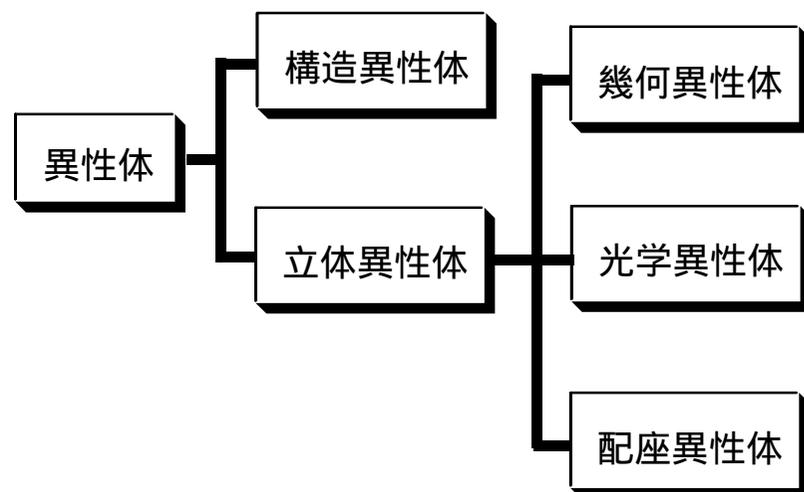


## 5. 異性体とその構造表示

### 【1】異性体



#### 1. 構造異性体 (constitutional isomer)

分子式が同じで、原子の結合順序が異なる化合物。

#### 2. 立体異性体 (stereoisomer)

分子式および原子の結合順序が同じで、原子の三次元的な空間配置が異なる化合物。

##### 2-1. 幾何異性体 (geometrical isomer)

2つの原子あるいは原子団が両者の共通の基準平面の相対位置が異なる化合物。

(cis, trans ; E, Z ; syn, anti ; ジアステレオマー, エピマー)

##### 2-2. 光学異性体 (optical isomer)

互いに鏡像の関係にある化合物。

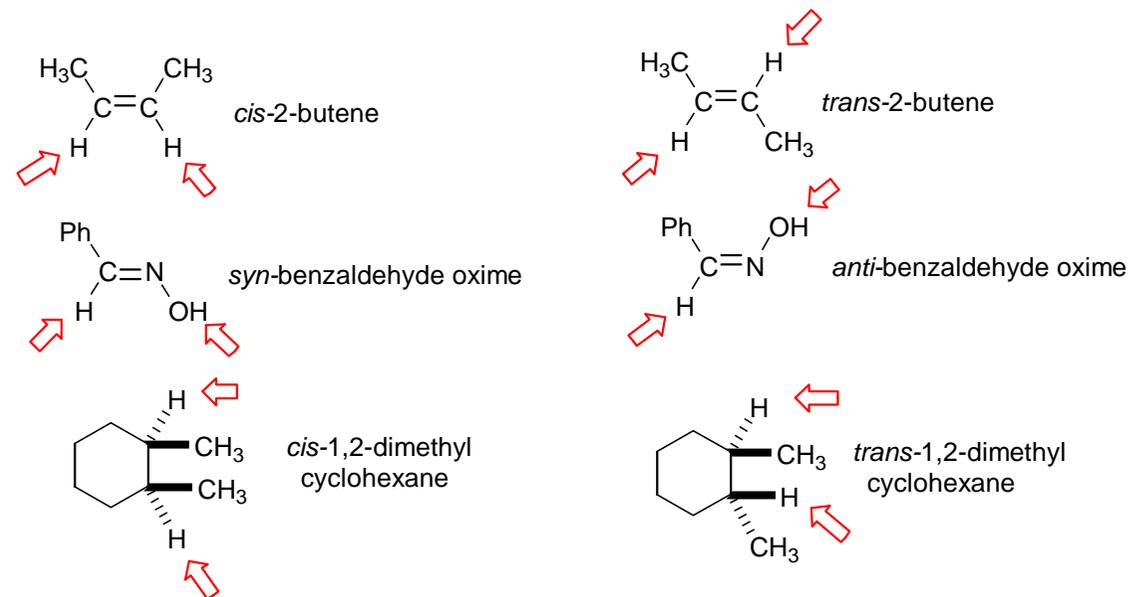
(エナンチオマー, ラセミ体, メソ体, R S, dl, DL, (+), (-))

