

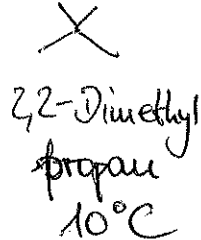
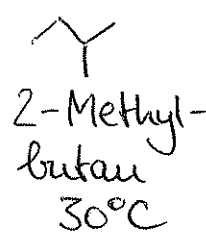
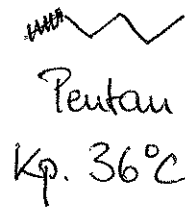
Isomerie

Konstitutionsisomerie → Verbindungen mit gleicher Summenformel aber unterschiedlicher Konstitution (= Art bzw. Reihenfolge mit der Atome verknüpft sind)

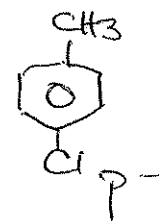
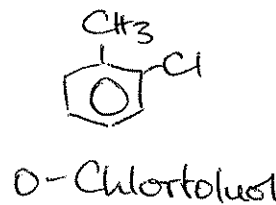
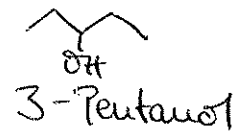
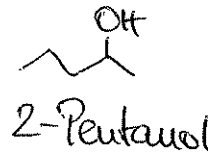
Stereoisomerie → Verbindungen mit gleicher Konstitution aber unterschiedlicher räumlicher Anordnung der Atome bzw. Atomgruppen

Konstitutionsisomerie

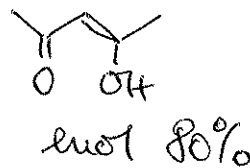
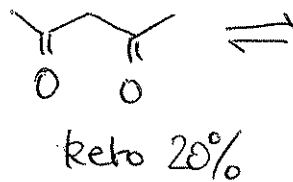
- Kettenisomerie, z.B. C_5H_{12}



- Stellungsisomerie



- Tautomerie



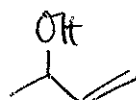
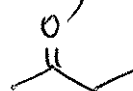
Gleichgewicht

- Valenzisomerie



- Unterschiedliche Verbindungsklassen bei gleicher Summenformel,

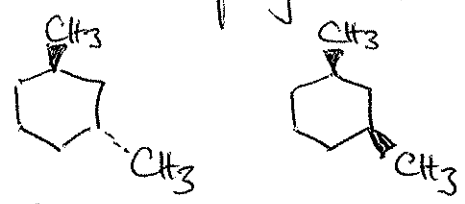
z.B. C_4H_8O



etc.

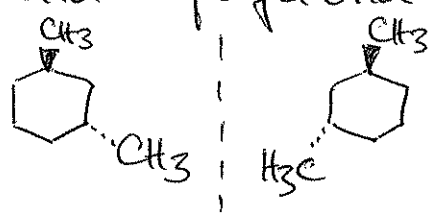
Stereoisomerie

- Diastereomere : nicht spiegelbildisomere Verbindungen



1,3-Dimethylcyclohexan

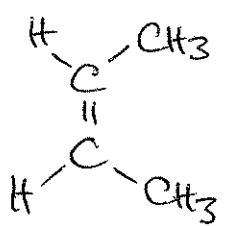
- Enantiomere : Bild-Spiegelbild



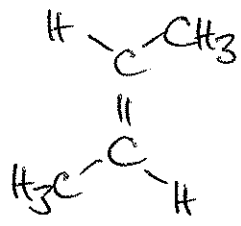
Geometrische (cis-trans-) Isomerie:

- Substituierte Ethylene → keine Drehung um Doppelbindung möglich

z.B. 2-Buten



(Z)-2-Buten
cis-



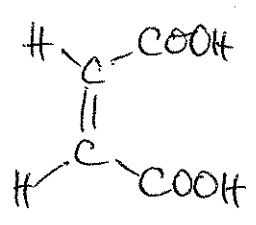
(E)-2-Buten
trans-

Diastereomere

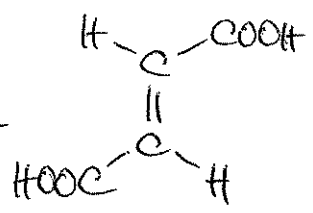
Z = zusammen

E = entgegen

Maleinsäure / Fumarsäure



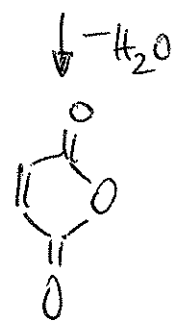
Fp.: 130°C



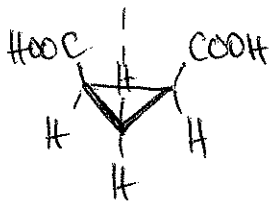
287°C

besser wasserlöslich
+ stabiler

bildet kein Anhydrid



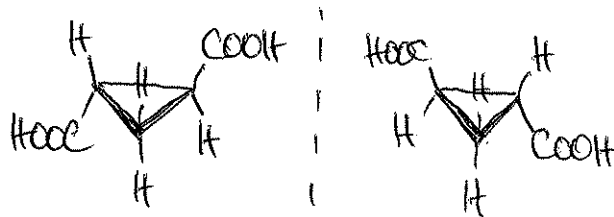
- Alicyclische Verbindungen



cis-Cyclopropanedicarbonsäure

beide Substituenten auf der gleichen Seite

→ symmetrisch



trans-Cyclopropanedicarbonsäure

Substituenten auf entgegengesetzten Seiten

→ asymmetrisch

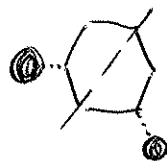
→ optisch aktiv

Disubstituierte Cyclohexane

Symmetrisch → cis, 1,4-trans



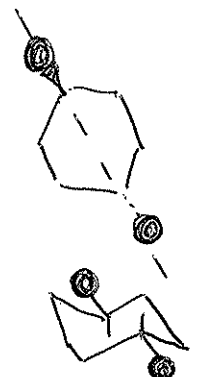
1,2-cis



1,3-cis

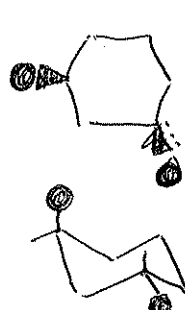
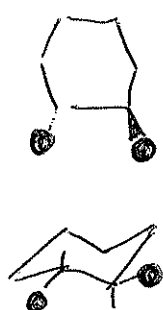


1,4-cis



1,4-trans

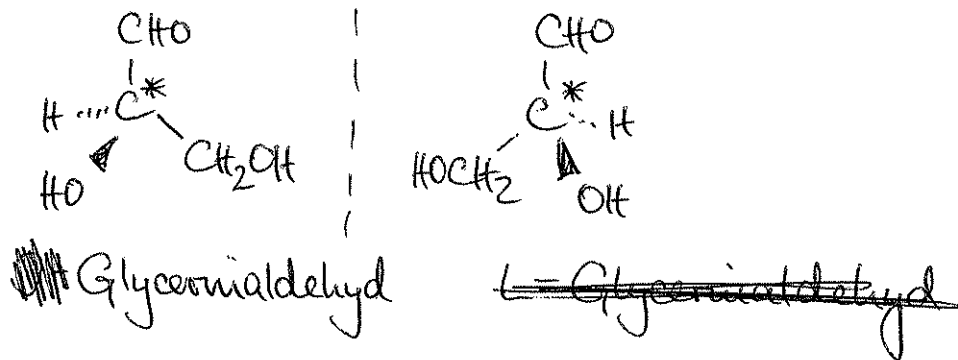
Asymmetrisch, optisch aktiv → 1,2-trans, 1,3-trans




Optische (Spiegelbild-) Isomerie:

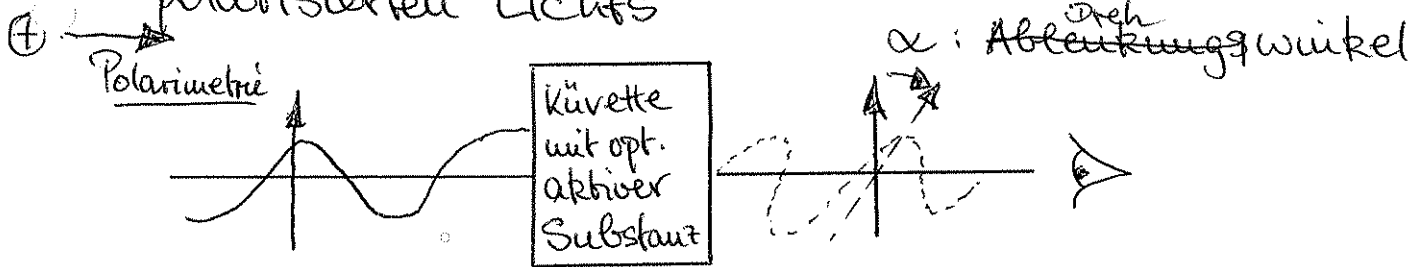
Chiralität \equiv "Händigkeit" (gr.)
 Eigenschaft von Systemen, deren Spiegelbild durch Drehung nicht ~~mit dem~~ Original zur Deckung gebracht werden kann.
 (Bsp. Hände, Schneckenhäuser)

→ Enantiomerepaare (optische Antipoden)



* Asymmetrisches C-Atom, Chiralitätszentrum: 
 Kohlenstoffatom mit vier unterschiedlichen Substituenten

Optische Aktivität: Chirale Moleküle sind optisch aktiv, d.h. sie drehen die Schwingungsebene linear polarisierten Lichts



$$\text{Spezifische Drehung } [\alpha]_T^{\lambda} = \frac{\alpha \cdot 100}{c \cdot l}$$

T: Temperatur

λ : Wellenlänge des Lichts (Natriumlicht D-Linie, 589,3 nm)

c: Konzentration (in g/100 ml)

l: optische Weglänge (in dm)

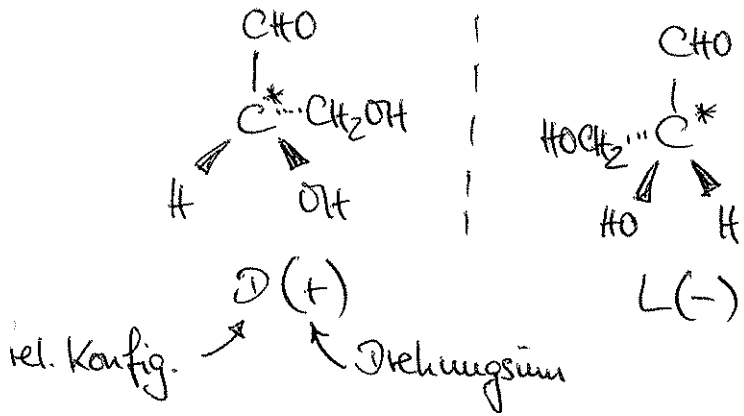
entgegengesetzter Rich.

⊕ Enantiomere drehen Schwingungsebene um gleichen Betrag in

D- und L-Konfiguration

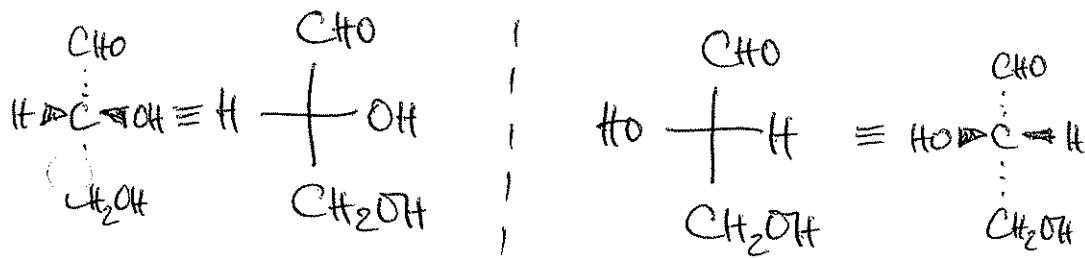
Bezugssubstanz: Glyceraldehyd, rechtsdrehend → D
 linksdrehend → L

