

# Stereochimica

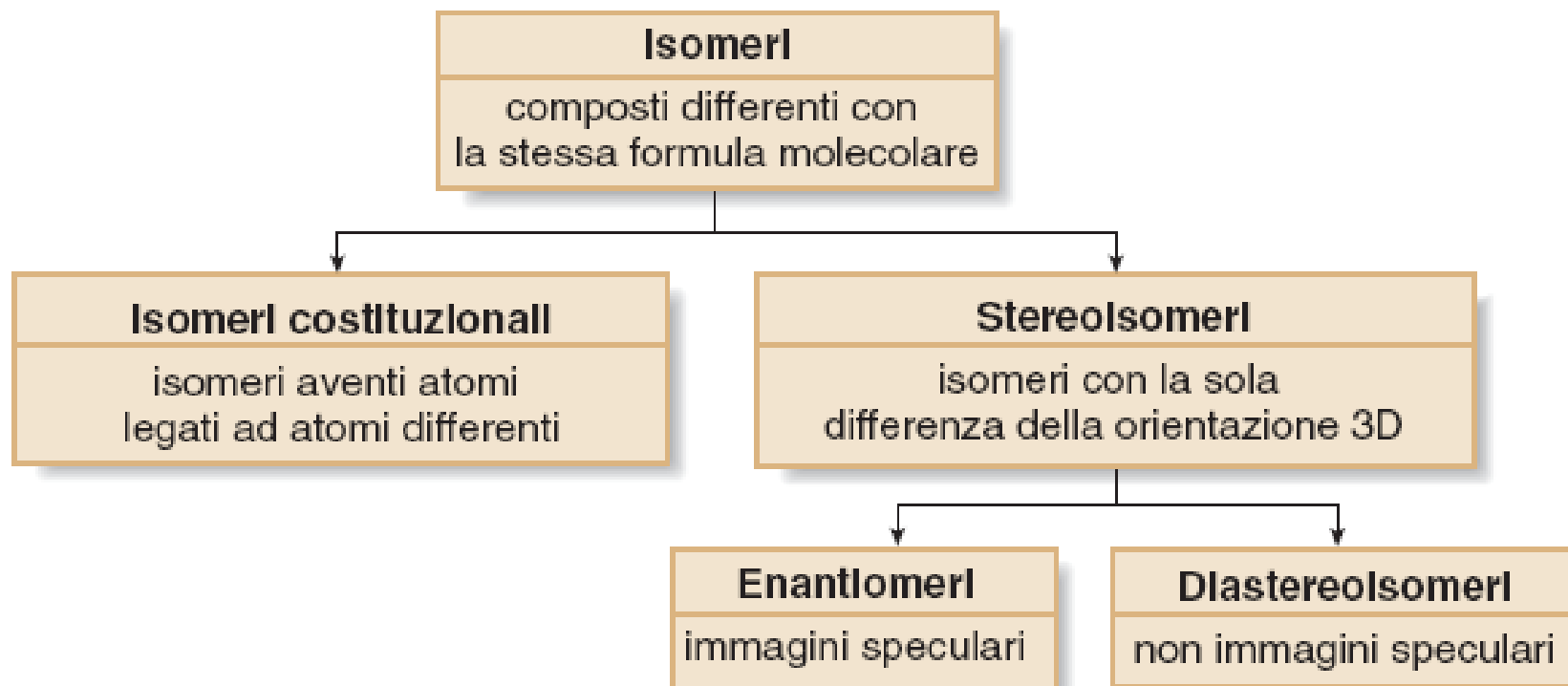
La stereochimica è una disciplina che studia la struttura tridimensionale delle molecole e come questa influenza le proprietà chimiche e fisiche delle stesse.

Un oggetto della stereochimica è la **STEREOISOMERIA**

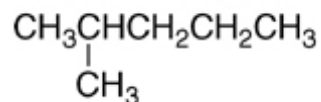
**Stereoisomeri** sono molecole che hanno la stessa formula bruta e la stessa costituzione (struttura) ma una diversa disposizione nello spazio dei gruppi che le compongono.

Questo arrangiamento tridimensionale è detto **CONFIGURAZIONE**.