##### 2-3. 配座異性体 (conformational isomer)

結合の周囲の回転によって生じる立体的配置の異なる化合物。

(エクリップス, スタッガード ; ゴーシュ, アンチ ; 椅子型, 舟型)

### 【2】従来の構造表示名



### 【3】現在の構造表示名

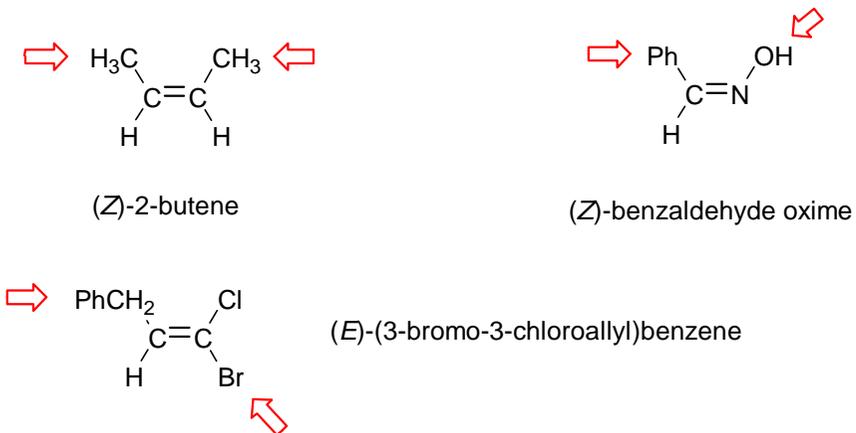
#### 置換基の順位法則 (上位順)

- 1) 原子番号の大きいもの。
- 2) 質量数の大きいもの。
- 3) 孤立電子対を考慮する場合、孤立電子対の原子番号を0とする。
- 4) 多重結合は、単結合に ( ) 付きの相手原子が結合しているものとする。

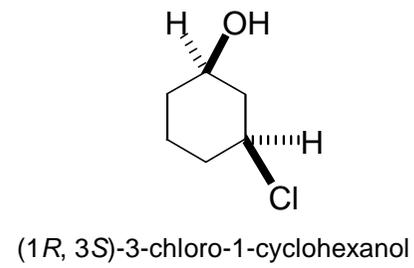
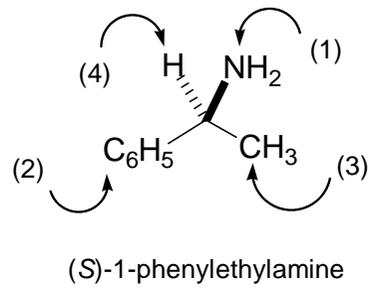
この時、( ) 付の原子の順位は、( ) なしの原子より下位とする。

注意: 1)-4) で決定できない場合は、次の原子の最も上位の原子で比較する。

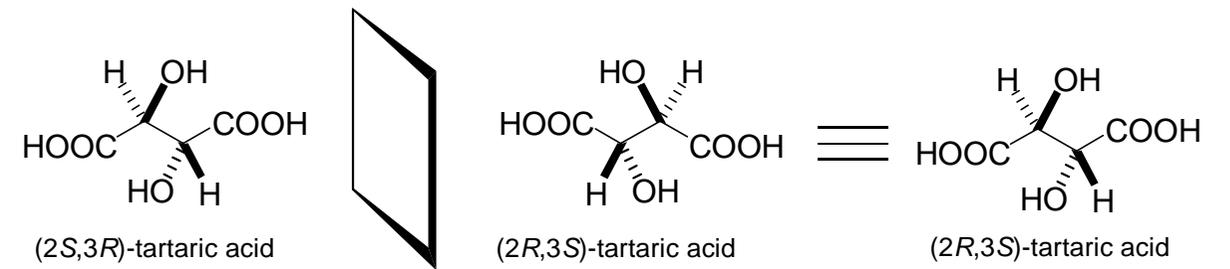
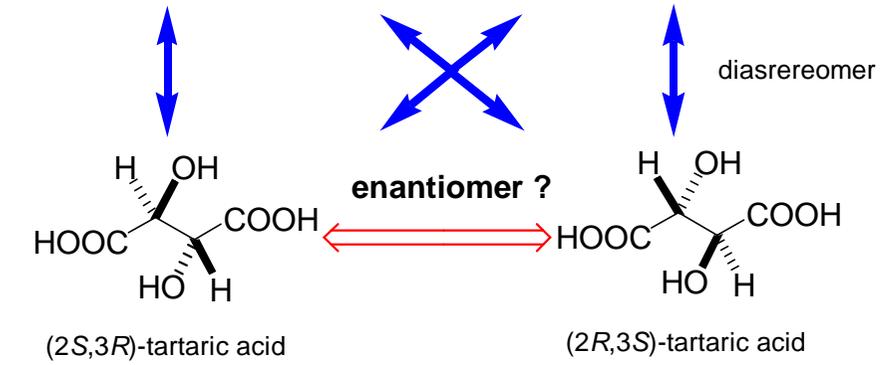
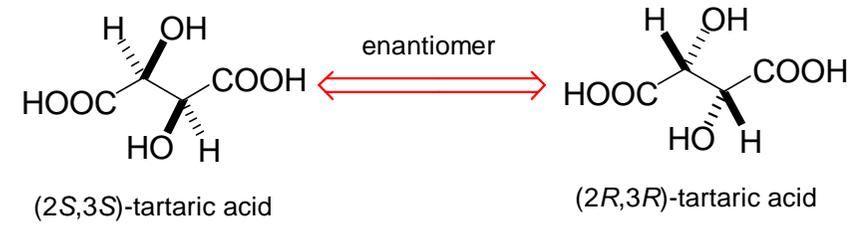
#### E,Z 表示法



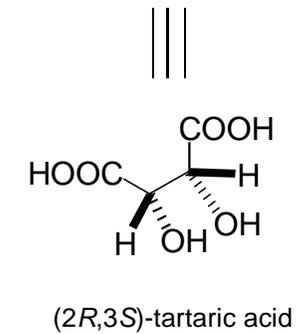
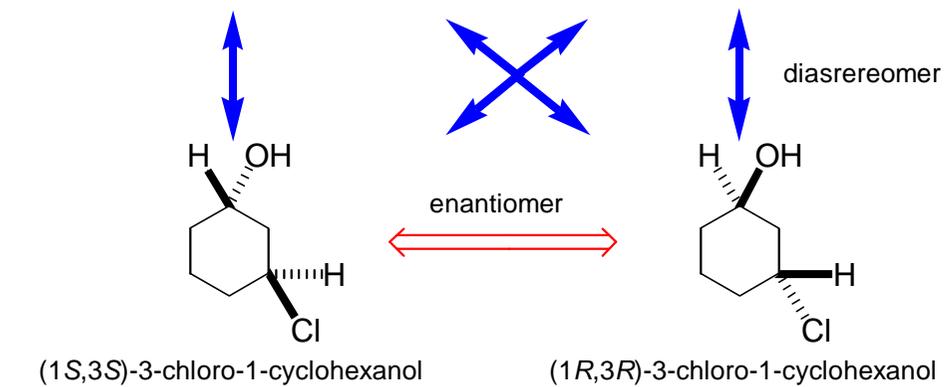
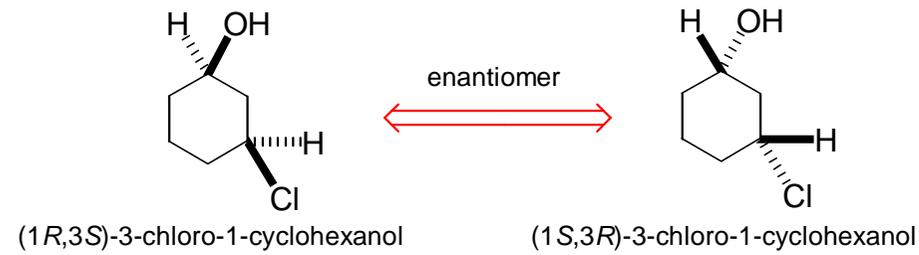
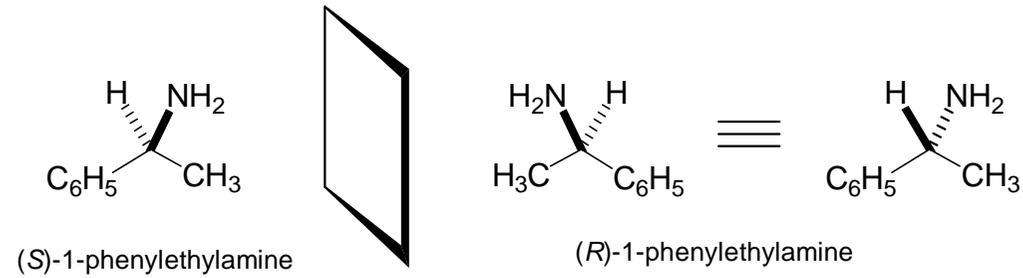
R,S 表示法



メソ体

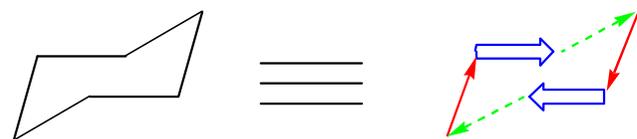


【4】エナンチオマーとジアステオマー

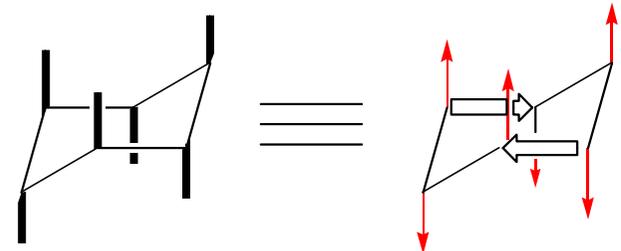


## 【5】シクロヘキサン環（椅子型）の透視図の書き方

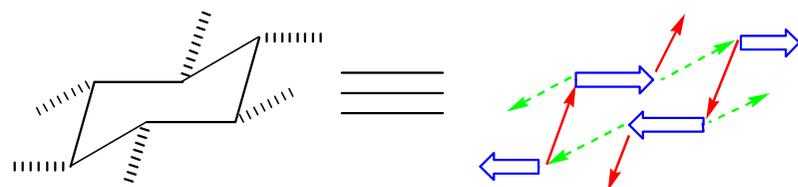
炭素 - 炭素結合



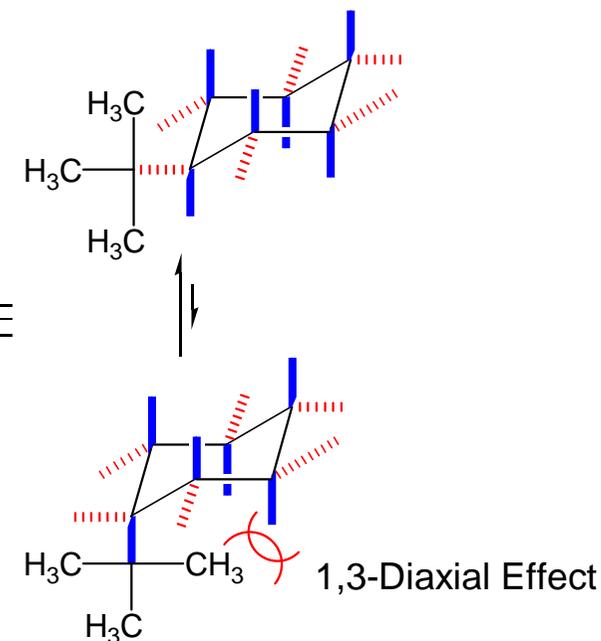
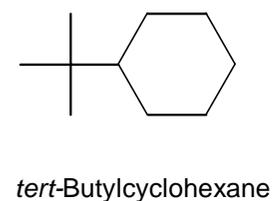
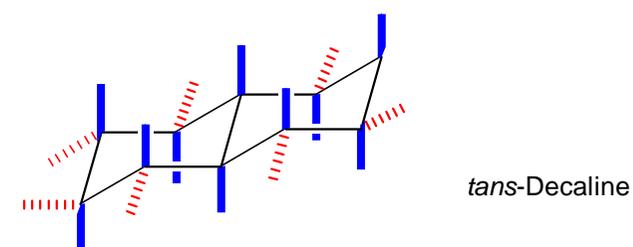
炭素 - 水素結合（アキシアル水素）



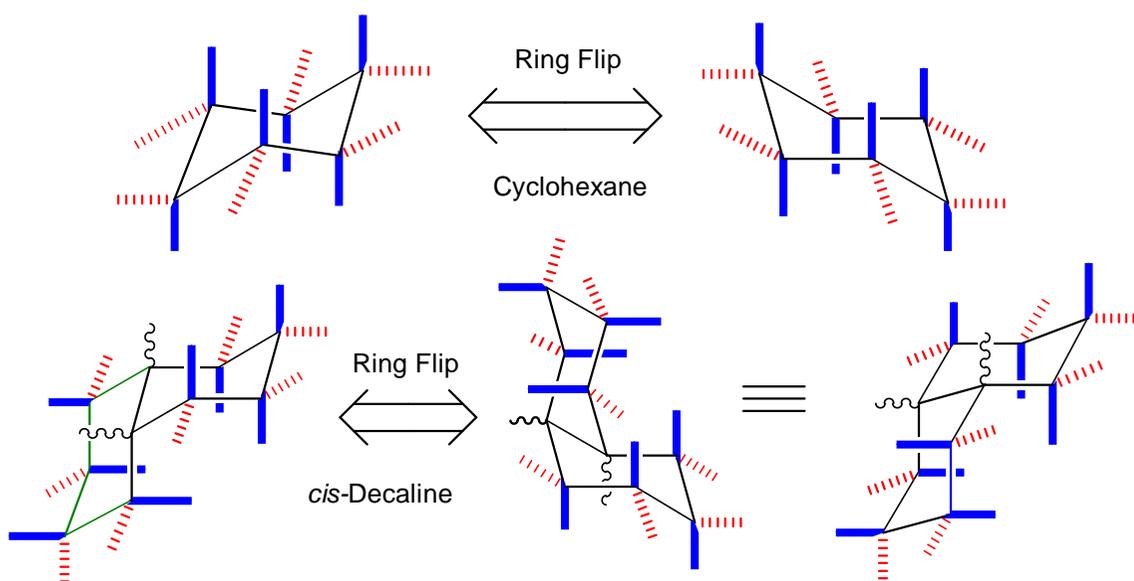
炭素 - 水素結合（エクアトリアル水素）



## 環反転の阻害



## 【6】シクロヘキサン環の反転



置換基がエクアトリアル位にあるシクロヘキサンの配座異性体がアキシアル位にあるものに反転したときの自由エネルギー変化

置換基	$G$ (kcal/mol)	置換基	$G$ (kcal/mol)
H	0	COOH	1.41
CH <sub>3</sub>	1.70	COOCH <sub>3</sub>	1.29
CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub>	1.75	OH	0.94
(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> CH	2.20	OCH <sub>3</sub>	0.75
(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> C	> 5	NH <sub>2</sub>	1.4

(参考) 15 で,  $G$ が 1.3 kcal/mol の差では, 90%, 2.6 kcal/mol では, 99%であり, 5 kcal/mol の差では, >99.98% がエクアトリアル位が優位になる。