(dextro = rechts, laeva = links)

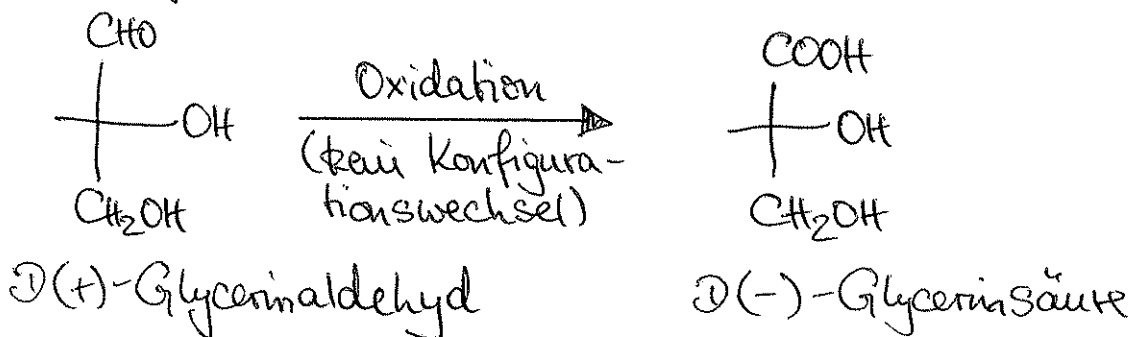


Fischer-Projektionsformel:

C-Atom mit höchster Oxidationsstufe nach oben
 Substituenten rechts und links von C* vor Papierebene
 Substituenten senkrecht in oder hinter Papierebene



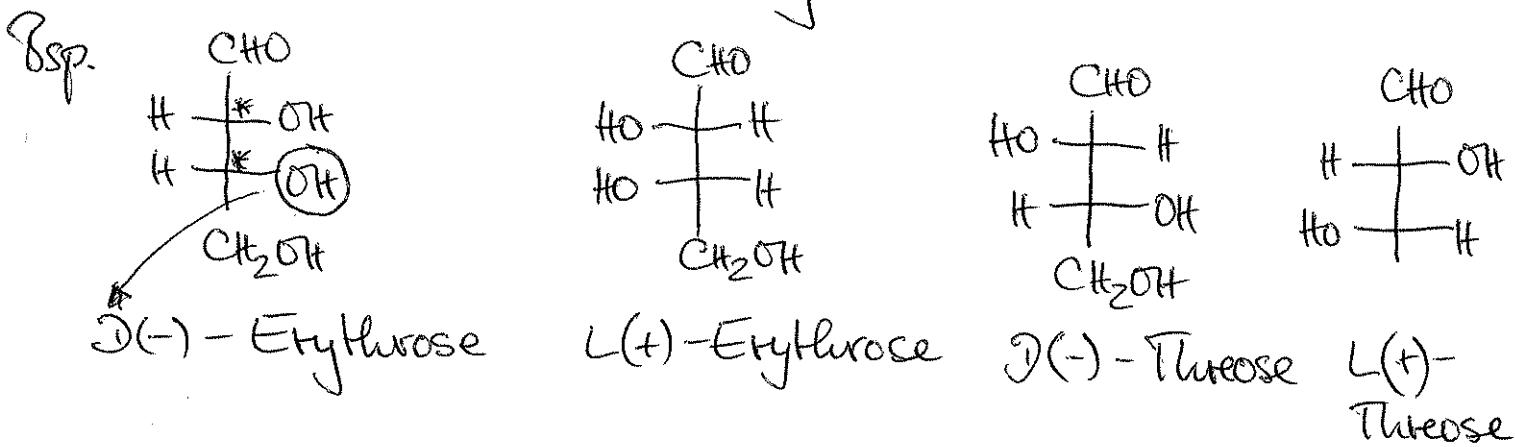
Wichtig: Jede Verbindung, deren experimentelle Konfiguration der des D-Glyceraldehyds entspricht, gehört zur D-Reihe, unabhängig von jeweiliger Drehungssinn.



