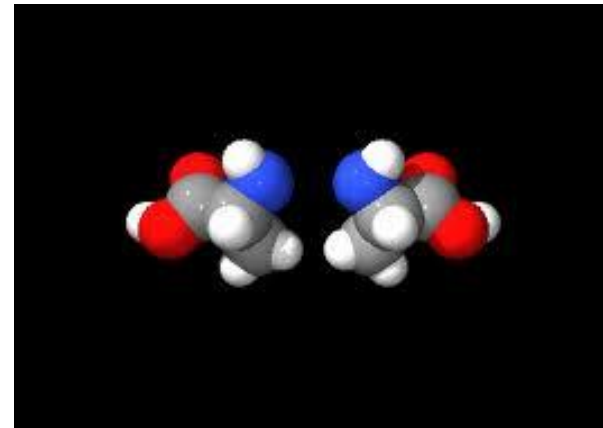
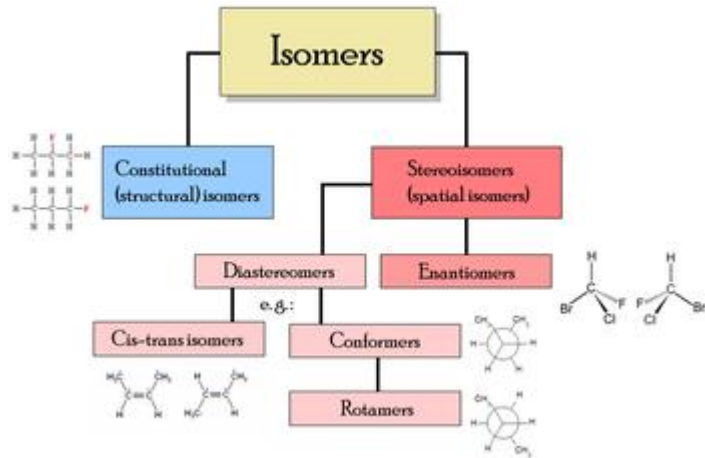
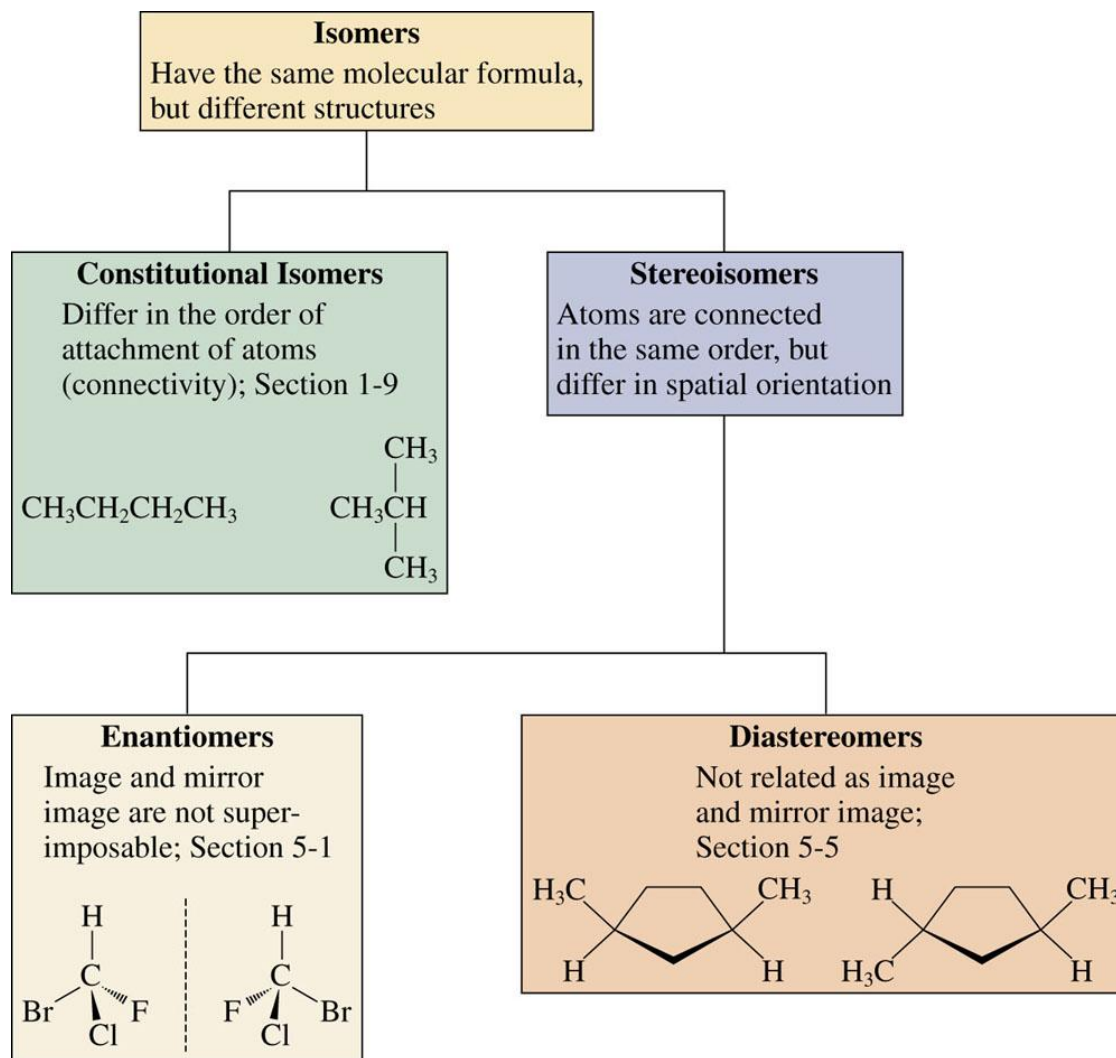


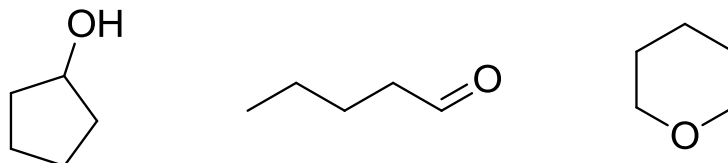
Izomerie a stereochemie



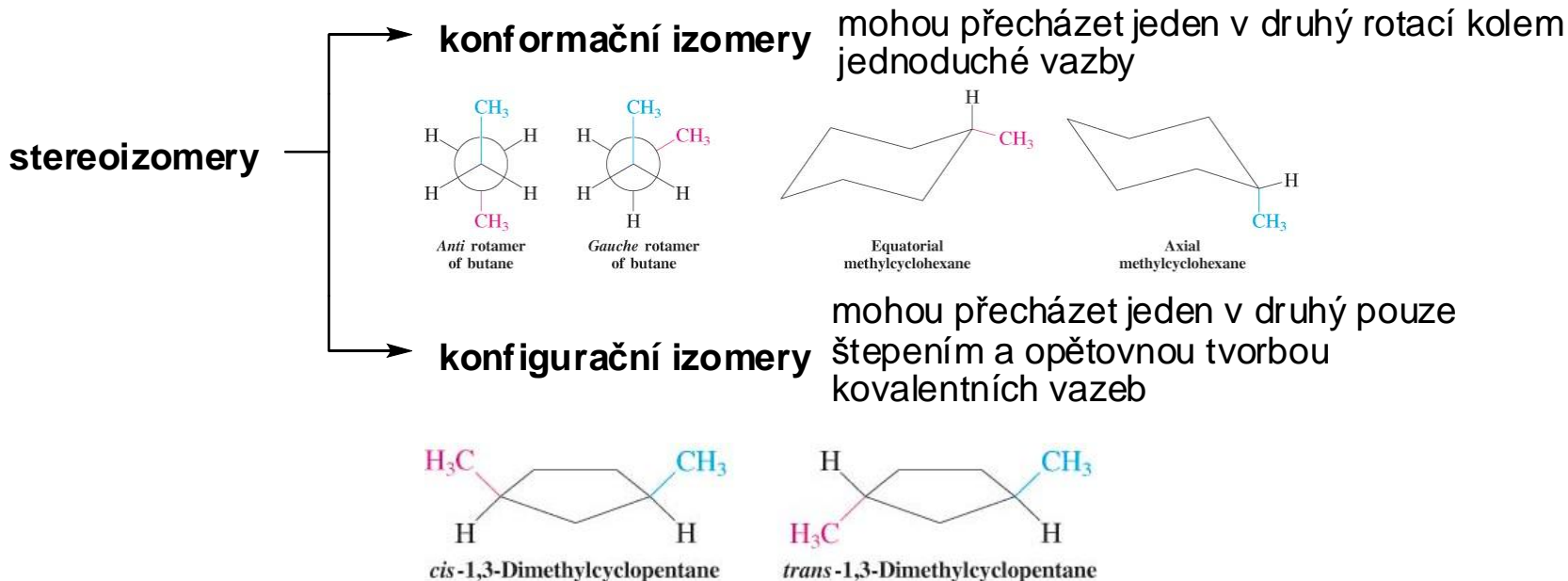


Izomery mají stejný sumární vzorec, ale liší se uspořádáním atomů v prostoru.

