

C2150

Zpracování informací a vizualizace v chemii a biochemii

4. lekce (Reakční schémata)

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

Obsah

➤ **Stereogenní centra**

Absolutní konfigurace, CIP pravidla, procvičování

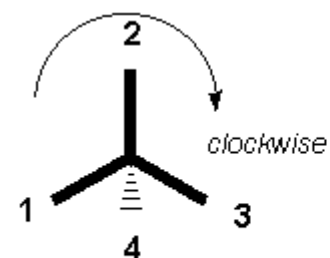
➤ **Reakční schémata**

typy reakcí, způsob zápisu

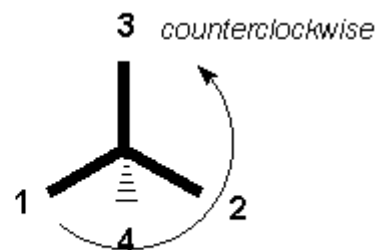
Opakování - Stereogenní centra

Za účelem jednoznačného označení stereoizomerů se používají **CIP (Cahn–Ingold–Prelog) prioritní pravidla**, které udávají prioritu pořadí ligandů

➤ absolutní konfigurace na stereogenních centrech (R/S)



R configuration

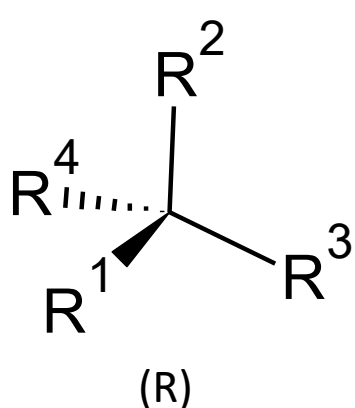


S configuration

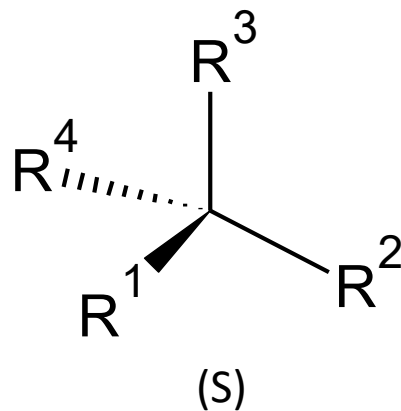
1 - skupina s nejvyšší prioritou

Fisherova projekce

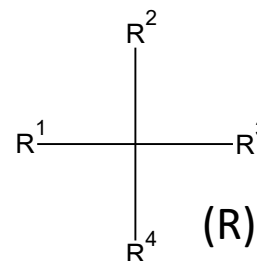
- svislice - za nákresnu
- horizontální čáry - před nákresnu



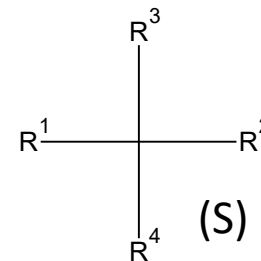
(R)



(S)



(R)

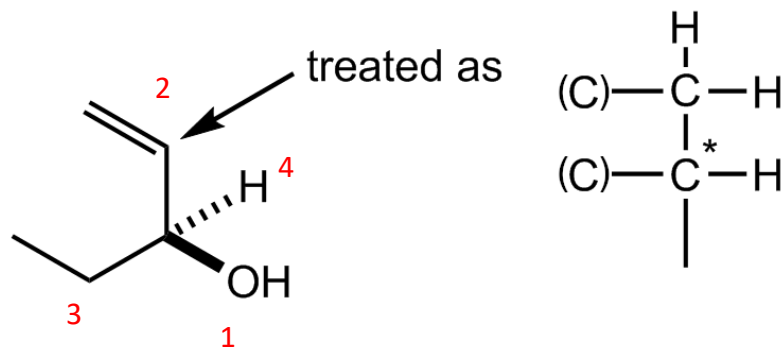


(S)

Opakování - Určení CIP priority

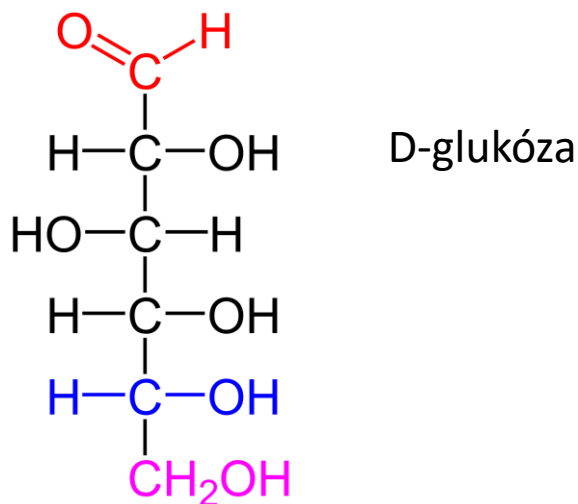
R/S a E/Z deskriptory se přiřazují pomocí systému pro řazení priorit skupin připojených ke každému stereocentru.

1. Porovnejte atomové číslo (Z) atomů přímo připojených ke stereocentru; skupina, která má atom s vyšším atomovým číslem, má vyšší prioritu.
2. V případě rovnosti musíme vzít v úvahu atomy ve vzdálenosti 2 od stereocentra - pro každou skupinu se vytvoří seznam atomů vázaných k atomu přímo připojenému ke stereocentru. Každý seznam je uspořádán v pořadí klesajícího atomového čísla. Poté se seznamy porovnají atom po atomu; při nejbližším rozdílu dostane vyšší prioritu skupina obsahující atom s vyšším atomovým číslem.
3. Tento postup se opakuje rekurzivně, pokaždé s atomy vzdálenými o jednu vazbu od stereocentra.



Cvičení 1

1. Určete absolutní konfiguraci na stereogenních centrech glukózy.



Reakční schémata

Cvičení 2

1. Ve zvoleném molekulárním editoru vytvořte schéma intra-intermolekulární criss-cross cykloadiční reakce z publikace [1]. Kromě samotné reakce, tj. přeměny látky **1** na **3**, zakreslete možný mechanismus reakce.

[1] Man, S.; Kulhanek, P.; Potacek, M.; Necas, M. New Fused Heterocycles by Combined Intra-Intermolecular Criss-Cross Cycloaddition of Nonsymmetrical Azines. *Tetrahedron Lett.* **2002**, 43 (36), 6431–6433. [https://doi.org/10.1016/S0040-4039\(02\)01378-3](https://doi.org/10.1016/S0040-4039(02)01378-3).

2. Ve zvoleném molekulárním editoru vytvořte schéma reakce katalyzované enzymem chorismát mutáza včetně znázornění předpokládaného tranzitního stavu. Zvolte vhodné označení jednotlivých struktur.