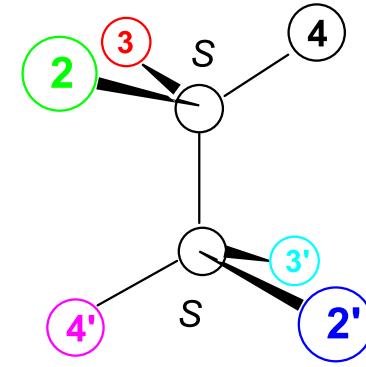
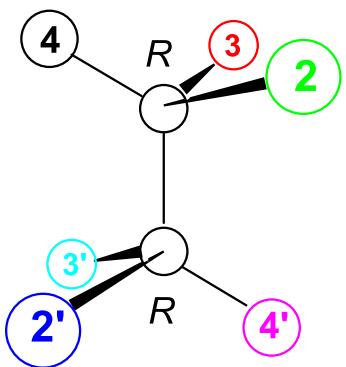
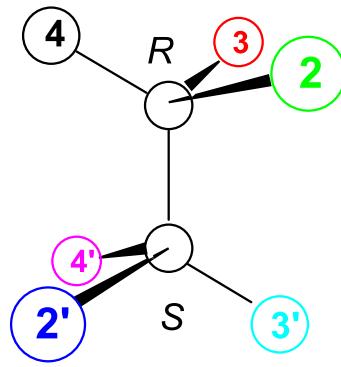


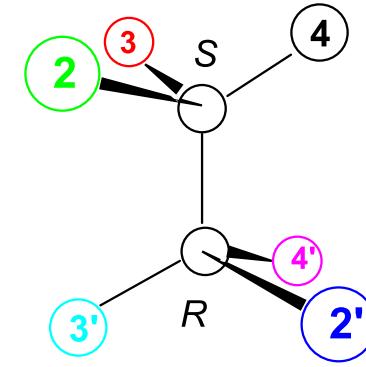
Két kiralitáscentrum különböző ligandumokkal



enantiomerek

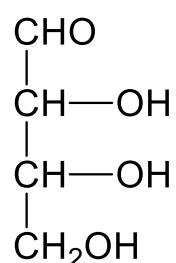


enantiomerek



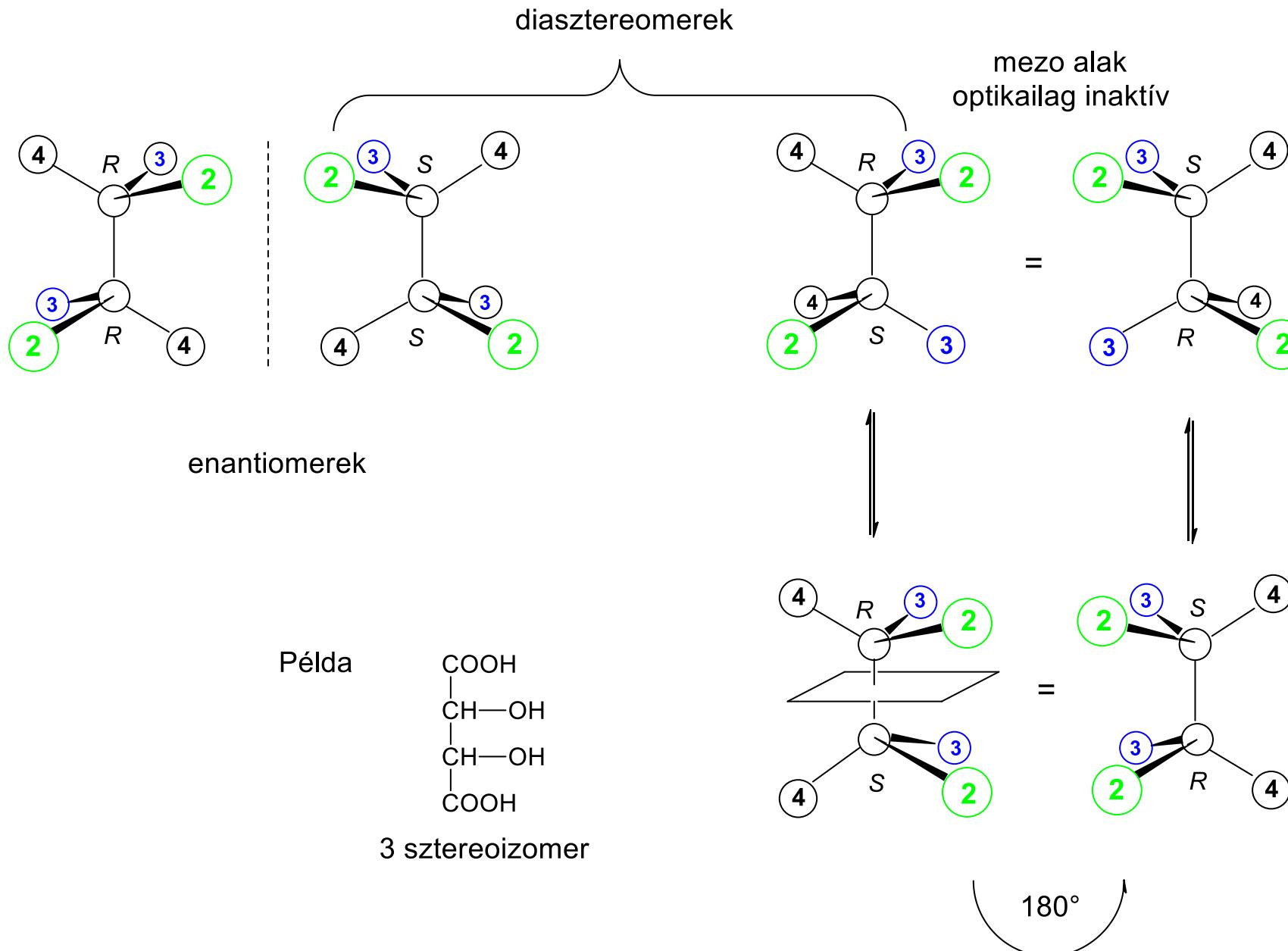
diasztereomerek

Példa (eritróz, treóz):

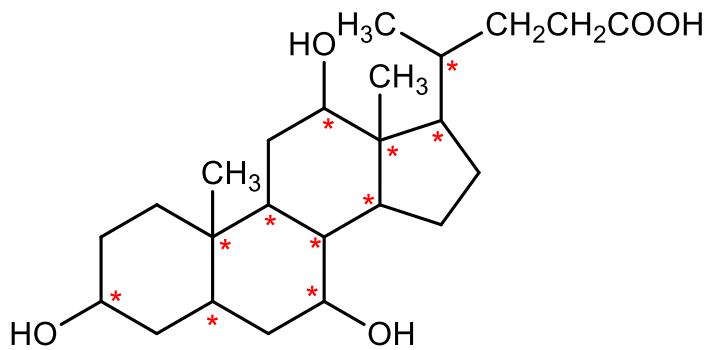


4 sztereoizomer

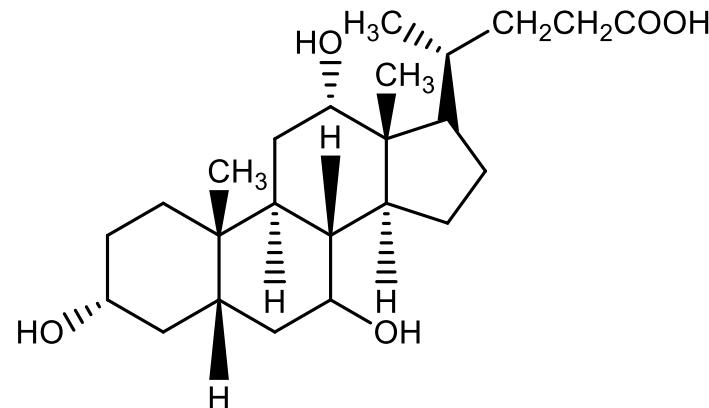
Két kiralitáscentrum, azonos ligandumokkal



