

STEREOCHEMIE

Eine kurze Einführung für
die AHS
(Unterricht, WPG, Olympiade)

Manfred Kerschbaumer, 2006

Inhaltsverzeichnis

- A. Einleitung

- B. Die Struktur von Teilchen
 - 1. Arten von Teilchen
 - 2. Konstitution – Konfiguration – Konformation
 - a) *Darstellungsmöglichkeiten*
 - b) *Konstitution*
 - c) *Konfiguration*
 - d) *Konformation*
 - 3. Arten der Isomerie
 - a) *Strukturisomerie – Konstitutionsisomere*
 - b) *Stereoisomerie – Konfigurationsisomere*
 - c) *Konformationsisomerie*
 - 4. Symmetrie von Teilchen
 - a) *Symmetrieelemente – Symmetrieoperationen*
 - b) *Punktgruppen – Folgen für makroskopische Messdaten*

- C. Stereoisomerie bei kleinen Molekülen
 - 1. Enantiomerie (Chiralität)
 - a) *Bedingungen*
 - b) *Ursachen*
 - c) *Nomenklatur*
 - d) *Physikalische und chemische Eigenschaften von Enantiomeren*
 - 2. Diastereomerie
 - a) *Aliphaten mit mehreren Chiralitätszentren*
 - b) *Cyclen mit Mehrfachsubstitution*
 - c) *Verbindungen mit Doppelbindungen*
 - f) *Eigenschaften von Diastereomeren*

- D. Stereoisomerie bei anderen Teilchen
 - 1. Enantiomerie und Diastereomerie bei Komplexen
 - 2. Polymere

- E. Anhang
 - 1. Literatur
 - 2. Flussdiagramm für Punktgruppen
 - 3. Punktgruppen
 - 4. Übungsaufgaben
 - 5. Lösungen der Aufgaben

A. Einleitung

Dieses Skriptum (und damit der Vortrag) beschäftigt sich mit Stereochemie, einem Fachgebiet, dem eigene Bücher oder zumindest große Kapitel in Büchern gewidmet sind. Daraus lässt sich leicht ableiten, dass hier nur die wichtigsten Aspekte und diese zum Teil nur exemplarisch durchgenommen werden können. Es stellt sich daher für den Chemielehrer die Frage, welchen Schülern die Inhalte dieser Ausführungen zugemutet werden können. Dazu eine kleine (sehr subjektive) Übersicht:

Tabelle 1:

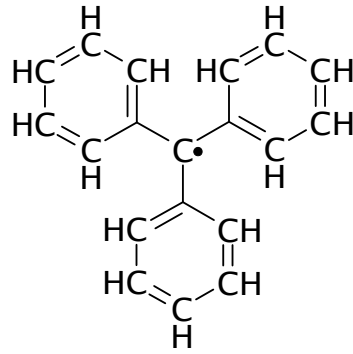
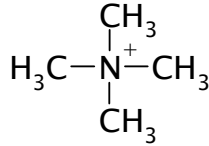
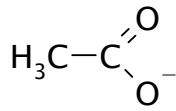
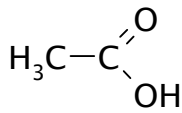
Nr.	Schülergruppe	Kapitel	Bemerkungen
1	Olympiadeteilnehmer auf dem Niveau des Bundeswettbewerbes oder im Spitzenfeld des Landeswettbewerbes	Alles	Selbstverständlich ist der Inhalt des Skriptums noch ausweitbar.
2	Olympiadeteilnehmer auf dem Niveau des Kurswettbewerbes	Alles mit Ausnahme der Kapitel B.4., Teile von C.1., C.2., Kapitel D	Am besten durch einfache Beispiele ergänzen
3	Wahlpflichtfachschrler	Alles	Je nach Belieben mehr Beispiele, oder Betonung bestimmter Kapitel
4	Schrler des Realgymnasiums	Wie Zielgruppe Nr. 2	Man wird den Inhalt auf das Jahr verteilt beim passenden Kapitel unterrichten.
5	Schrler des Gymnasiums	Wie Zielgruppe Nr. 4, jedoch ohne Teile von B.2 und B.3	Man wird den Inhalt auf das Jahr verteilt beim passenden Kapitel unterrichten

B. Die Struktur von Teilchen

1. Arten von Teilchen

Zunächst muss man sich über die Art der Teilchen, die betrachtet werden, einen Überblick verschaffen. In Abb. 1 sind mögliche Teilchenarten zusammengestellt. Es ist klar, dass in der Stereochemie nur Gebilde aus mehreren Atomen eine Rolle spielen können.

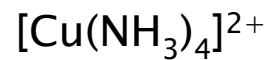
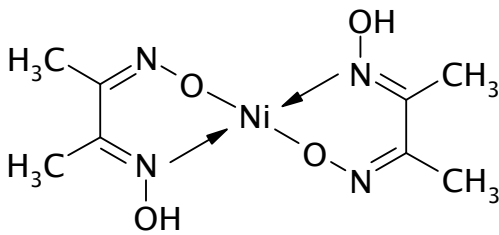
Abb. 1



Moleküle

Molekülionen

Radikal



Neutralkomplexe

Komplexionen

2. Konstitution – Konfiguration – Konformation

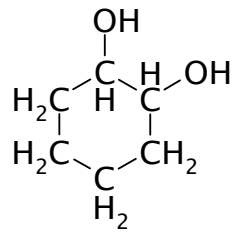
a) Darstellungsmöglichkeiten

Im Folgenden beschränken wir uns bei den Beispielen für Teilchen im Wesentlichen auf Moleküle aus der organischen Chemie, da dies den häufigsten Fall stereochemisch relevanter Teilchen darstellt. Bevor zu den drei in der Überschrift genannten Begriffen Stellung bezogen wird, muss man sich noch über die verschiedenen Darstellungsmöglichkeiten von Strukturen einen Überblick verschaffen.

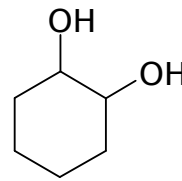
- Da gibt es zunächst die Möglichkeit, tatsächliche räumliche Strukturen mit Hilfe von Kalotten- oder Stäbchenbaukästen zu bauen.
- Es gibt eine Reihe von Computerprogrammen, mit denen man alle Arten von Strukturdarstellungen vornehmen kann (isisdraw, chemsketch, chemdraw..)
- In der Ebene dienen verschiedene Projektionsformelschreibweisen zur Verdeutlichung struktureller Probleme:
 - ✓ Halbstrukturformeln
 - ✓ Valenzstrichformeln mit Keil- und Punktschreibweise
 - ✓ Haworthprojektionen
 - ✓ Newmanprojektionen

Die verschiedenen Darstellungen sind in Abb. 2 an einem der möglichen 1,2-Cyclohexandiole gezeigt.

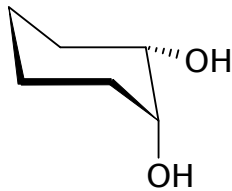
Abb. 2



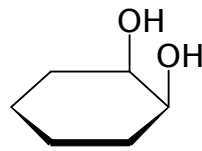
Halbstrukturformel



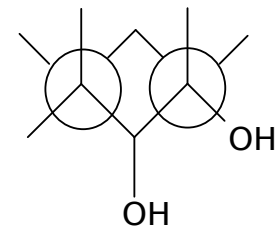
Valenzstrichschreibweise



Keil- und Punktschreibweise



Haworth-Projektion



Newman-Projektion

b) *Konstitution*

Die Konstitution eines Teilchens gibt die Art, die Anzahl und die Verknüpfungsweise der Atome in diesem Teilchen (Molekül) wieder. Zur eindeutigen Darstellung der Konstitution genügt die Halbstrukturformel oder die Valenzstrichformel ohne Keile und Punkte.

c) *Konfiguration*

Die Konfiguration gibt die echte räumliche Struktur ohne Beachtung der Drehbarkeiten um Einfachbindungen wieder. Zur klaren Darstellung verwendet man am besten Valenzstrichformeln mit Keil- und Punktschreibweise.

d) *Konformation*

Die Konformation gibt den exakten räumlichen Aufbau des Teilchens wieder, wobei auch Drehungen um Einfachbindungen beachtet werden müssen. Zur Darstellung verschiedener Konformationen verwendet man am besten die Newmanprojektion.

3. Arten der Isomerie

Der Inhalt dieses Kapitels ist sicherlich nicht nur in der Chemieolympiade, sondern auch im Unterricht für die Oberstufe als Zusammenfassung zu besprechen. Dabei soll aber hier das übliche Schema ein wenig erweitert werden. Man unterscheidet im Wesentlichen drei Arten der Isomerie, die sehr gut zu den Begriffen aus Kapitel 2 passen.

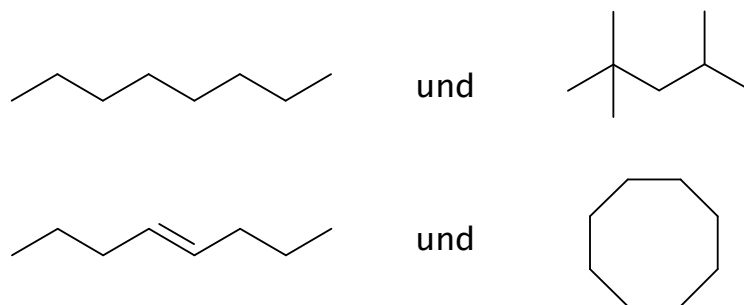
a) *Strukturisomerie – Konstitutionsisomerie*

Strukturisomere unterscheiden sich durch die verschiedene Konstitution der Teilchen. Die Gründe dafür können ganz unterschiedlich sein. Zur Darstellung verschiedener Konstitutionsisomere genügen Valenzstrichformeln ohne Keile und Punkte oder Halbstrukturformeln. Die Isomere unterscheiden sich (mehr oder weniger) deutlich in den physikalischen und chemischen Eigenschaften.

i) Gerüstisomere

Diese haben ein **unterschiedliches Kohlenstoffgerüst**. Die Gerüstisomerie ist üblicherweise die erste Art, die man im Unterricht der organischen Chemie bespricht.

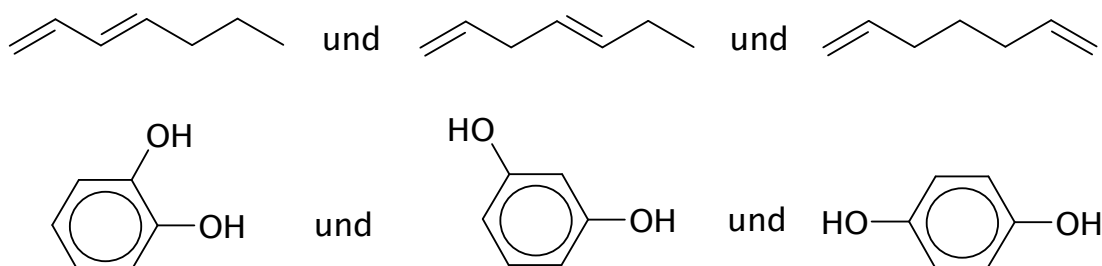
Abb. 3



ii) Stellungsisomere

Stellungsisomere haben grundsätzlich das gleiche Kohlenstoffgerüst, lediglich **Mehrfachbindungen, funktionelle Gruppen oder charakteristische Atome** sind **anders positioniert**.

Abb. 4

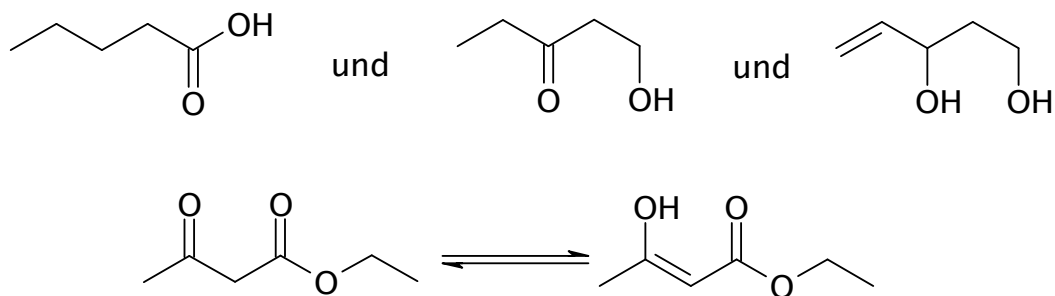


iii) Funktionsisomere

Funktionsisomere haben das gleiche Kohlenstoffgerüst und auch die gleiche Position von Mehrfachbindungen jedoch **andere funktionelle Gruppen**. Dabei ist die Verwechslung mit der Stellungsisomerie manchmal möglich (Aldehyde – Ketone). Die physikalischen und chemischen Unterschiede zwischen Funktionsisomeren sind sicherlich am größten, da es sich ja um „Angehörige“ verschiedener Verbindungsklassen handelt.

Eine besondere Form der Funktionsisomerie ist die **Tautomerie**, bei der zwei Funktionsisomere im chemischen Gleichgewicht stehen, dessen Aktivierungsenergie niedrig ist.

Abb. 5



b) Stereoisomerie – Konfigurationsisomerie

Stereoisomere unterscheiden sich durch **verschiedene Konfiguration**. Diese Art der Isomerie ist für stereochemische Betrachtungen ganz besonders wichtig, daher sind den Arten der Stereoisomerie das eigene Kapitel C gewidmet.