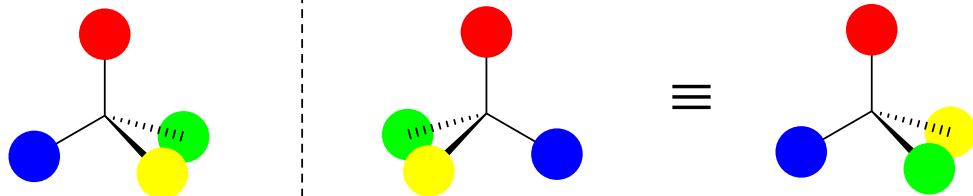
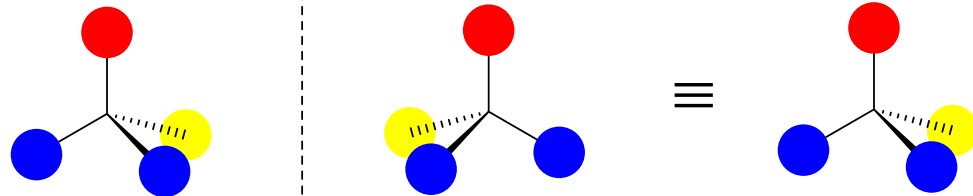
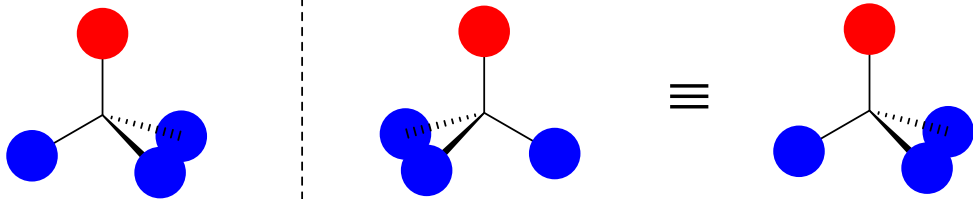
Konstituční izomery – jednotlivé atomy v molekule jsou spojeny různým způsobem



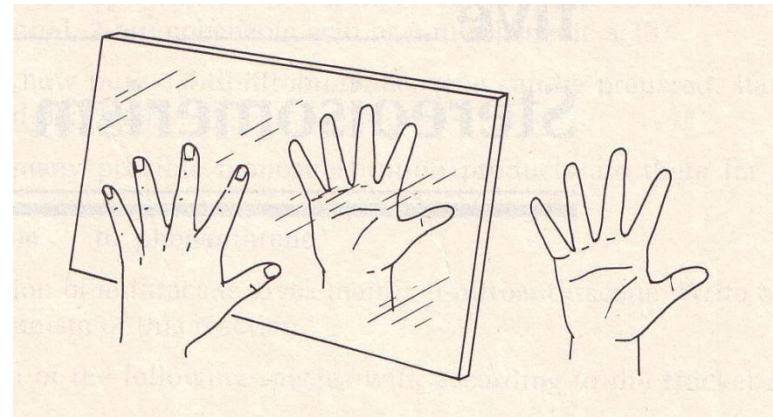
Stereoizomery – jednotlivé atomy v molekule jsou spojeny stejným způsobem, ale mají různé prostorové uspořádání



Konfigurační izomery - chiralita



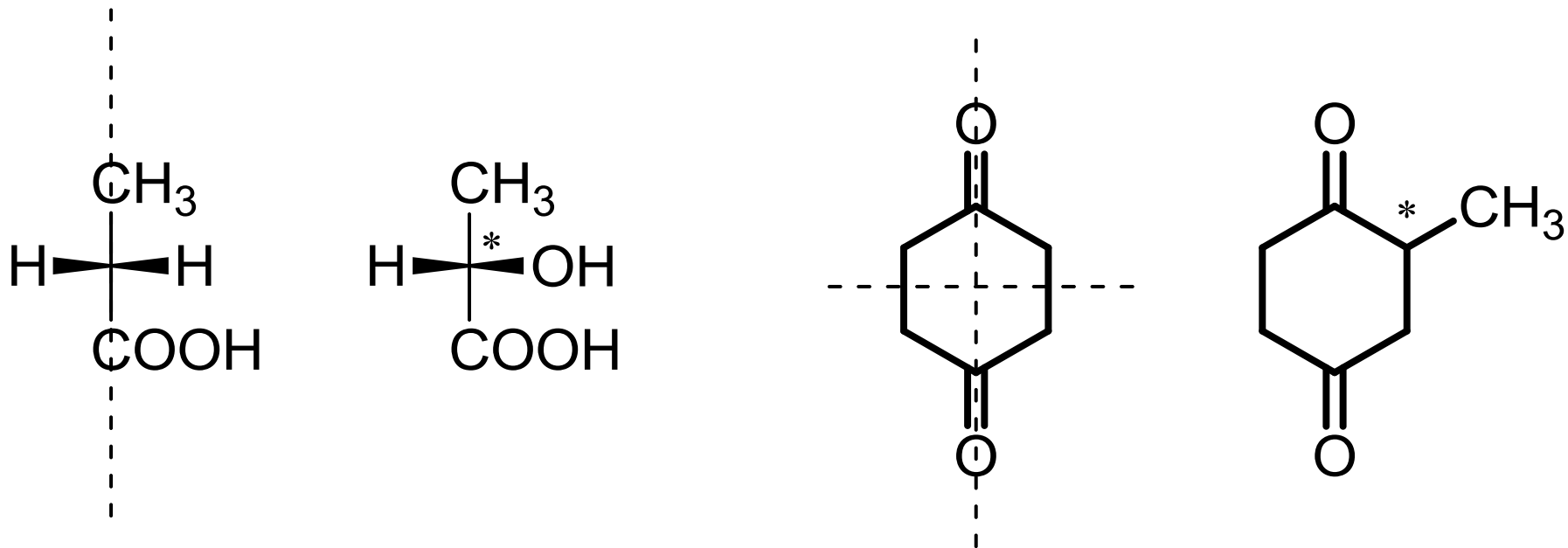
Enantiomery



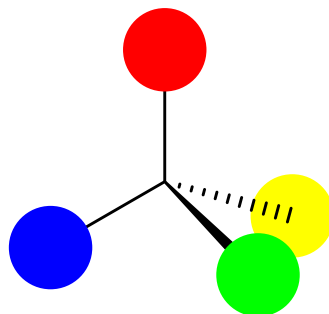
Chirální objekt se pozná podle toho, že on a jeho zrcadlový obraz nejsou totožné nebo se nemohou vzájemně překrýt.



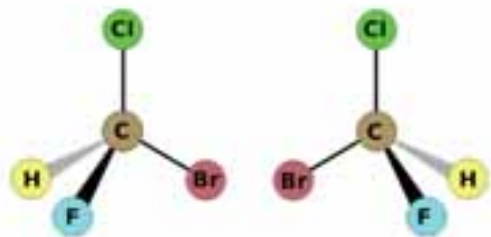
Chirální objekt nemá rovinu symetrie.



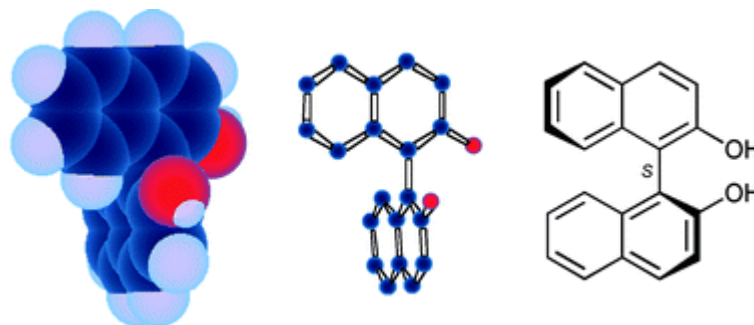
Stereogenní centrum – strukturní rys v molekule, který způsobuje chiralitu
Např. uhlík, na který jsou navázány 4 různé substituenty



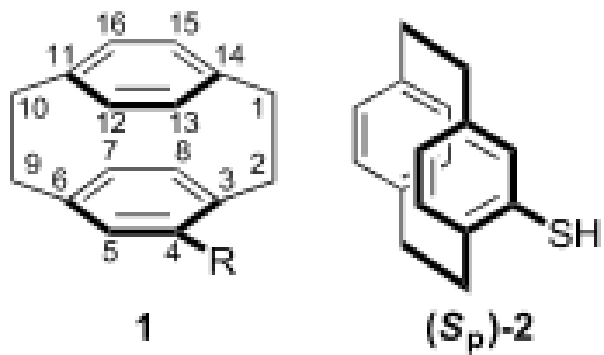
Centrální chiralita



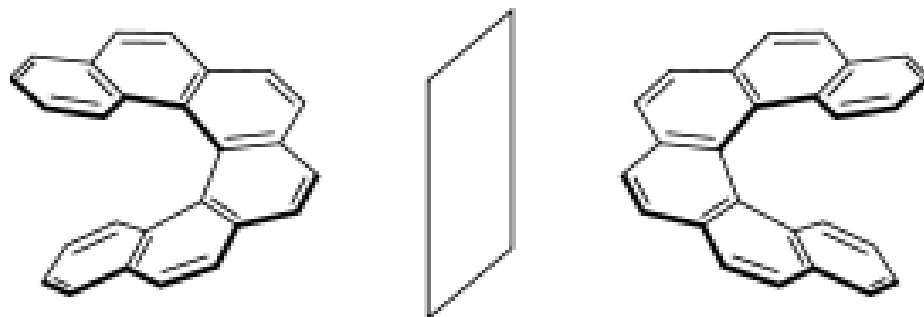
Axiální chiralita



Planární chiralita



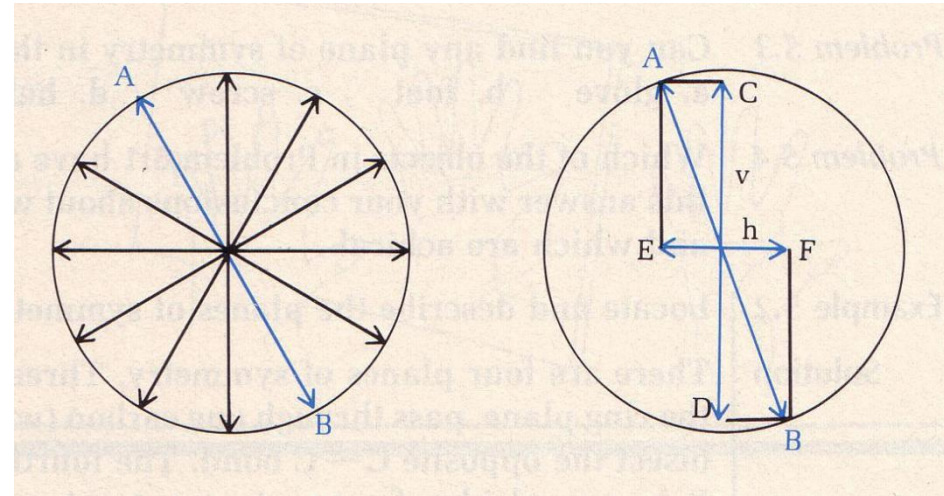
Helikální chiralita (helicita)



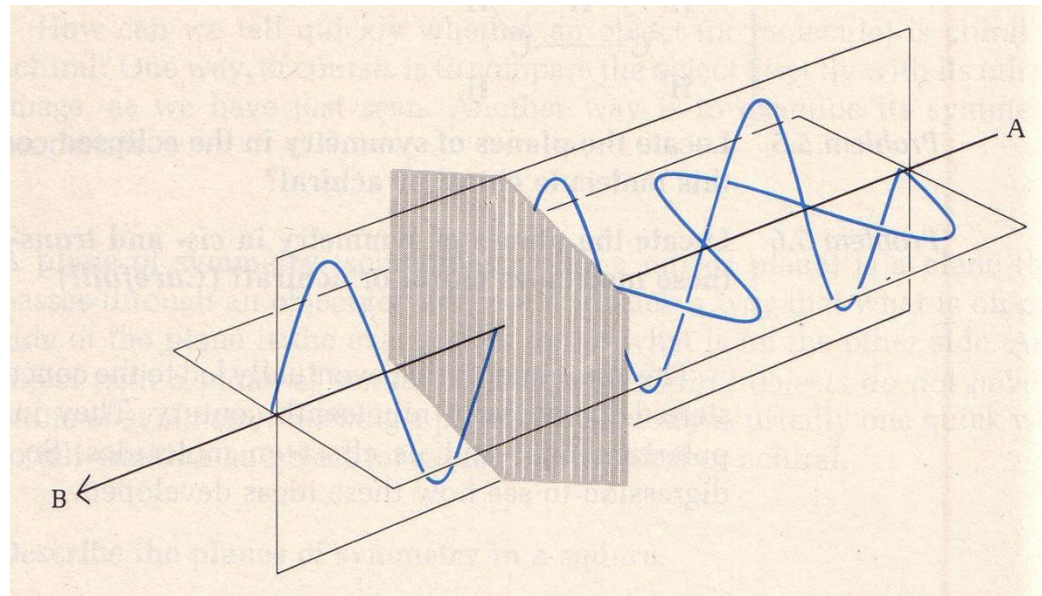
Polarizované světlo

Obyčejné světlo, které přichází k pozorovateli, kmitá ve všech možných rovinách.

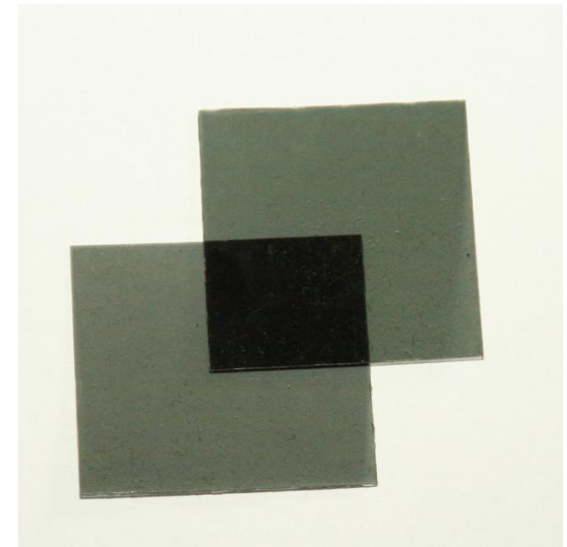
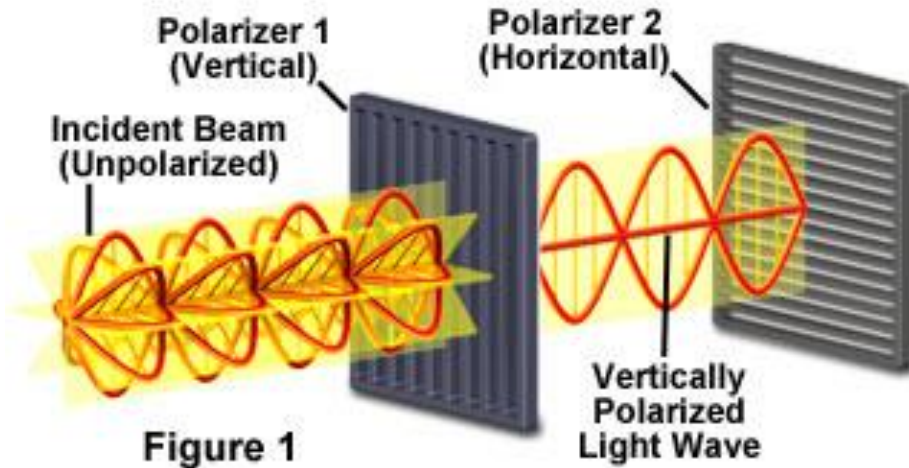
Paprsek AB je možné rozložit na horizontální (EF) a vertikální (CD) složky.



Pokud paprsek světla projde polarizačním hranolem, bude kmitat pouze v jedné rovině,



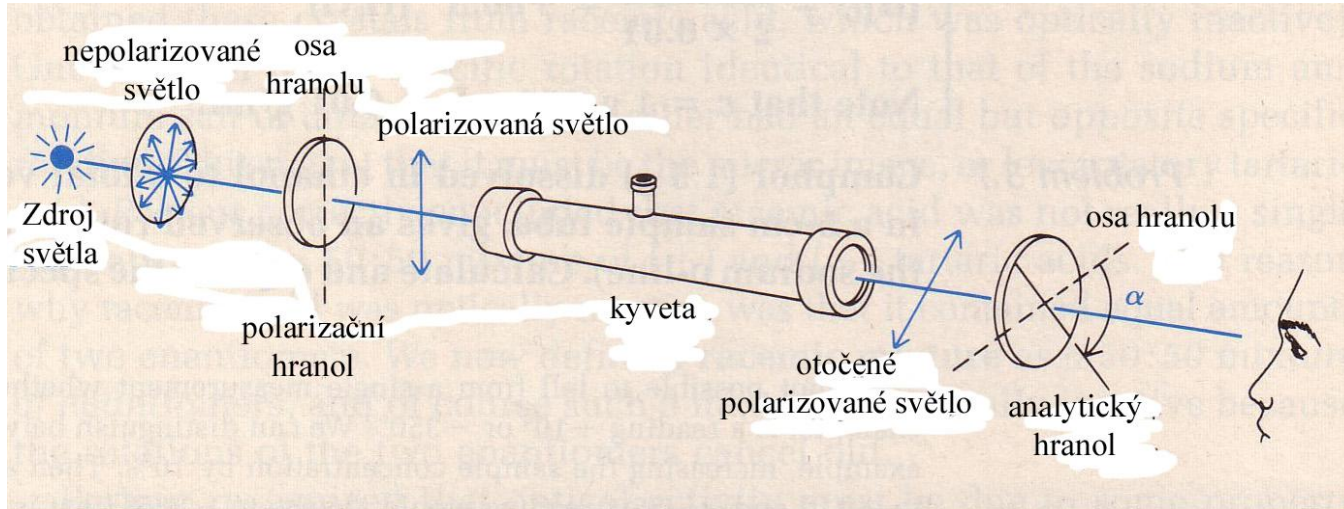
Polarization of Light Waves



Běžný paprsek světla projde dvěma polarizačními hranoly (clonami) pouze v případě, že jejich polarizační osy jsou rovnoběžné.

Pokud jsou vůči sobě kolmé, paprsek neprojde.

Optická aktivita - polarimetr



$$\text{specifická rotace} = [\alpha]_l^t = \frac{\alpha}{l \times c} \quad (\text{rozpouštědlo})$$

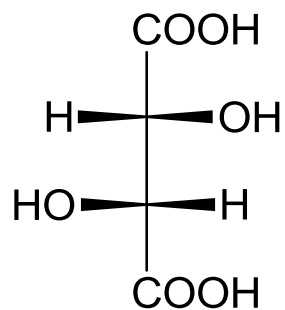
kde l je délka kyvety decimetrech,
 c – koncentrace v g/ml,
 t – teplota roztoku,
 l – vlnová délka použitého světla.

V závorce se uvádí použité rozpouštědlo.

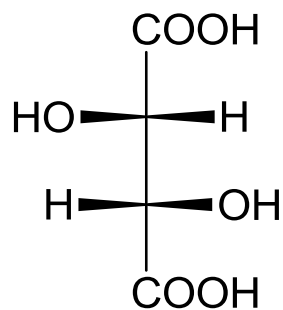
Měření se většinou provádí při laboratorní teplotě (20 °C) a jako zdroj světla se používá linie D sodíkové výbojky ($\lambda = 589.3 \text{ nm}$).

Pasteurovy experimenty

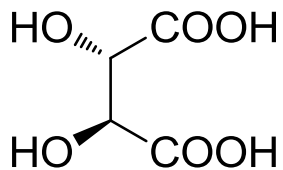
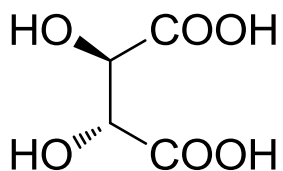
Krystalizace vínanu sodno-amonného



(+)-vinná kyselina



(-)-vinná kyselina



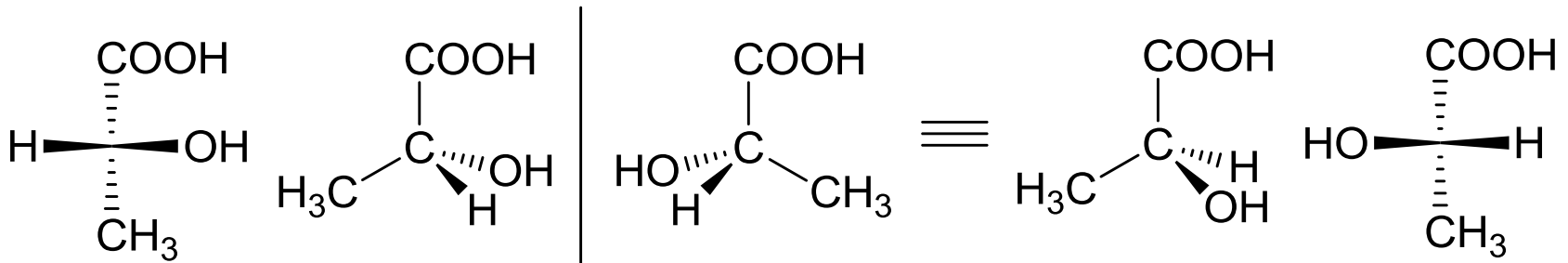
(+)-vinná kyselina
pravotočivá



(-)-vinná kyselina
levotočivá

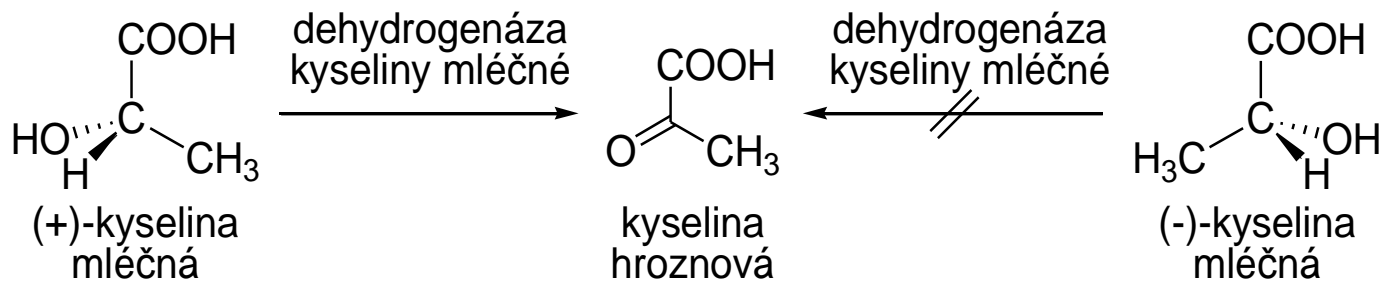
Racemická směs je směs enantiomerů v poměru 1:1 – není opticky aktivní.

Vlastnosti enantiomerů, kyselina mléčná



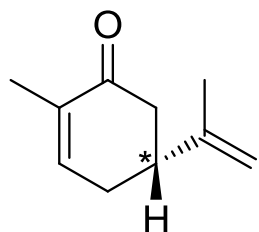
kyselina (-)-mléčná
 $[\alpha]_D^{25^\circ\text{C}} = -3.33 \text{ (H}_2\text{O)}$
t.t. 53 °C

kyselina (+)-mléčná
 $[\alpha]_D^{25^\circ\text{C}} = +3.33 \text{ (H}_2\text{O)}$
t.t. 53 °C



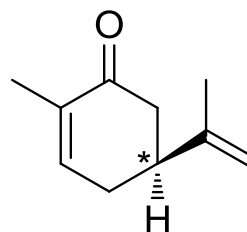
Chiralita a biologické vlastnosti

Vůně



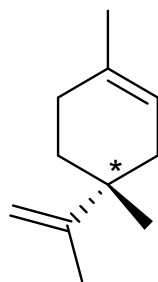
(-)-karvon

t.v. 231°C
pepermintová vůně

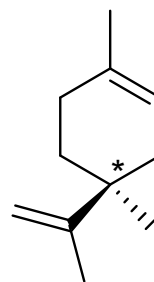


(+)-karvon

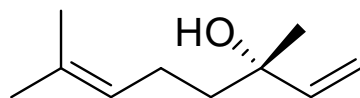
t.v. 231°C
kmínová vůně



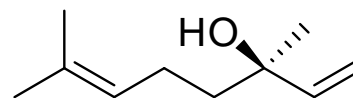
(+)-limonen
citrusová vůně



(-)-limonen
terpenická vůně

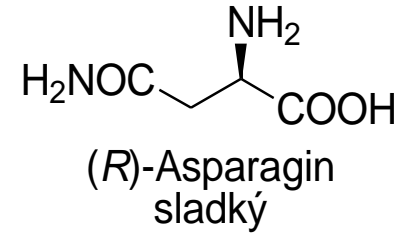
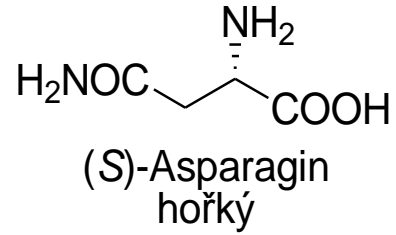


(*R*)-(-)-linalool
květinová vůně
s levandulovým podtextem

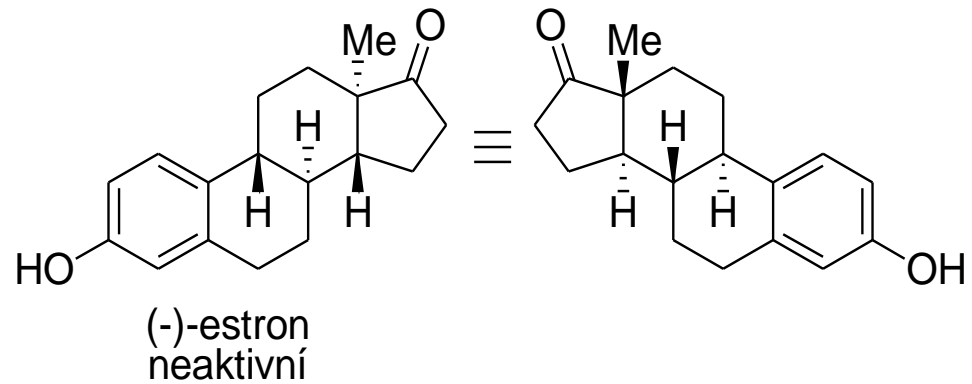
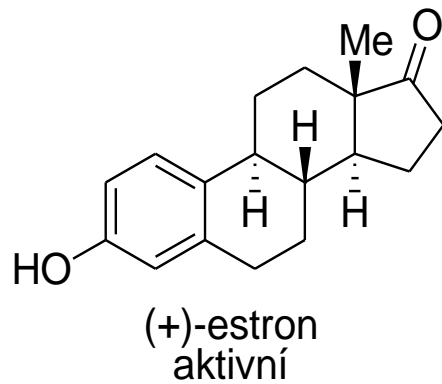


(*S*)-(+)-linalool
hořce nebo kyselé
pomerančová vůně

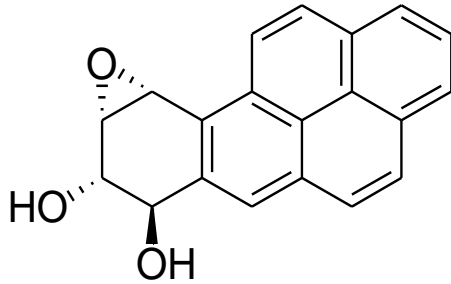
Chuť



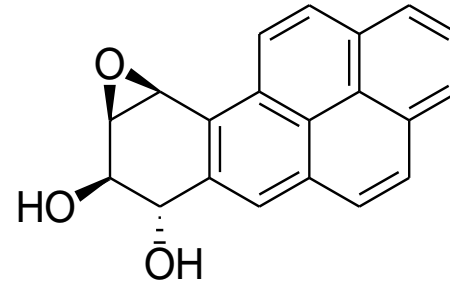
Hormony



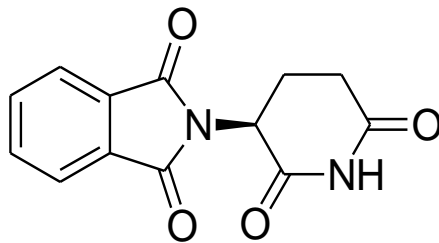
Další příklady



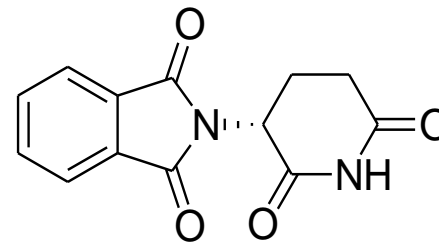
(+)-metabolit benzo[a]pyrenu
karcinogenní



(-)-metabolit benzo[a]pyrenu



(S)-thalidoimid
exterémně teratogenní



(R)-thalidoimid
sedativum

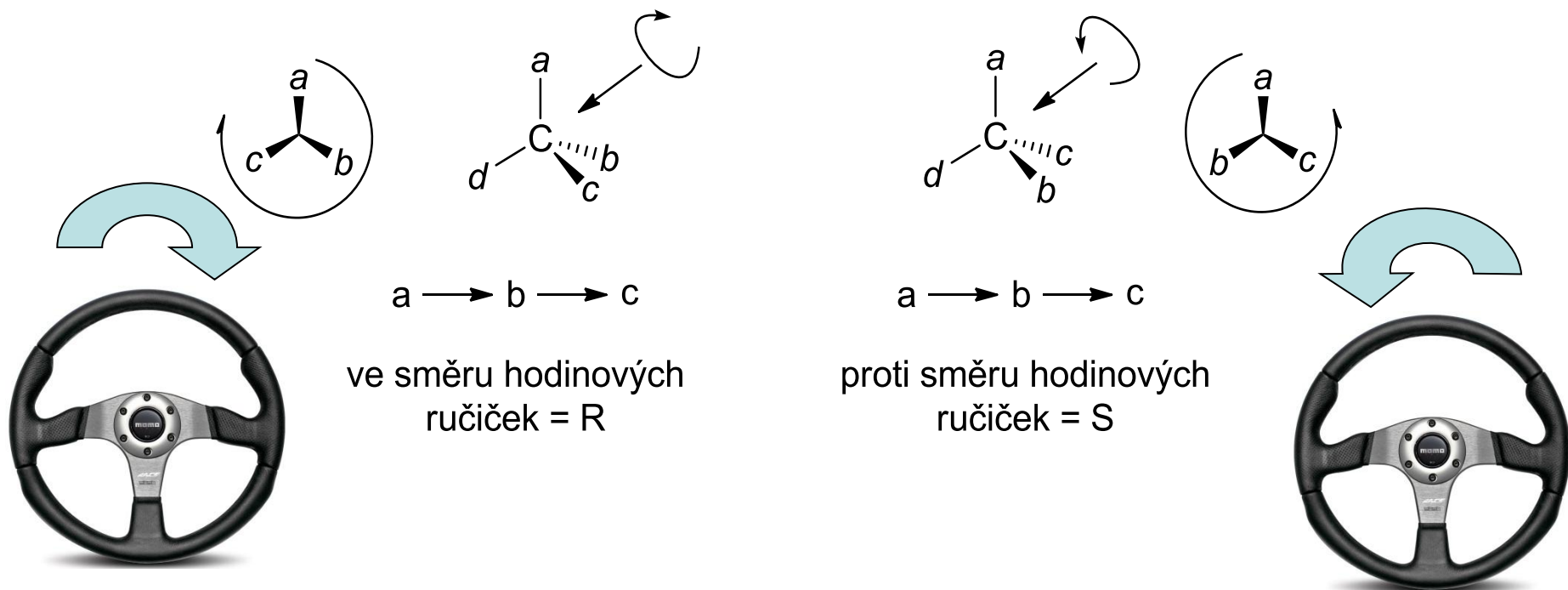
Konfigurace

Enantiomery se liší uspořádáním skupin kolem stereogenního centra.

Toto uspořádání se nazývá **konfigurace** stereogenního centra.

Konfigurační izomery – mají stereogenní centra s různou konfigurací

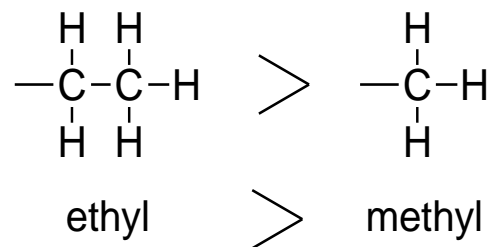
Pro zápis konfigurace se používá tzv. *R-S* nebo *Cahn-Ingold-Prelogovův* systém.



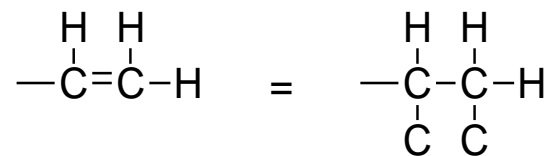
1. Priorita atomů se řídí atomovým číslem. Čím vyšší atomové číslo tím vyšší priorita.



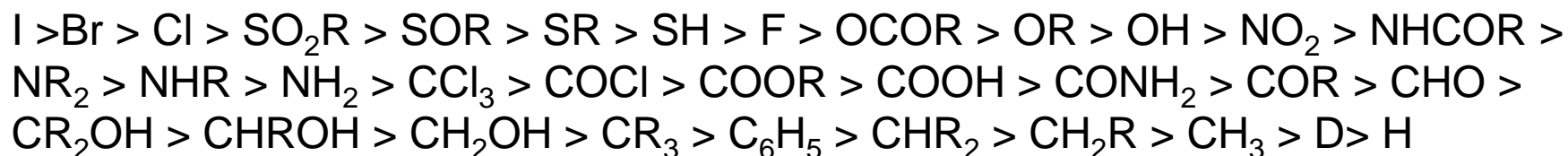
2. Pokud není možné určit prioritu podle pravidla 1 (např. dva atomy jsou stejné). Postupuje se podle stejného pravidla směrem od chirálního centra.

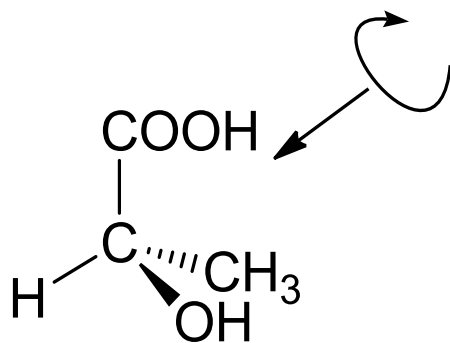


3. Násobné vazby se považují rovné násobkům jednoduchým vazeb.

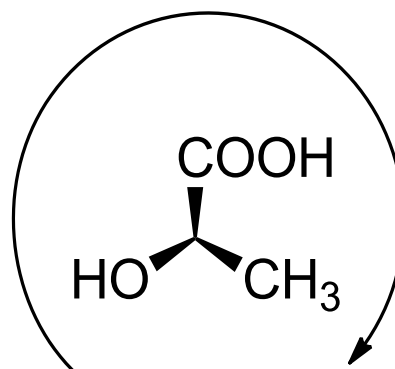


Pořadí důležitosti (priority) jednotlivých atomů a funkčních skupin:

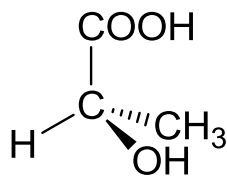




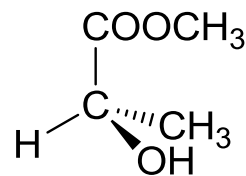
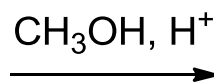
(-)-mléčná kyselina



R



kyselina (R)-(-)-mléčná

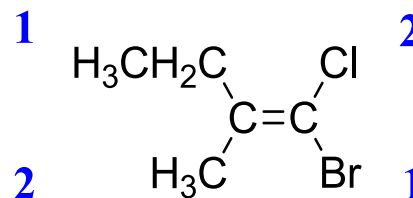
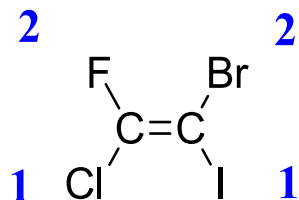


methyl (R)-(+)-laktát

R/S- stereodeskriptory nesouvisí se specifickou rotací!!!

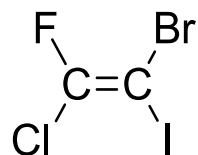
E-Z pravidla pro *cis-trans* izomerii na dvojn  vazb 

Cahn-Ingold-Prelogov v syst m je vhodn y i k popisu *cis* a *trans* izomerie.

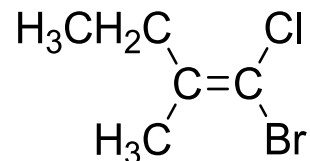


E (z n meck ho *entgegen*, proti)

Z (z n meck ho *zusammen*, spolu)

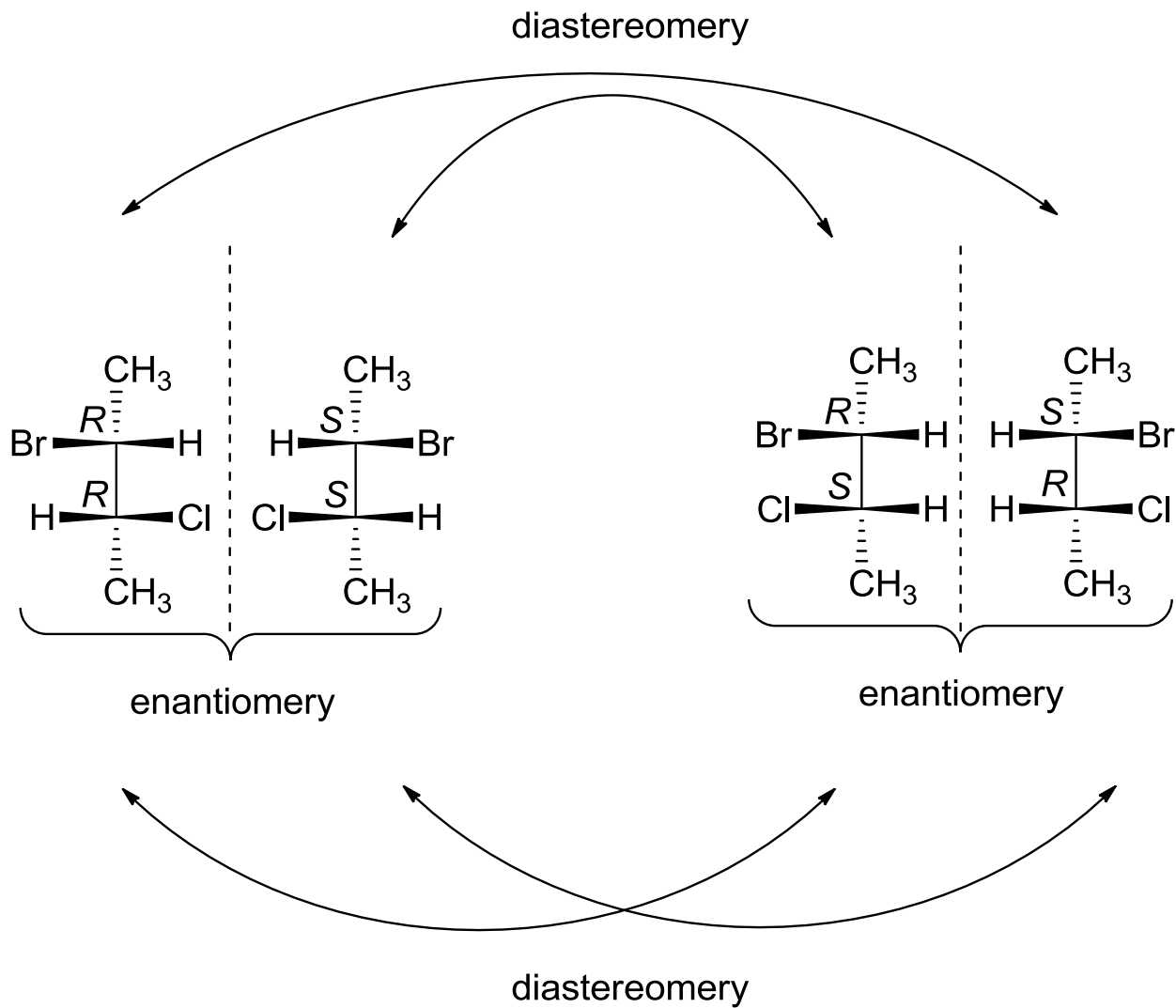


(*Z*)-1-brom-2-chlor-2-fluor-1-jodethen



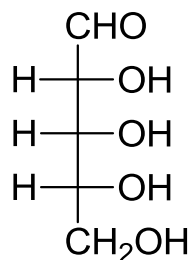
(*E*)-1-brom-1-chlor-2-methylbut-1-en

Sloučeniny s více než jedním stereogenním centrem – 2-brom-3-chlorbutan

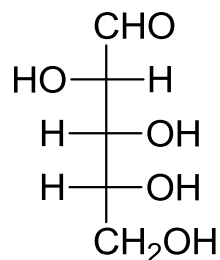


Jestliže má molekula n různých center chiralidy, může existovat až 2^n stereoizomerů.

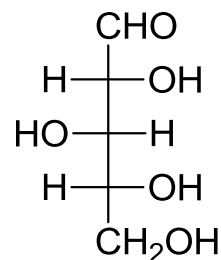
Z toho plyne, že může existovat 2^{n-1} enantiomerních párů.



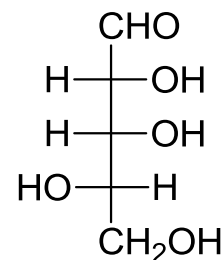
D-ribosa



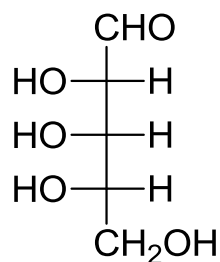
D-arabinosa



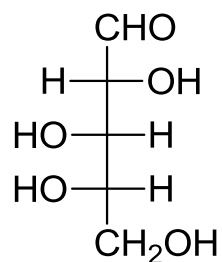
D-xylosa



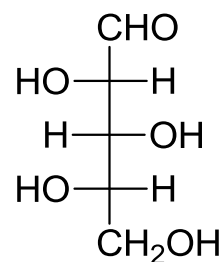
D-lyxosa



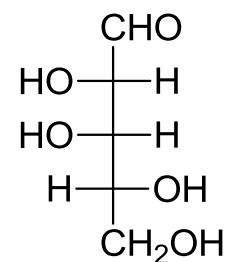
L-ribosa



L-arabinosa

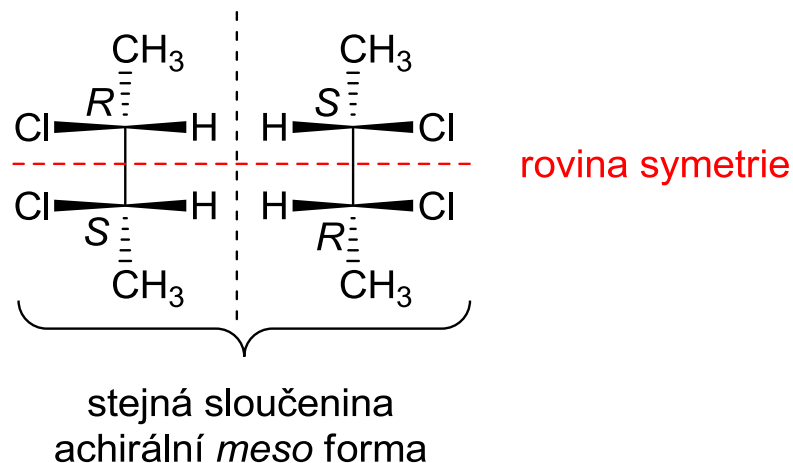
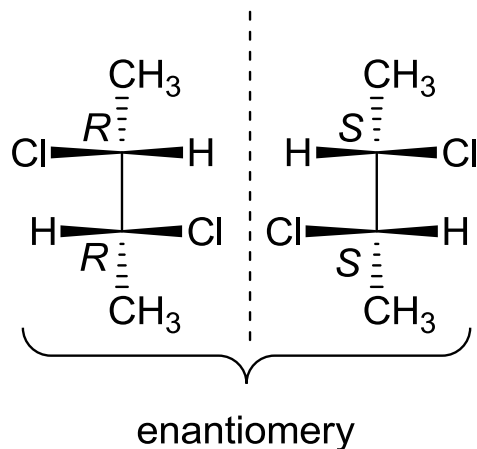


L-xylosa

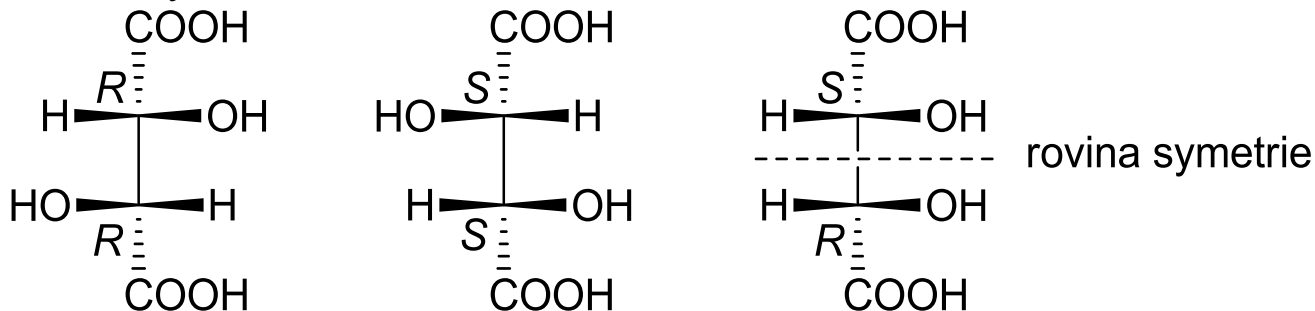


L-lyxosa

meso sloučeniny - 2,3-dichlorbutan

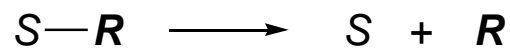
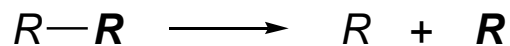
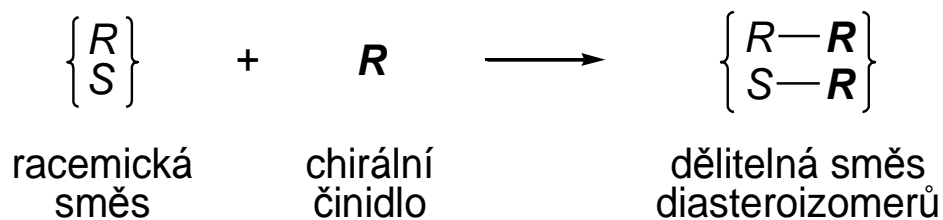
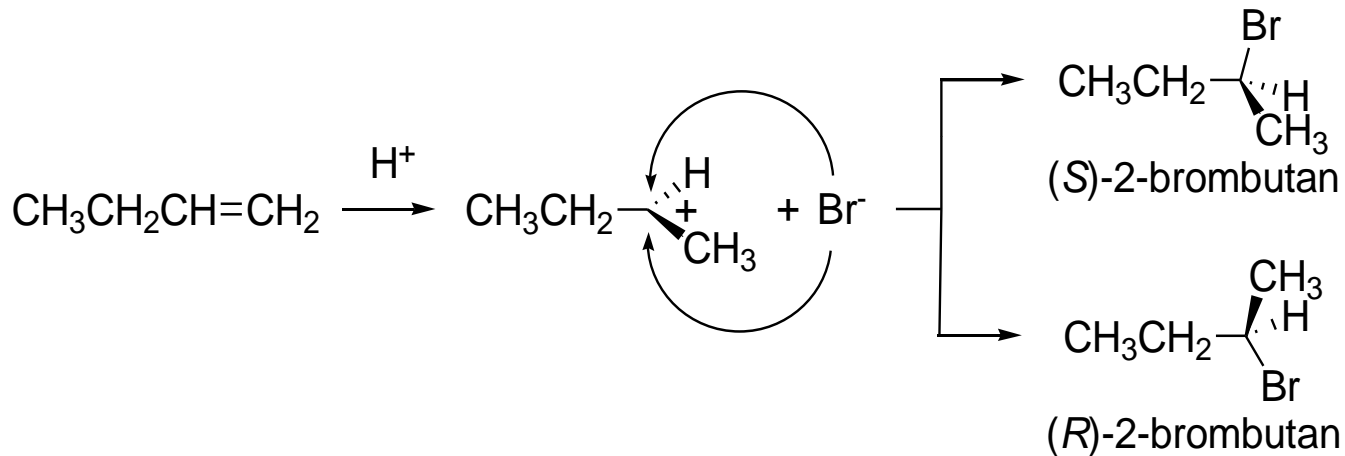
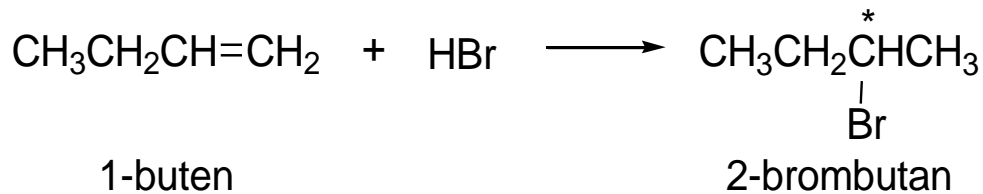


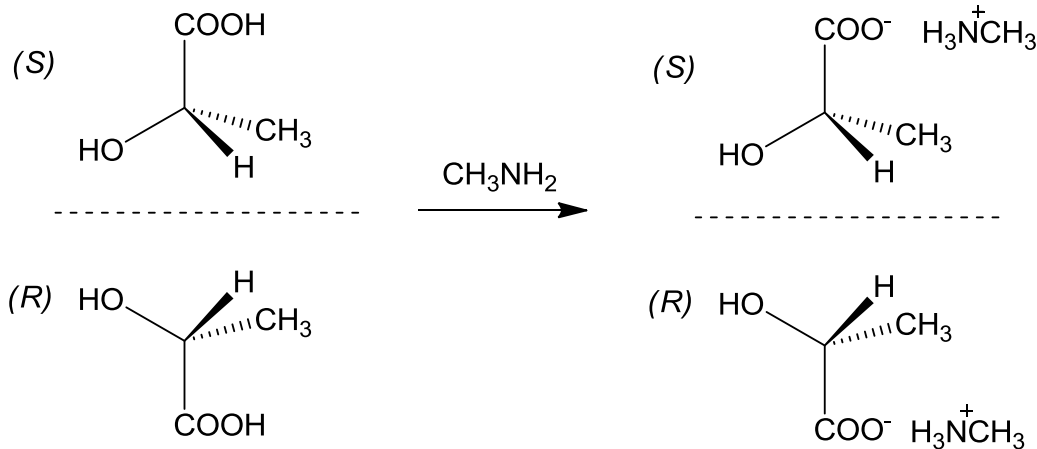
Meso sloučeniny jsou opticky neaktivní a achirální diastereoizomery sloučenin obsahující centra chiraloty.



konfigurace	(<i>R,R</i>)	(<i>S,S</i>)	<i>meso</i>
$[\alpha]_D^{20^\circ\text{C}}$	+ 12	- 12	0
teplota tání	170	170	140

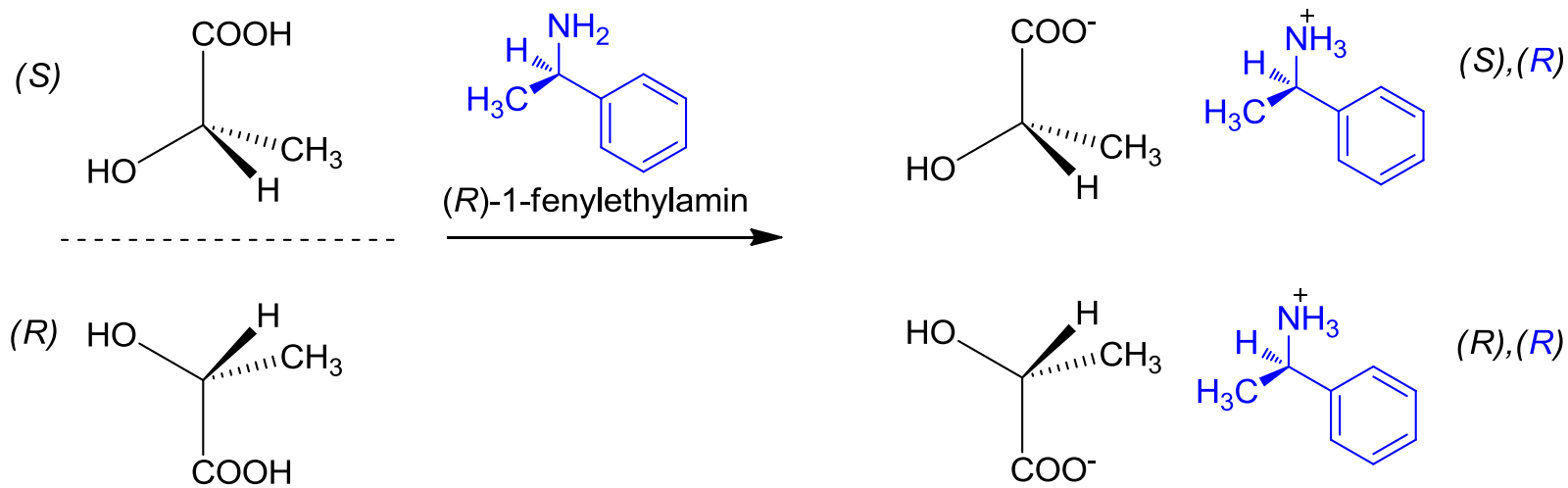
5.13. Dělení enantiomerů





Racemická směs

Racemická směs

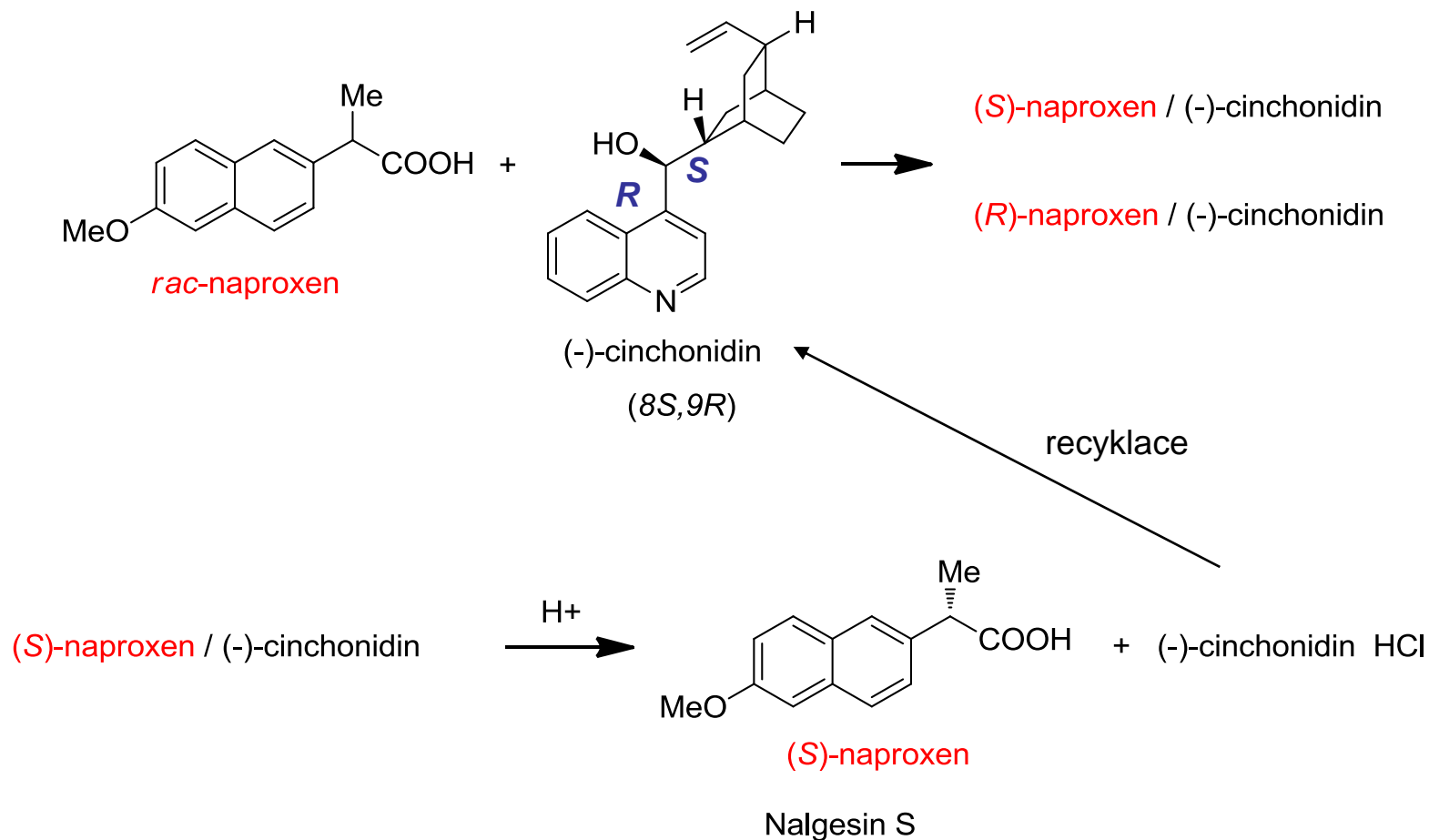


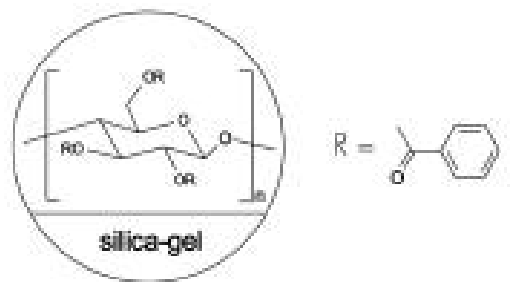
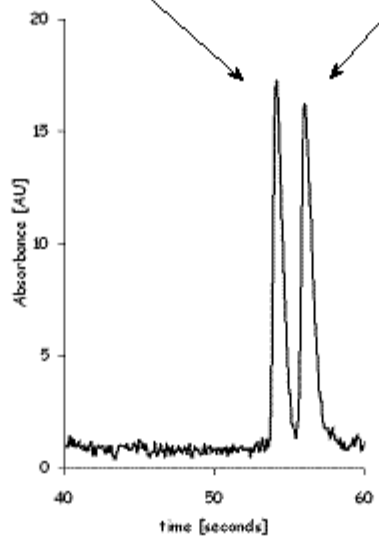
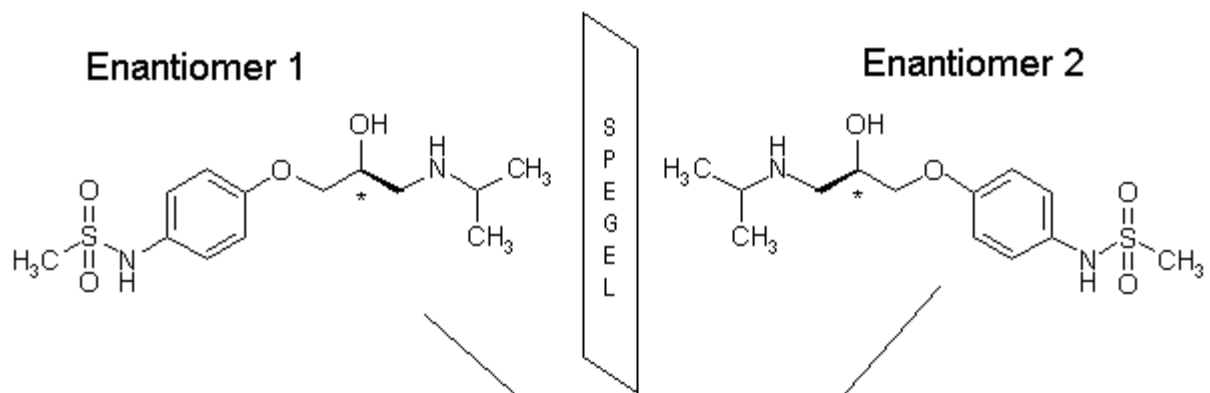
Racemická směs

Diastereomery

Naproxen – nesteroidní protizánětlivé léčivo

Dělení na enantiomery v posledním kroku syntézy





Enzymatic resolution