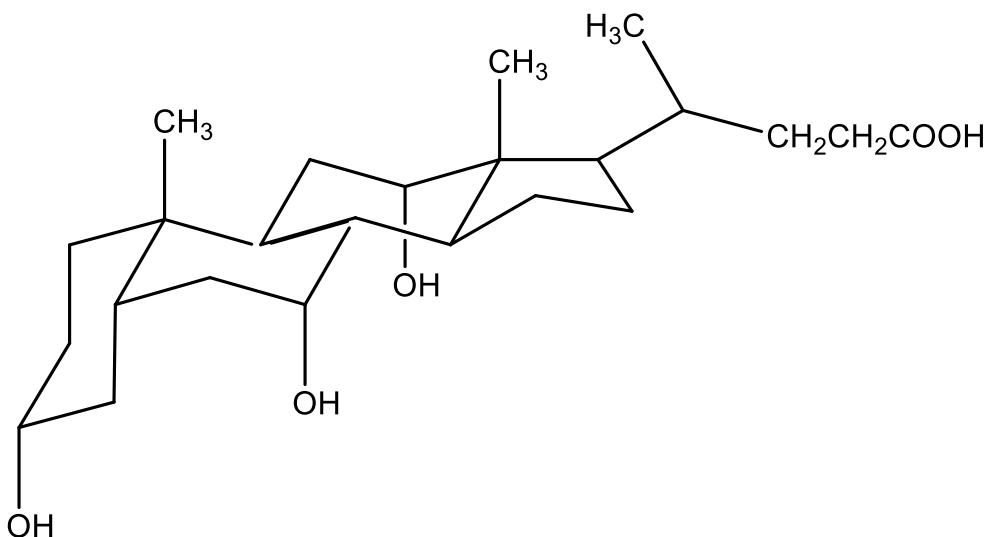
n kiralitáscentrum \longrightarrow 2^n sztereoizomer



11 királis szénatom
(2048 sztereoizomer)

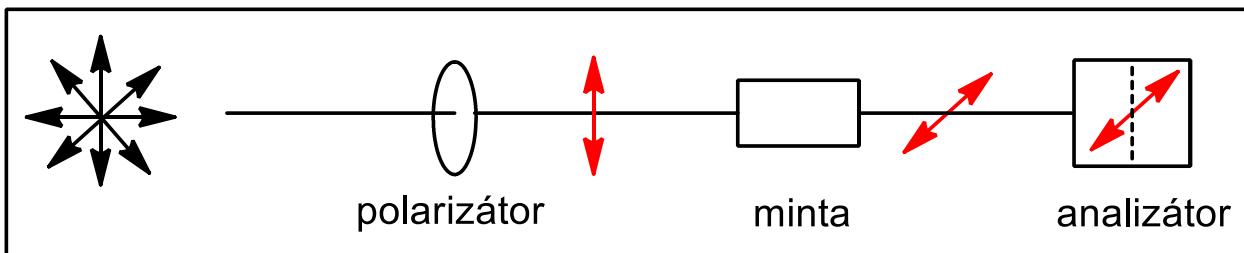


kólsav



A forgatóképesség mérése

polariméter



Fajlagos forgatóképesség

$$\alpha_{\text{mért}} \times 100 = [\alpha] \times c \times l \quad [\alpha] = \frac{\alpha_{\text{mért}}}{l c} \times 100$$

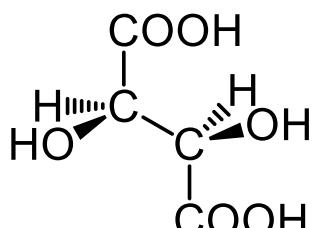
$[\alpha]$: fajlagos forgatóképesség

l : 1 dm

c : koncentráció (g/100 ml)

$$\left[\frac{\text{fok} \times \text{ml}}{\text{g} \times \text{dm}} \right]$$

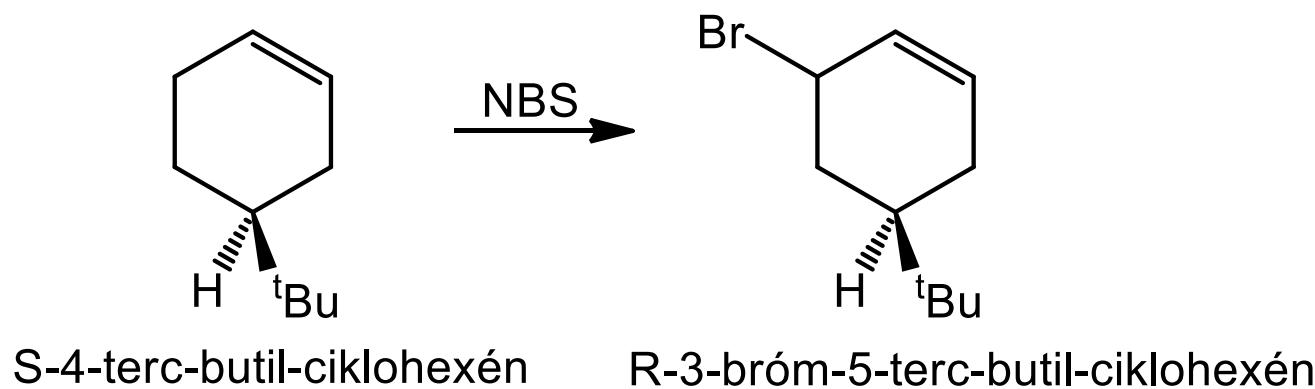
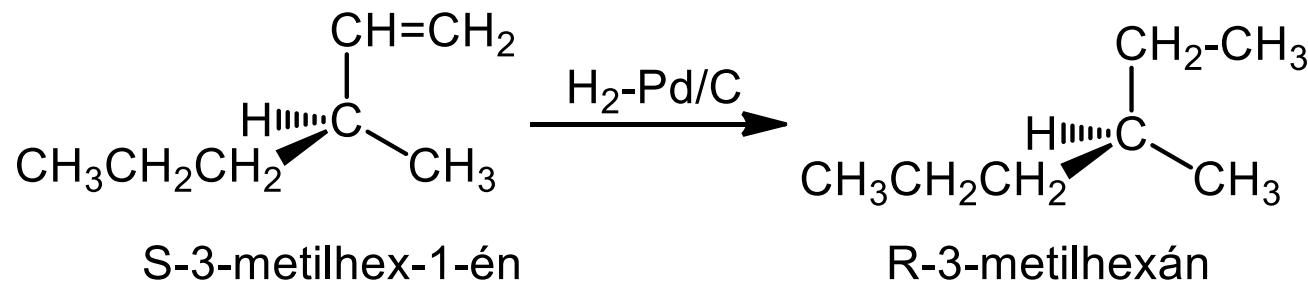
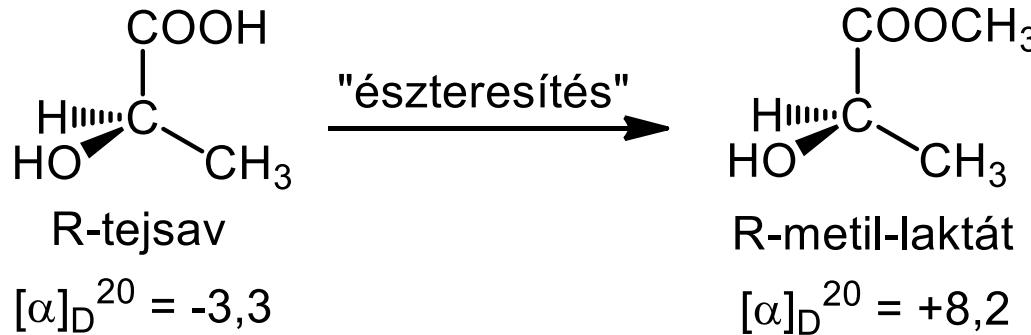
példa



R,R-borkösav

$$[\alpha]_D^{20} = +12 \quad (c = 2, \text{H}_2\text{O})$$

Forgatóképesség és abszolút konfiguráció



Enantiomerfelesleg (enantiomeric excess, ee)

$$ee = \frac{[R] - [S]}{[R] + [S]} \times 100 = \%R - \%S$$

Enantiomerfelesleg meghatározása

kromatográfiás módszerek (királis állófázis)

NMR-spektroszkópia (királis shift-reagensek)