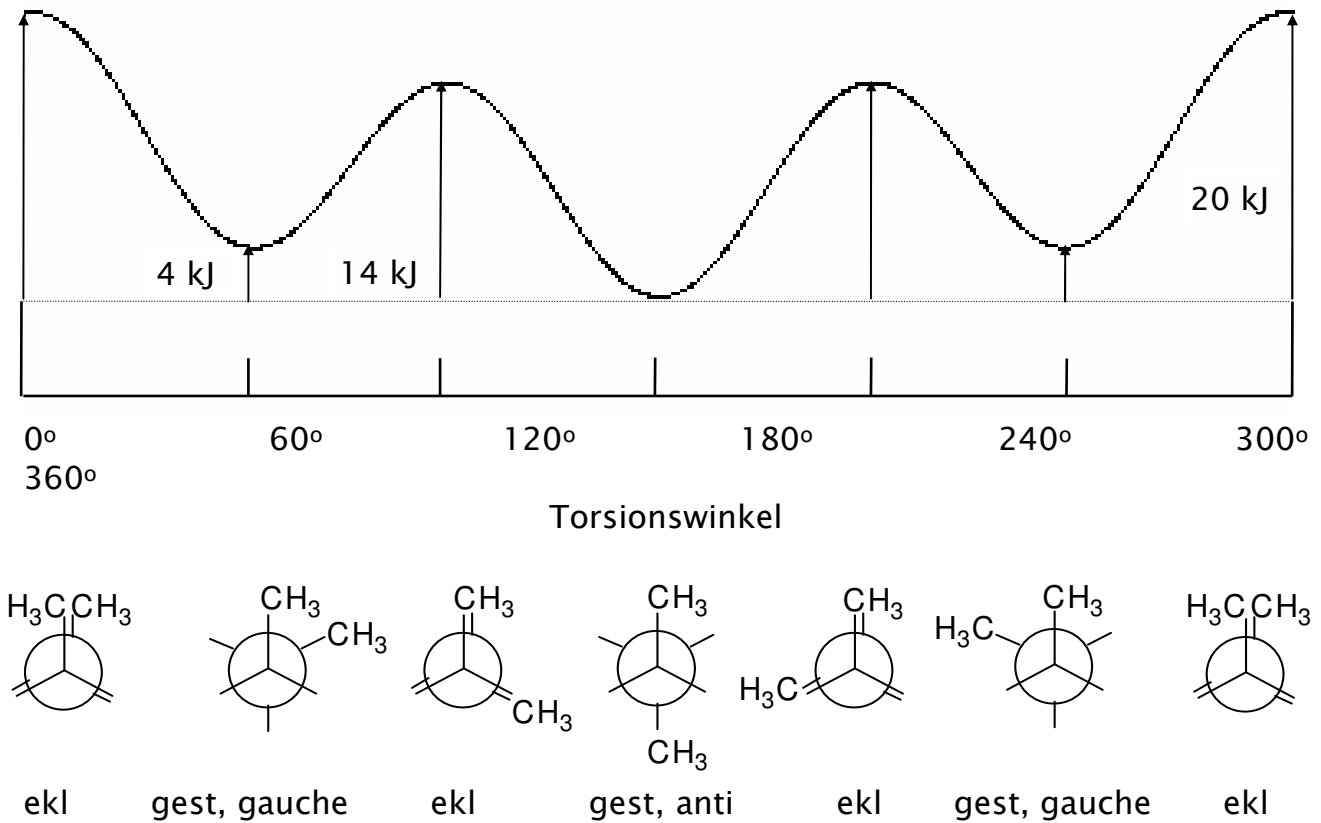
Man unterscheidet dabei die **Enantiomerie** (= Chiralität) und die **Diastereomerie**. Zur letzteren gehören alle Konfigurationsisomere außer den Enantiomeren.

c) Konformationsisomerie

Wie der Begriff zum Ausdruck bringt, unterscheiden sich diese Strukturen durch **verschiedene Konformation** voneinander. Es stellt sich die Frage, ob man (bei Raumtemperatur) überhaupt von Isomeren spricht, da ja die geringe Aktivierungsenergie für die Umwandlung der Konformer ineinander eine sehr rasche Gleichgewichtseinstellung gewährleistet.

Weiters liegen die energetischen Unterschiede zwischen den verschiedenen Konformeren meist im Bereich von 10 – 50 kJ/mol, also deutlich unter den Energietönungen, wie sie beim Aufbrechen und Schließen chemischer Bindungen auftreten. Dies und einige wichtige Begriffe sind in Abb. 6 zu sehen (verschiedene Konformationen von Butan bezüglich der Bindung C2–C3 mit ihren relativen Energien) .

Abb.6



4. Die Symmetrie von Teilchen

Symmetrieüberlegungen spielen bei Strukturdiskussionen eine wesentliche Rolle, daher sollen die wichtigsten Begriffe zusammengefasst werden.

a) Symmetrieelemente – Symmetrieeoperationen

Jedem einzelnen Gebilde, daher auch einem Molekül, kann man so genannte **Symmetrieelemente** zuordnen bzw. kann mit jedem Teilchen eine **Symmetrieeoperation** durchgeführt werden. Diese Symmetrieeoperationen überführen die Teilchen in eine vom Anfangszustand nicht unterscheidbare Lage:

Tabelle 2

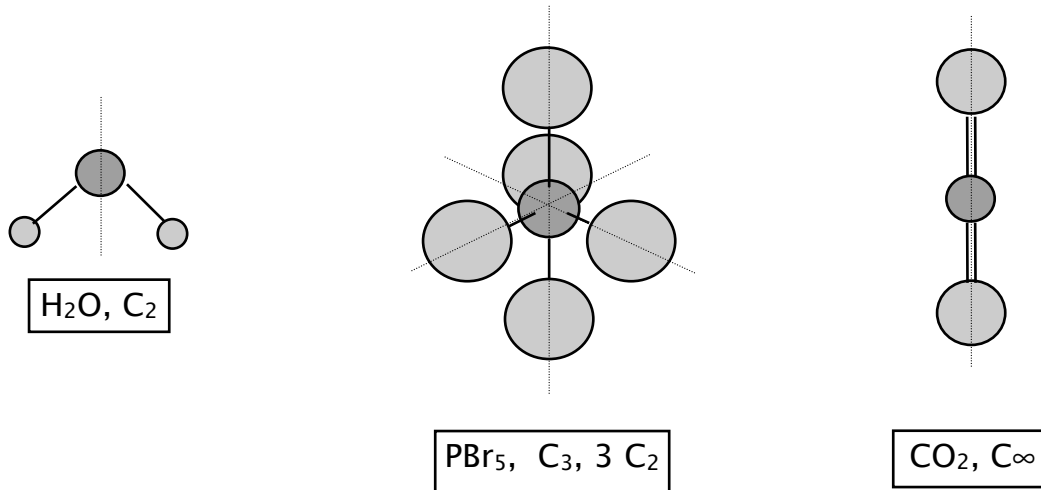
Kap	Symmetrieelement	Symmetrieeoperation	Symbol
i	Drehachsen	Drehung	C_n
ii	Spiegelebenen	Spiegelung	σ
iii	Inversionszentrum	Punktspiegelung	i
iv	Drehspiegelachsen	Drehspiegelung	S_n
v	Identität	----	I

i) Drehachsen

Ein Körper (Molekül), der eine Drehachse C_n besitzt, kann um einen Winkel $2\pi/n$ bzw. $360^\circ/n$ um diese Achse gedreht werden, ohne dass der Körper von seinem Anfangszustand unterschieden werden kann.

Einige Beispiele:

Abb. 7

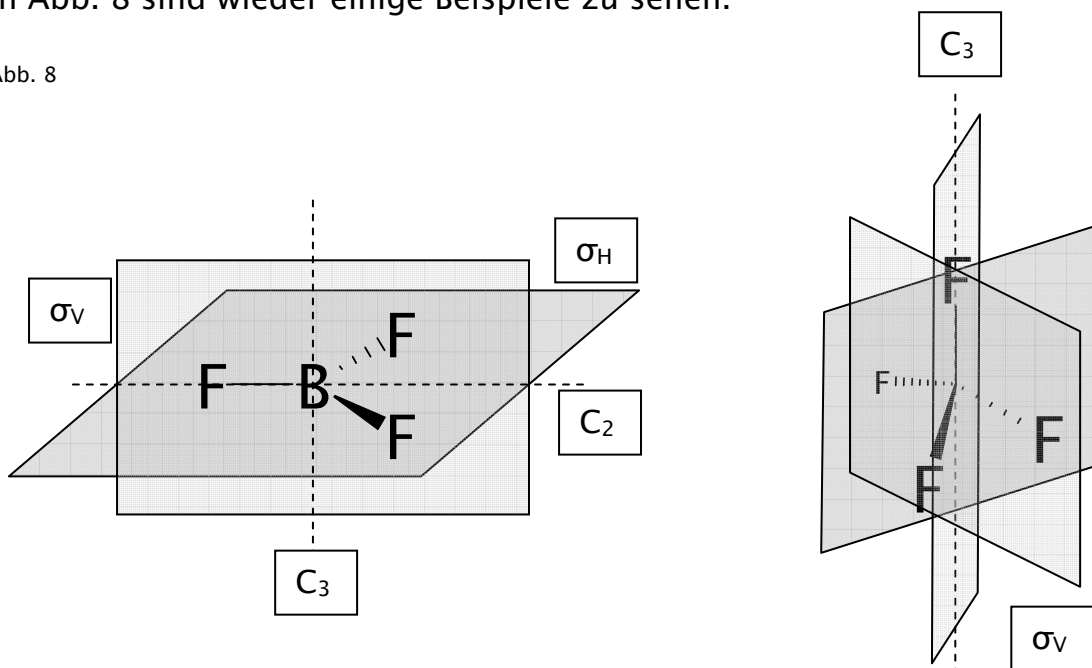


ii) Spiegelebenen

Ein Molekül, das eine Spiegelebene besitzt, ist von seinem Ausgangszustand nicht zu unterscheiden, wenn alle Atome an dieser Ebene gespiegelt werden. Man unterscheidet für den Fall, dass mehrere Spiegelebenen auftreten σ_v (vertikal), σ_h (horizontal) und σ_d (diagonal). Im Allgemeinen wird die Drehachse C_n mit der höchsten Zähligkeit als vertikal angenommen und dann darauf die Stellung der Spiegelebene bezogen.

In Abb. 8 sind wieder einige Beispiele zu sehen.

Abb. 8



iii) Inversionszentrum

Besitzt ein Teilchen ein Inversionszentrum, dann bleibt das Aussehen des Teilchens unverändert, wenn man die Atome am Zentrum spiegelt.

Einige Beispiele in Abb. 9.

Abb. 9



iv) Drehspiegelachsen

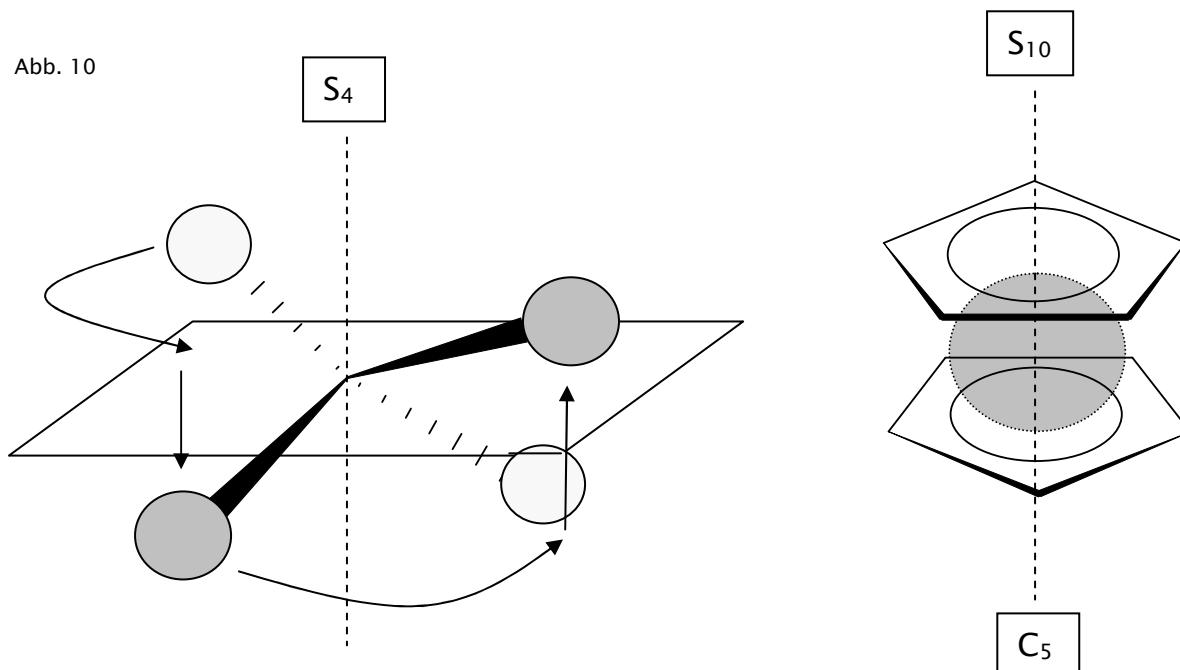
Bleibt bei einem Molekül nach der Drehung um $2\pi/n$ um eine Achse und anschließender Spiegelung an einer Ebene senkrecht zu dieser Drehachse durch den Molekülmittelpunkt die Lage der Atome gleich, dann spricht man von einer n-zähligen Drehspiegelachse. Dabei muss die Drehspiegelachse keine Drehachse und die Spiegelebene muss keine normale Spiegelebene des Moleküls sein.

Man kann sich leicht überzeugen, dass $S_1 = \sigma$ und $S_2 = i$ sind.

Einige Beispiele in Abb. 10:

Methan besitzt zwar eine S_4 , aber keine C_4 , es besitzt zwar σ_v , aber keine σ_h zu den C_2 . Ferrocen hat zwar eine S_{10} aber nur eine C_5 , außerdem hat dieses Molekül keine σ_h .

Abb. 10



v) Identität

Diese Symmetrieoperation lässt ein Teilchen unverändert, sie erscheint daher trivial, ist aber aus gruppentheoretischen Gründen notwendig. Die Symmetrieoperationen bilden eine mathematische Gruppe, jede Gruppe muss ein so genanntes neutrales Element enthalten, dieses ist hier die Identität.

b) *Punktgruppen – Folgen für makroskopische Messdaten*

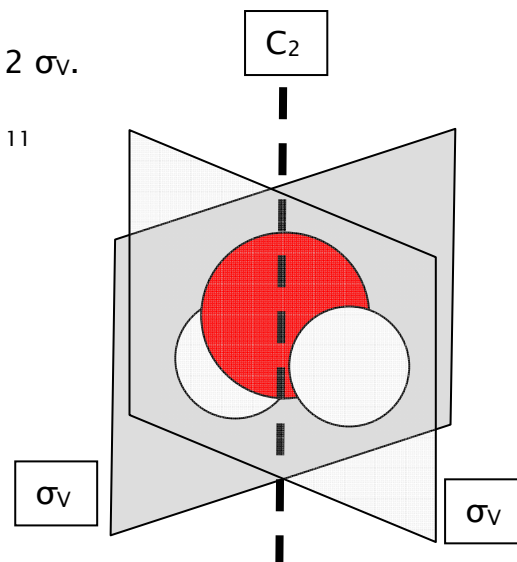
Es gibt Teilchen, die nur ein Symmetrieelement besitzen, aber auch solche mit mehreren oder manchmal mit sehr vielen Symmetrieelementen. Dabei stellt sich heraus, dass es **keine beliebige Kombination** von Symmetrieoperationen gibt, sondern sich nur gewisse zu Punktgruppen zusammenfassen lassen. Dabei genügen die Symmetrieelemente einer Punktgruppe auch den mathematischen Anforderungen der Gruppentheorie.

