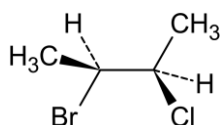


Układy zawierające dwa centra asymetrii

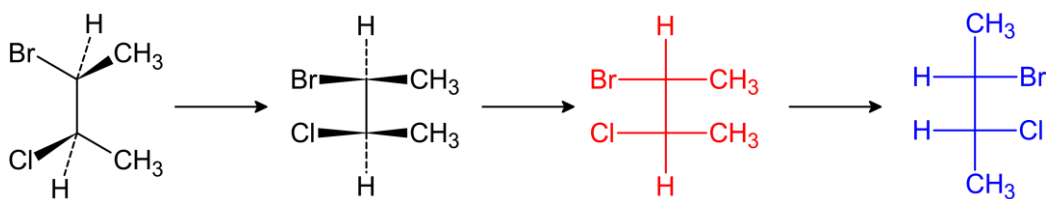
1. Przekształcanie wzoru przestrzennego na wzór rzutowy Fischera

Wzór przestrzenny ustawiamy tak, aby wiązanie C2-C3 było pionowe pamiętając przy tym jaka jest kolejność atomów szkieletu węglowodorowego w finalnym wzorze Fischera (od góry do dołu lokanty poszczególnych atomów węgla powinny wzrastać). Stąd możemy kręcić wiązaniem pionowym (C2-C3) zgodnie lub przeciwnie do ruchu wskazówek zegara o kąt 90° . Wiązania które były przed płaszczyzną rysunku pozostają przed nią w dalszym ciągu. Wiązania w płaszczyźnie rysunku wychodzą do przodu stając się wiązaniami przed płaszczyzną rysunku. Przy uwzględnianiu wiązań będących początkowo za płaszczyzną rysunku, i dalej za nią pozostają, należy wziąć pod uwagę ułożenie poszczególnych podstawników przy C2 i C3 (konformacja na przemian lub naprzeciwległa) i tak skierować ostatni podstawnik aby nie zmienić początkowej konformacji cząsteczki.

Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan o konformacji:



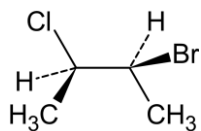
Obracamy całą cząsteczkę o 90° zgodnie z ruchem wskazówek zegara. W tym przypadku atom C2 związany jest z Br (nie z Cl!), z Cl związany jest atom C3, co wynika z nazwy cząsteczki: 2-bromo-3-chlorobutan, stąd atom C2 (połączony z bromem) powinien znajdować się po obrocie u góry.



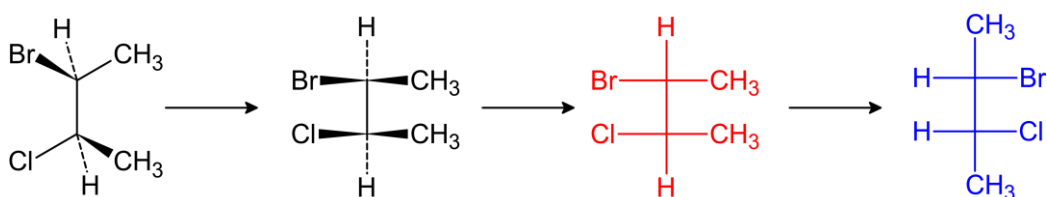
- na czerwono zaznaczono wzór Fischera umożliwiający odczytanie konfiguracji absolutnej obu centrów chiralności.
- na niebiesko zaznaczono finalny wzór Fischera z łańcuchem węglowodorowym ustawionym pionowo, w sekwencji rosnącego lokanta (C1 $\rightarrow$ C4)



Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan może być również narysowany w trochę mniej wygodnej konformacji - atomy C2 i C3 będą na wzorze przestrzennym zamienione miejscami (kolejność na rysunku nie ma znaczenia i tak trzeba nazwać związek zgodnie z zasadami nazewnictwa związków organicznych):



Obracamy całą cząsteczkę o 90° przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. W tym przypadku atom C2 związany jest z Br (nie z Cl!), z Cl związany jest atom C3, co wynika z nazwy cząsteczki: 2-bromo-3-chlorobutan, stąd atom C2 (połączony z bromem) powinien znajdować się po obrocie u góry.



- na czerwono zaznaczono wzór Fischera umożliwiający odczytanie konfiguracji absolutnej obu centrów chiralności.
- na niebiesko zaznaczono finalny wzór Fischera z łańcuchem węglowodorowym ustawionym pionowo, w sekwencji rosnącego lokanta (C1 → C4)

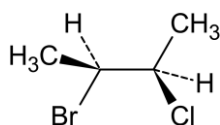
Oczywiście zarówno pierwszy jak i drugi wzór rzutowy Fischera musi być taki sam, ponieważ istnieje tylko jeden związek o nazwie (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan. Uważać należy jedynie na lokanty atomów węgla tworzących trzon cząsteczki aby były ustawione w pionie w sekwencji rosną.



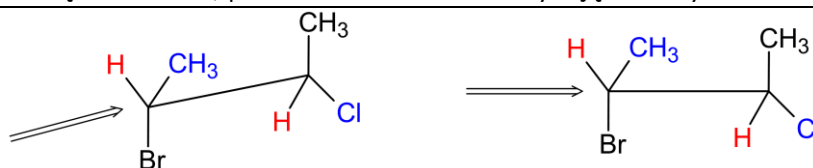
2. Przekształcanie wzoru przestrzennego na projekcję Newmana

Patrzmy na wzór przestrzenny wzdłuż wiązania C2-C3 (uwaga na rysunek, raz węgiel C2 może być po lewej, a raz po prawej stronie wzory przestrzennego) i rzuty wiązań bliższego (drugiego) atomu węgla doprowadzamy do środka koła, natomiast rzuty wiązań dalszego (trzeciego) atomu węgla doprowadzamy do środka okręgu. Zauważamy, że "patrząc" na wzór przestrzenny w ten sposób wiązania skierowane przed płaszczyznę "widzimy" po naszej stronie prawej i tak też są usytuowane na wzorze Newmana, podczas gdy wiązania skierowane za płaszczyznę „widzimy” po stronie lewej i tak są też usytuowane w projekcji Newmana.

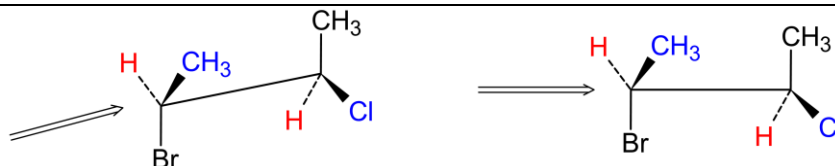
Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan o konformacji naprzemianległej:



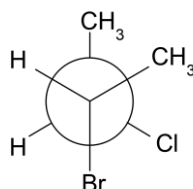
Atom Br znajduje się przy atomie węgla C2 i jest położony po stronie lewej rysunku, stąd patrzymy na cząsteczkę wzdłuż wiązania C2-C3, przez atom C2. Pomocne bywają struktury koziołkowe/konikowe:



Płaskie (wszystkie wiązania na płaszczyźnie)

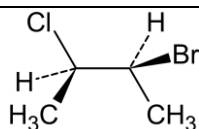


Przestrzenne (wiązania które na wzorze przestrzennym znajdowały się w płaszczyźnie rysunku pozostają w niej dalej, wiązania znajdujące się przed lub za płaszczyzną rysunku dalej takowe pozostają)

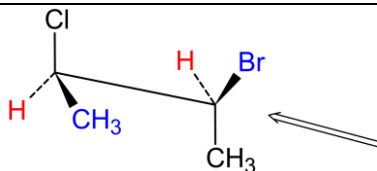


Punkt w środku oznacza węgiel C2, okrąg z tyłu węgiel C3. Wiązania znajdujące się przed płaszczyzną rysunku znajdują się po stronie prawej w projekcji Newmana, podczas gdy wiązania skierowane za płaszczyznę rysunku (we wzorze przestrzennym) umiejscowione są po stronie lewej w projekcji Newmana.

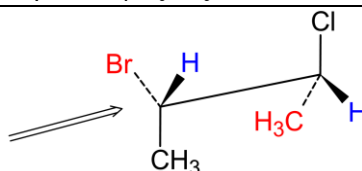




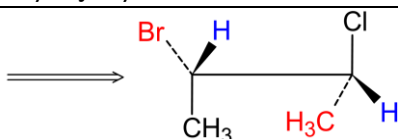
Atom Br znajduje się przy atomie węgla C2 i jest położony po stronie prawej rysunku, stąd patrzymy na cząsteczkę wzdłuż wiązania C2-C3, przez atom C2. Pomocne bywają struktury koziołkowe/konikowe:



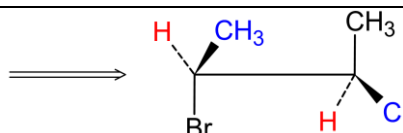
W powyższym ułożeniu atom C2 znajduje się po stronie prawej rysunku, stąd musimy całą cząsteczkę obrócić o 180° w płaszczyźnie poziomej, tak aby atom C2 był po stronie lewej. Będzie nam to potrzebne aby dobrze narysować projekcje Newmana. Otrzymujemy wówczas:



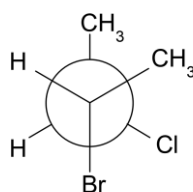
Przy obrocie o 180° wiązania znajdujące się przed płaszczyzną są teraz za nią, a te które były skierowane za płaszczyznę wychodzą przed. Otrzymujemy:



Wzór ten różni się od zaprezentowanego wcześniej miejscem położenia podstawników, co mogłoby doprowadzić do pewnych niejasności jak chodzi o projekcję Newmana. Aby nie powstał niepotrzebny dysonans można zamienić umiejscowienie podstawników kręcąc nimi wzdłuż osi wiązania C2-C3. Prowadzi to do wzoru:



Który jest identyczny z przedstawionym wcześniej (gdy wychodziliśmy dla tego samego związku ale o innej konformacji – atom C2 był po stronie lewej podczas gdy w analizowanym przypadku jest po stronie prawej). Na podstawie dwóch powyższych struktur możemy narysować wzór $(2S,3R)$ -2-bromo-3-chlorobutanu w projekcji Newmana.



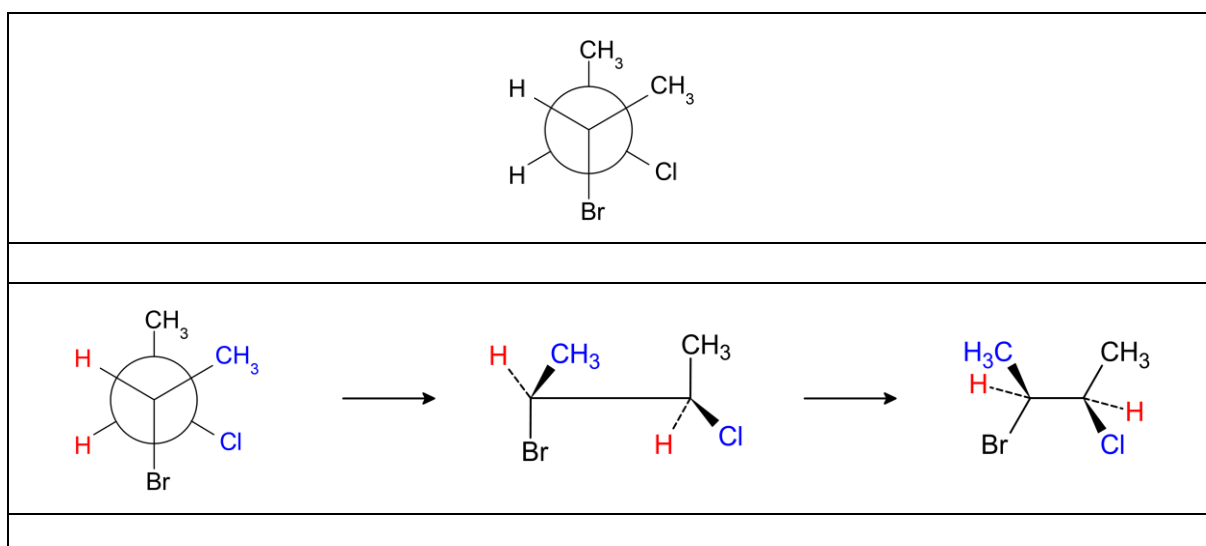
Oczywiście powinien być identyczny jak poprzednio z uwagi na fakt, że istnieje tylko jeden taki związek.



3. Przekształcanie projekcji Newmana na wzór przestrzenny

Wzór Newmana należy "rozsunąć" tak, aby tylny atom węgla znalazł się np. po prawej stronie i nieco wyżej przedniego atomu węgla. Wówczas obydwa atomy węgla oraz wszystkie związane z nimi grupy stają się widoczne; taki zapis budowy cząsteczki jest nazywany wzorem koziołkowym (ewentualnie konikowym). Wzór koziołkowy może być pomocą w narysowaniu klasycznego wzoru perspektywicznego, w którym zwykłą linią zaznacza się wiązania leżące w płaszczyźnie, linią przerywaną - wiązania skierowane za płaszczyznę, a klinami - wiązania skierowane przed płaszczyznę. Podstawniki po stronie prawej we wzorze koziołkowym znajdują się przed płaszczyzną rysunku, po stronie lewej za płaszczyzną rysunku, górne i dolne w płaszczyźnie rysunku. Przy pewnej wprawie rysowanie wzoru koziołkowego można pominąć.

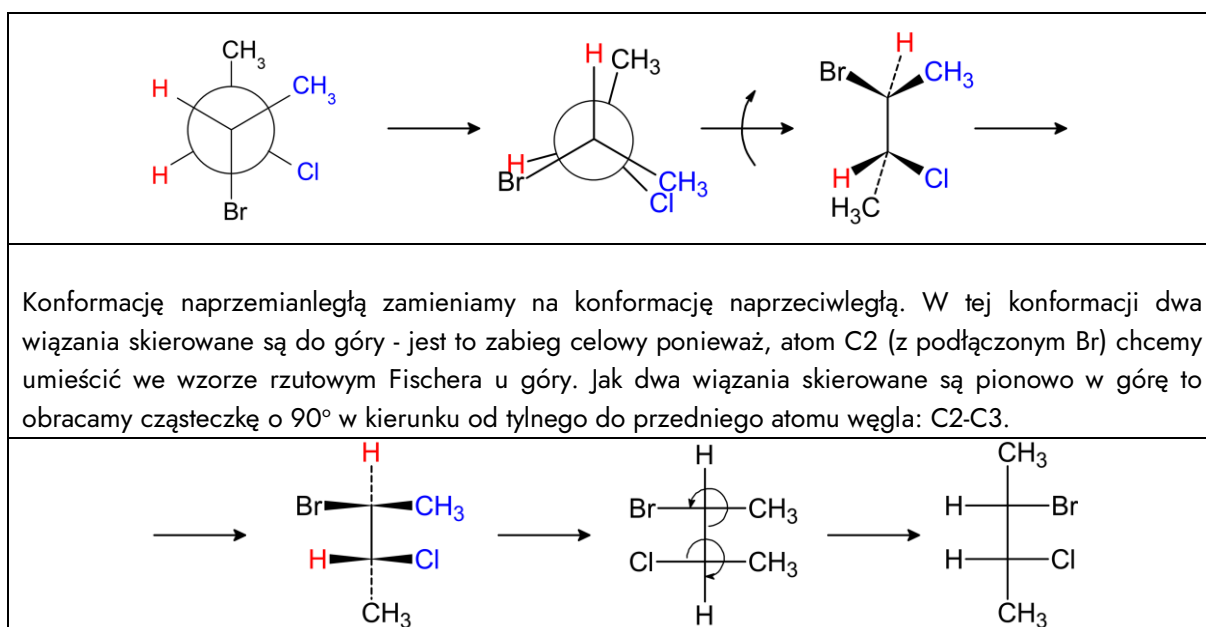
Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan w konformacji naprzemianległej



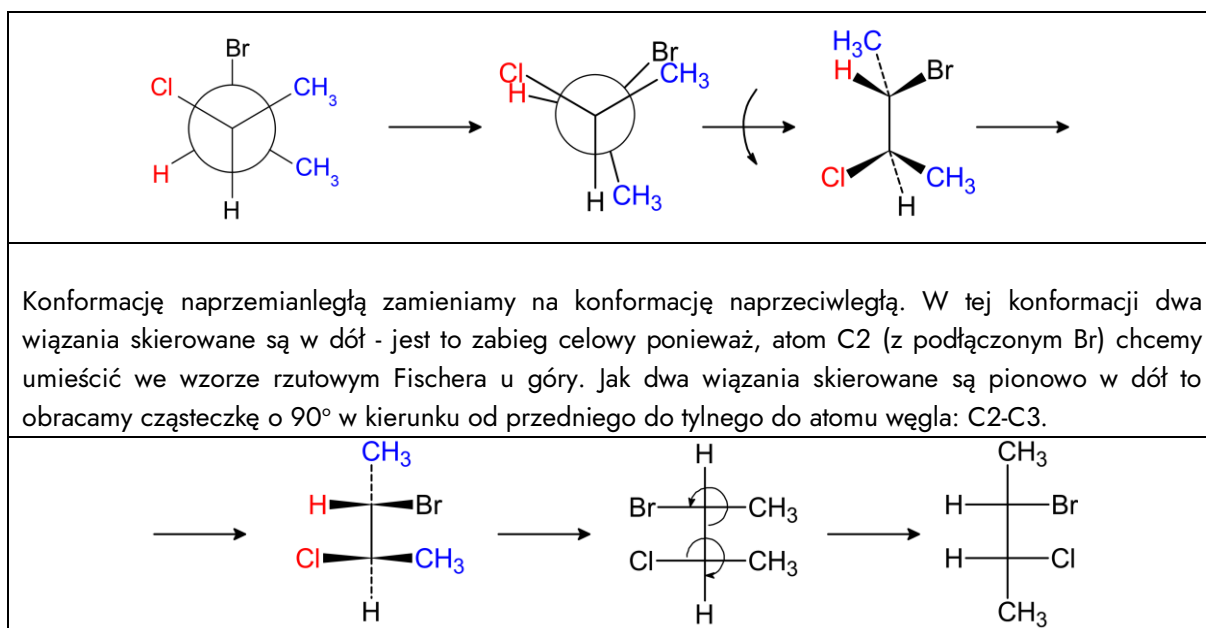
4. Przekształcanie projekcji Newmana na wzór rzutowy Fischera

Wzór Newmana należy "rozsunąć" tak, aby tylny atom węgla znalazł się np. po prawej stronie i nieco wyżej przedniego atomu węgla. Jeżeli wzór Newmana przedstawia konfigurację naprzemianległą, to należy ją przekształcić w naprzeciwległą, w taki sposób, aby dwa wiązania były skierowane pionowo w dół lub pionowo w górę. Następnie należy wyobrazić sobie wykonanie tym wzorem obrotu o kąt 90° ku tyłowi (od siebie), wskutek czego wiązania "pionowe" znajdą się za płaszczyzną, wiązanie C2-C3 przyjmie kierunek pionowy, a pozostałe wiązania "wyjdą" przed płaszczyzną. Następnie wykonuje się rzut wzoru przestrzennego na płaszczyznę, uzyskując wzór Fischera (nie koniecznie finalny).

Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan w konformacji naprzemianległej - atom C2 (z Br) ustawiony z przodu



Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan w konformacji naprzemianległej - atom C2 (z Br) ustawiony z tyłu



Oczywiście obydwa wzory rzutowe Fischera muszą być identyczne ponieważ istnieje tylko jeden (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan. Różnica w obu podejściach – jak ustawić wiązania: w pionie do góry albo w pionie w dół tkwi w szczególe czy atom C2 jest z pokazany z przodu czy z tyłu cząsteczki.

Uwaga!

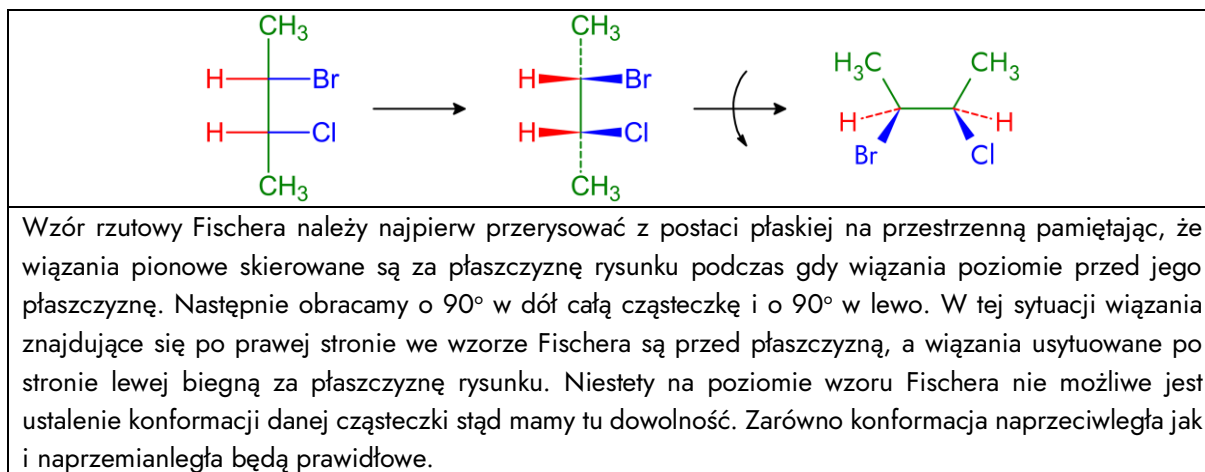
Jeżeli na wyjściowym wzorze wiązania "pionowe" są skierowane w dół, to przedni atom węgla z wzoru Newmana staje się dolnym atomem na wzorze Fischera, jeżeli te wiązania "pionowe" są skierowane ku górze, to przedni atom węgla z wzoru Newmana staje się górnym atomem we wzorze Fischera.



5. Przekształcanie wzoru rzutowego Fischera na wzór przestrzenny

Najpierw rysujemy wzór rzutowy Fischera w taki sposób, aby ostatnie w szeregu pierwszeństwa podstawniki obydwu atomów C* znalazły się na linii pionowej (są wtedy skierowane za płaszczyznę) i odczytujemy konfigurację absolutną wszystkich centrów chiralnych. Następnie przekształcamy ten wzór w klasyczny (finalny) wzór Fischera (łańcuch węglowy w pionie, lokanty wg kolejności rosnącej z góry na dół). Rysujemy odpowiednią konformację. Jeżeli nie jest ona narzucona w treści to wybieramy dowolną (np. naprzeciwległą) następnie rysujemy drugą (w tym przypadku naprzemianległą). Podstawniki znajdujące się po prawej stronie we wzorze Fischera są podstawnikami wychodzącymi przed płaszczyznę, podstawniki po stronie lewej wychodzą za płaszczyznę, natomiast pionowe znajdują się we wzorze przestrzennym w płaszczyźnie rysunku.

Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan



6. Przekształcanie wzoru rzutowego Fischera na projekcję Newmana

Postępujemy analogicznie jak w zagadnieniu 4, ale w odwrotnej kolejności:

Przykład: (2*S*,3*R*)-2-bromo-3-chlorobutan