Példa

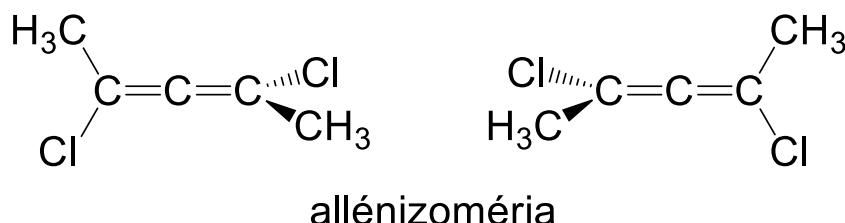
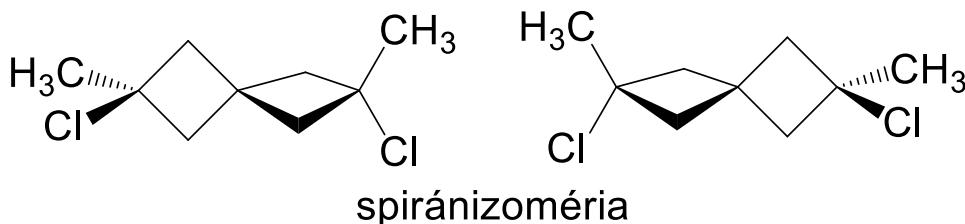
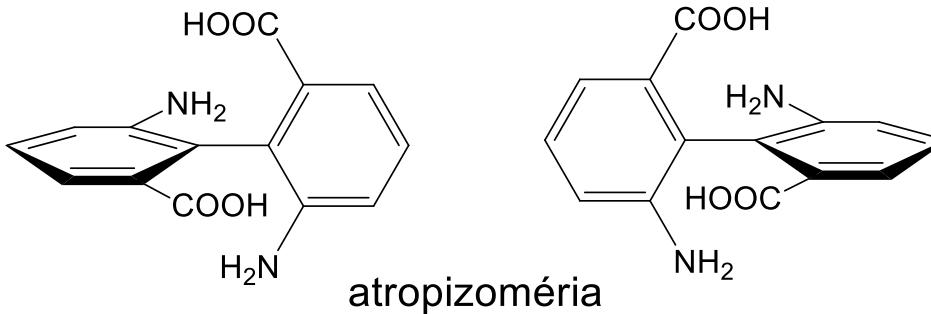
ha R = 70%, S = 30%, akkor ee = 40%, vagyis

az elegendő 40% R enantiomert és 60% racemátot tartalmaz

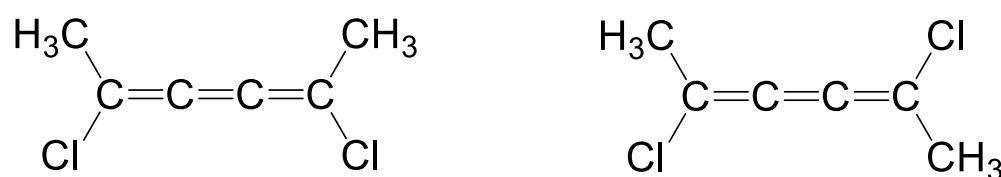
Optikai tisztaság (OT)

$$OT\% = \frac{[\alpha]_{\text{mért}}}{[\alpha]_{\text{max}}} \times 100$$

Optikailag aktív vegyületek kiralitáscentrum nélkül

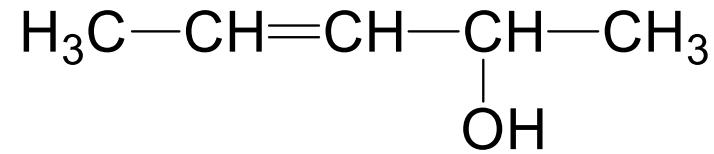


DE! páratlan számú kumulált kötés → cisz-transz izoméria

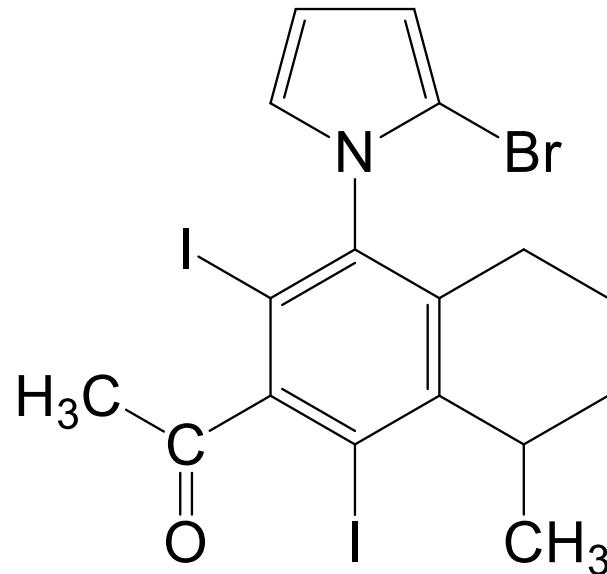


Molekulák különböző aszimmetriaelemekkel

a) cisz-transz izoméria és kiralitáscentrum

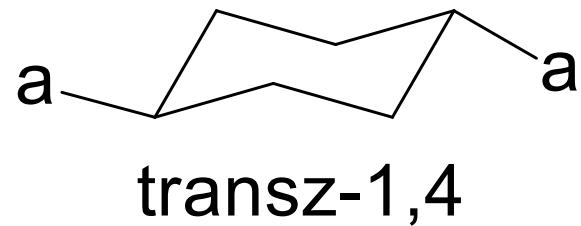
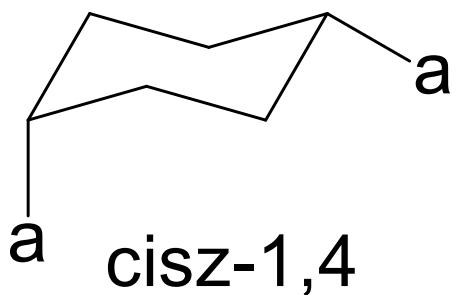
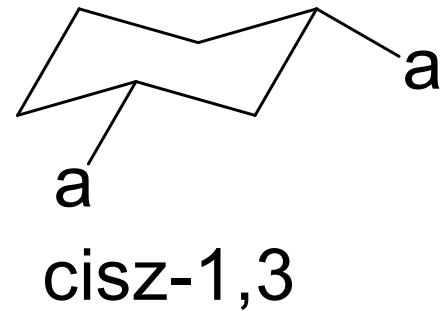
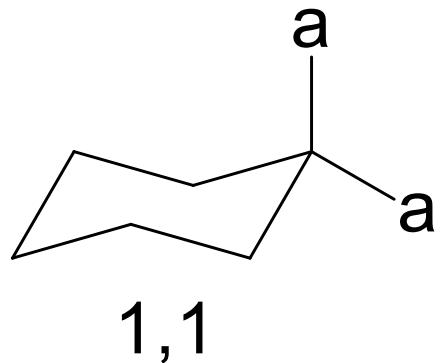


b) gátolt rotáció és kiralitáscentrum



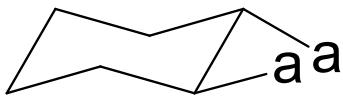
1,2-diszubsztituált ciklohexánok sztereoizomériája

akirális származékok (van belső tükörsík)

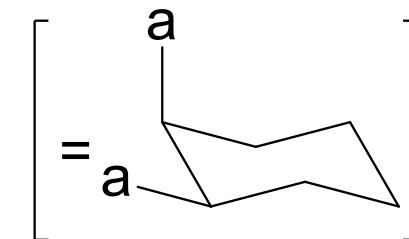
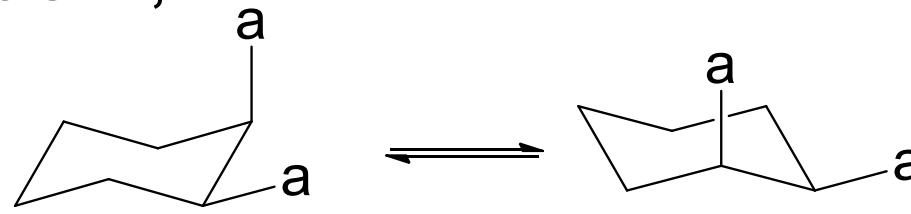


királis származékok (nincs belső tükörsík)

transz-1,2

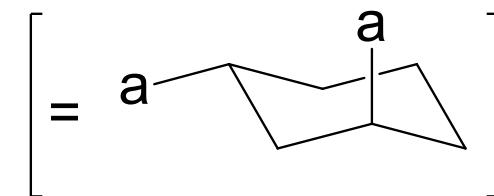
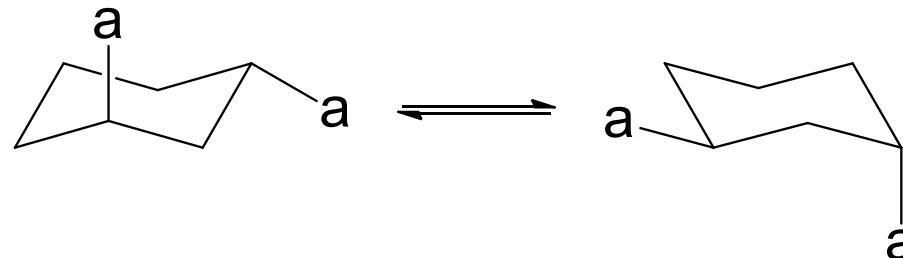