Im Anhang sind die 32 Punktgruppen tabellarisch zusammengefasst.

Hier soll als besonderes Beispiel die Punktgruppe C_{2v} am Beispiel des Moleküls Wasser besprochen werden (Abb. 11).

Diese Punktgruppe besitzt eine C_2 und 2 σ_v .

Abb. 11



Liegt dem Betrachter ein beliebiges Molekül vor, das mehrere Symmetrieelemente besitzt, so ist die Zugehörigkeit zu einer bestimmten Gruppe nicht immer auf den ersten Blick zu bestimmen. Man verwendet daher am besten ein Bestimmungsschema, das in der Art eines Flussdiagramms verfasst ist. Es ist ebenfalls im Anhang zu finden.

Die Zugehörigkeit zu einer bestimmten Punktgruppe bzw. das Vorhandensein oder Nichtvorhandensein bestimmter Symmetrieelemente lässt ganz spezielle Rückschlüsse von der molekularen Ebene auf makroskopische Eigenschaften zu. Hier sollen drei Aspekte diskutiert werden.

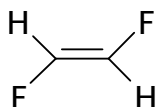
i) Symmetriebetrachtungen und NMR-Spektroskopie

Die nach wie vor wichtigste Art der NMR-Spektren ist das ^1H -NMR. Wasserstoffatome in verschiedener Umgebung sollten daher verschiedene Resonanzsignale ergeben. H-Atome, die hinsichtlich ihrer chemischen Umgebung äquivalent sind, sollten gleichartig absorbieren. Der Begriff „chemisch äquivalente Umgebung“ kann nun mit Hilfe einfacher Symmetrieüberlegungen näher erläutert werden. Eine Regel gibt darauf Antwort:

Wenn Atome in einem Molekül durch mindestens eine Symmetrieoperation der Punktgruppe, zu der das Molekül gehört, ausgetauscht werden können, so sind sie aus Symmetriegründen äquivalent.

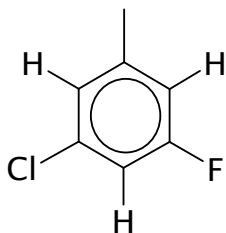
Dazu Beispiele in Abb. 12.

Abb. 12



E-1,2-Difluorethen (C_{2h})

Die Gruppe enthält i , bezüglich i können die beiden H-Atome ausgetauscht werden, sie sind daher gleichwertig \Rightarrow ein Signal



3-Chlor-5-fluortoluen (C_s)

Die Gruppe besitzt nur σ , bezüglich dieses Elementes können die H-Atome nicht ausgetauscht werden \Rightarrow drei Signale

Führt man diese Betrachtungen weiter, so kommt man zum Schluss, dass die drei H-Atome der CH_3 -Gruppe im Methanol nicht gleichwertig sind. Man sieht das recht gut in der Newmanprojektion (Blickrichtung C-O-Bindung):

In beiden Projektionen gibt es keine Symmetrieoperationen, die die H-Atome austauschen können. Das NMR-Spektrum von CH_3OH zeigt jedoch bei Raumtemperatur nicht vier, sondern nur zwei Signale. Dieser Widerspruch kann durch die intramolekulare Rotation um die C-O-Bindung erklärt werden. Dadurch wird die Umgebung der drei Protonen zeitlich gemittelt, es entsteht von ihnen nur ein Signal.



ii) Voraussetzungen für Dipolmomente

Voraussetzungen für die Existenz eines permanenten Dipolmoleküls sind:

- Das Molekül muss Atome enthalten, die nicht die gleiche Elektronegativität haben;
- Das Molekül muss bestimmten Punktgruppen angehören, bzw. bestimmte Punktgruppen dürfen nicht zutreffen.

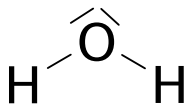
Es können nur Moleküle, die den Punktgruppen C_n , C_{nv} , und C_s angehören, elektrische Dipole sein.

Für C_n und C_{nv} kann das Dipolmoment nur in Richtung der Drehachse liegen und es darf keine Symmetrioperationen geben, die oben und unten vertauschen!

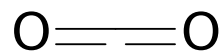
Für C_s kann das Dipolmoment nur in der Ebene σ liegen.

Beispiele dazu in Abb 13.

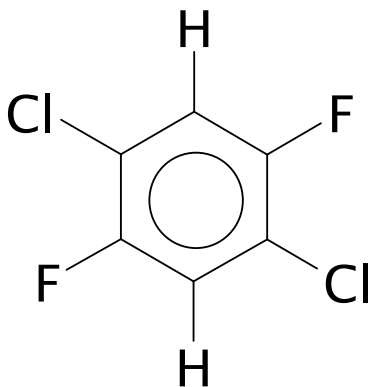
Abb. 13



Wasser, C_{2v} , Dipol



Kohlendioxid, $D_{\infty h}$, kein Dipol



1,4-Dichlor-3,5-difluorbenzen, C_{2h} , kein Dipol;
Tauscht man ein H gegen ein weiteres F aus,
so gehört das Molekül C_s an \rightleftharpoons Dipol

iii) Symmetrie und Chiralität

Diese beiden Begriffe sind sehr stark miteinander verknüpft. Symmetrieüberlegungen spielen gerade im Bereich der Spiegelbildisomerie die entscheidende Rolle. Aufgrund der Wichtigkeit sind diesem Zusammenhang die Kapitel C und D gewidmet.

C. Stereoisomerie bei kleinen Molekülen

1. Enantiomerie (Chiralität)

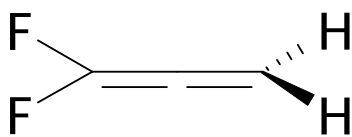
a) Bedingungen

Enantiomere sind Spiegelbilder, die nicht deckungsgleich sind. Üblicherweise begründet man dieses Symmetrieverhalten mit der Anwesenheit eines asymmetrischen C-Atoms. Die Begründung über Symmetrievorstellungen ist allerdings viel allgemeiner zu formulieren:

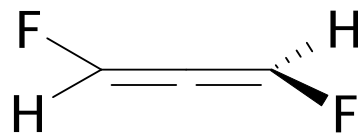
Enthält ein Molekül eine Drehspiegelachse S_n , so ist es nicht chiral.
Teilchen ohne Drehspiegelachse sind chiral.

Da $S_1 = \sigma$ und $S_2 = i$ sind, können Moleküle mit Symmetrieebenen und Inversionszentren nicht chiral sein. Hier einige Beispiele, bei denen nicht ganz auf den ersten Blick (k)ein Enantiomerieverhalten feststellbar ist:

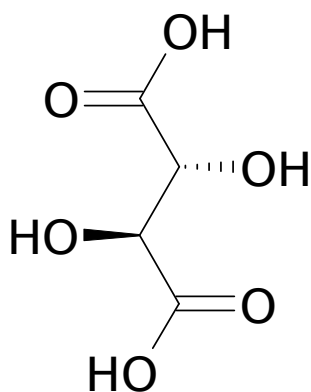
Abb. 14



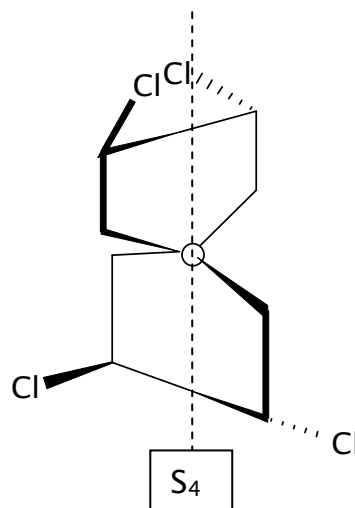
1,1-Difluorallen (C_{2v})
nicht chiral, weil $2 \times \sigma_v$



1,2-Difluorallen (C_2)
chiral, weil σ , kein i , keine $S_{n>2}$



2,3-Dihydroxybutandisäure,
trotz zweier asymmetrischer C
nicht chiral, da σ vorhanden



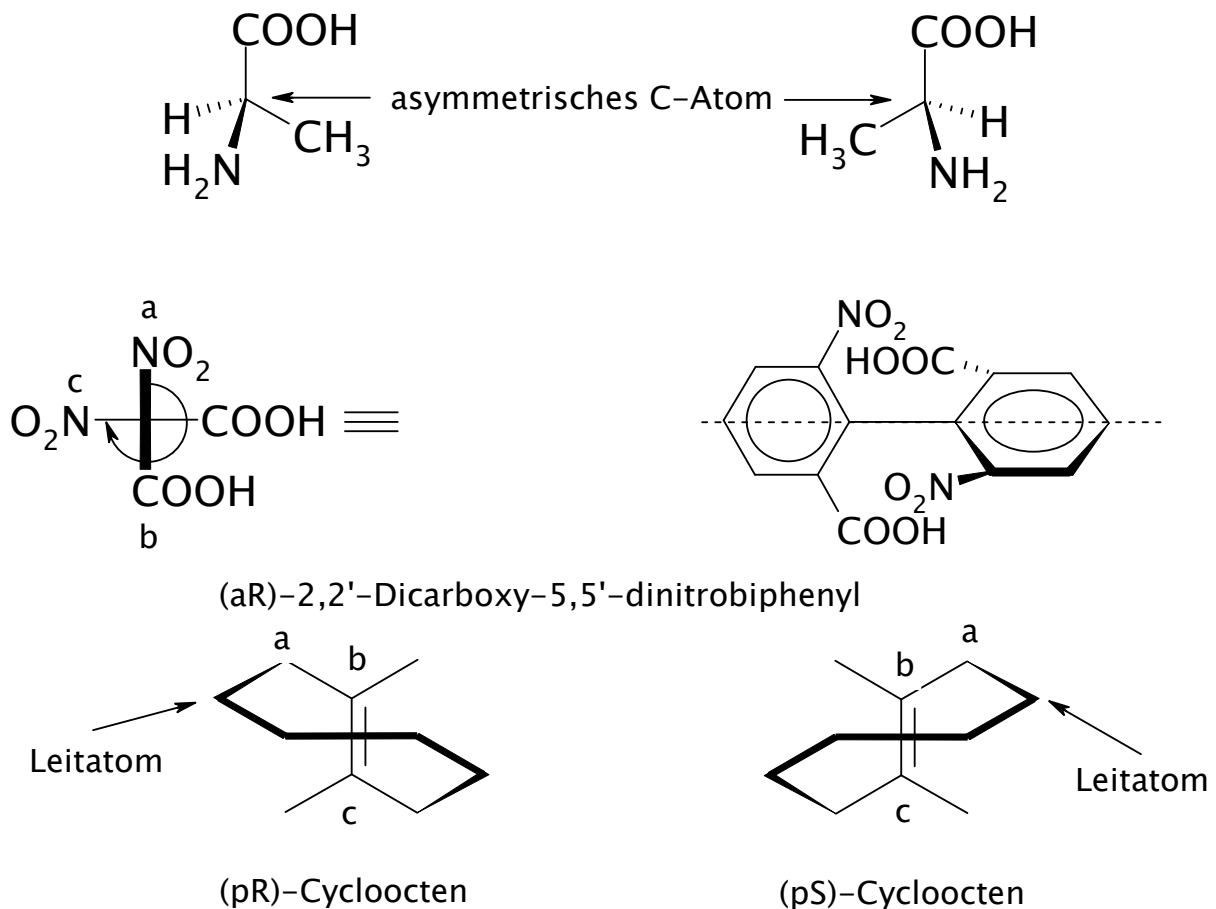
trans-2,3-trans-7,8-Tetrachlor-[4,4]-spirononan;
nicht chiral, obwohl keine σ und kein i , aber S_4

b) Ursachen

Die oben genannte Symmetriebedingung kann drei verschiedene Ursachen haben:

- Ein Chiralitätszentrum (häufigster Fall, 4 verschiedene Liganden an einem (C-)Atom).
- Eine Chiralitätsachse (4 verschiedene Liganden a,b,c und d paarweise um eine Achse angeordnet, Substituenten liegen nicht in einer Ebene).
- Eine Chiralitätsebene (Ebene im Molekül, bezüglich der die beiden Seiten eines Moleküls verschieden sind).

Abb. 15



c) Nomenklatur

Die Benennung der verschiedenen Enantiomeren erfolgt durch Voranstellen eines oder mehrerer Buchstaben – so genannten Stereodeskriptoren – vor den Präfixteil des Namens. Zu diesen Deskriptoren kommt man durch Betrachten verschiedener ebener Projektionen der Teilchenstruktur.

Dabei unterscheidet man die ältere, in erster Linie für Kohlenhydrate und Aminosäuren geschaffene Projektion und Benennung nach Fischer (auf Chiralitätszentren beschränkt) und die moderne und allgemein verwendete Benennung nach Cahn, Ingold und Prelog (CIP-Projektion, CIP-Regeln).

