

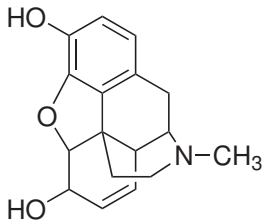
# Chemie pro fyzikální obory

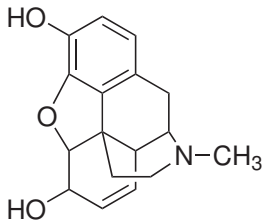
Jaromír Literák

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

27. dubna 2017

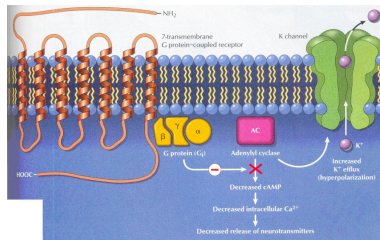
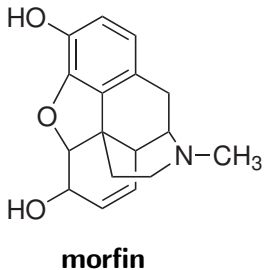


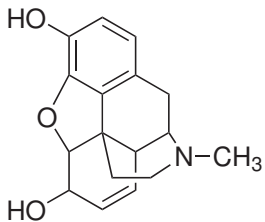




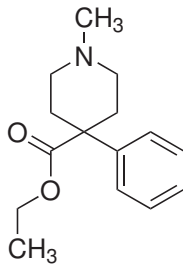
**morfin**



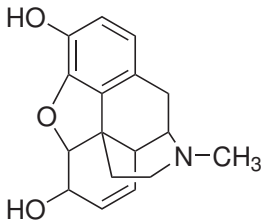




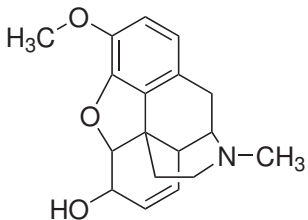
**morfin**



**pethidin**

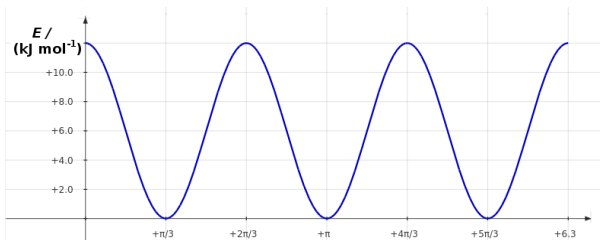
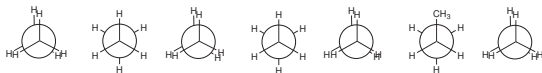
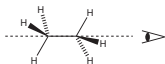


**morfin**



**kodein**

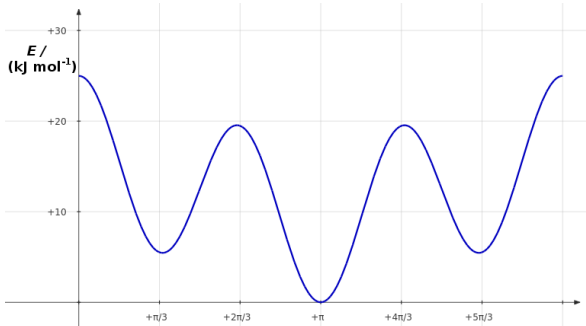
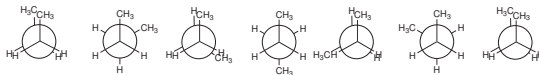
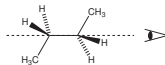
# Konformace ethanu