cisz-1,2



konformerek és enantiomerek is

transz-1,3

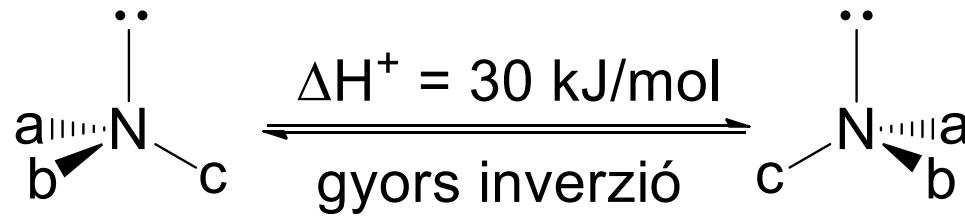


konformerek és enantiomerek is

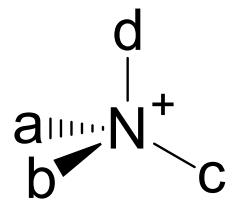
királis molekulák, de az egyensúly miatt optikailag inaktívak

Szénatomtól különböző kiralitáscentrumok

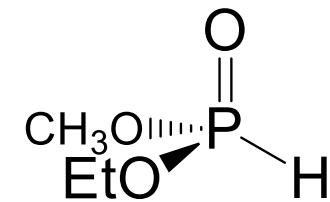
aminok (nem rezolválhatók)



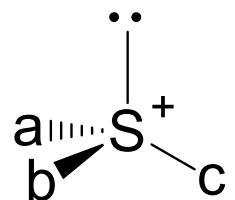
rezolválható molekulák



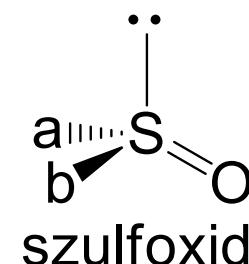
ammónium kation



foszfonsav észter

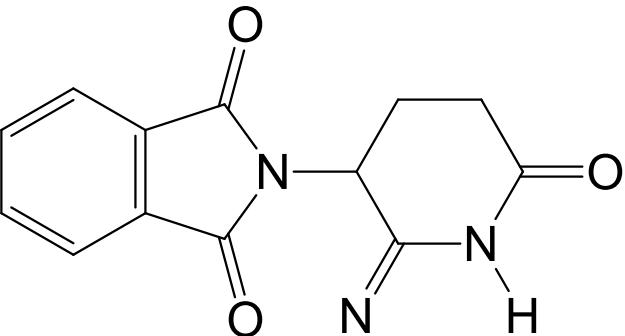


szulfónium kation



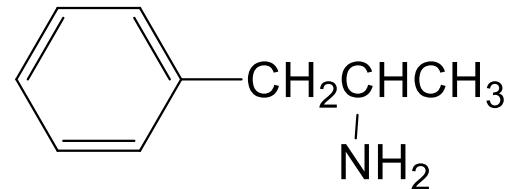
szulfoxid

Az enantiomerek eltérő biológiai hatása



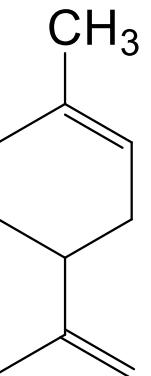
Contergan

- gyógyszer
- magzatkárosító



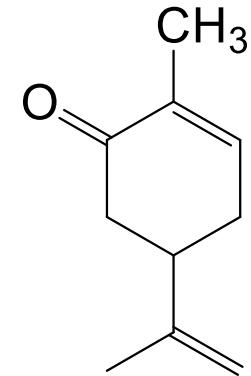
Amfetamin

- stimuláló hatás
- ártalmatlan mellékhatás



Limonén

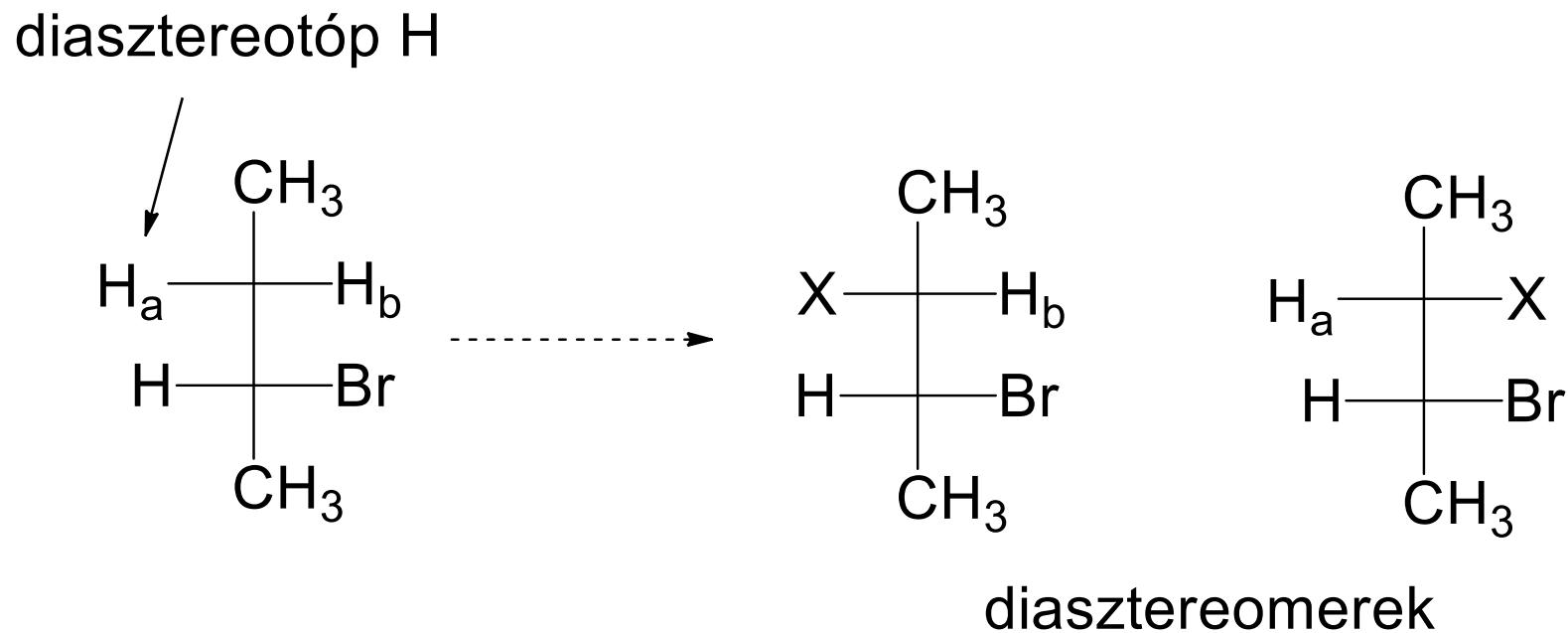
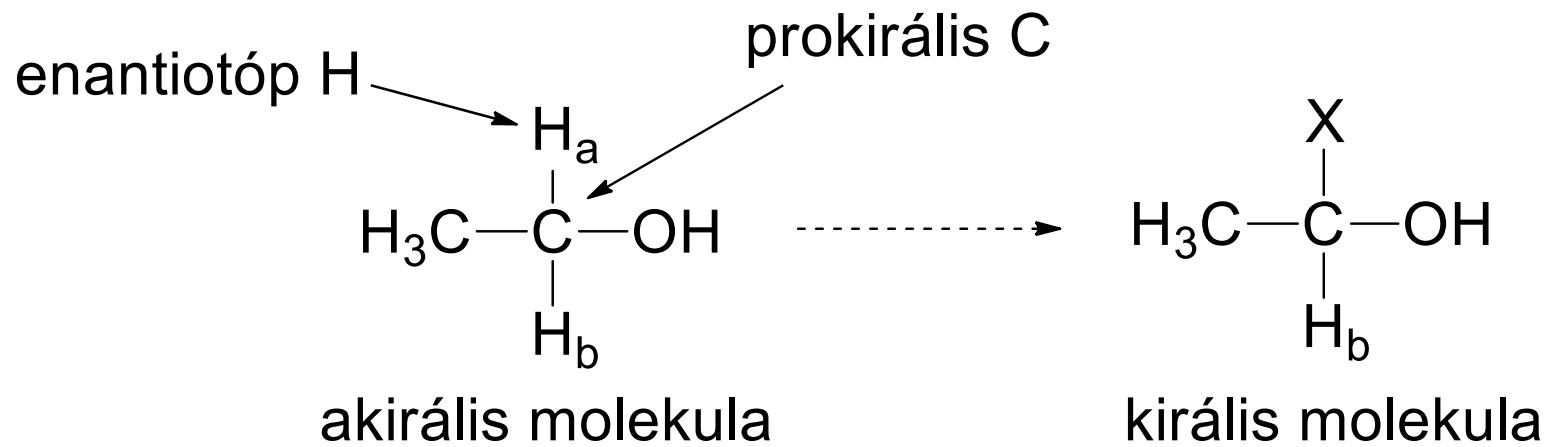
- citrom illat
- narancs illat