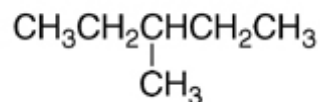
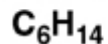
# Stereoisomeri



2-metilpentano



3-metilpentano



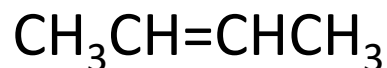
and

Isomeri costituzionali

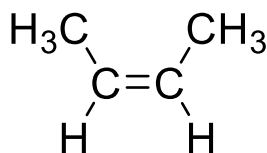
# Esempi di stereoisomeri: isomeri geometrici

## 1. Alcheni cis/trans (E/Z)

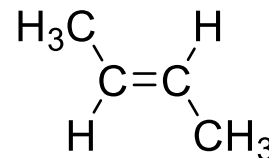
- ❑ La stereoisomeria degli alcheni è detta Stereoisomeria Geometrica
- ❑ I due isomeri geometrici hanno una diversa **configurazione** indicata con i prefissi *cis* e *trans* (E/Z)
- ❑ L'isomeria geometrici è un particolare tipo di **diastereoisomeria**: due alcheni cis/trans sono per definizione stereoisomeri ma non sono immagini speculari



2-butene

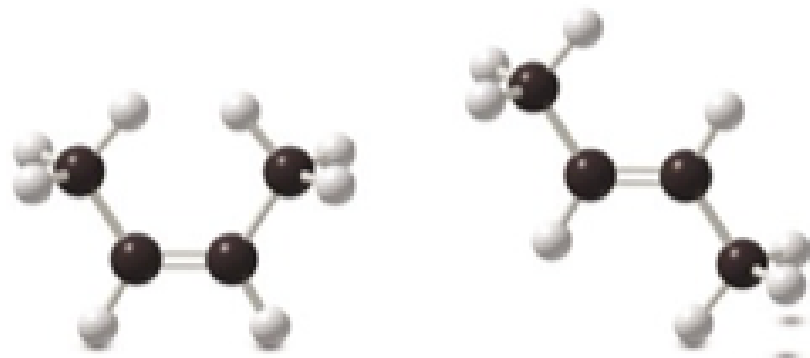
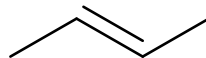
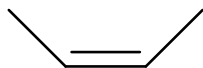


cis-2-butene



trans-2-butene

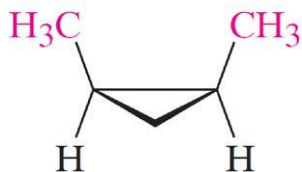
Cis e trans-2-butene sono due stereoisomeri, più in particolare sono isomeri geometrici, un tipo specifico di diastereoisomeri



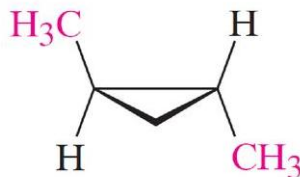
# Esempi di stereoisomeri: isomeri geometrici

## 2. Cicloalcani disostituiti cis/trans (E/Z)

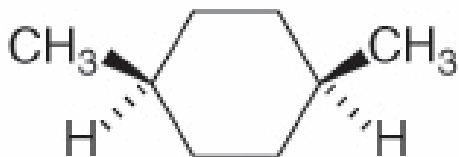
- ☐ Anche la stereoisomeria dei cicloalcani disostituiti è detta Stereoisomeria Geometrica
- ☐ I due isomeri geometrici hanno una diversa **configurazione** indicata con i prefissi *cis* e *trans*.
- ☐ Anche cicloalcani disostituiti sono diastereoisomeri e più in particolare isomeri geometrici