Mehrere asymmetrische C-Atome:

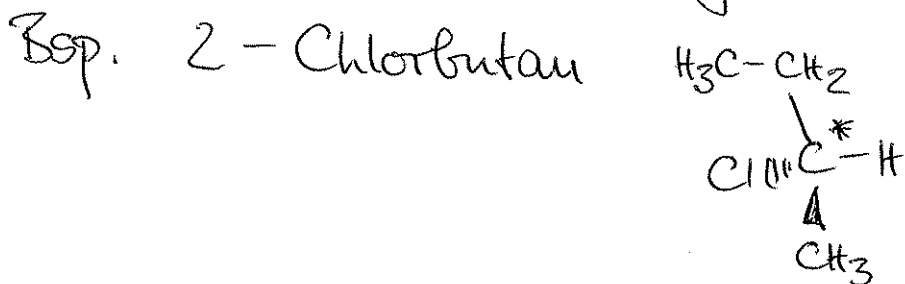
~~Bsp.~~ Konfiguration des am weitesten vom C-Atom mit höchster Oxidationsstufe entfernten Chiralitätszentrums bestimmt Zugehörigkeit zur D- bzw. L-Reihe.

Konfigurationen der weiteren Zentren sind implizit im Namen der Verbindung enthalten.

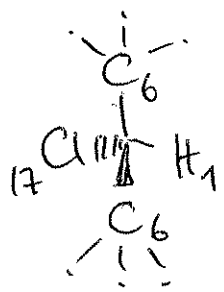


Absolute Konfiguration (CIP-System)

Spezifikation der Chiralität am asymmetrischen C-Atom nach Cahn, Ingold und Prelog

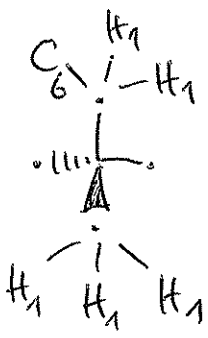


1. Ordnungszahl der unmittelbar gebundenen Atome (sog. 1. Sphäre) gemäß Periodensystem bestimmen, höhere Ordnungszahl → höhere Priorität



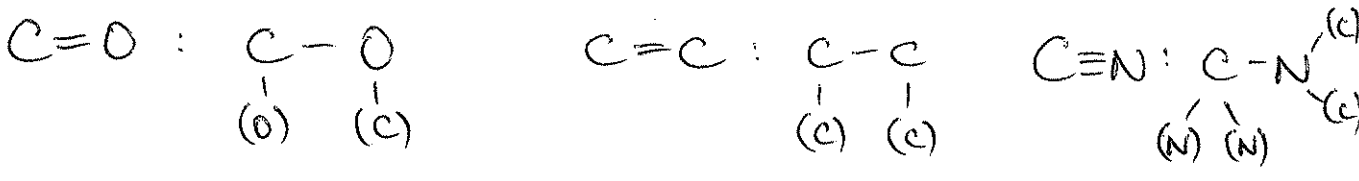
Cl : höchste Priorität
 H : niedrigste Priorität