**Konformace** – jakékoliv prostorové uspořádání molekuly odvozené otočením kolem  $\sigma$ -vazby

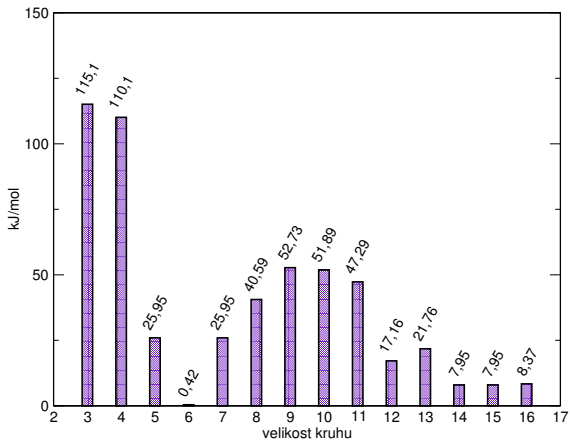
**Konformer** (konformační izomer) – lokální minimum

# Konformace butanu

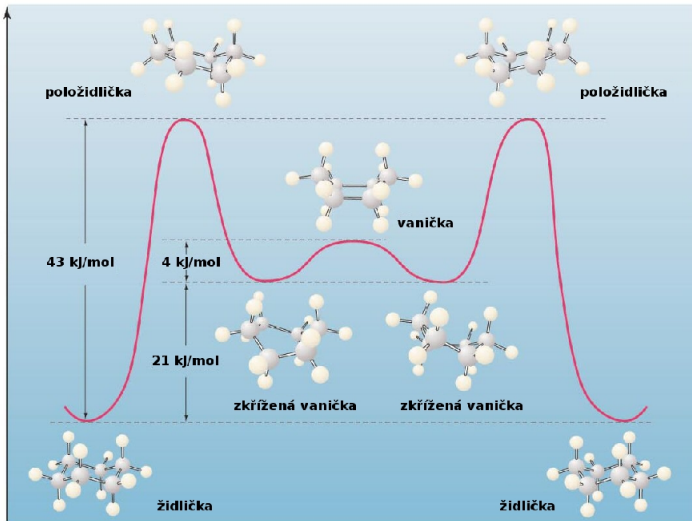




# Velikost pnutí cyklů u cykloalkanů



## Cyklohexan



## Axiální a ekvatoriální vazby



**axiální**



**ekvatoriální**

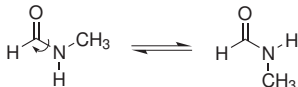
# Variabilita bariéry konformačního pohybu



12 kJ mol<sup>-1</sup>



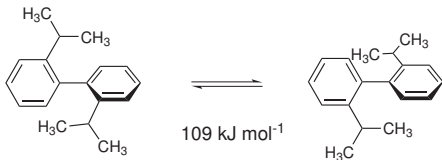
30 kJ mol<sup>-1</sup>



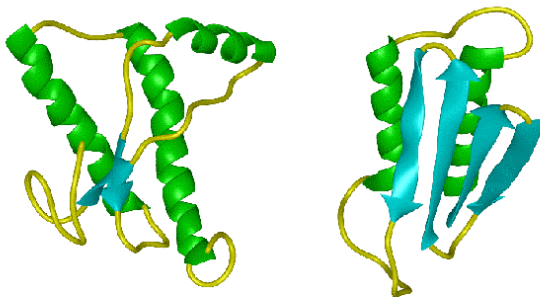
85 kJ mol<sup>-1</sup>



268 kJ mol<sup>-1</sup>

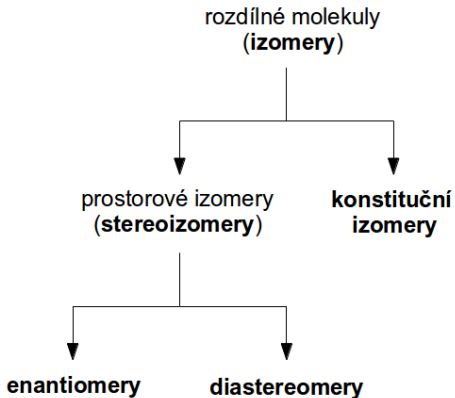


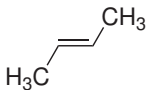
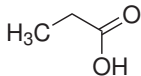
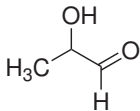
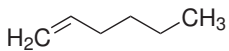
109 kJ mol<sup>-1</sup>