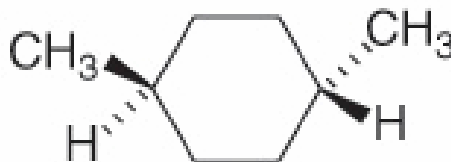
**cis**-1,2-dimetilciclopropano



**trans**-1,2-dimetilciclopropano



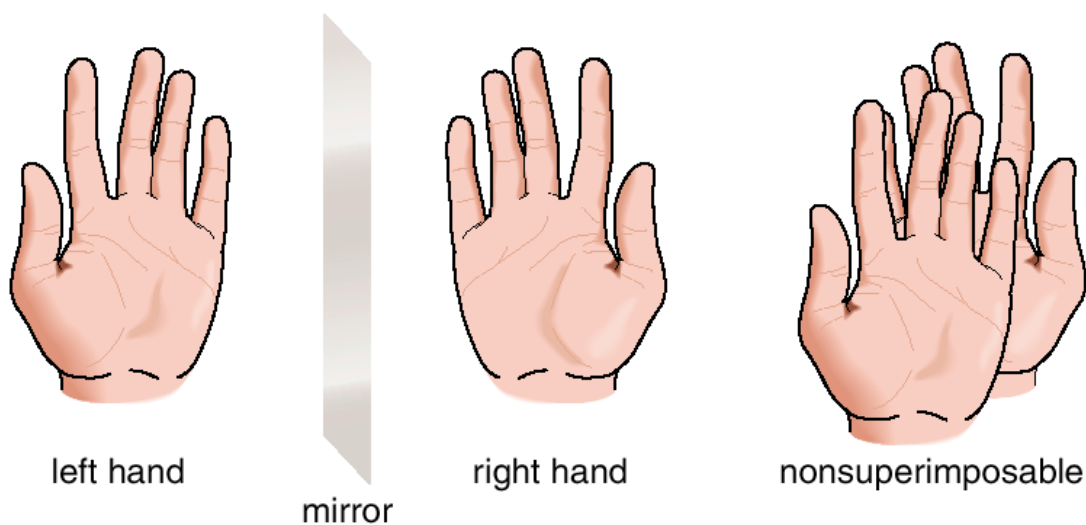
**cis**-1,4-dimetilcicloesano



**trans**-1,4-dimetilcicloesano

# Chiralità - enantiomeria

- Ci sono molti oggetti (e **molecole**) che sono come le mani.
- Le mani destra e sinistra sono immagini speculari, ma non sono **sovrapponibili**.



Un oggetto che non è sovrapponibile alla sua immagine speculare è detto **chirale**.

Il termine "Chirale" deriva dal greco **χείρ** (Cheir) che significa **mano**

# Chiralità

Anche questi oggetti sono chirali, hanno un'immagine speculare non sovrapponibile



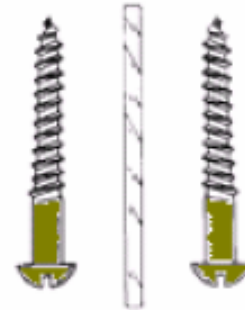
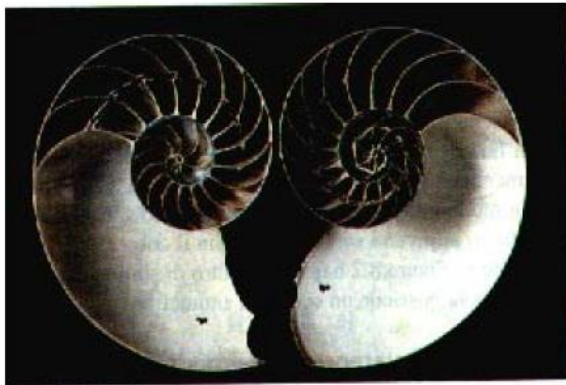
Queste copie di oggetti sono immagini speculari non sovrapponibili.

# Chiralità e simmetria

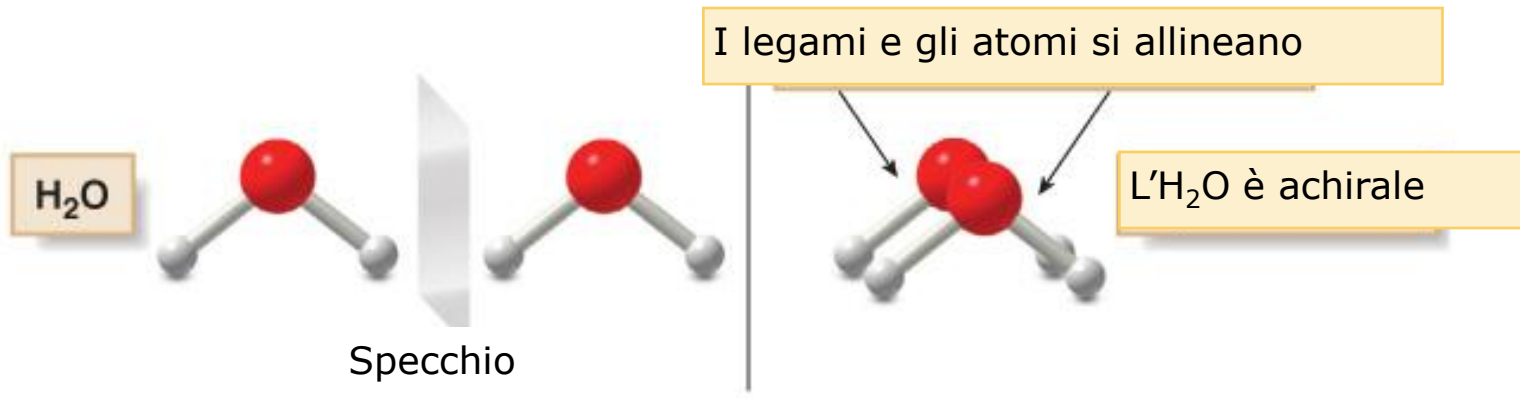
Oggetti **achirali** hanno almeno un piano di simmetria



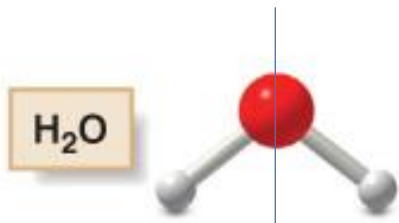
Oggetti **chirali** non hanno elementi di simmetria



# Chiralità e simmetria

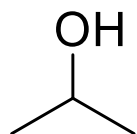


L' $H_2O$  è una molecola simmetrica



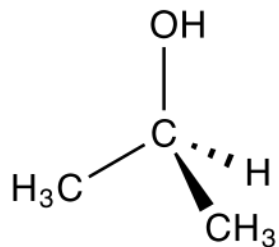
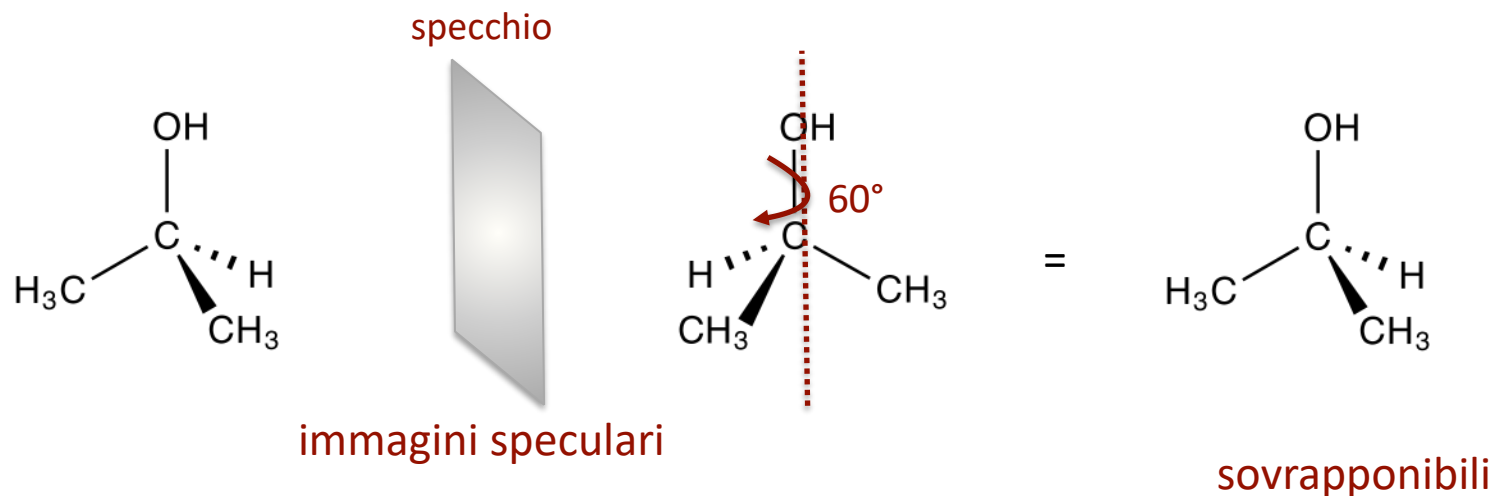
E' divisa in due parti uguali da un piano di simmetria