2. Bei gleichen Atomen werden die daran direkt gebundenen Atome (sog. 2. Sphäre) zugeordnet, usw.



Cl > C₂H₅ > CH₃ > H

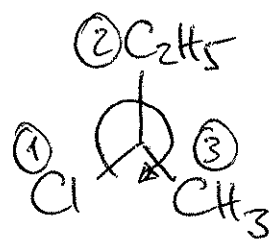
3. Mehrfachbindungen zählen wie entsprechende Zahl von Einfachbindungen



→ Prioritätsreihenfolge :

I > Br > Cl > OR > OH > NH₂ > COOR > COOH
 > CHO > CH₂OH > CN > C=C > C₂H₅ > CH₃ > H

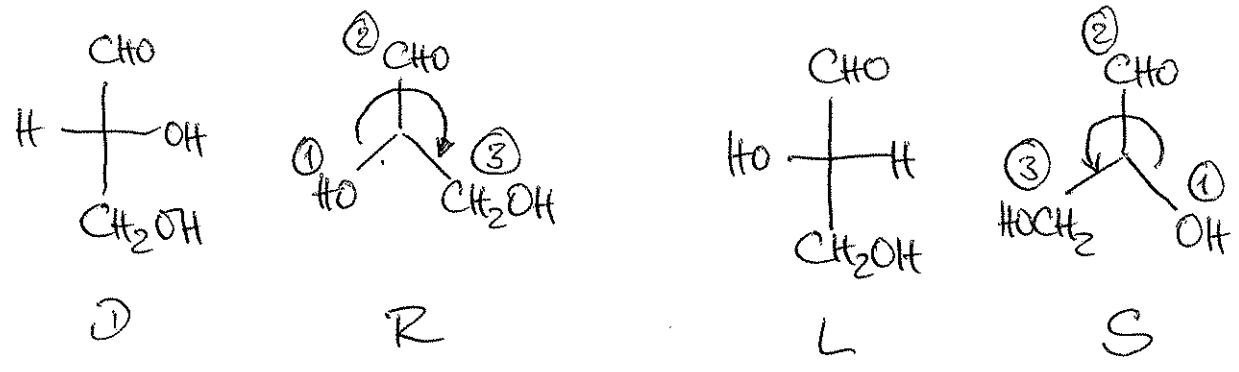
4. Molekül so drehen, dass man auf C-H Achse blickt (H-Atom mit niedrigster Priorität hinten)



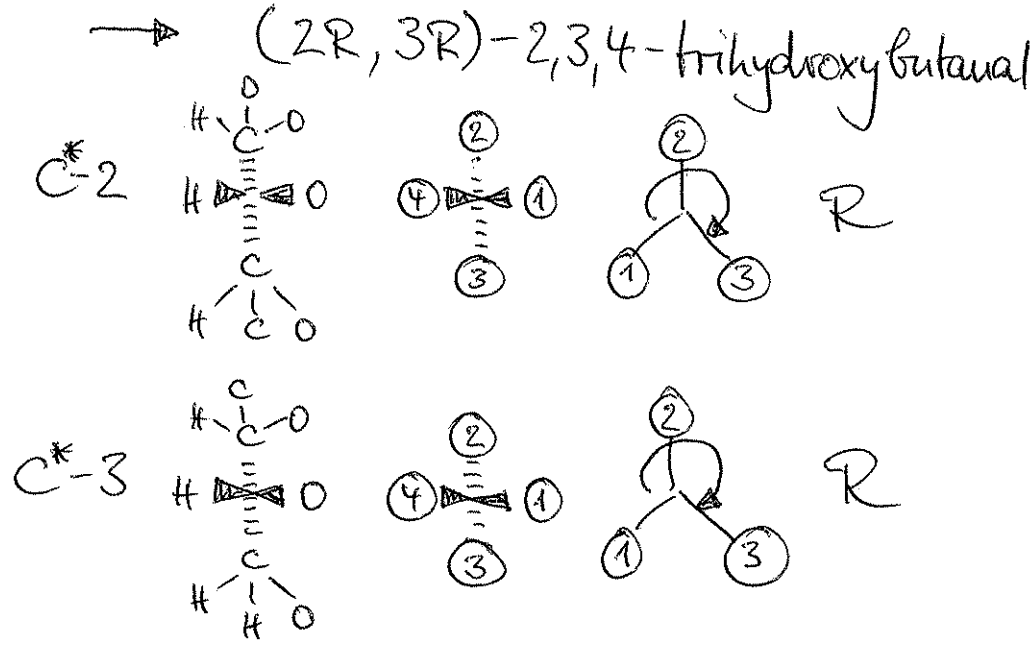
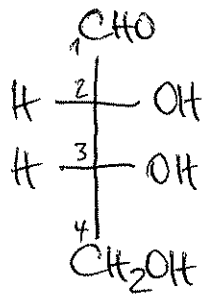
Bogen im Uhrzeigersinn → R
 gegen Uhrzeigersinn → S

(R)-2-Chlorbutan

Glycerinaldehyd: D- ist mit (R)-Form und L- mit (S)-Form identisch.

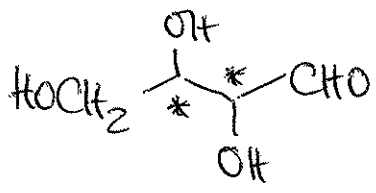


① - Erythrose



Moleküle mit n Chiralitätszentren

→ 2ⁿ optische Isomere (2ⁿ⁻¹ zueinander diastereomere Enantiomerenpaare), ~~aber nur~~ wenn keine Symmetrieebene im Molekül vorliegt

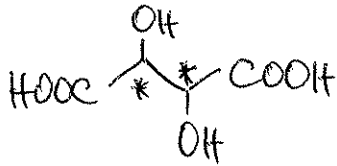


4 Isomere:

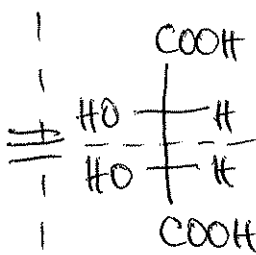
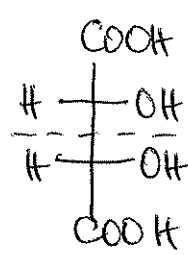
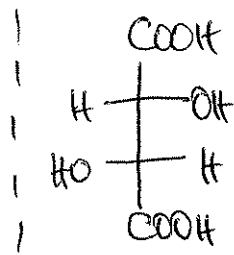
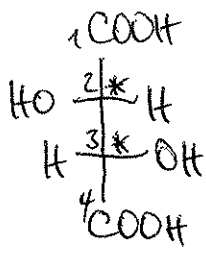
D(-)-Erythrose	L(+)-Erythrose
D(-)-Threose	L(+)-Threose

↙ Diastereomere ↘ Enantiomere

Weinsäure \rightarrow 2 Chiralitätszentren, aber nur



3 Stereoisomere



D(-)

L(+)

Mesoweinsäure

(2S,3S)-(-)

(2R,3R)+(+)

(2R,3S)



Racemat: Traubensäure

\rightarrow optisch inaktiv

Racemat \equiv Gemisch aus exakt gleichen Teilen der (+)- und der (-)-Form einer chiralen Verb.
Keine optische Aktivität aber andere physikalische Eigenschaften als keine Enantiomere

Trennung von Enantiomeren (Racemspaltung):

Enantiomere haben gleiche chem./phys. Eigenschaften

- \rightarrow • Mechanisches Auslesen spiegelbildlicher Kristalle
- Chromatographische Trennung auf chiraler Phase
- Enzymatischer Abbau eines Enantiomeren
- Bildung diastomerer Salze

(+) Säure

(-) Säure

+ 2 (+) Base \rightarrow

(++) Salz

(-+) Salz

$\underbrace{\hspace{10em}}$
Racemform

$\underbrace{\hspace{10em}}$
Diastomere \rightarrow Krist

Beziehungen zwischen den verschiedenen Isomeriearten

