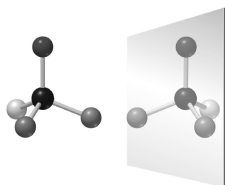


03

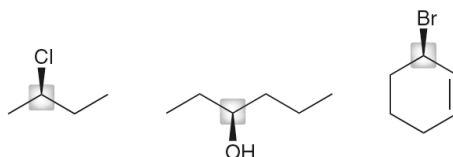
입체화학

입체 화학

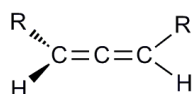
1. **카이랄 화합물**(거울상이 겹치지 않는 화합물)과 **비카이랄 화합물**(거울상이 겹치는 화합물)은 분자내 대칭 평면의 유무로 구분한다. 즉, 분자 내 대칭 평면이 존재하지 않으면 카이랄 화합물이고 분자 내 대칭 평면이 존재하면 비카이랄 화합물이다.



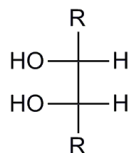
2. **카이랄 중심**(비대칭 중심 또는 입체중심이라고도 함)이란 sp^3 혼성된 원자에 결합한 네 개의 치환기 또는 그룹이 모두 다른 원자를 말한다. 따라서, 탄소, 질소, 규소, 인, 황 등의 원자는 카이랄 중심이 될 수 있다.



3. 카이랄 화합물이라 해서 반드시 카이랄 중심을 갖고 있어야 하는 것은 아니며 카이랄 중심이 있다고 해서 반드시 카이랄 화합물이 되는 것은 아니다. 다시 말해 카이랄 중심의 유무는 카이랄 또는 비카이랄 화합물을 구분할 수 있는 기준이 될 수 없다.



카이랄 중심이 없으나 분자내 대칭 평면이 존재하지 않으므로 카이랄 화합물이다.

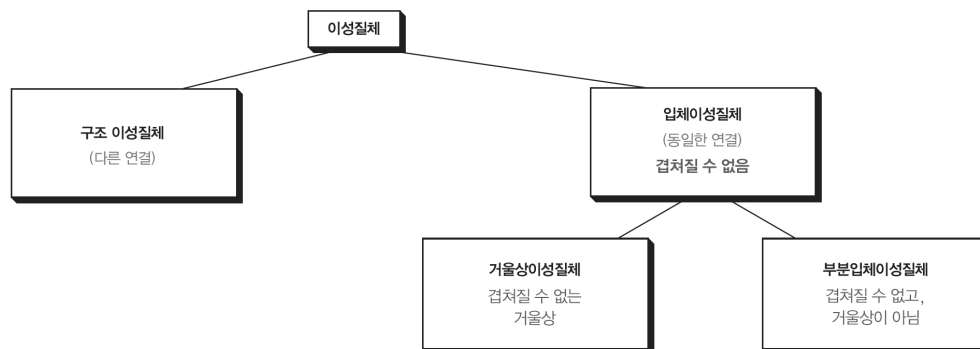


카이랄 중심이 존재하지만 분자내 대칭 평면이 존재하므로 비카이랄 화합물이다.

카이랄 중심이 존재하면서 비카이랄인 화합물을 메조(meso) 화합물이라 한다.

카이랄 중심 개수	카이랄? or 비카이랄?
0개	대부분 비카이랄 (카이랄 중심 없어도 카이랄인 분자가 존재)
홀수 개	무조건 카이랄
짝수 개	대부분 카이랄 ('메조'는 비카이랄)

4. 이성질체



5. 광회전도(optical rotation)와 거울상 초과량(enantiomeric excess, % ee)

(1) 광회전도: α 로 표현하며 카이랄 화합물은 $\alpha \neq 0$, 비카이랄 화합물은 $\alpha = 0$

(2) 고유 광회전도: $[\alpha]$ 로 표현하며 측정된 광회전도를 평면 편광된 빛이 통과하는 시료관의 길이(dm)와 시료의 농도(g/mL)의 곱으로 나눈 값이다.

$$[\alpha] = \frac{\alpha_{\text{측정}}}{l \times c}$$

(3) 측정된 광회전도는 거울상 초과량과 비례식이 성립한다.

$$\text{고유 광회전도} : 100 \% ee = \text{측정된 광회전도} : \chi \% ee$$

$$\% ee = \frac{|\text{측정된 } [\alpha]|}{\text{순수한 거울상이성질체의 } [\alpha]} \times 100\%$$