Carvone

- fodormenta illat
- kömény illat

Enantiotóp, diasztereotóp hidrogének, prokiralitás

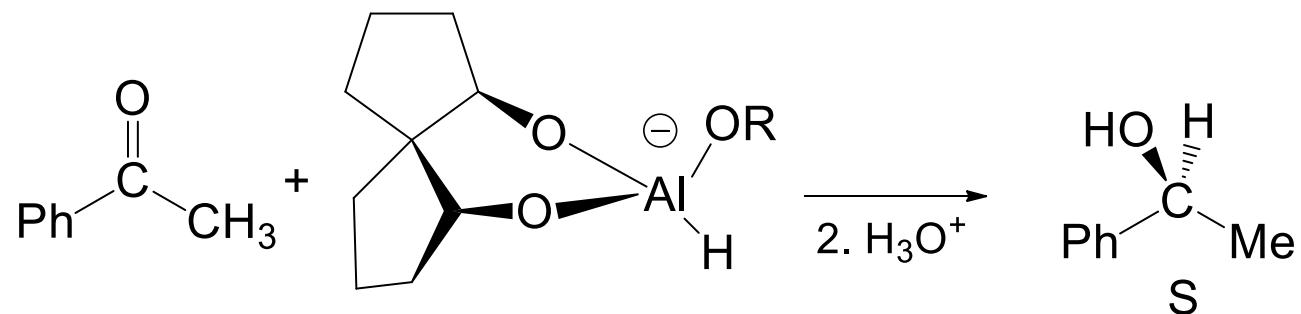


Enantiomerek előállítása

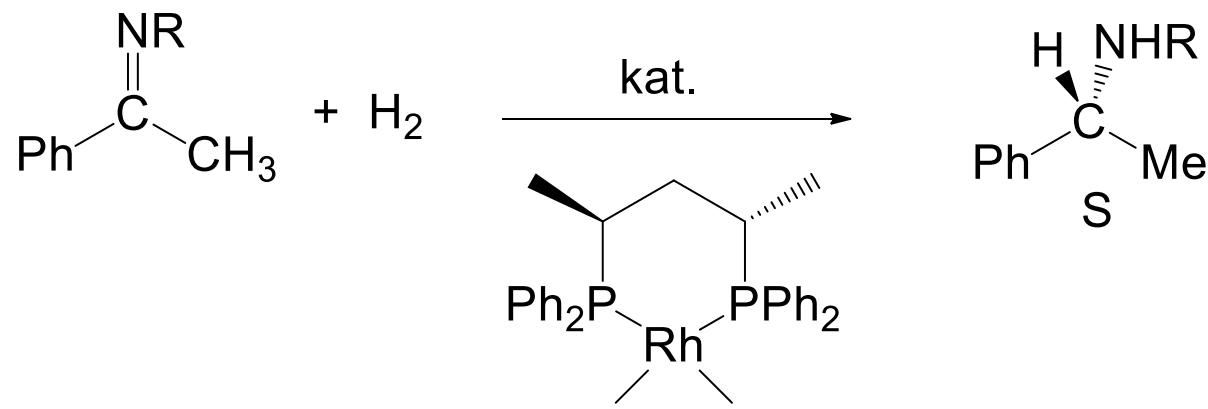
1) Királis molekula izolálása, ill. továbbalakítása
Pl. morfin, ill. morfinszármazékok

2) Szttereoszelektív szintézisek

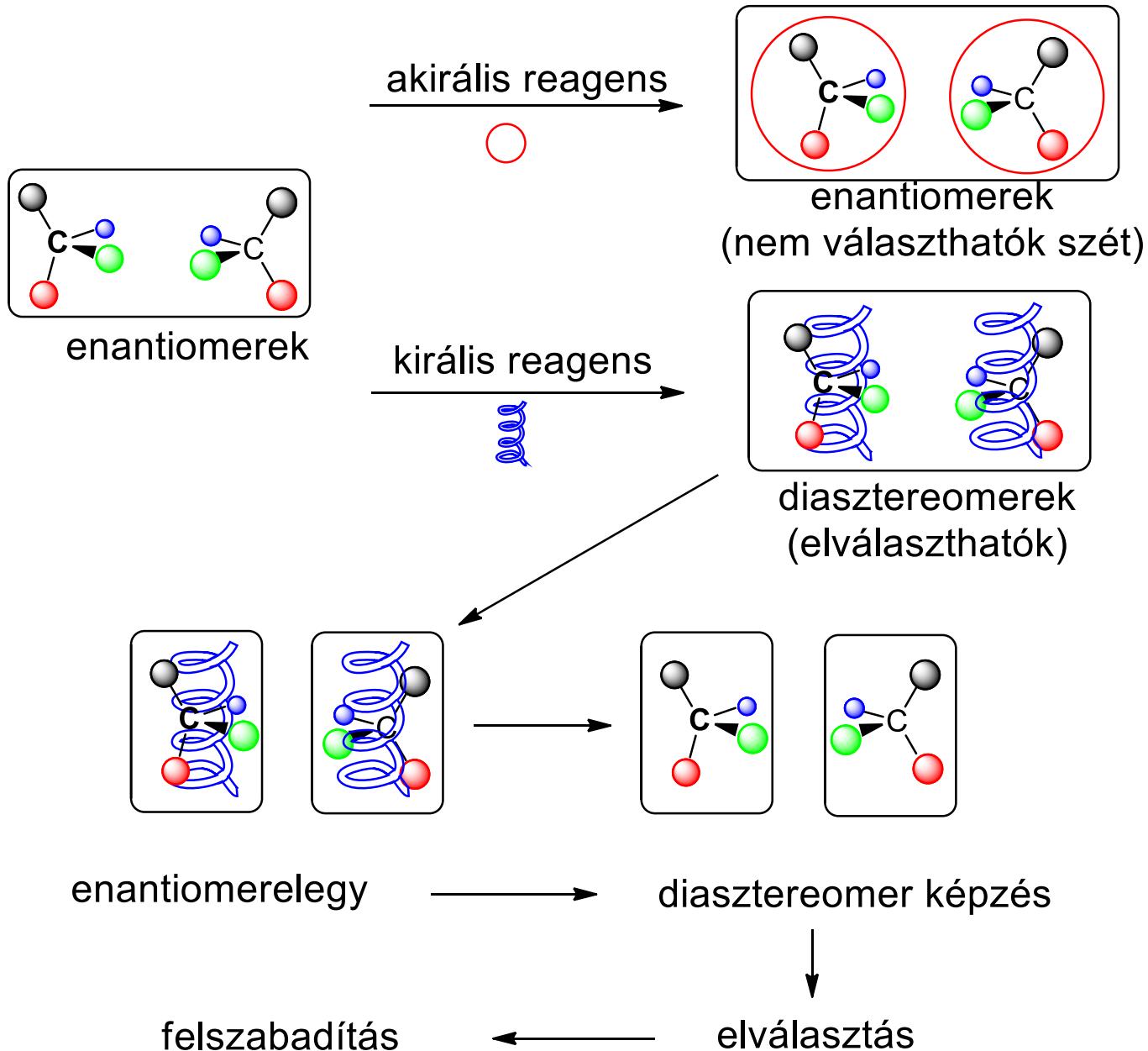
a) Királis reagens használata



b) Királis katalizátor használata

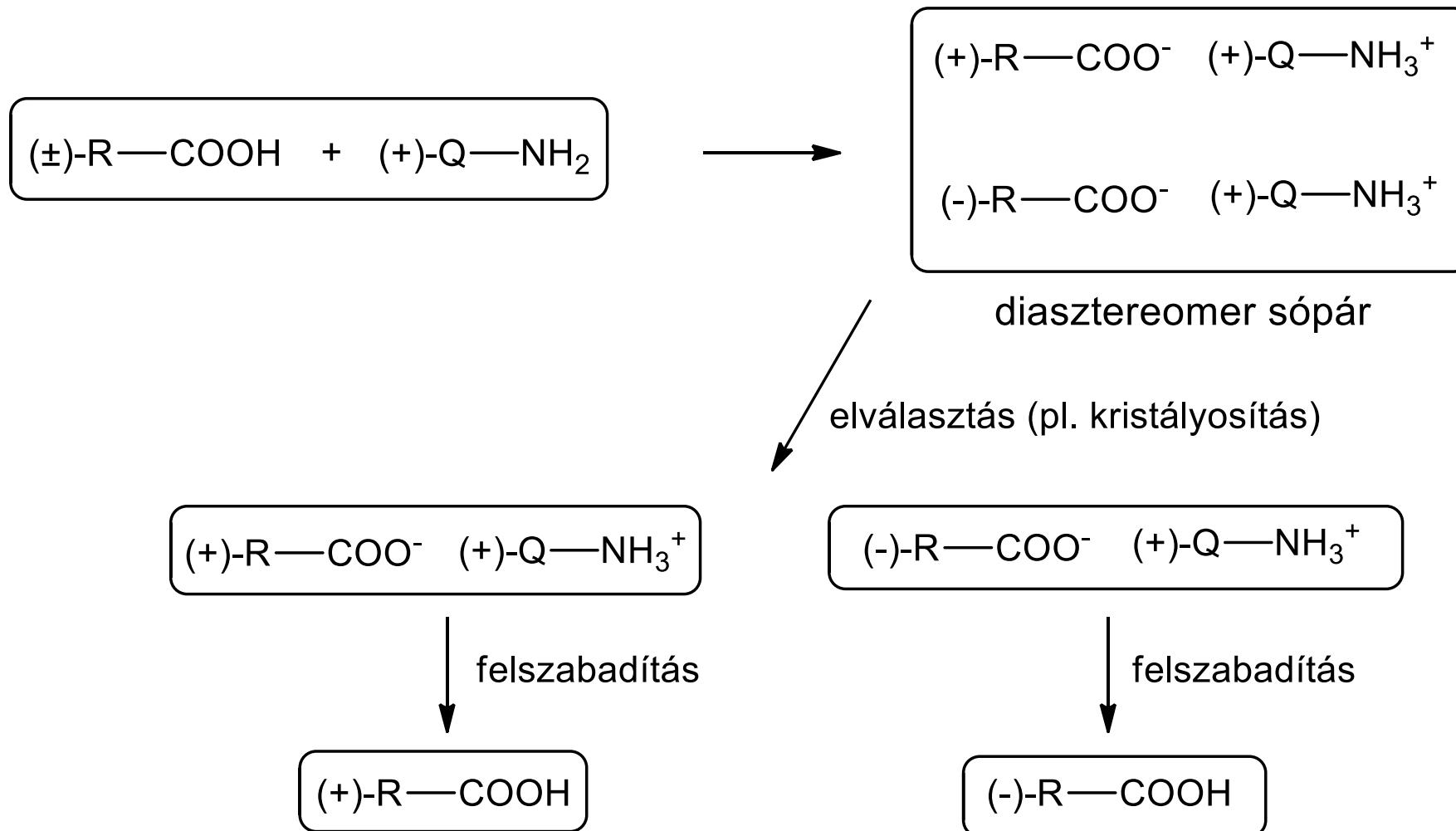


3) Racém vegyület rezolválása

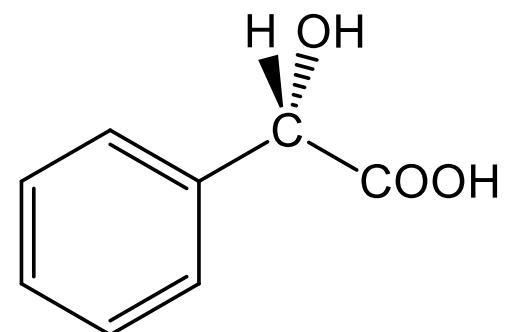
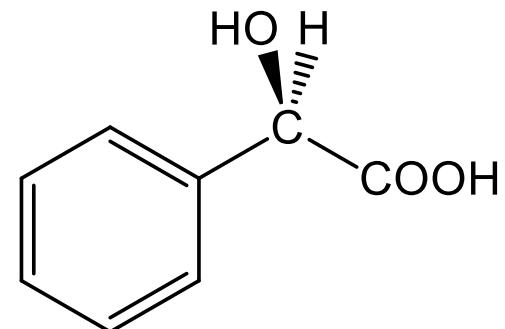
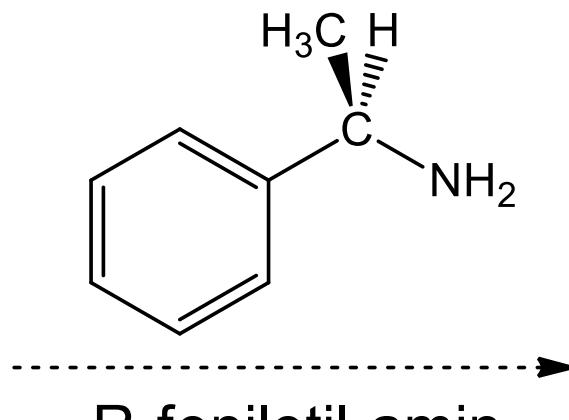
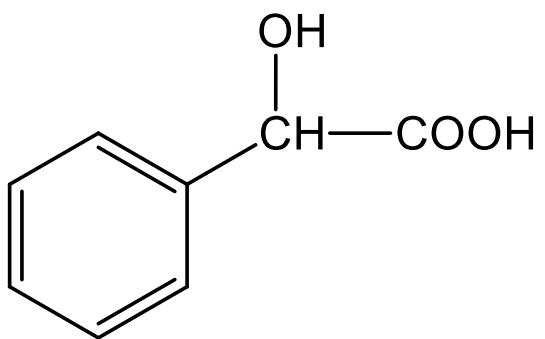


Diasztereomer képzés sav-bázis reakcióval

a) ekvivalens rezolválószer alkalmazása



Példa



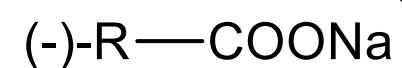
b) félekvivalens rezolválószer alkalmazása