# Chiralità e Simmetria



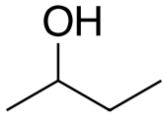
2-propanolo

Non chirale



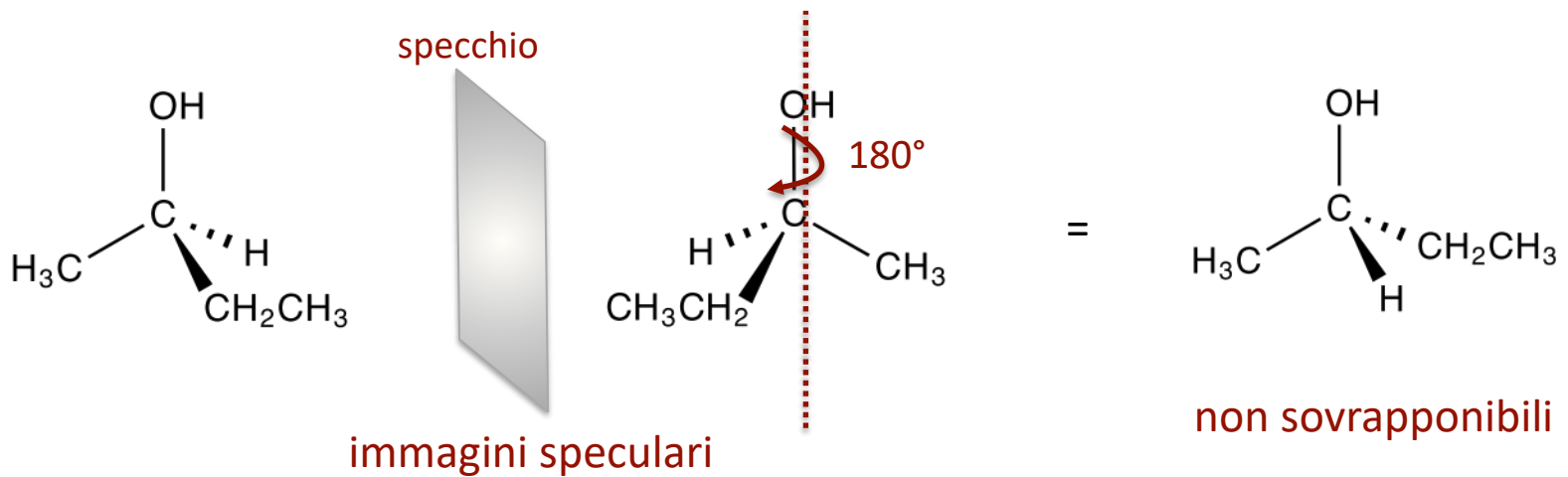
La molecola del 2-propanolo è divisa in due parti uguali da un piano di simmetria che comprende OH-C-H

# Chiralità e Simmetria



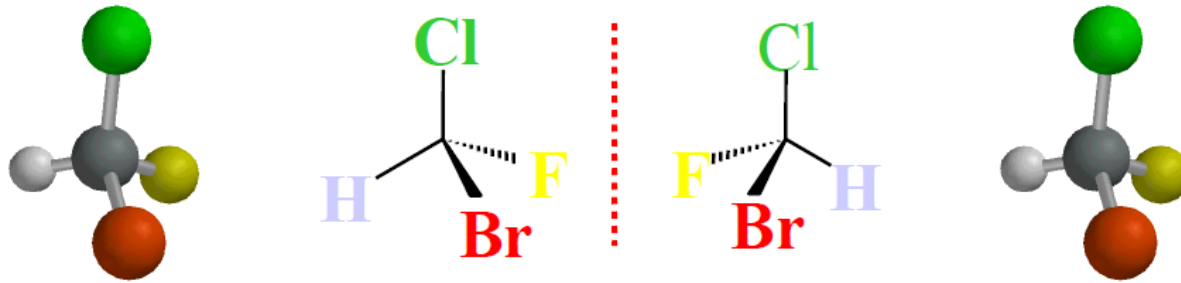
2-butanolo

Chirale



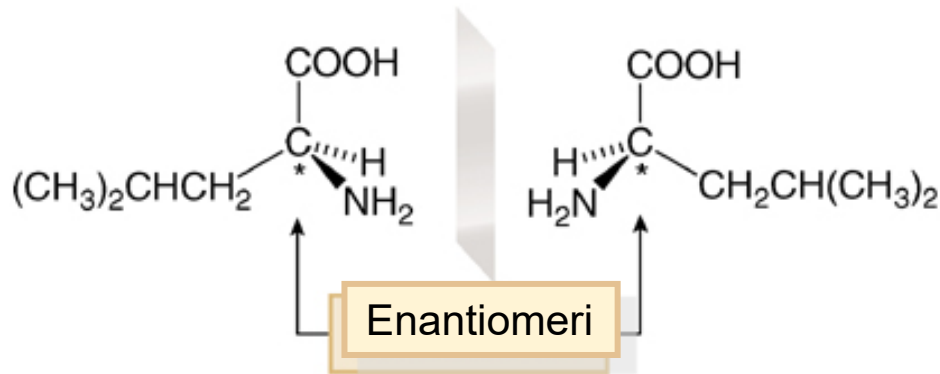
# Carbonio stereogenico e enantiomeria

- Un carbonio stereogenico è *tetraedrico* ( $sp^3$ ) ed ha quattro sostituenti diversi:



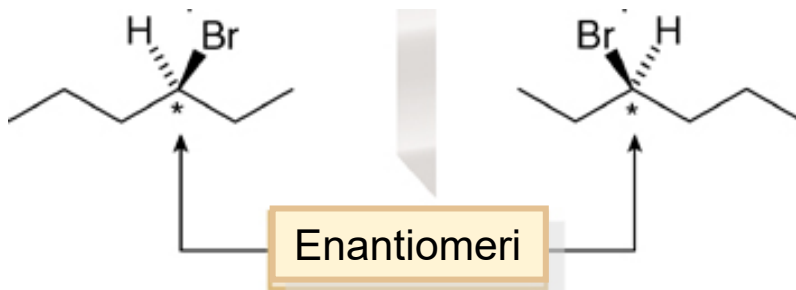
- Una molecola chirale ha uno stereocentro, è *asimmetrica*.
- Esiste in due forme, immagini speculari non sovrapponibili, che formano una *coppia di enantiomeri*