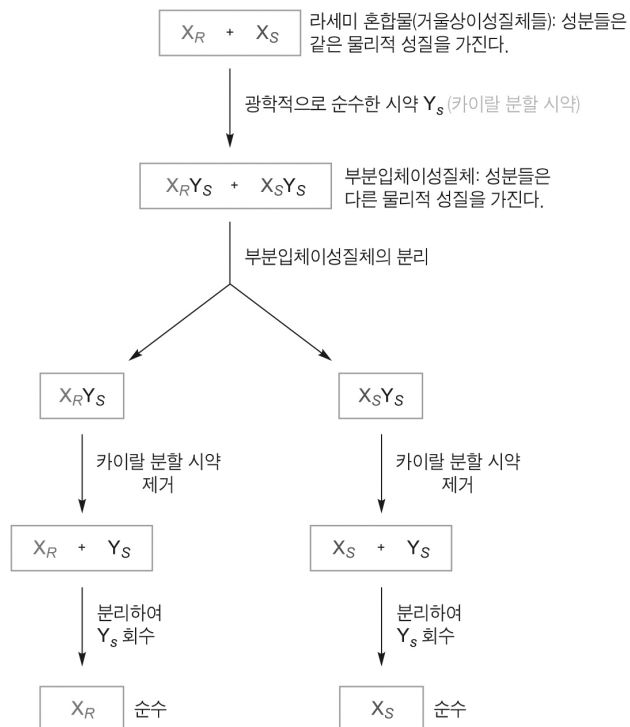
6. 메조화합물 vs 라세미 혼합물

(1) 메조 화합물: 카이랄 중심을 갖고 있으면서 분자 내 대칭 평면이 존재하는 비카이랄 화합물 ($\alpha=0$)로 거울상이성질체가 존재하지 않는다.

(2) 라세미 혼합물: 두 거울상이성질체가 1:1로 섞여 있는 혼합물($\alpha=0$)

cf. 메조 화합물은 라세미 혼합물을 만들 수 없다.

1) 라세미 혼합물은 카이랄 분할시약을 통해 분할할 수 있다.



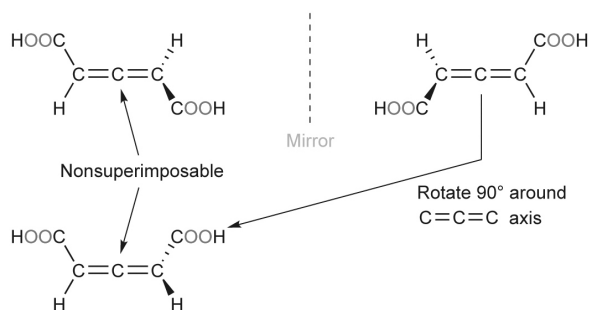
라세미 혼합물은 카이랄 컬럼 크로마토그래피를 통해 분할할 수 있다.

7. 입체이성질체의 물성

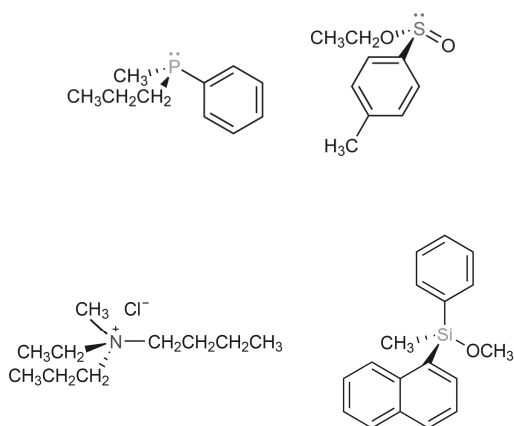
- (1) 거울상 이성질체 관계에 있는 화합물은 광회전도를 제외한 모든 물성(끓는점, 녹는점, 용해도, pK_a 등)이 같다.
cf. 거울상 이성질체 관계에 있는 화합물의 광회전도는 절대값이 같고 부호가 반대이다.
- (2) 부분입체이성질체 관계에 있는 화합물은 광회전도를 포함한 모든 물성이 다르다.
- (3) 라세미 혼합물의 물성은 해당 거울상이성질체의 물성과 다르다.

8. 입체이성질체의 물성 특별한 카이랄 분자들

▸ 알렌 유도체, biphenyl 유도체, 카이랄 황과 인이 포함된 분자



▸ 황, 인, 질소, 규소가 포함된 카이랄 분자



▸ biphenyl 유도체