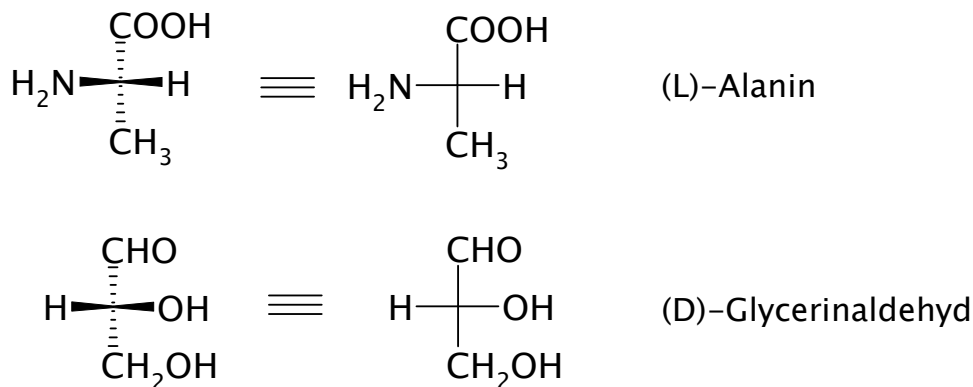
i) Projektion und Nomenklatur nach Fischer

Die voran zu setzenden Deskriptoren heißen (D)- oder (L)-.

Die Regeln für die Projektion und die Benennung lauten:

- Das Chiralitätszentrum liegt in der Zeichenebene.
- Die C-Kette wird von oben nach unten gezeichnet, wobei die C-Atome, die an das asymmetrische C-Atom gebunden sind, hinter die Zeichenebene schauen.
- Das höher oxidierte C-Atom neben dem Zentrum liegt oben.
- Die beiden nicht-C-Substituenten liegen waagrecht und schauen vor die Zeichenebene.
- Liegt nun die OH-Gruppe oder die NH₂-Gruppe rechts, dann spricht man von (D)-, im anderen Fall von (L)-.

Abb. 16



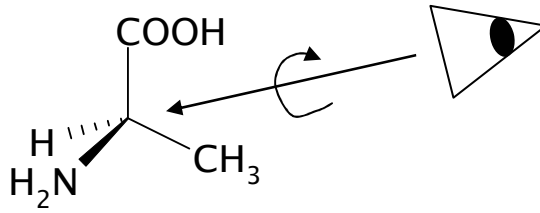
ii) Benennung nach Cahn, Ingold und Prelog (alle Formen der Chiralität)

Die voran zu setzenden Deskriptoren heißen (R)- oder (S)-, wenn es sich um ein Zentrum, (aR)- und (aS), wenn es sich um eine Achse und (pR)- bzw. (pS)-, wenn es sich um eine Ebene als Grund für die Chiralität handelt.

Die Regeln für die Projektion und die Benennung im Fall eines *Chiralitätszentrums* lauten:

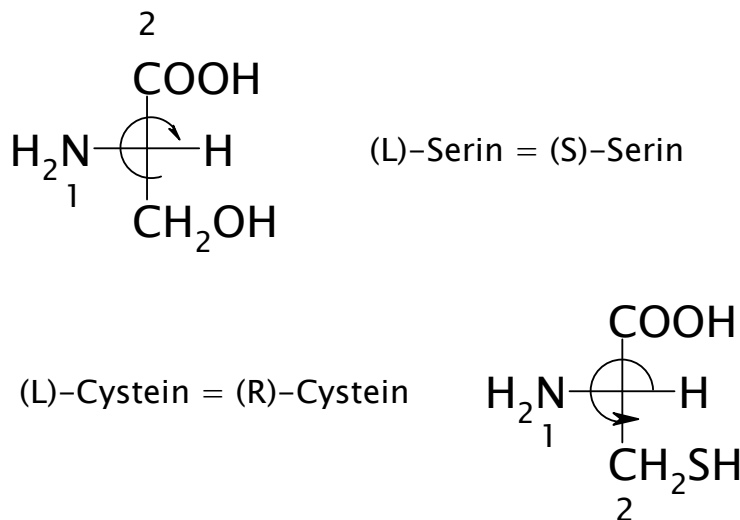
- Die Substituenten am Zentrum werden nach Prioritäten gereiht, Reihungskriterium ist die Ordnungszahl des Atoms, das an das Zentrum gebunden ist.
- Man betrachtet das Asymmetriezentrum so, dass der Substituent mit der niedrigsten Priorität vom Betrachter weggerichtet ist.
- Man dreht dann das Molekül um jene Bindung, die nach hinten gerichtet ist, so, dass der Substituent mit der höchsten Priorität die Stelle des mit der zweithöchsten Priorität einnimmt.
- Verläuft die Drehung im Uhrzeigersinn, dann verwendet man (R)-, im anderen Fall (S)- als Stereodeskriptor.

Abb. 17



Wenn einer der Substituenten H ist, kann man auch die Fischer Projektion verwenden, um nach CIP die richtigen Stereodeskriptoren zu erhalten. Man geht dann nach den Prioritätsregeln von CIP vor, betrachtet von vorne und dreht wieder so, dass der höchste Substituent in die Position des nächst höheren gelangt. Da jedoch in der Fischer-Projektion der Wasserstoff nach vorne schaut, ist bei einer Linksdrehung der richtige Deskriptor (R)-, bei einer Rechtsdrehung (S)-. Achtung: Die Deskriptoren (D)- und (R)- bzw. (L)- und (S)- können, müssen aber nicht korrespondieren.

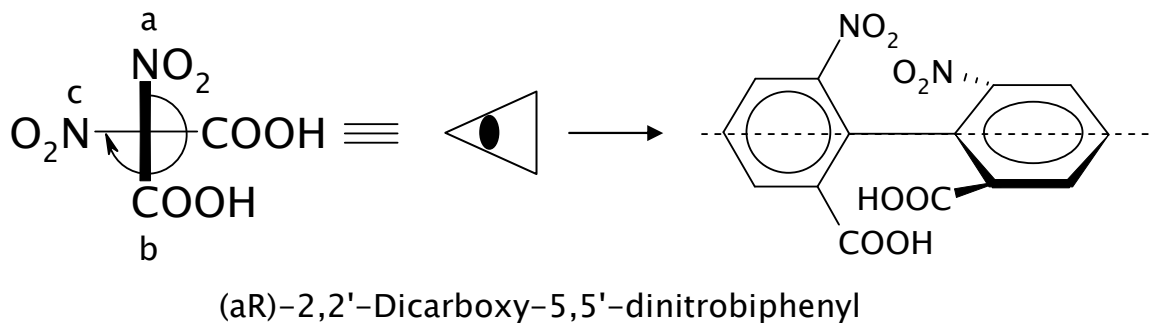
Abb. 18



Die Regeln für die Projektion und die Benennung im Fall einer **Chiralitätsachse** lauten:

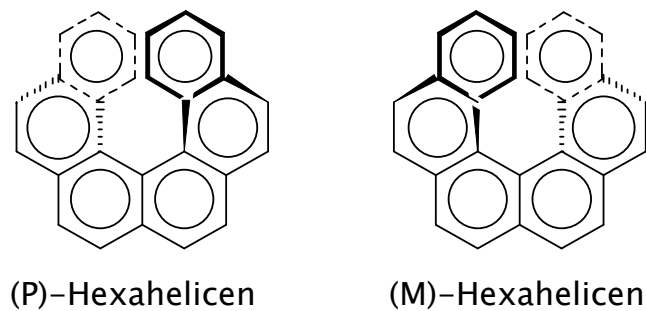
- Man betrachtet das Molekül in Richtung der Chiralitätsachse, wobei die beiden Bindungen zu den am vorderen C-Atom gebundenen Liganden a und b senkrecht stehen (dicke Linie). Die hinteren Bindungen zu c und d sind waagrecht zu schreiben (dünne Linie).
- Die Prioritätenfolge der Liganden lautet vorne $a > b$, hinten $c > d$ und $a \geq c$ (Ordnungszahl).
- Man dreht nun in die Richtung $a \rightarrow b \rightarrow c$. Verläuft diese Drehung im Uhrzeigersinn, so spricht man von (aR)-, im anderen Fall von (aS)-.

Abb. 19



Eine besondere Form der Axialchiralität ist die Helicität. Helices sind chirale Objekte mit C_n -Symmetrie, die rechts- oder linksgängig sein können. Betrachtet man eine rechtsgängige Helix längs ihrer Achse, so beschreibt sie eine Drehung im Uhrzeigersinn und man nennt sie P (von plus), im anderen Fall M (von minus).

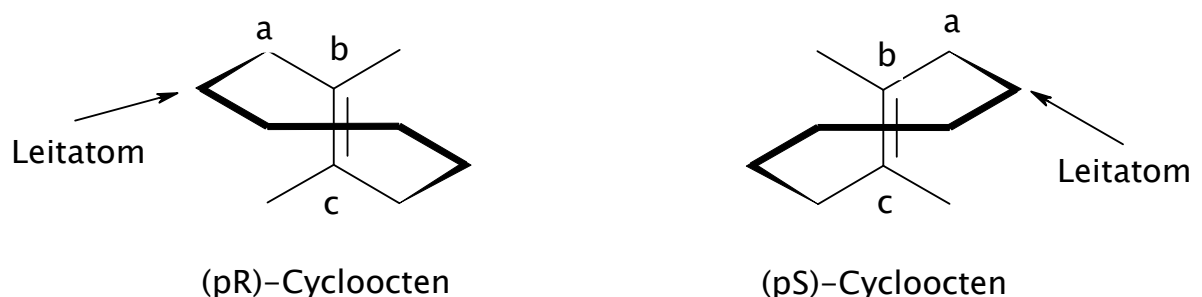
Abb. 20



Die Regeln für die Projektion und die Benennung im Fall einer **Chiralitätsebene** lauten:

- Man betrachtet jenes ranghöchste Atom **vor** der Chiralitätsebene des Moleküls, das als nächstes neben einem in der Chiralitätsebene liegt (= Leitatom).
- Vom Leitatom weg werden die nächsten drei Atome in der Ebene mit a, b und c gekennzeichnet, wobei die Prioritätenreihenfolge $a > b > c$ ist.
- Geht man nun von a nach c im Uhrzeigersinn, so lautet der Stereodeskriptor (pR)-, im anderen Fall (pS)-.

Abb. 20



d) *Physikalische und chemische Eigenschaften von Enantiomeren*

Es gibt nur einen einzigen physikalischen Unterschied zwischen den Spiegelbildisomeren. Die Schwingungsebene des linear polarisierten Lichts wird von einem der beiden Enantiomeren um einen bestimmten Winkel nach rechts, vom anderen um denselben Winkel nach links gedreht. Die Drehrichtungen werden mit (+) und (-) gekennzeichnet und haben nichts mit der absoluten Konfiguration und damit den Stereodeskriptoren zu tun.

Diese optische Aktivität ist von einigen Parametern abhängig:

$$\begin{array}{ccccc} \text{Drehwinkel} & \longrightarrow & \alpha_{\lambda} = \alpha_{\lambda}^{\circ} \cdot c \cdot d & \longleftarrow & \text{Schichtdicke} \\ & & \nearrow & & \nwarrow \\ & & \text{spezifischer Drehwinkel} & & \text{Konzentration} \end{array}$$

Eine 1:1-Mischung zweier Enantiomere heißt Racemat und ist nicht optisch aktiv. Dabei unterscheidet man:

- Racemische Gemische (Konglomerate), das sind Gemische von enantiomorphen Kristallen der reinen Enantiomeren, d.h. die Kristalle sind zueinander spiegelbildlich.
- Racemische Verbindungen, das sind 1:1 Molekülverbindungen der Enantiomeren. Sie haben andere Eigenschaften als die reinen Enantiomere.
- Racemische Mischkristalle, das sind weitgehend ideale feste Lösungen. Diese haben die gleichen Eigenschaften bis auf den Drehwinkel.

Viel wichtiger sind jedoch Unterschiede in chemischen Reaktionen. In den meisten (z.B. Protolysen, Redoxreaktionen) verhalten sich Enantiomere völlig gleich, es gibt jedoch stereoselektive bzw. stereospezifische Reaktionen, bei denen Unterschiede zwischen den Spiegelbildern vorhanden sein können.

Selbstverständlich besteht immer ein Unterschied (vor allem in der Kinetik), wenn es sich um enzymkontrollierte Reaktionen handelt. Die Enantiomerie hat daher größte Bedeutung in der Biochemie, da ja eine genau vorgegebene räumliche Struktur des Substrates zu einem bestimmten Enzym passt (Schlüssel - Schloss - Beziehung).

2. Diastereomerie

Alle Stereoisomeren, die nicht Spiegelbilder sind, nennt man Diastereomere. Es gibt dabei eine ganze Reihe von Gründen für die Diastereomerie, die im Folgenden kurz beschrieben werden.

a) *Aliphaten mit mehreren Chiralitätszentren*

Dies ist die klassische, bekannte Art der Diastereomerie. Besitzt eine Verbindung n asymmetrische Zentren, so gibt es 2^n Diastereomere, oder auch 2^{n-1} Enantiomerenpaare. Die Mitglieder verschiedener Paare sind zueinander diastereomer. Eine Besonderheit stellen dabei meso-Formen dar. Dies sind Moleküle mit einer geraden Anzahl von Asymmetriezentren (im einfachsten Fall zwei), die aber eine σ besitzen, also nicht chiral sind. Man könnte sie auch als „intramolekulare Racemate“ auffassen, da die beiden Asymmetriezentren die gegenteilige Konfiguration bei relativ gleicher Umgebung besitzen (Abb. 14: 2,3-Dihydroxybutandisäure auf Seite 13).

Bei der Benennung kann man natürlich ganz normal die Stereodeskriptoren (R)- und (S)- verwenden, man spricht in diesem Fall von absoluter Konfiguration.

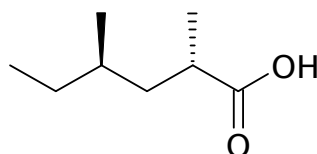
Unter der relativen Konfiguration (hier mit „erythro“ oder „anti“ bzw. „threo“ oder „syn“ gekennzeichnet) versteht man die Konfiguration eines asymmetrischen C-Atoms in Bezug auf die anderen chiralen Zentren. Die relative Konfiguration ist im Gegensatz zur absoluten invariant gegenüber Spiegelung.

Von „erythro“ spricht man, wenn in der Fischerprojektion die gleichen Substituenten auf derselben Seite der C-Kette liegen, bzw. die Substituenten in der Newmanprojektion bei Drehung paarweise zur Deckung kommen. Im anderen Fall spricht man von „threo“.