**PrP<sup>Sc</sup>**

## Izomery?

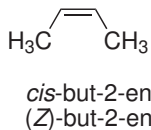
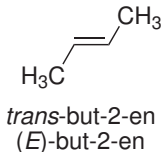




Zdrojem rozdílného prostorového uspořádání může být:

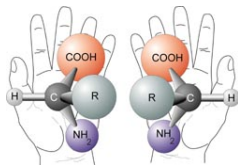
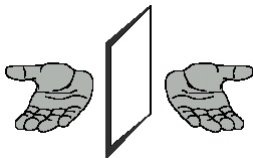
- **konformace** – prostorové uspořádání odvoditelné otáčením kolem  $\sigma$ -vazeb.
- **konfigurace** – prostorové uspořádání, které nelze odvodit konformačním pohybem.

**Stereogenní centrum** – část molekuly, která podmiňuje existenci stereoizomerů.



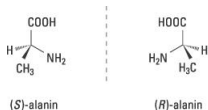


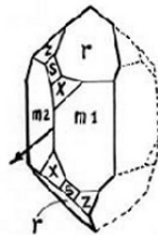
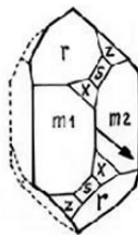
„Objekt neztotožnitelný se svým zrcadlovým obrazem“



$\chi\epsilon\iota\rho$  – ruka

Fenomén projevující se na mnoha úrovních – od chirality makroskopických objektů (**enantiomorfy**), přes chiralitu molekul (**enantiomery**) po chiralitu matematických objektů.



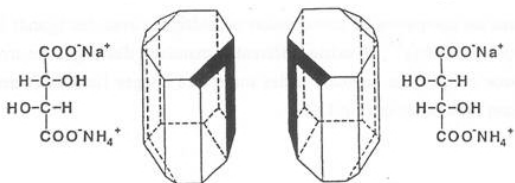




**1783** – **Immanuel Kant** diskutuje předměty, které zrcadlením poskytují neztotožnitelné obrazy.

**poč. 19. století** – francouzští fyzici **Arago** a **Biot** popisují stáčení roviny polarizovaného světla při průchodu krystalem křemene a některými kapalinami organického původu.

**1848** – **Louis Pasteur** rozdělil mechanicky krystaly vinanu sodno-amonného na enantiomery. Ukázal na spojitost chiralidy (dissymetrie) a optické aktivity, které byly do té doby spojeny s krystaly, s vlastnostmi jednotlivých molekul.

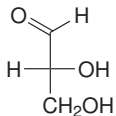


**1874** – **J. H. van 't Hoff** a **J. Le Bel**: tetraedrické uspořádání vazeb vycházejících z atomu uhlíku, chiralita spojena se čtyřmi různými substituenty atomu uhlíku.

**1884** – **lord Kelvin** zavádí pojem chiralita, jak jej dnes známe.

*„Atribut jakéhokoliv geometrického útvaru nebo množiny bodů, jehož obraz v ideálním zrcadle s ním nelze ztotožnit.“*

**1891 až 1894** – **Hermann Emil Fischer** určil konfiguraci všech známých cukrů a předpověděl existenci dalších možných isomerů.