# Centri Stereogenici



Leucina, un amminoacido

Sono stereoisomeri immagini speculari (non sovrapponibili)



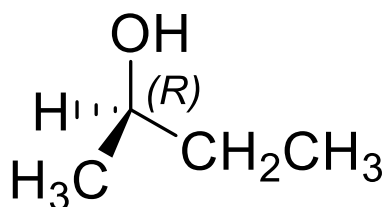
3-Bromoesano

Sono stereoisomeri immagini speculari (non sovrapponibili)

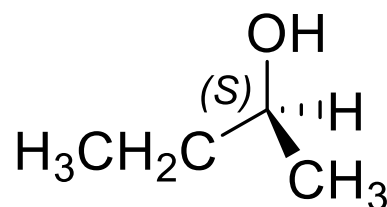
C\* atomo di carbonio stereogenico

# Configurazioni *R* e *S*

- Due enantiomeri hanno lo stesso nome IUPAC. Per distinguerli bisogna assegnare loro una configurazione assoluta.
- *R* e *S* sono due descrittori che definiscono la configurazione di uno stereocentro attraverso un set di regole.



R-2-butanolo



S-2-butanolo

# Nomenclatura R,S

## Sistema Cahn Ingold Prelog (C.I.P.)

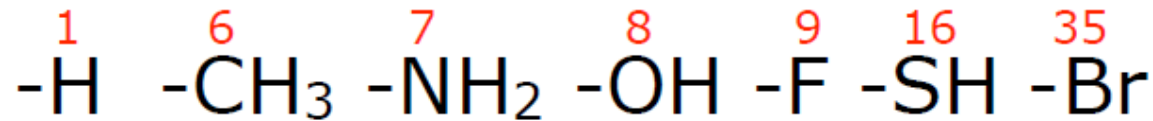
Il Sistema **Cahn-Ingold-Prelog** identifica i due enantiomeri con i prefissi **R** e **S**.

### Procedimento

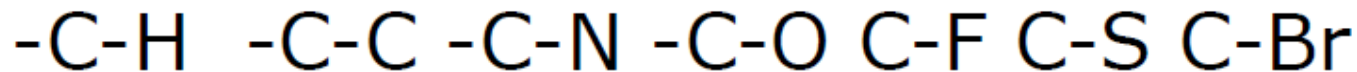
A) Bisogna innanzitutto assegnare un ordine di priorità ai gruppi legati al carbonio stereogenico secondo le regole CIP, le stesse usate per assegnare la configurazione E/Z degli alcheni

# Regole di priorità

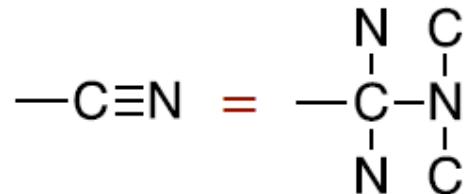
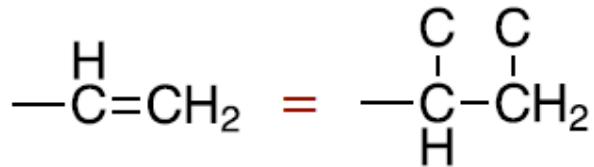
A) Numero atomico del primo atomo del sostituito



B) Numero atomico del secondo atomo del sostituito



C) Legami multipli = n legami singoli



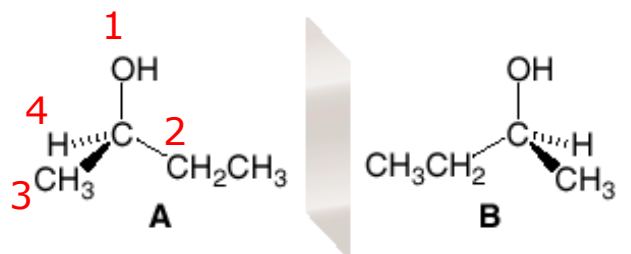
# Sistema Cahn-Ingold-Prelog

## Nomenclatura R,S

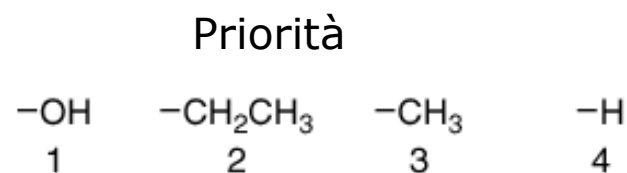
### Procedimento (continuazione)

B) Dopo aver assegnato le priorità ai quattro sostituenti, bisogna orientare la molecola in modo che il gruppo a priorità minore sia dalla parte opposta rispetto all'osservatore.

Esempio:



I due enantiomeri del 2-butanolo



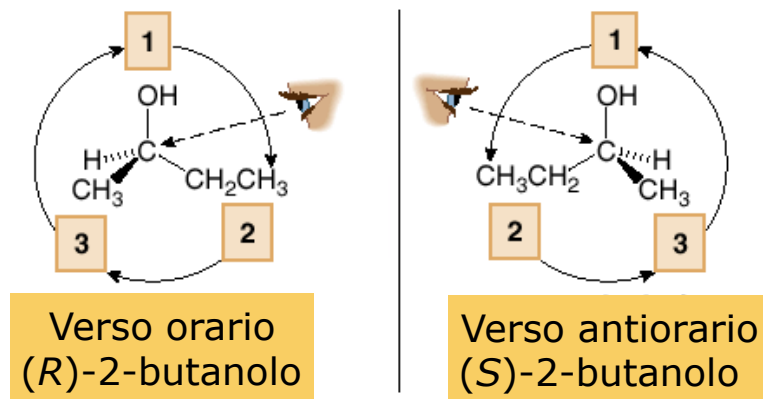
priorità decrescente

In questo caso l' H (priorità 4) è già dalla parte opposta rispetto all'osservatore

# Sistema Cahn-Ingold-Prelog

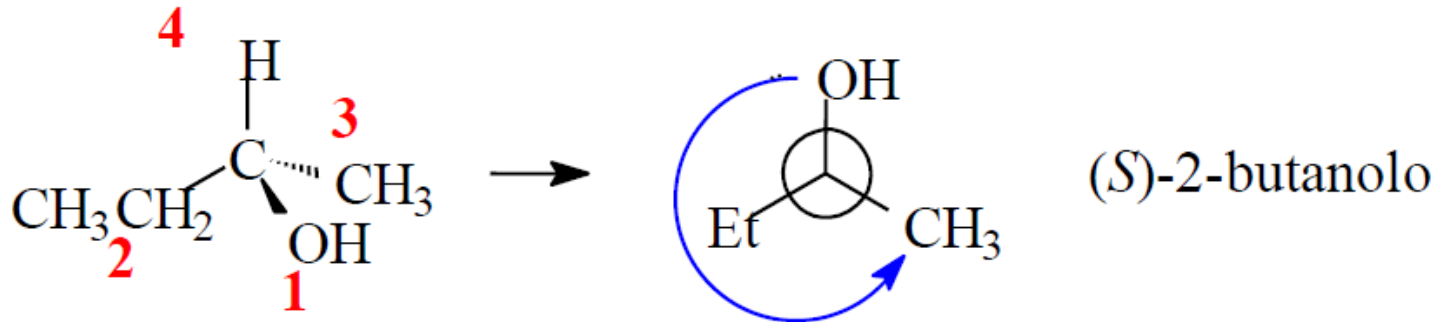
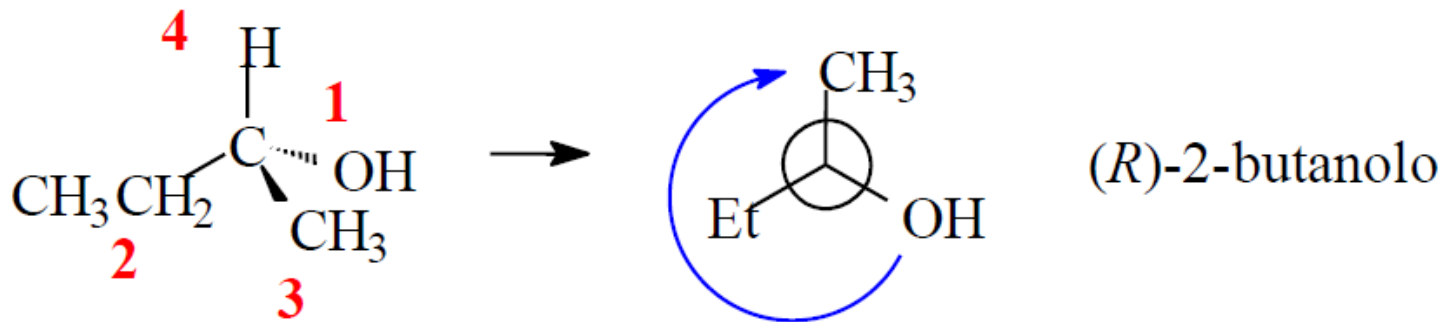
## Nomenclatura R,S

- C) Congiungere idealmente i gruppi da 1 a 2 a 3:  
se il verso del circolo è destrogiro (orario) l'enantiomero ha configurazione **R**  
se il verso del circolo è levogiro (antiorario) l'enantiomero ha configurazione **S**.



