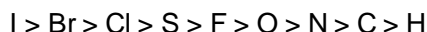


ED2 - Descripteurs stéréochimiques R/S, E/Z

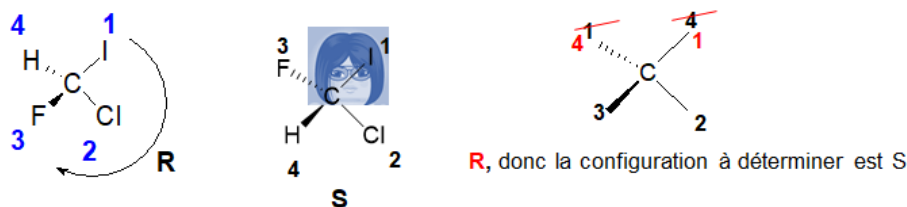
Attribution de la configuration R ou S à un atome asymétrique : règles C.I.P.

Les règles séquentielles de Cahn-Ingold et Prélog permettent d'attribuer les ordres de priorité 1 à 4 aux 4 entités fixées sur un atome asymétrique (ex sur C*), en fonction des numéros atomiques des éléments (1= la plus prioritaire = numéro atomique le plus élevé) :



- 1) Classer de 1 à 4 les éléments liés au carbone asymétrique par ordre de priorité des numéros atomiques
- 2) Regarder dans l'espace la structure en voyant le C* en 1^{er} et la priorité 4 devant vous (= regarder dans l'axe de la liaison C* → priorité 4)
- 3) Considérer le sens priorité 1 → priorité 2 → priorité 3 : horaire ↻ = R, antihoraire ↺ = S

A partir d'une représentation de Cram :



- Quand la priorité 4 est à l'arrière en Cram (au bout de la liaison hachurée), on est bien positionné pour lire directement 1-2-3 sur la structure.
- Quand la priorité 4 est à l'avant (au bout de la liaison triangle plein), il faut se positionner derrière la structure, de façon à regarder dans l'axe C* → priorité 4. Le plus simple est d'inverser le sens 1-2-3 lu directement de face.
- Quand la priorité 4 est dans le plan (au bout d'une liaison trait simple), il faut théoriquement se positionner de façon à regarder dans l'axe C* → priorité 4. Pour simplifier, on va tirer parti du fait que quand on permute la position de 2 entités, on inverse la configuration du C*. On va donc permuter l'entité de priorité 4 avec celle qui est à l'arrière (par ex la priorité 1 sur le schéma), déterminer le sens 1-2-3 ainsi obtenu et la configuration correspondante, et inverser celle-ci.

A partir d'une représentation de Fischer :

Selon la convention de Fischer, les éléments au sommet et à la base de la verticale sont à l'arrière, ceux sur une horizontale sont à l'avant. Par conséquent, si l'élément de priorité 4 est sur la verticale, la configuration donnée par le sens 1-2-3 est à conserver ; si l'élément de priorité 4 est sur une horizontale, la configuration donnée par le sens 1-2-3 est à inverser.



Attribuer des ordres de priorité à des entités composées de plusieurs éléments

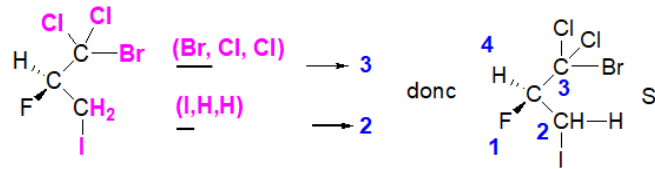
1) Classer par ordre de priorité les éléments directement liés au carbone asymétrique (= éléments de niveau 1, ou de rang 1). Si éléments de rang 1 identiques, passer à la règle n°2.



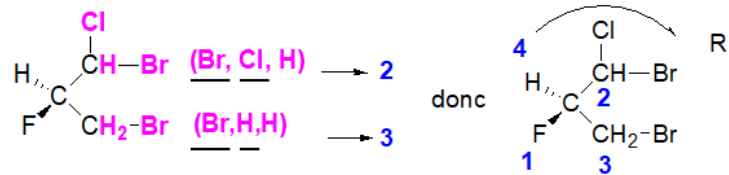
2) Classer par ordre de priorité les groupes de 3 éléments (= éléments de 2^{ème} niveau) liés aux éléments identiques de rang 1, toujours en s'éloignant du C*. Le groupe prioritaire donne la priorité à l'entité dont il est issu.

Pour classer les groupes de 3 éléments :

- Classer les 3 éléments entre parenthèses par ordre décroissant de numéro atomique
- Considérer l'élément le plus prioritaire de chaque groupe (donc le 1^{er} de chaque parenthèse) et les comparer entre eux : le plus prioritaire donne la priorité à son groupe.

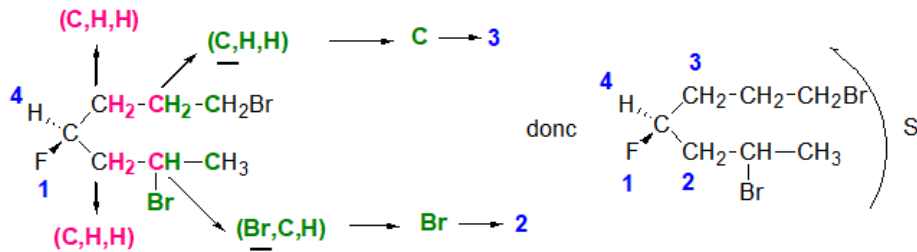


- Si les 1ers éléments de chaque groupe sont identiques, comparer les 2èmes. Si les 2èmes sont identiques, comparer les 3èmes.



- Si les groupes de 3 éléments sont totalement identiques, passer à la règle n°3

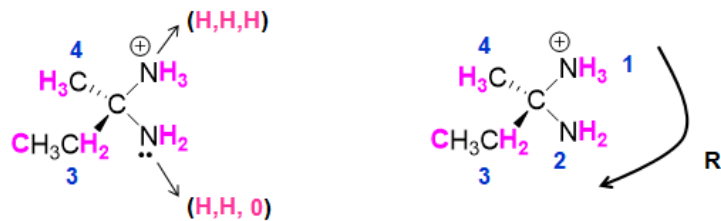
3) On considère les groupes de 3 éléments de rang suivant, en s'éloignant du C* et en choisissant toujours le chemin le plus favorable à l'entité si plusieurs possibles (ramifications...), et on les classe comme précédemment.



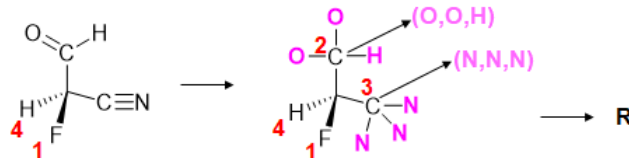
Il est parfois nécessaire d'aller au rang 4, rang 5 etc.

➤ Il doit toujours y avoir 3 éléments dans les parenthèses :

- ❖ Si nécessaire, utiliser les doublets libres (= dernière priorité par convention, notés 0)



- ❖ Doubler les éléments doublement liés, tripler les éléments triplement liés (règle simplifiée, la « vraie » règle est plus complexe)



Attribution de la configuration E ou Z à une double liaison : règles C.I.P.

- 1) Attribuer les priorités 1 et 2 aux 2 entités sur chaque carbone doublement lié, de façon indépendante pour chacun de ces deux carbones, et en appliquant les mêmes règles que pour classer les entités autour d'un carbone asymétrique
- 2) Si les entités de priorité 1 sont du même côté de la double liaison → configuration Z, si elles sont de part et d'autre de la double liaison : configuration E