Die Bezeichnungen „anti“ und „syn“ sind vor allem in der Valenzstrichschreibweise mit Keilen gut zu sehen. Bei anti liegen die gleichen Substituenten auf verschiedenen Seiten der C-Hauptkette, bei syn auf derselben Seite. Diese Benennung (relative Konfiguration) lässt sich auch gut auf jene Verbindungen anwenden, bei denen die chiralen Zentren weiter auseinander liegen.

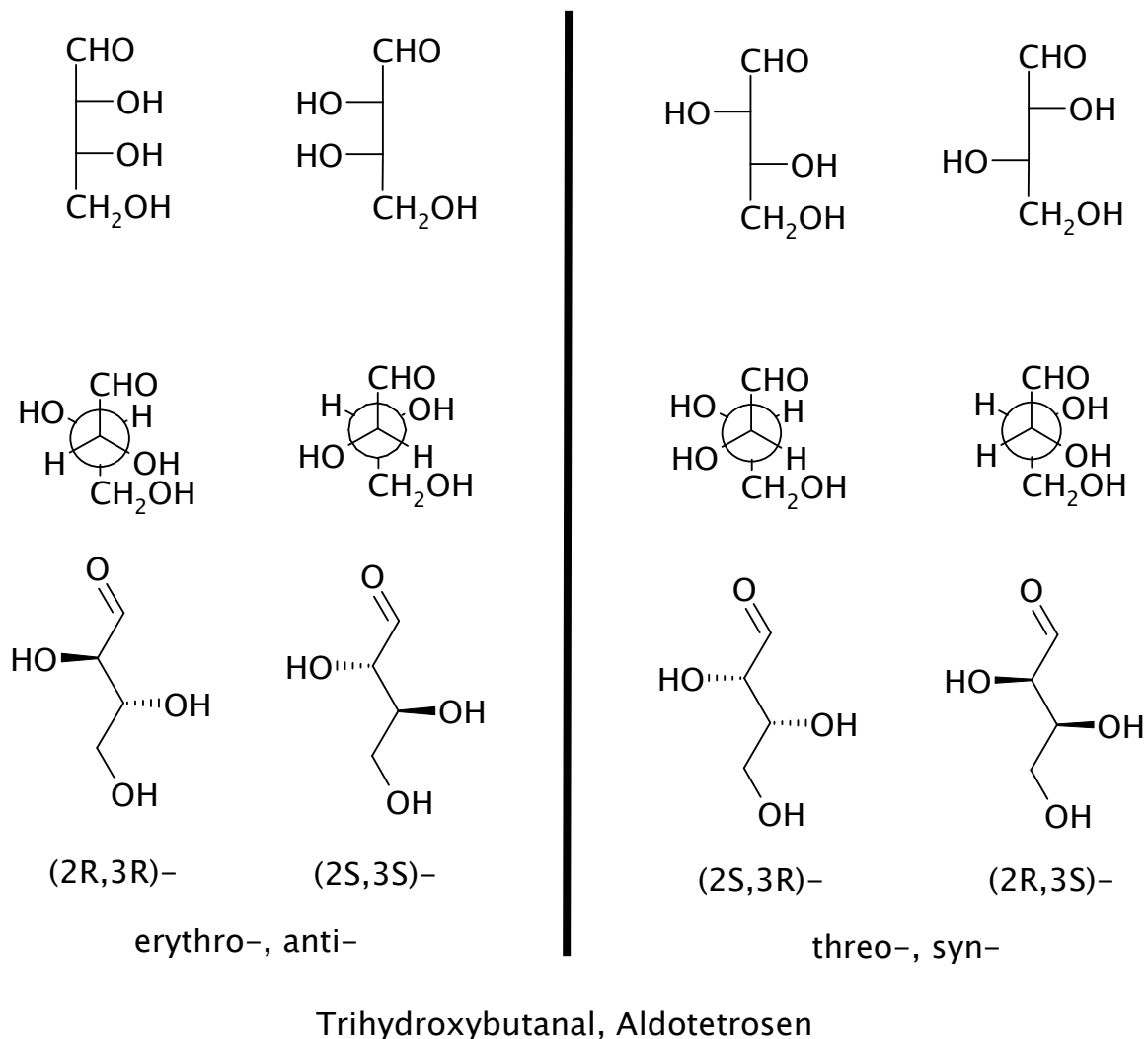
Die Abbildungen 21 und 22 zeigen dies:

Abb. 21



absolut: (2S,4R)-2,4-Dimethylhexansäure
relativ: anti-2,4-Dimethylhexansäure

Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass mit der relativen Konfigurationsangabe „anti“ auch die (2R,4S)-2,4-Dimethylhexansäure gemeint sein kann.



In der Fischer-Projektion von Pentan-1,2,3,4,5-pentol sind C-Atom 2 und 4 Chiralitätszentren, Nummer 3 jedoch nicht. Man spricht hier von einem Pseudochiralitätszentrum, weil es beim Ändern der Konfiguration eines der beiden daneben liegenden C-Atome sofort zum echten Zentrum wird.

Daher vergibt man einen klein geschriebenen Stereodeskriptor, wobei das Zentrum mit (R)- Priorität vor dem mit (S)- besitzt.

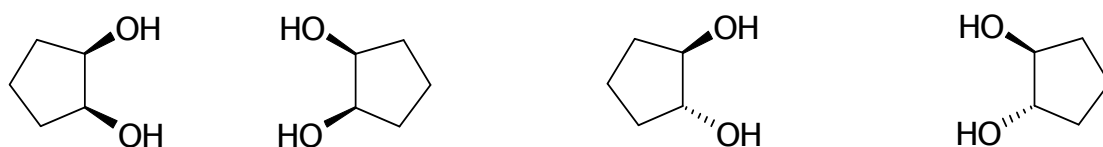
b) Cyclen mit Mehrfachsubstitution

Man unterscheidet bei disubstituierten Cycloalkanen zunächst die cis- und trans-Diastereomeren. Dabei sind alle mit gleichen Gruppen disubstituierten cis-Cyclen achiral, da die nicht planaren Konformationen gewöhnlich sehr rasch ineinander übergehen und damit statistisch gesehen Spiegelebenen senkrecht zur Ringebene vorhanden sind.

Trans-disubstituierte Cyclen sind auf alle Fälle chiral, auch wenn es sich um gleiche Substituenten handelt (siehe Abb. 23).

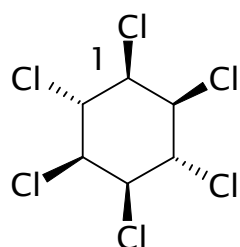
Die absolute Konfiguration solcher Systeme wird wie gewöhnlich mit den Stereodeskriptoren (R)- und (S)- wiedergegeben. Auch hier gibt es die Möglichkeit einer relativen Konfigurationsbezeichnung. Bei Disubstitution sind es die erwähnten Deskriptoren cis- bzw. trans-, bei mehreren Substituenten schreibt man jenem mit der niedrigsten Positionsnummer den Buchstaben (r) für Referenz zu und gibt allen anderen die Buchstaben (c) für cis oder (t) für trans (Abb. 23).

Abb. 23



(1R,2S)-Cyclopentandiol
meso-1,2-Cyclopentandiol
cis-1,2-Cyclopentandiol

(1R,2R)-Cyclopentandiol (1S,2S)-Cyclopentandiol
trans-1,2-Cyclopentandiole



(1r,2c,3t,4c,5c,6t)-Hexachlorcyclohexan
Gammexan, Lindan, HCH,
als einziges der möglichen Diastereomeren
wirkt es als Insektizid

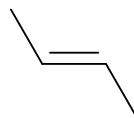
c) Verbindungen mit Doppelbindungen

Für Strukturen mit Doppelbindungen der Konstitution $abX=Ycd$, in denen $a \neq b$ und $c \neq d$ ist, existieren zwei Diastereomere, zu deren Kennzeichnung früher die Deskriptoren cis und trans verwendet wurden. Diese sind jedoch nur eindeutig, wenn wenigstens einer der Liganden von X und einer von Y gleich sind, wie z.B. in 2-Buten.

Abb. 24



cis-But-2-en



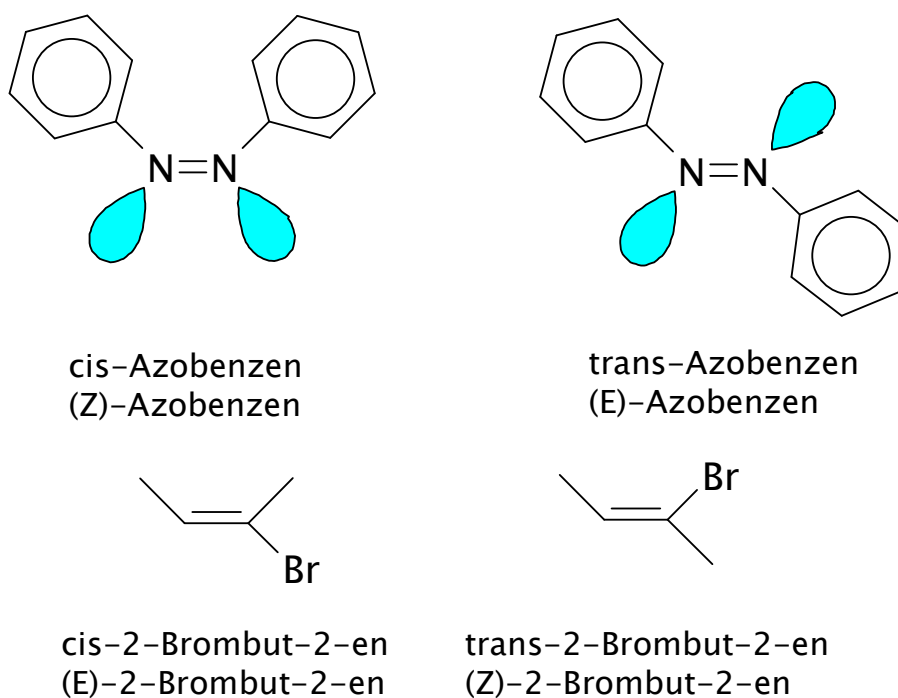
trans-But-2-en

Ist dies nicht der Fall, so ist vorzüglich die Nomenklatur mit den Stereodeskriptoren (E)- (von: entgegen) und (Z)- (von: zusammen) anzuwenden. Dabei wird nach den üblichen Prioritätsregeln (siehe CIP) die Sequenz der Liganden festgelegt. Schließlich erhält jene Struktur, bei der die jeweils höheren Substituenten auf derselben Seite der Doppelbindung liegen, den Deskriptor (Z)-, die andere den Buchstaben (E)-.

Normalerweise sind Diastereomere mit Doppelbindungen achiral, außer die Ebene der Doppelbindung ist eine Chiralitätsebene (siehe Cycloocten).

In vielen Fällen entspricht dem cis-Diastereomeren auch der Deskriptor (Z)-, es ist aber nicht immer so (siehe Abb. 25).

Abb. 25



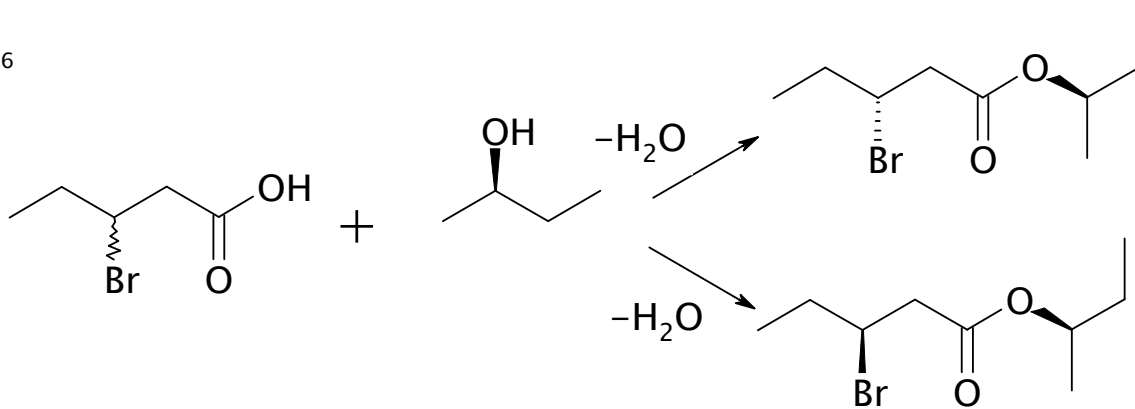
d) *Eigenschaften von Diastereomeren*

Diastereomere haben unterschiedliche physikalische und chemische Eigenschaften und können daher durch übliche Methoden (z.B. Chromatographie, Destillation, Extraktion...) voneinander getrennt werden.

Darauf beruht letztendlich auch ein mögliches Trennverfahren von Enantiomeren, wie im Folgenden kurz erklärt werden soll. Bei der Umsetzung eines Racemats mit **einer** optisch aktiven Substanz entstehen zwei Diastereomere, die getrennt werden können.

Man kann z.B. ein Racemat einer Carbonsäure mit einem reinen Enantiomeren eines Alkohols verestern. Die beiden diastereomeren Ester können dann durch ein übliches Verfahren getrennt werden und die gewünschte Säure durch Esterspaltung zurück gewonnen werden (Abb. 26).

Abb. 26



D. Stereoisomerie bei anderen Teilchen

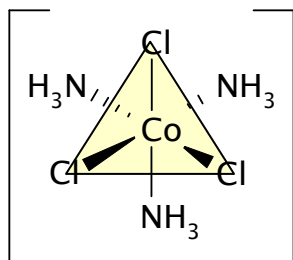
1. Enantiomerie und Diastereomerie bei Komplexen

Bei komplexen Teilchen spielt die Stereoisomerie ebenfalls eine bedeutende Rolle, wenn auch nicht so umfassend wie in der organischen Chemie. Auch hier gibt es also Diastereomerie und Enantiomerie.

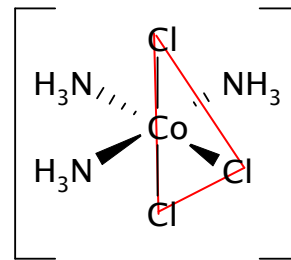
Im Detail hängen die Möglichkeiten zur Stereoisomerie auch von der Geometrie des Komplexes und von der Zahl und Art der Liganden ab.

In Abbildung 27 (diese und nächste Seite) sind einige Beispiele von stereoisomeren Komplexen gegeben und die nach wie vor häufig verwendeten Stereodeskriptoren (relative Konfiguration) cis-trans, sowie fac-mer. Letztere leiten sich von „facial“ und „meridional“ ab.

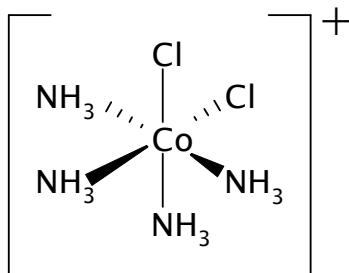
Abb. 27



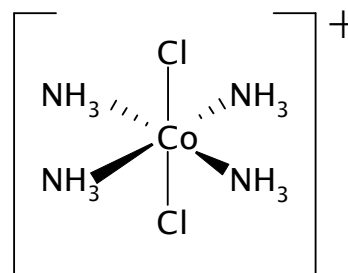
fac-Trichlorodiammincobalt-III



mer-Trichlorodiammincobalt-III

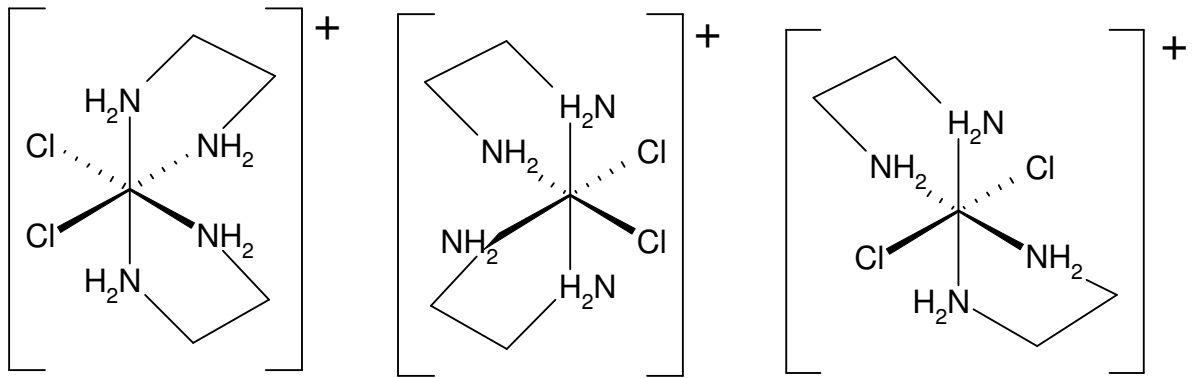


cis-Dichlorotetrammincobalt-III



trans-Dichlorotetrammincobalt-III

nicht chirale Diastereomere



Δ -cis-Dichlor-bis-(1,2)-ethandiamincobalt-III

Λ -cis-Dichlor-bis-(1,2)-ethandiamincobalt-III

trans-Dichlor-bis-(1,2)-ethandiamincobalt-III

enantiomer

diastereomer

2. Polymere

Makromoleküle mit mehreren Chiralitätszentren können durch Angabe der absoluten Konfiguration leicht charakterisiert werden. Dennoch ist es üblich, hier die relative Konfiguration der Chiralitätszentren anzugeben. Diese heißt **Taktizität**.

Nach der Anzahl der Chiralitätszentren pro Grundbaustein (kleinste sich wiederholende Einheit) unterscheidet man **monotaktische**, **ditaktische** usw. Polymere.

Die verschiedenen Möglichkeiten der Taktizität werden hier an monotaktischen Vinylpolymeren, z.B. Polypropylen, gezeigt. Die kleinste sich wiederholende Einheit sind dabei zwei aufeinander folgende C-Atome in der Kette. Zwei solche Strukturelemente bilden eine Diade. Für die Beschreibung der relativen Konfiguration der Diaden können nun die Deskriptoren m (meso) und r (racemisch) festgelegt werden. Man könnte natürlich auch 1,3-syn bzw. 1,3-anti schreiben. Für die Triaden ergeben sich dann die Stereosequenzen mm, rr und mr (=rm). Extrapoliert auf stereoreguläre Polymere wurden dann die Bezeichnungen **isotaktisch**, **syndiotaktisch** und **heterotaktisch** eingeführt. Stereoirreguläre Polymere heißen **ataktisch**.

Polymere mit stereoregulären Makromolekülen können im Gegensatz zu den ataktischen kristallisieren und sind achiral.

Alle diese Möglichkeiten sind auf Seite 25 in Abbildung 29 dargestellt.

Enthalten Makromoleküle Doppelbindungen, dann wird natürlich Z/E-Diastereomerie beobachtet. Ein berühmtes Beispiel für diastereomere, natürliche Polymere dieser Art sind Kautschuk, ein Elastomer, und Guttapercha, ein Thermoplast.

Abb. 28

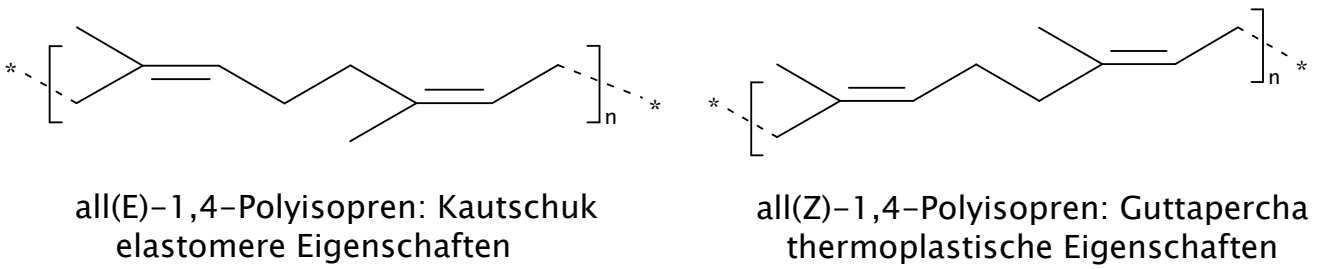
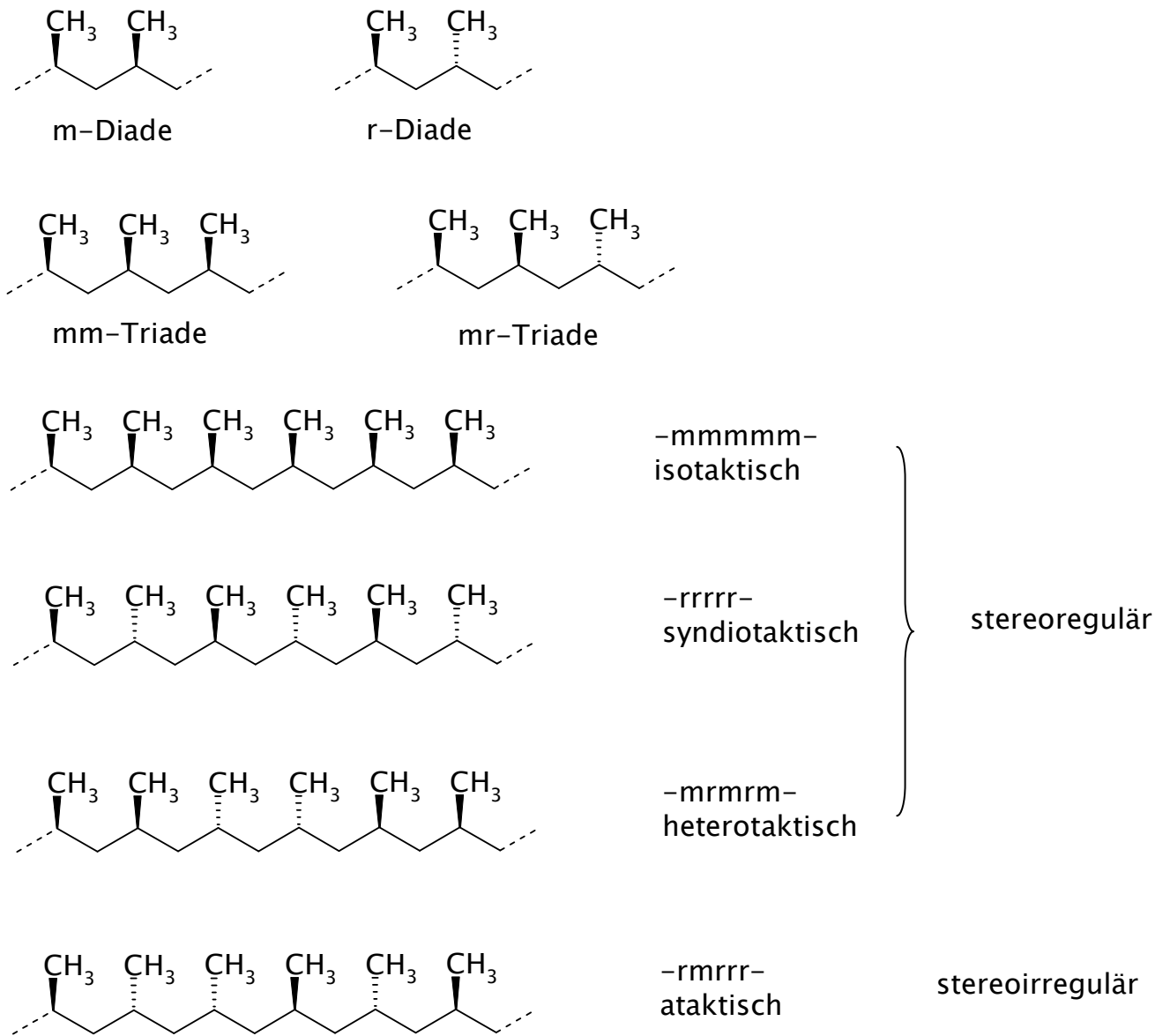


Abb. 29



E. Anhang

1. Literatur

Den Inhalt dieses Skriptums findet man zum Großteil in allen gängigen Lehrbüchern der organischen Chemie und der Komplexchemie.

Dennoch möchte ich für die AHS zwei Bücher empfehlen, in denen zusätzlich stereochemische Inhalte zu finden sind:

Siegfried Hauptmann, Gerhard Mann: **Stereochemie**

Spektrum Akademischer Verlag, 1996

ISBN: 3-86025-144-9

Karl-Heinz Hellwich, Carsten Siebert: **Übungen zur Stereochemie**

Springer Verlag

ISBN: 3-540-01299-0

Alle Formeln in Abbildungen wurden mit der Software ISIS/Draw erstellt.

Diese ist als kostenloser Download von der Seite www.mdli.com zu erhalten. Man muss sich registrieren und erhält umgehend ein Kenn- und ein Passwort, kann dann herunterladen und muss nur mehr installieren.

Die Handhabung der Software ist nicht sehr schwierig und kann durch Üben (trial and error) leicht perfektioniert werden.

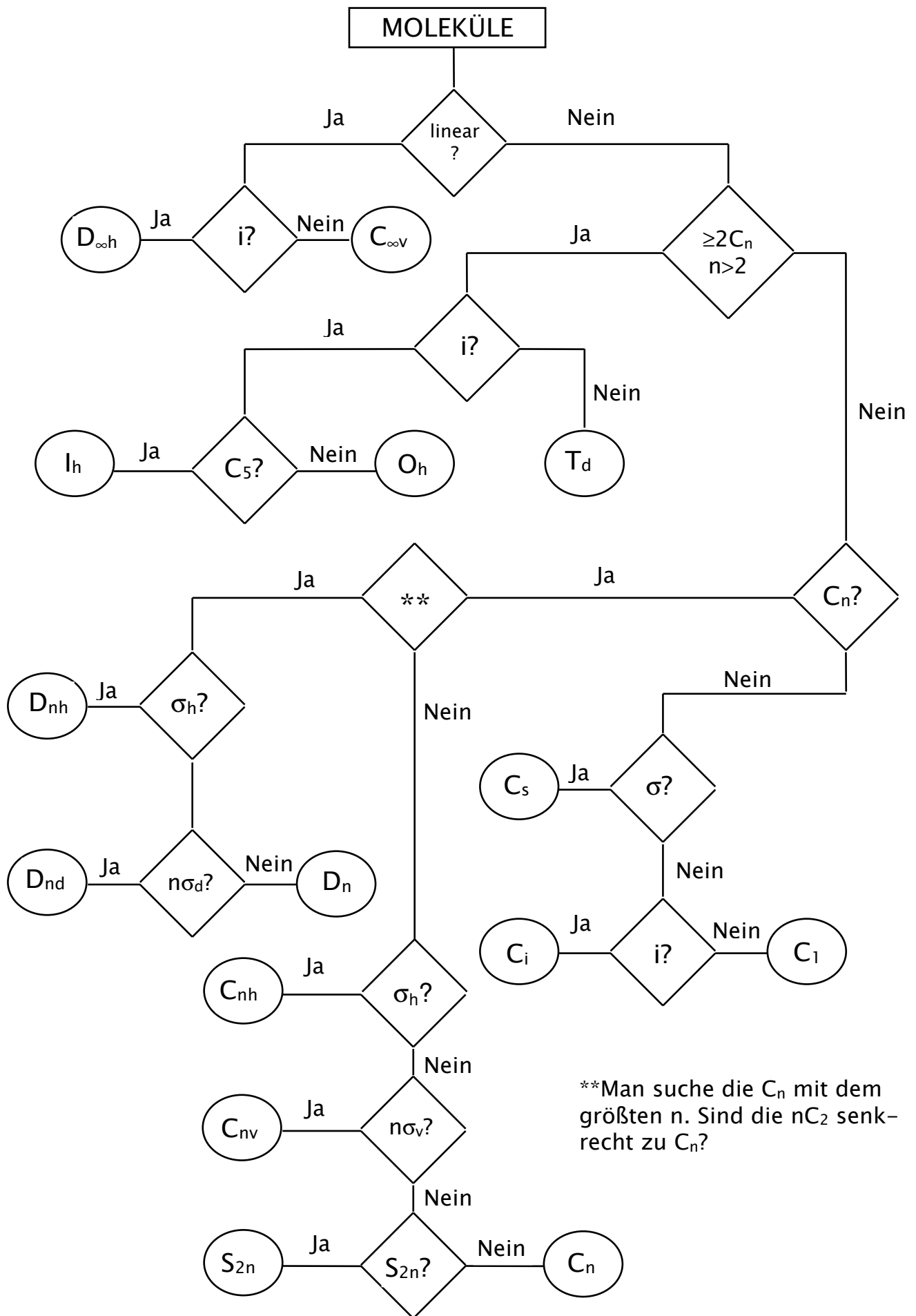
Will man nun eine Formel (Gleichung) in einen WORD-Text einfügen, so gibt es zwei Möglichkeiten:

- Öffnen von ISIS/Draw, zeichnen der Formeln, markieren, kopieren wieder öffnen des WORD-Dokumentes, einfügen, anschließend das Objekt noch formatieren
- An der Stelle im WORD-Dokument, wo eine Formel eingefügt werden soll, mit „Einfügen“ – „Objekt“ – „ISIS/Draw Sketch“ ISIS/Draw öffnen, zeichnen, dann schließen und auf die Frage „This object has been changed. Update Microsoft Word before proceeding“ mit „Ja“ antworten. Anschließend das Objekt noch formatieren.

2. Flussdiagramm zur Bestimmung von Punktgruppen

Es ist fast unmöglich durch Aufzählen der Symmetrieelemente eine bestimmte Punktgruppe eines Teilchens zu finden, weil man, besonders bei hochsymmetrischen Gebilden, leicht ein Element übersieht.

Daher empfiehlt es sich nach dem auf der nächsten Seite angegebenen Flussdiagramm die entsprechende Punktgruppe zu finden.



3. Punktgruppen

Familien	Gruppen	enthält	Beispiele
C_n	C ₁	C ₁ = I (geringste Symmetrie)	CHFCIBr
	C ₂	C ₂ (Diedersymmetrie)	H ₂ O ₂ , S ₂ Cl ₂
	C _{>2}	C _{>2} (sehr selten)	
S_n	S ₂	S ₂ = i	HCIFC-CFCIH (ekliptisch)
	S ₄	S ₄ , S ₄ ² = C ₂ , S ₄ ³	Tetrachlorspiropentan
	S _{>4}	S _{>4} (äußerst selten)	
C_{nv}	C _{1v} = C _s	σ (sehr häufig)	Jedes planare Molekül, das kein weiteres Symmetrieelement besitzt: Phenol
	C _{2v}	C ₂ , 2xσ _v (sehr häufig)	H ₂ O, o-Dichlorbenzen
	C _{3v}	C ₃ , C ₃ ² , 3xσ _v (häufig)	Alle trigonal pyramidalen Moleküle: NH ₃
	C _{4v}	C ₄ , C ₄ ³ , C ₂ , 2xσ _v , 2xσ _d	Alle quadratisch pyramidalen Moleküle: XeOF ₄
	C _{∞v}	C _∞ , ∞ viele σ _v ,	Alle linearen Moleküle, die verschiedene Enden haben: HCN, HCl
D_n enthalten eine C _n und nC ₂ senkrecht dazu	D ₁ = C ₂	C ₂ (Diedersymmetrie)	H ₂ O ₂ , S ₂ Cl ₂
	D ₂	C ₂ , 2xC ₂ senkrecht dazu	twisted (angeregtes) H ₂ C=CH ₂
	D ₃	C ₃ , 3xC ₂ senkrecht dazu	
	D _{>3}	äußerst selten	
C_{nh} enthalten C _n und σ _h	C _{1h} = C _s	enthält nur σ	siehe C _s
	C _{2h}	C ₂ , σ _h , i	trans N ₂ H ₄
	C _{3h}	C ₃ , C ₃ ² , S ₃ , S ₃ ⁵ , σ _h	B(OH) ₃

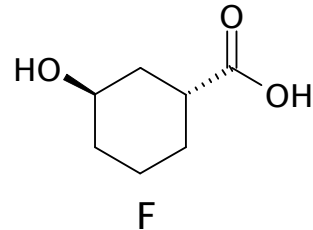
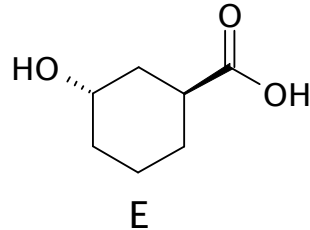
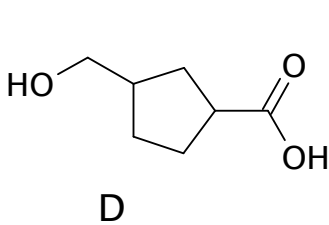
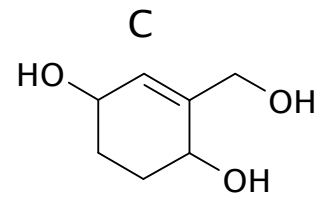
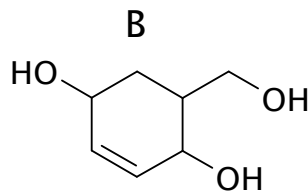
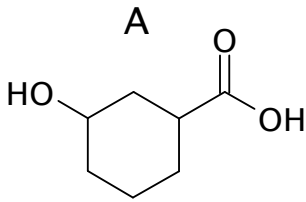
Familien	Gruppen	enthält	Beispiele
D_{nd} enthält C _n S _{2n} , nC ₂ senkrecht zu C _n und nσ _d	D _{2d}	3xC ₂ , S ₄ , 2xσ _d	Allen, S ₄ N ₄
	D _{3d}	C ₃ , 3xC ₂ , S ₆ , C ₃ ² , i, S ₆ ⁵ , 3xσ _d	C ₂ H ₆ in gestaffelter Form
	D _{4d}	C ₄ , 4xC ₂ , S ₈ , S ₈ ⁵ , S ₈ ⁷ , C ₂ , C ₄ ³ , 4xσ _d	S ₈
	D _{5d}	C ₅ , S ₁₀ , 5xC ₂ , C ₅ ³ , 5xσ _d , C ₅ ² , S ₁₀ ⁹	Ferrocen
D_{nh} C _n , nC ₂ senkrecht dazu, σ _h , weitere σ, eventuell i, S _n	D _{2h}	3xC ₂ (senkrecht), 3xσ, i	C ₂ H ₄ , B ₂ H ₆
	D _{3h}	C ₃ , 3xC ₂ , 3xσ _v , σ _h , C ₃ ² , S ₃ , S ₃ ²	BF ₃ , PCl ₅
	D _{4h}	C ₄ , 4xC ₂ , 2xσ _v , 2xσ _d , σ _h , C ₂ , C ₄ ³ , S ₄ , i, S ₄ ³	Alle quadratischen Moleküle; XeF ₄
	D _{5h}	C ₅ , 5xC ₂ , 5xσ _v , σ _h , C ₅ ² , C ₅ ³ , C ₅ ⁴ , S ₅ , S ₅ ² , S ₅ ³ , S ₅ ⁴	Alle pantagonalen Moleküle: JF ₇
	D _{6h}	C ₆ , 3xC ₂ , 3xσ _v , 3xσ _d , σ _h , C ₆ ² , C ₂ , C ₆ ⁴ , C ₆ ⁵ , S ₆ , S ₆ ² , i, S ₆ ⁴ , S ₆ ⁵	Alle hexagonalen Moleküle: C ₆ H ₆
D _{∞h}	C _∞ , ∞ viele C ₂ , ∞ viele σ _v , σ _h , i,	Alle linearen Moleküle mit Inversionszentrum	
Spezielle Gruppen	T _d	4xC ₃ , 3xC ₂ , 6xσ _d , 4xC ₃ ² , 4xS ₄ , 4xS ₄ ³	Alle Moleküle mit Tetraeder- symmetrie: CH ₄
	O _h	3xC ₄ , 4xC ₃ , 6xC ₂ , 3xσ _h , 6xσ _d , i, 3xC ₂ , 3xC ₄ ³ , 3xS ₄ ³ , 4xS ₆ , 4xS ₆ ⁵	Alle Teilchen mit Oktaeder- symmetrie: SF ₆ , Fe(CN) ₆ ⁴⁻
	I _h	Ikosaedersymmetrie	B ₁₂ H ₁₂ ²⁻
	K _h	Alle Symmetrieelemente	Alle Atome

4. Übungsaufgaben

Im Folgenden sind 15 eher kurze Übungsaufgaben mit den Lösungen angeführt, die bei Olympiadebeispielen als Teile von Aufgaben eingesetzt werden können.

1. Aufgabe

In welcher Isomeriebeziehung stehen die folgenden 6 Verbindungen?



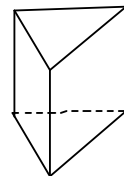
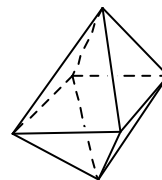
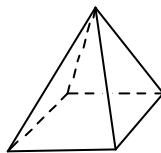
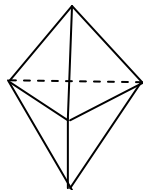
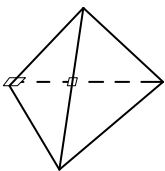
2. Aufgabe

Für einen Komplex des Typs MeX_3Y_2 (Me = Zentralatom, X, Y = Liganden) sind verschiedene Anordnungen der Liganden denkbar.

Zeichnen Sie für einen derartigen Komplex sämtliche mögliche Diastereomere (inklusive eventueller optischer Isomere).

Geben Sie weiters an, welche der von Ihnen skizzierten Anordnungen Sie für die stabilste Variante halten (unter der Annahme, dass X ein kleiner und Y ein voluminöser Ligand ist)

Als Hilfestellung (sozusagen als Kopiervorlage) werden Ihnen verschiedene Koordinationspolyeder zur Auswahl angeboten:



3. Aufgabe

Man betrachtet das Molekül SF_4 .

a) Zeichnen Sie eine Struktur des Moleküls in der Valenzstrichformel.

b) Welchem Strukturtyp nach VSEPR gehört es an?

Im ^{19}F -NMR sieht man zwei triplettische Fluorsignale.

c) Skizzieren Sie die tatsächliche räumliche Struktur des SF_4 . Begründen Sie Ihre Annahme kurz.

d) Welcher Punktgruppe gehört SF_4 an?

e) Besitzt Schwefeltetrafluorid ein permanentes Dipolmoment?

4. Aufgabe

Zeichnen Sie in räumlicher Darstellung die Struktur des Borchlorids B_4Cl_4 und geben Sie dazu seine Punktgruppe an.

5. Aufgabe

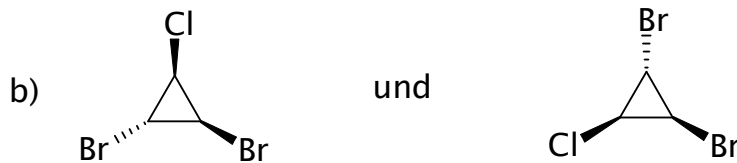
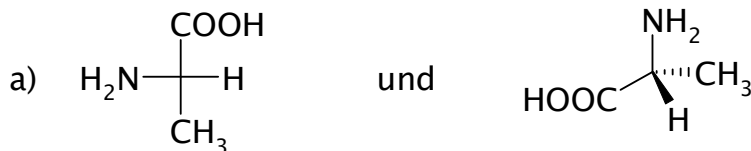
Wieviele Konfigurationsisomere gibt es jeweils zu der mit den folgenden Namen ausgedrückten Konstitution?

Geben Sie im Fall von zwei Isomeren das entsprechende Isomerieverhältnis an.

- | | | |
|--------------------|--------------------|--------------------------|
| a) Ethanol | e) Acetonoxim | i) 3-Brombutan-2-ol |
| b) Butan-2-ol | f) Pent-3-en-2-ol | j) But-2-ensäure |
| c) Glycerol | g) Pentan-2,3-diol | k) 4-Ethylhepta-2,5-dien |
| d) 2,3-Dibrombutan | h) Pentan-2,4-diol | l) Hexa-2,3,4-trien |

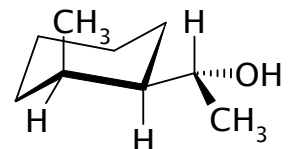
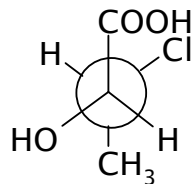
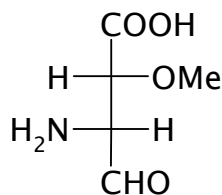
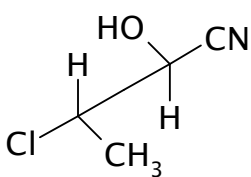
6. Aufgabe

In welchem Verhältnis stehen die folgenden Verbindungspaare zueinander?



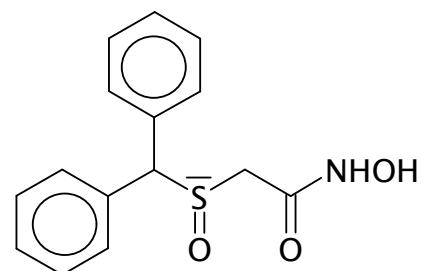
7. Aufgabe

Bestimmen Sie an allen Chiralitätszentren die absoluten Konfigurationen in folgenden Verbindungen:



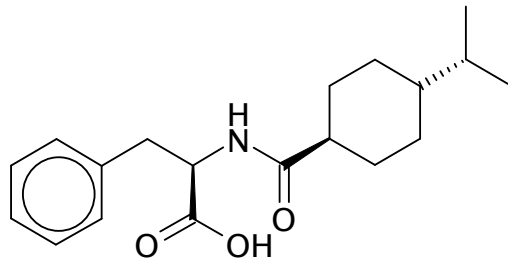
8. Aufgabe

Das Psychostimulanz Adrafinil liegt racemisch vor. Zeichnen Sie die Formeln der beiden Verbindungen.