vizes oldat
↓

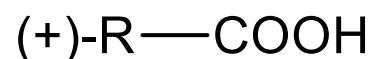


oldhatatlan

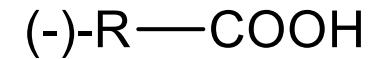


oldatban

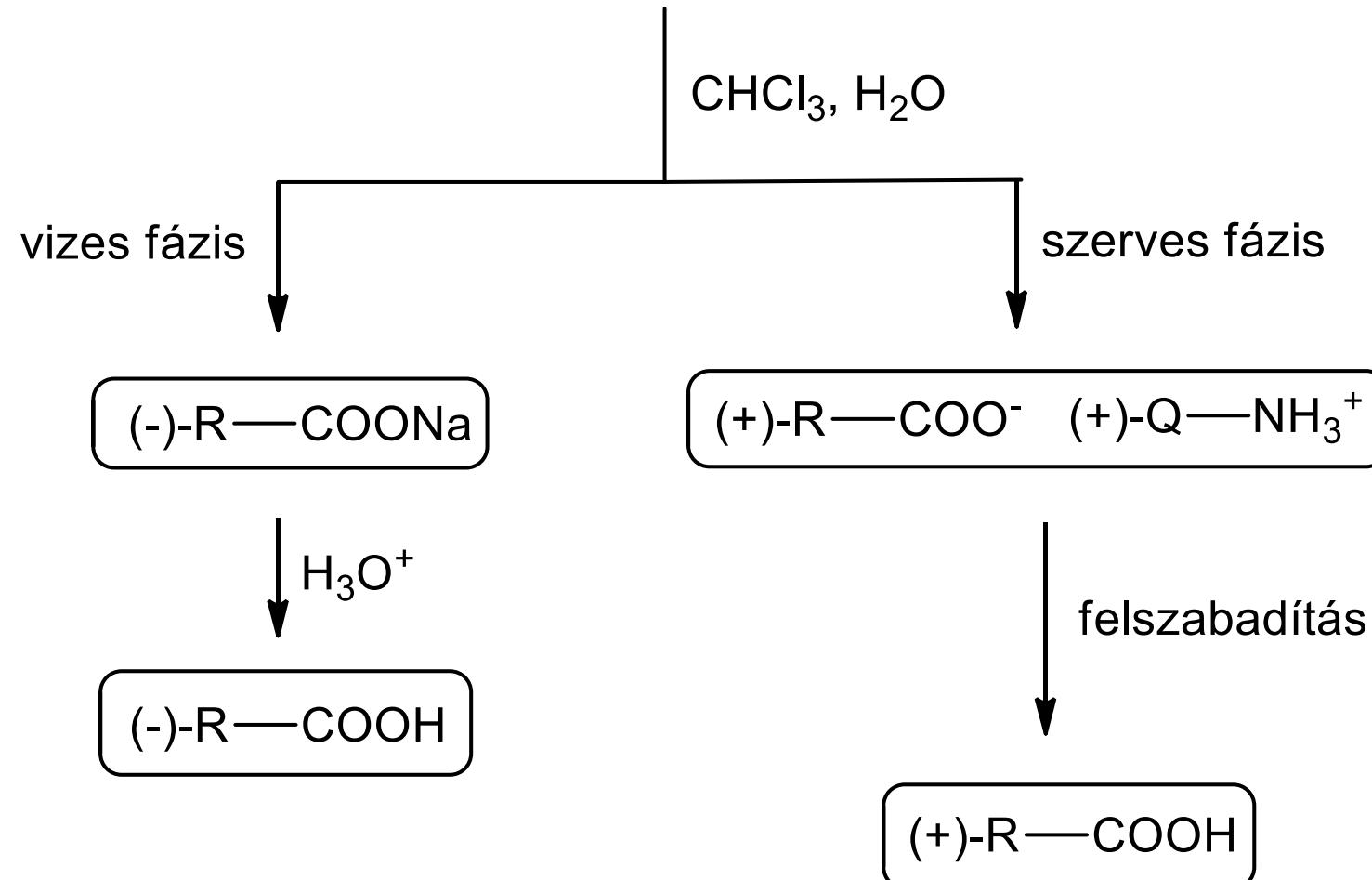
↓



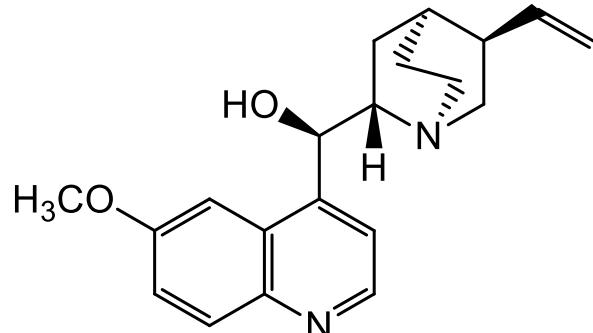
H_3O^+
↓



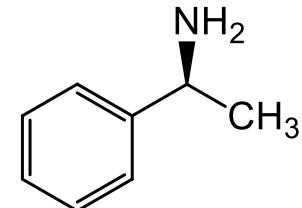
Rezolválás extrakcióval



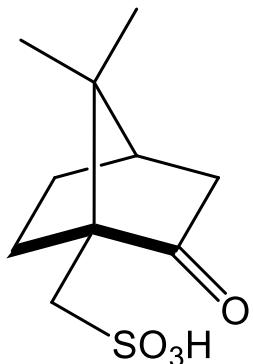
Gyakran használt rezolváló bázisok és savak



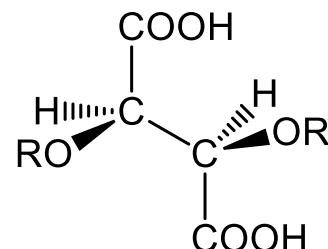
kinin



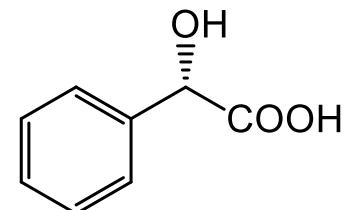
(S)-(-)-fenil-ethyl-amin



(S)-(+)-kámfor-10-szulfonsav

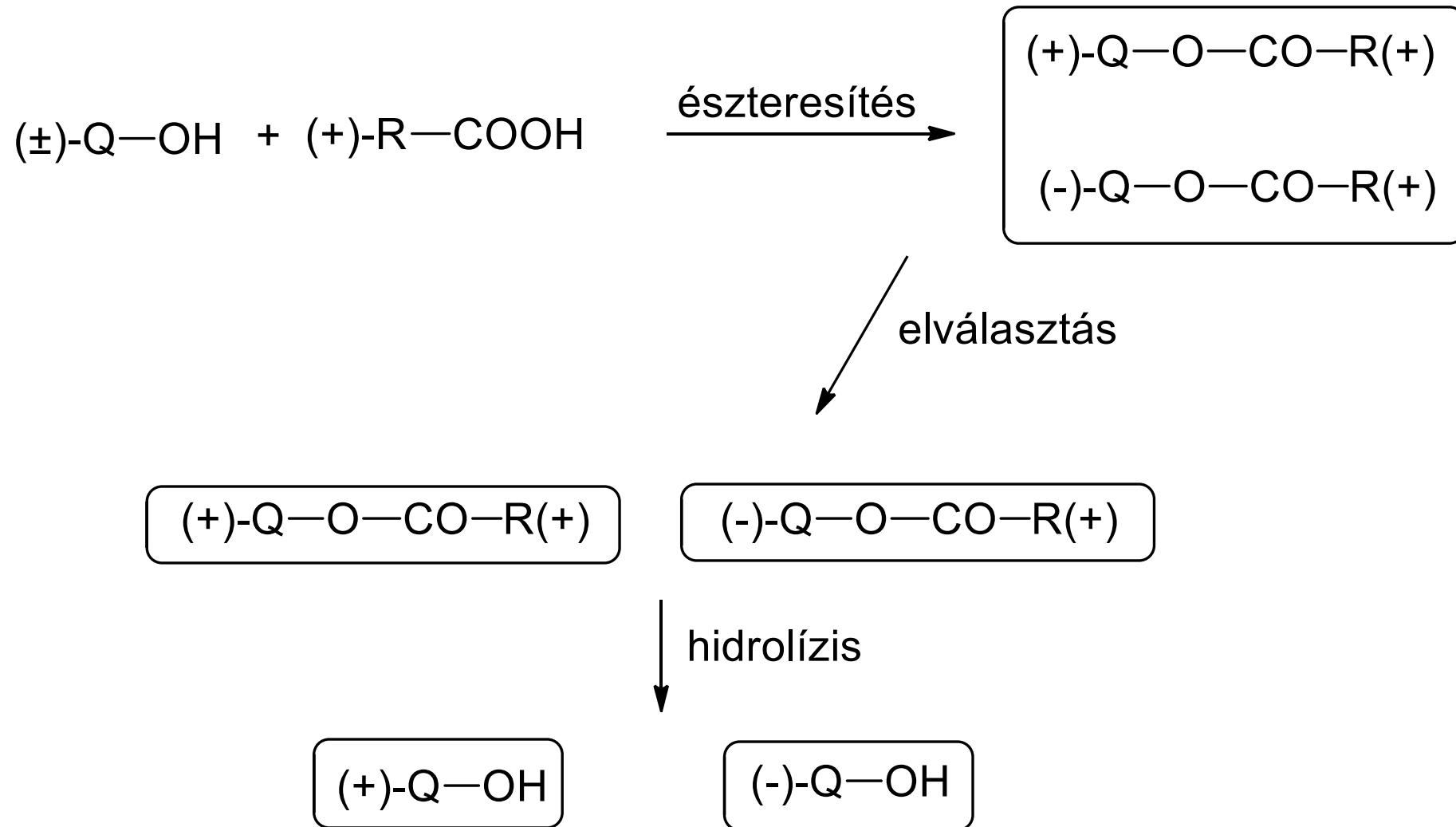


(R,R)-borkösav származékok
pl. R = H, benzoil, acetil

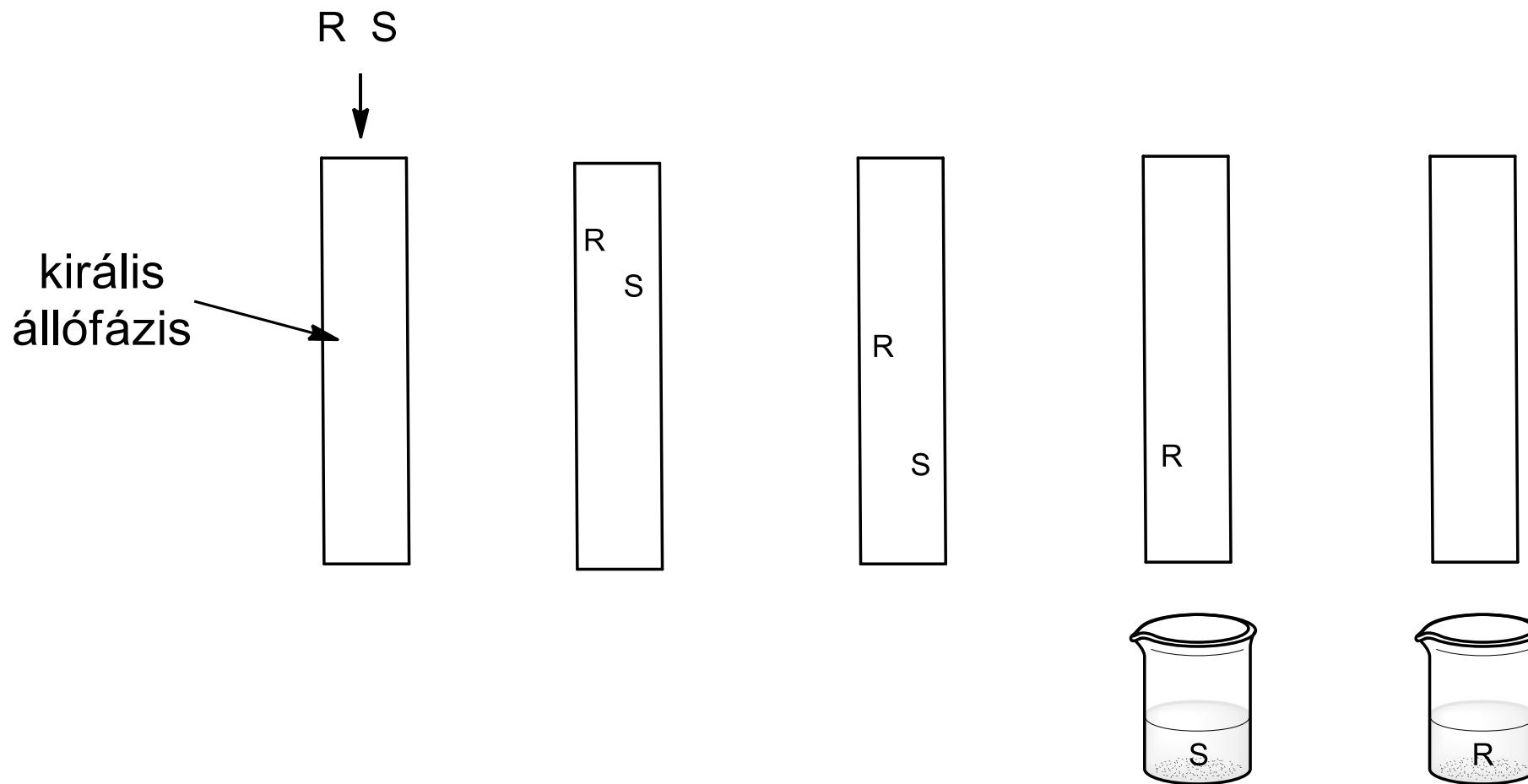


(S)-(+)-mandulasav

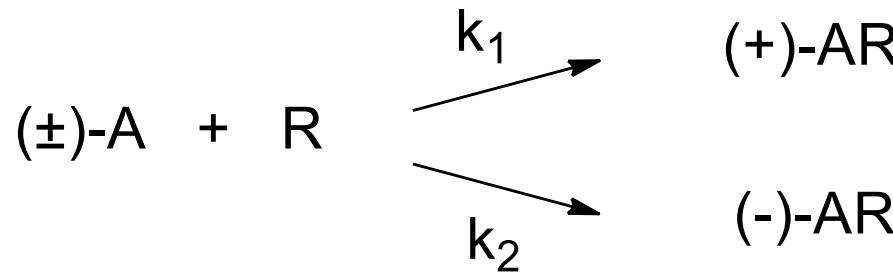
Rezolválás kovalens származékképzéssel



Kromatográfiás rezolválás

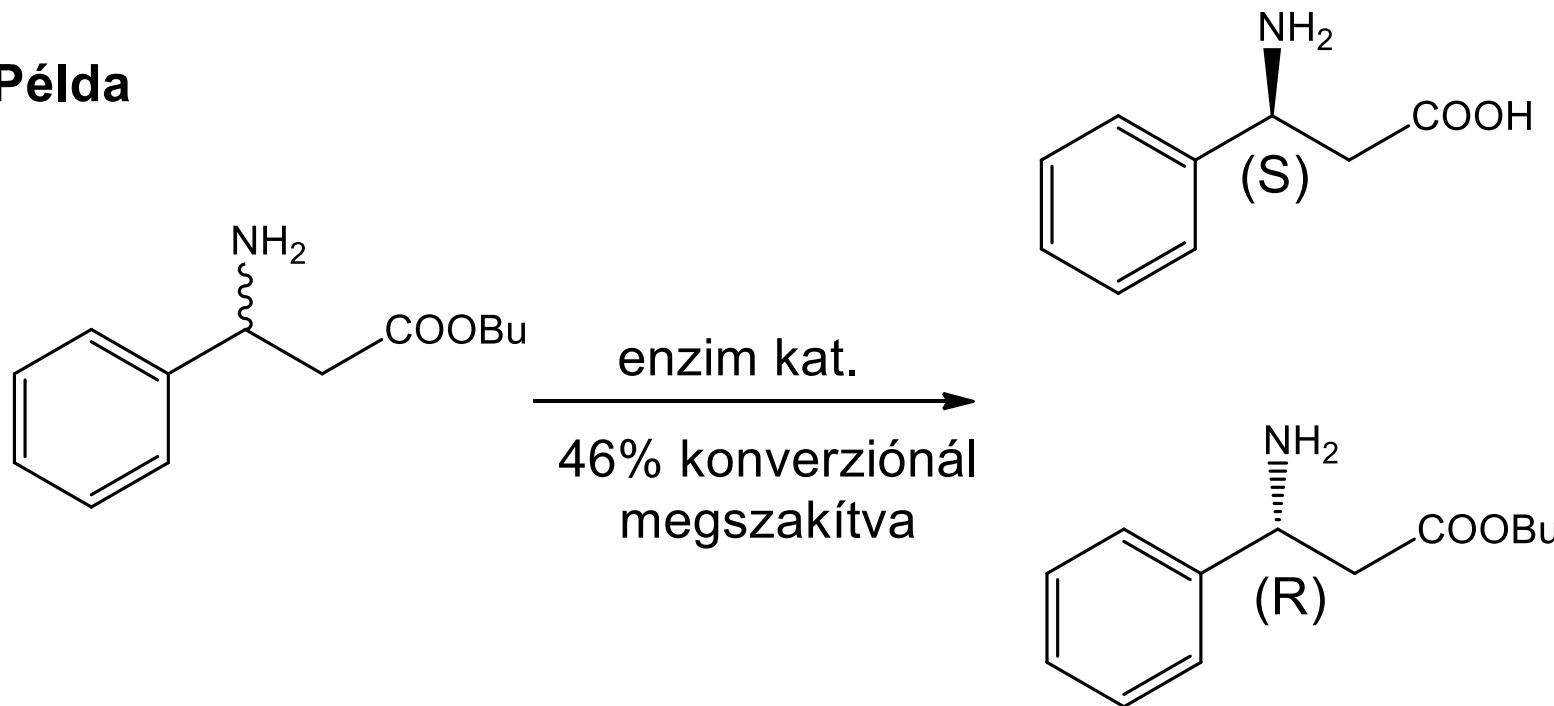


Kinetikus rezolválás



ha $k_1 > k_2$, akkor megfelelő időben megszakítva $[(+)\text{-AR}] > [(-)\text{-AR}]$

Példa



Dinamikus kinetikus rezolválás