Il simbolo *R* o *S* deve comparire nel prefisso del nome IUPAC

# Sistema Cahn-Ingold-Prelog Nomenclatura R,S



# Configurazioni *R* e *S*

- Assegnare la priorità ai quattro sostituenti secondo le Regole di Priorità.
- Orientare la molecola in modo che il gruppo a priorità più bassa sia dalla parte opposta rispetto dall'osservatore.
- Congiungere idealmente gli altri tre gruppi cominciando da quello con la massima priorità:
- Se il verso descritto è orario = ***R*** (*rectus*)
- Se il verso descritto antiorario = ***S*** (*sinister*)

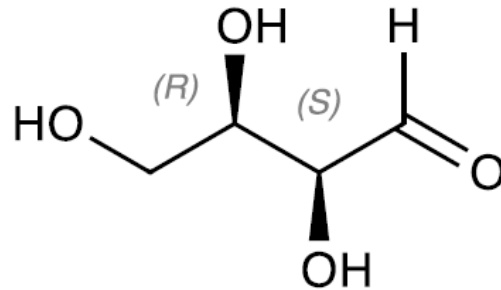
# Diastereoisomeri

- Diastereomeri o diastereoisomeri: stereoisomeri che non sono immagini speculari.
- Ad esempio gli isomeri geometrici sono diastereoisomeri
- Anche composti con più stereocentri esistono sottoforma di diastereoisomeri

# Composti con due o più stereocentri

## Diastereoisomeri

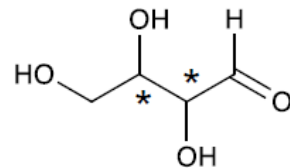
- Quando un composto ha più di uno stereocentro, le configurazioni R e S devono essere assegnate a ognuno di essi.



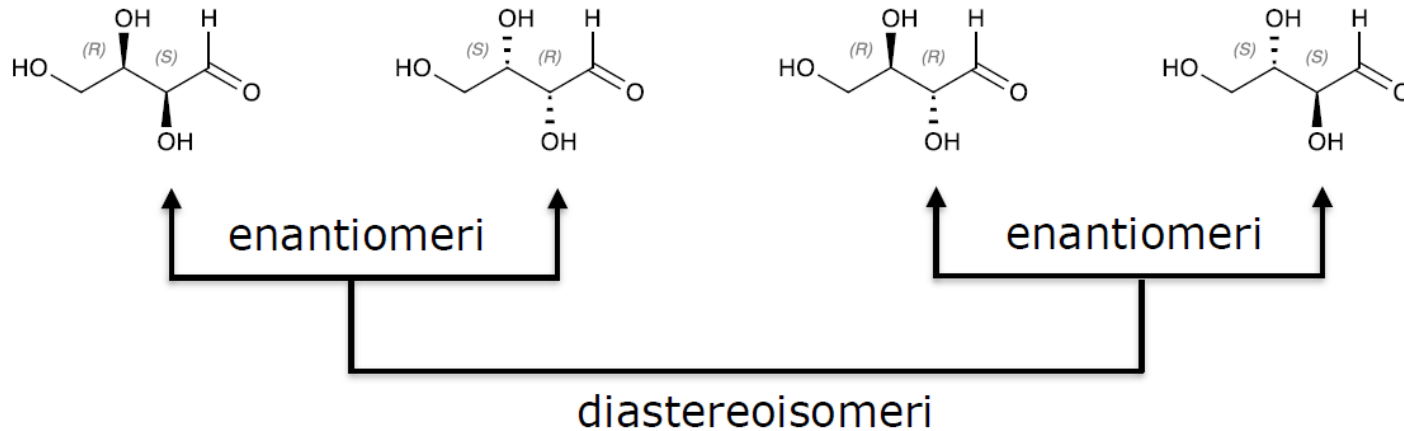
(2S,3R)-2,3,4-triidrossibutanale (treosio)

# Composti con due o più stereocentri

## Diastereoisomeri



uno zucchero



In generale:  $n$  centri stereogenici,  $2^n$  stereoisomeri