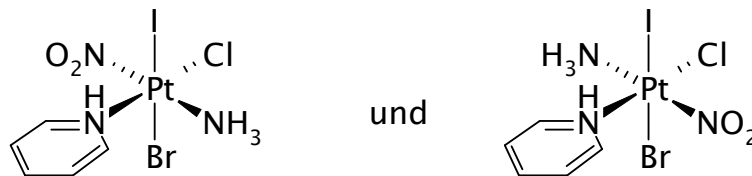
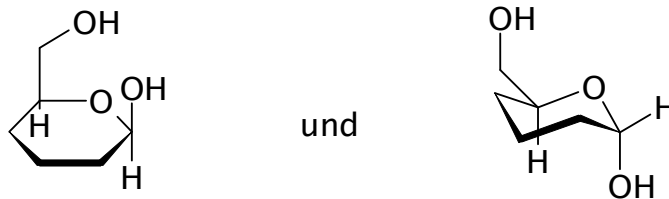
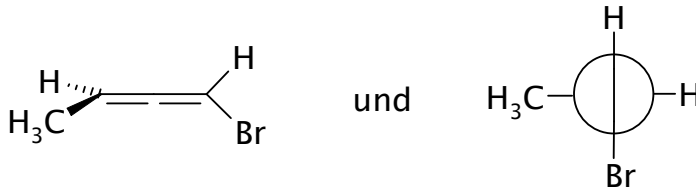
9. Aufgabe

Nateglinid ist ein oral verfügbares Antidiabetikum. Versehen Sie die Verbindung mit den richtigen Stereodeskriptoren und geben Sie an, aus welcher Aminosäure die Verbindung aufgebaut wurde.



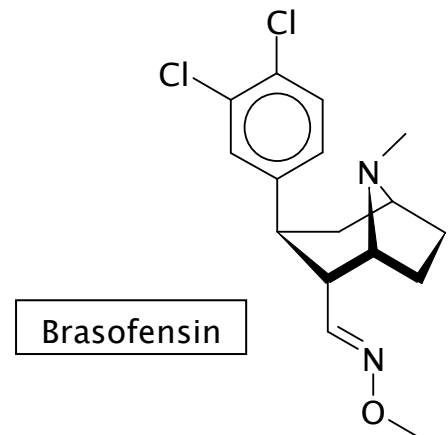
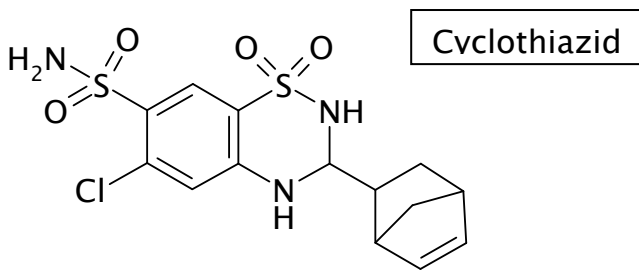
10. Aufgabe

In welchem Verhältnis stehen die jeweiligen Verbindungspaare?



11. Aufgabe

Das Diuretikum Cyclothiazid wird als Stereomengemisch eingesetzt. Wieviele Stereoisomere existieren?



12. Aufgabe

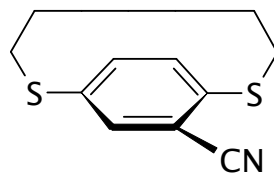
Bezeichnen Sie die Konfiguration des Dopamin-Wiederaufnahmehemmers Brasofensin mit geeigneten Stereodeskriptoren.

13. Aufgabe

Zeichnen Sie die Konfigurationsformel von (2R,3s,4S)-2,3,4-Trichlorpentandisäure in der Fischer Projektion.

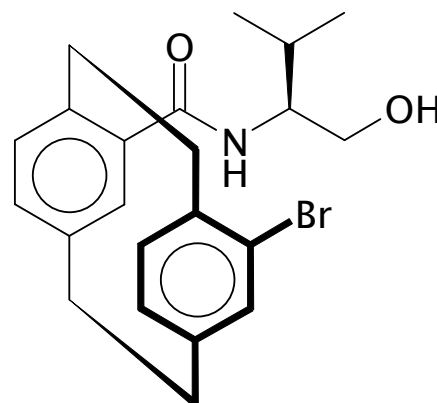
14. Aufgabe

Welche stereogene Einheit (= Ursache für Stereoisomerie) enthält nachfolgend abgebildete Verbindung und welche Konfigurationsbezeichnung gehört dazu?



15. Aufgabe

Beschreiben Sie die Konfiguration des nachfolgend abgebildeten Moleküls mit den entsprechenden Stereodeskriptoren.



5. Lösungen

1. Aufgabe

A – B: Funktionsisomerie

A – C: Funktionsisomerie

A – D: Gerüstisomerie

A – E: Diastereomerie

A – F: Diastereomerie

B – C: Stellungsisomerie

B – D: Gerüstisomerie, Funktionsisomerie

B – E: Funktionsisomerie

B – F: Funktionsisomerie

C – D: Gerüstisomere, Funktionsisomerie

C – E: Funktionsisomerie

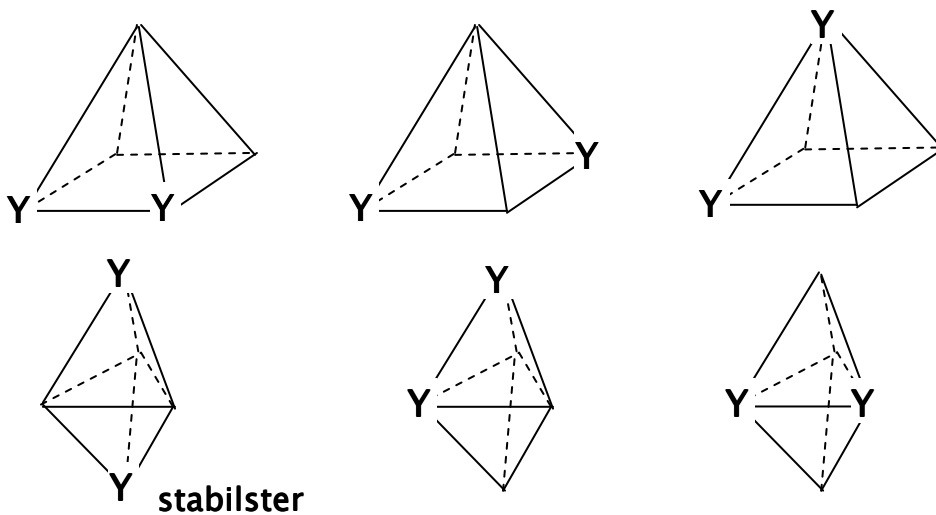
C – F: Funktionsisomerie

D – E: Gerüstisomerie

D – F: Gerüstisomerie

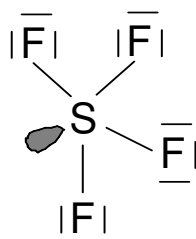
E – F: Enantiomerie

2. Aufgabe



3. Aufgabe

a)

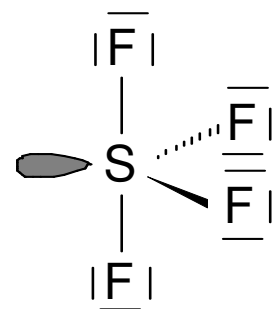


b) AX₄E

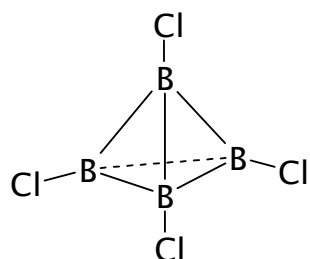
c) Die triplettischen F-Signale bedeuten, dass es zwei verschiedene Typen F-Atome gibt, die jeweils zwei andere Fluoratome als Nachbarn haben, daher kann SF₄ nur eine trigonale Bipyramide mit dem nicht bindenden Paar in der trigonalen Ebene sein.

d) C_{2v}

e) Ja



4. Aufgabe



T_d

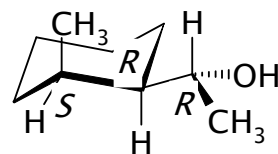
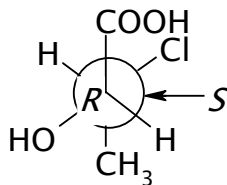
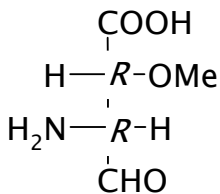
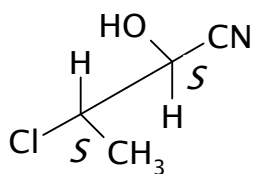
5. Aufgabe

- a) Ethanol: keine
- b) Butan-2-ol: 2 Enantiomere
- c) Glycerol: keine
- d) 2,3-Dibrombutan: 3
- e) Acetonoxim: keine
- f) Pent-3-en-2-ol: 4
- g) Pentan-2,3-diol: 4
- h) Pentan-2,4-diol: 3
- i) 3-Brombutan-2-ol: 4
- j) But-2-ensäure: 2 Diastereomere
- k) 4-Ethylhepta-2,5-dien: 4
- l) Hexa-2,3,4-trien: 2 Diastereomere

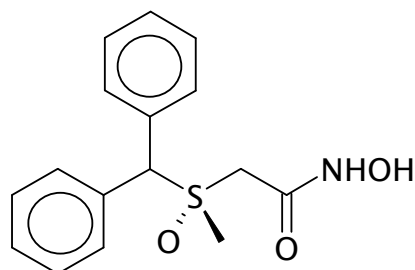
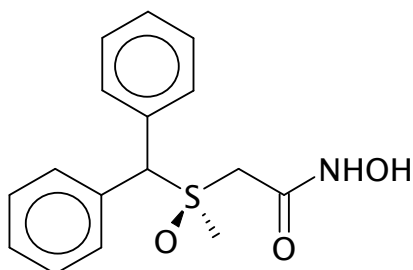
6. Aufgabe

- a) enantiomer
- b) enantiomer

7. Aufgabe

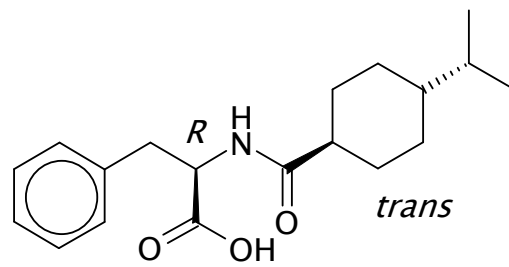


8. Aufgabe



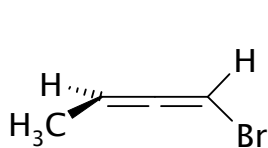
9. Aufgabe

Aus (D)-Phenylalanin

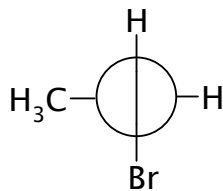


10. Aufgabe

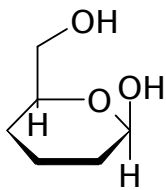
In welchem Verhältnis stehen die jeweiligen Verbindungspaare?



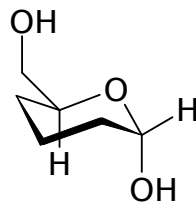
und



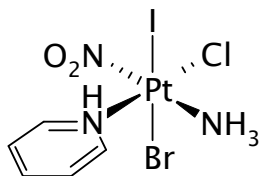
sind identisch



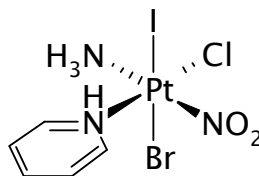
und



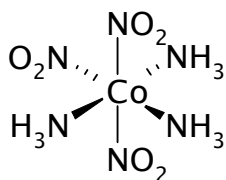
sind Diastereomere (Anomere)



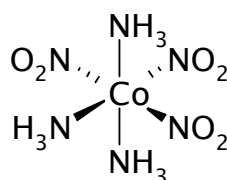
und



sind Enantiomere



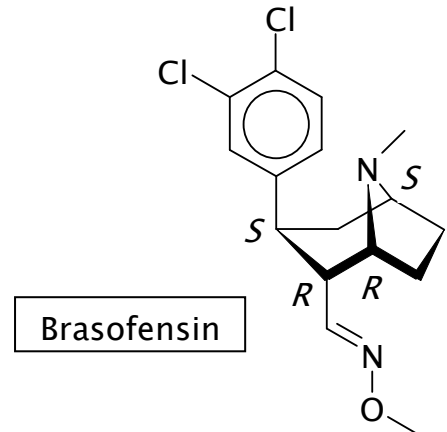
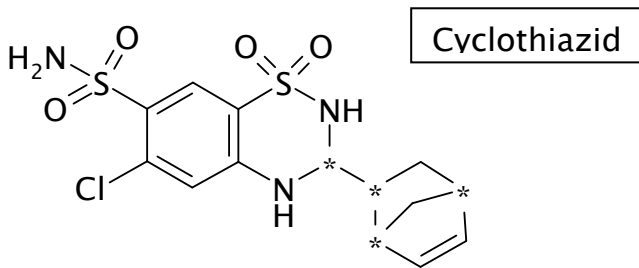
und



sind identisch

11. Aufgabe

Es gibt 4 Chiralitätszentren, die beiden Brückenkopf-C können aber nicht unabhängig voneinander die Konfiguration ändern, zählen daher nur einmal, daher gibt es $2^3 = 8$ Diastereomere.

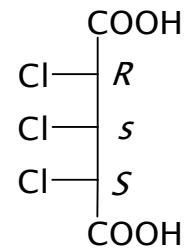


12. Aufgabe

Bezeichnen Sie die Konfiguration des Dopamin-Wiederaufnahmehemmers Brasofensin mit geeigneten Stereodeskriptoren.

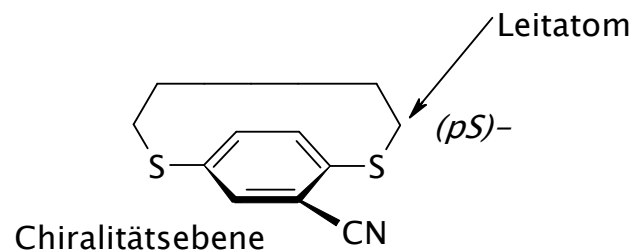
13. Aufgabe

Zeichnen Sie die Konfigurationsformel von (2R,3s,4S)-2,3,4-Trichlorpentandisäure in der Fischer Projektion.



14. Aufgabe

Welche stereogene Einheit (= Ursache für Stereoisomerie) enthält nachfolgend abgebildete Verbindung und welche Konfigurationsbezeichnung gehört dazu?



15. Aufgabe

Beschreiben Sie die Konfiguration des nachfolgend abgebildeten Moleküls mit den entsprechenden Stereodeskriptoren.

