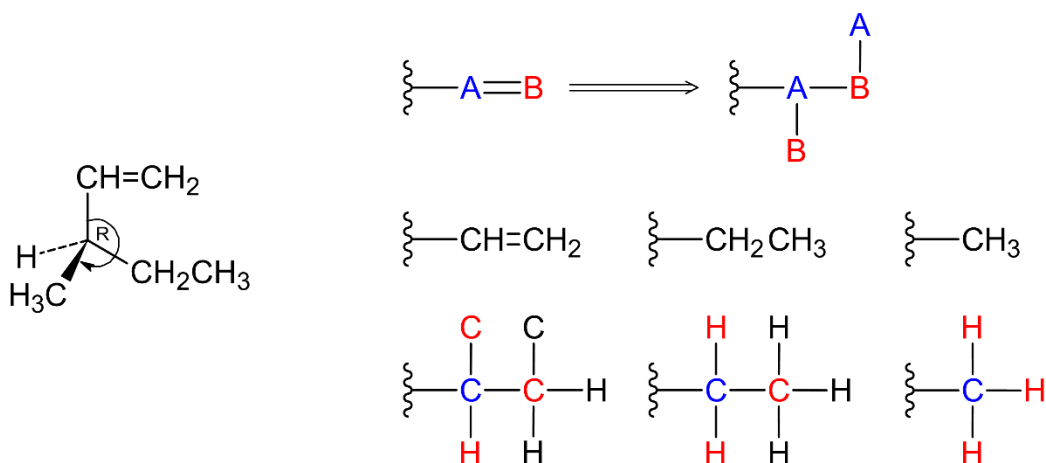


Reguły Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) i System R/S

Reguły Cahna-Ingolda-Preloga (CIP) to zbiór zasad służących do określania konfiguracji absolutnej centrów stereogenicznych w cząsteczkach organicznych. Zasady te są stosowane w systemie R/S, który pozwala jednoznacznie opisać konfigurację przestrzenną asymetrycznych atomów węgla (lub innych centrów stereogenicznych).

1. Krok 1: Priorytety podstawników według reguł CIP

- Każdemu podstawnikowi przy centrum stereogenicznym przypisuje się priorytet według poniższych zasad:
 - liczba atomowa - im wyższa liczba atomowa pierwiastka bezpośrednio związanego z centrum stereogenicznym, tym wyższy priorytet.
 - przykład: Cl (Z=17) > O (Z=8) > N (Z=7) > C (Z=6) > H (Z=1).
 - jeśli dwa podstawki mają taki sam atom na pierwszym miejscu, porównuje się atomy dalej w łańcuchu, aż do znalezienia różnicy (zawsze bierzemy najwyższy z możliwych podstawników - o największej liczbie Z).
 - przykład: CH₂OH vs CH₃ - pierwszy atom (C) jest ten sam, więc patrzymy na następny: O (w CH₂OH) vs H (w CH₃). O ma wyższą liczbę atomową, więc CH₂OH ma wyższy priorytet niż CH₃.
 - wiązania wielokrotne - traktuje się jak powtórzone pojedyncze wiązania do tego samego atomu.
 - przykład: (3R)-3-metylopent-1-en

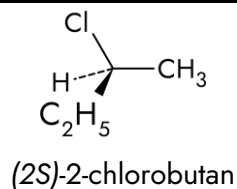
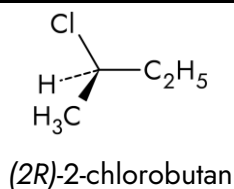


2. Krok 2: Ustalenie konfiguracji R/S

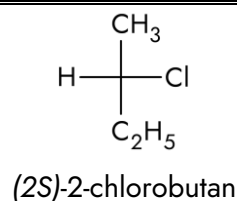
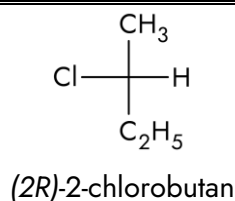
Po przypisaniu priorytetów wykonujemy następujące kroki:

- ustawienie czwartego podstawnika (najniższego priorytetu) do tyłu - czyli tak, aby znajdował się za płaszczyzną ekranu (najczęściej w pozycji przerywanej linii w projekcji klinowej).
- obserwacja ruchu od priorytetu 1 do 2 do 3:
- jeśli ruch odbywa się zgodnie z ruchem wskazówek zegara → konfiguracja R (łac. rectus - prawy).
- jeśli ruch odbywa się przeciwnie do ruchu wskazówek zegara → konfiguracja S (łac. sinister - lewy).
- przykład: 2-chlorobutan:
 - Przydzielamy priorytety:
 - Cl (Z=17) - 1
 - CH₂CH₃ (Z=6 dla C, do którego podłączony jest kolejny atom C) - 2
 - CH₃ (Z=6 dla C, do którego podłączony jest atom H) - 3
 - H (Z=1) - 4
 - ustawiamy H do tyłu (jeśli nie jest tam domyślnie).
 - sprawdzamy ruch od 1 → 2 → 3:
 - jeśli ruch zgodny z zegarem → R
 - jeśli ruch przeciwny do zegara → S

Wzory przestrzenne:

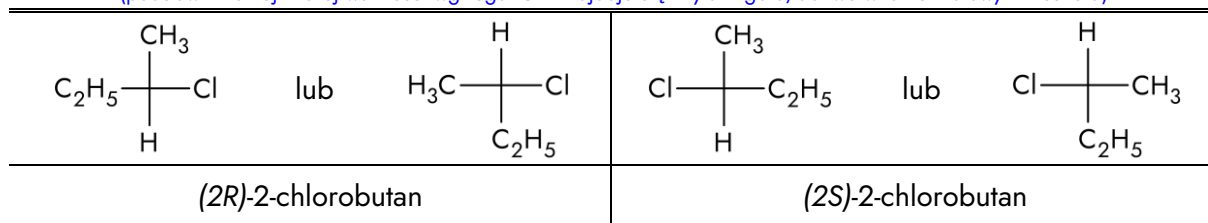


Wzory rzutowe Fischera (finalne):



Wzory rzutowe Fischera (pozwalające na określenie konfiguracji absolutnej C*):

(podstawnik o najniższej ważności wg reguł CIP znajduje się z tyłu = góra/dół we wzorze rzutowym Fischera)



Uwaga!

Jeżeli w poleceniu „jest przedstaw wzór rzutowy Fischera i na jego podstawie określ konfigurację absolutną C*”, tzn. że chodzi o finalny wzór Fischera. Można (i należy) zastosować odpowiednie przekształcenia umożliwiające reorganizację podstawników w taki sposób, aby ten o najniższej hierarchii w myśl reguł CIP znajdował się z tyłu, ale w odpowiedzi zawsze powinien znaleźć się wzór finalny.

Podsumowanie

- nadajemy priorytety podstawnikom według liczb atomowych.
- ustawiamy najniższy priorytet do tyłu.
- analizujemy kierunek ruchu od 1 do 3.
- jeśli jest on zgodny z ruchem wskazówek zegara → R, jeśli jest przeciwny do ruchu wskazówek zegara → S.