**1951** – poprvé určena absolutní konfigurace chirální molekuly vinanu sodno-rubidného (**Johannes Martin Bijvoet**).

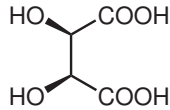
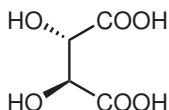
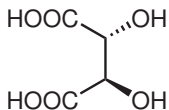
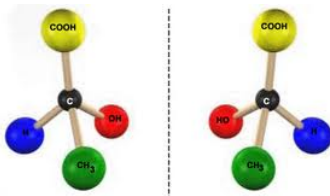
*„The result is that Emil Fisher's convention, which assigned the configuration of FIG. 2 to the dextrorotatory acid appears to answer the reality.“*



**1956** – předpověď (**Lee** a **Yang**) a experimentální prokázání (**Wu**) porušení parity slabé interakce.

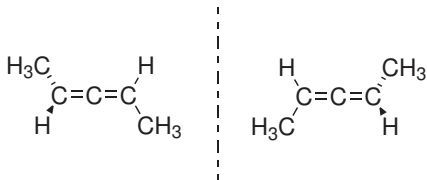
# Centrální chiralita

**Centrum chirality** – nejčastěji atom uhlíku nesoucí čtyři rozdílné substituenty.



Určující je přítomnost **roviny symetrie** v molekule.

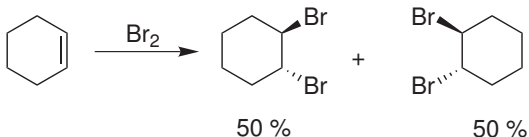
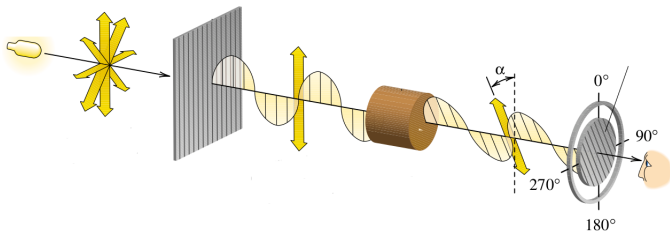
# Axiální chiralita





# Vlastnosti enantiomerů

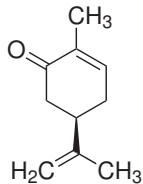
Enantiomery se neliší svými fyzikálně chemickými vlastnostmi – s výjimkou stáčení roviny polarizovaného světla (?).



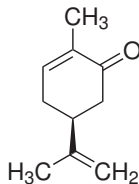
recemát

# Vlastnosti enantiomerů

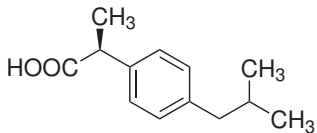
**Ale:**



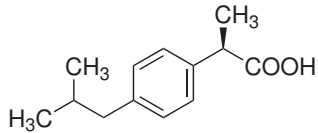
(*R*)-karvon  
máta



(*S*)-karvon  
kmín

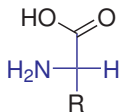
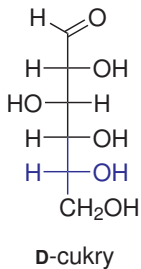


(*S*)-ibuprofen  
analgetikum



(*R*)-ibuprofen  
neaktivní

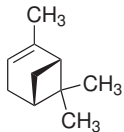
# Homochiralita života



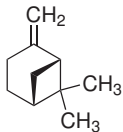
L-aminokyseliny



V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



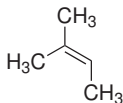
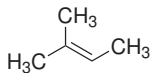
(+)- $\alpha$ -pinen



(+)- $\beta$ -pinen

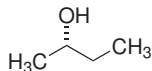
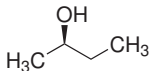
- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



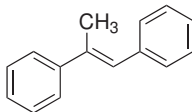
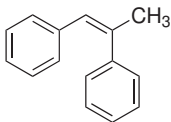
- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

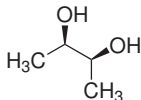
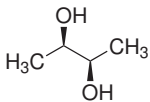
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery



V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



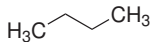
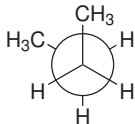
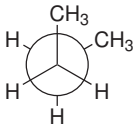
- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery