



Organická chemie pro biochemiky I

část 2 a 3

Temata přednášky

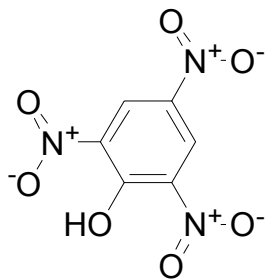
Nomenklatura organických sloučenin, historie, používané názvoslovné normy a jejich specifika (IUPAC, CAS, Beilstein), principy a typické příklady, moderní přístupy k zápisu chemických struktur a jejich převodu na „jednoznačné“ názvy a naopak, WLN, řetězce SMILES, CAS RN, ACX, názvoslovné programy

Uhlíkaté sloučeniny a chemická vazba, hybridizace sp sp^2 a sp^3 , druhy vazeb (σ , π), popis kovalentní vazby, polární vazba, aromaticita, induktivní, mezomerní a sterický efekt, struktura organické sloučeniny jako její prvořadý atribut pro interakce s biologickými systémy

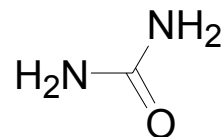
Názvosloví organických sloučenin

původní názvy sloučenin (kdy nebyla známa jejich struktura) velmi často odrážely vlastnosti či výskyt takové názvy někdy dodnes používáme a nazýváme je názvy triviálními

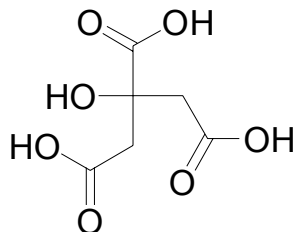
kyselina pikrová (pikros - hořký)



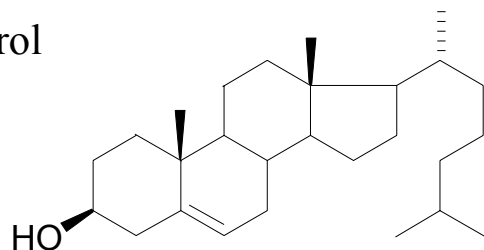
močovina



citronová kyselina



cholesterol



někdy tyto názvy slouží jako základ názvosloví systematického

Názvosloví organických sloučenin

během vývoje chemie se hodně používalo názvů

řeckých či z řečtiny odvozených

pikrová kyselina
dokosan

latinských či z latiny odvozených

acidum formicum formiát

arabských či z arabštiny odvozených

alkohol

včetně vlivů německých, francouzských aj.
atd. atd.

ve vzniklém zmatku byla na konferenci v Ženevě v r. 1892 položen základ systematického názvosloví tzv. ženevským názvoslovím, ze kterého se pod patronací IUPAC vyvinulo dnešní rigorosní systematické a vzhledem k pomalé práci komisí IUPAC pak i normy systémů CAS a Beilstein

na způsobu jednoznačného převodu zápisu trojrozměrné struktury na pojmový či znakový řetězec se stále pracuje

žádný ze stávajících systémů neumožňuje 100% převod struktura-“název“-struktura

Systematické názvosloví organických sloučenin

základní struktura - nejběžněji je to základní hydrid
nevětvená acyklická cyklická či kombinovaná struktura, která má k atomům
řetězce vázány pouze vodíky

k té může být vázán jeden jiný atom, řada atomů, řada atomů spojených do cyklu

operace názvosloví

substituční

nahradíme vodík či jiný atom na zákl. hydridu

I-23-ethoxypropan

skupinově funkční

pojmenujeme skupiny a názvoslovnou funkci

ethyl(propyl)ether

konjunktivní

spojuje části do celku

1*H*-indol-I-23-octová kyselina

záměnná

zaměňuje atom zákl. hydridu

I-23-azabicyklo[2.2.2]oktan

subtraktivní

odejme atom zákl. hydridu

10-norbornan

aditivní

přidá k zákl. hydridu

styrenoxid

koordinační

vychází z názvů koordinačních sloučenin

dichlorbis(triethylfosfan)platina

vazebné číslo prvku

v zásadě jde o teoretickou možnost připojení vodíku k jednoduchým vazbám

standardní vazebné číslo je určeno definicí

3	B
4	C Si Ge Sn Pb
3	N P As Sb Bi
2	O S Se Te Po
1	F Cl Br I At

nestandardní vazebné číslo

může být libovolné a značí se symbolem λ^n

$\text{CH}_3\text{-SH}_5$ methyl- λ^6 -sulfan

formálně kumulované dvojně vazby

-CH=C=CH- označí se symbolem δ^c

vznik cyklu a jeho změny

cyklo-

uzavření cyklu

hexan \rightarrow cyklohexan

$5\beta,9\beta$ -androstan \rightarrow 9,19-cyklo- $5\beta,9\beta$ -androstan

seko-

rozštěpení cyklu s přidáním „vodíků“

5β -androstan \rightarrow 2,3-seko- 5β -androstan

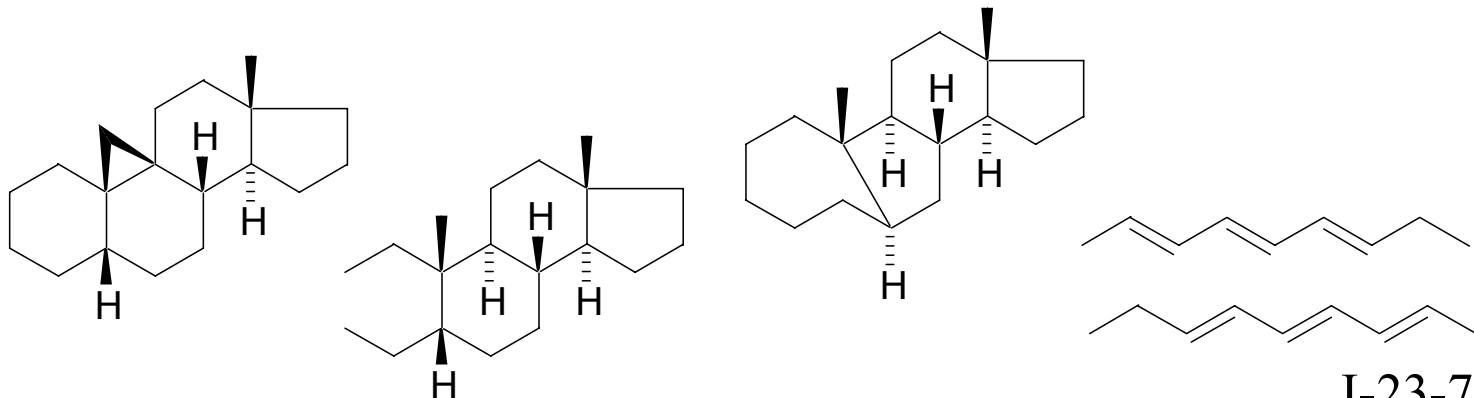
abeo-

přesmyknutí základní struktury

5α -androstan \rightarrow 10(5 \rightarrow 6)abeo-6 α (H)-androstan

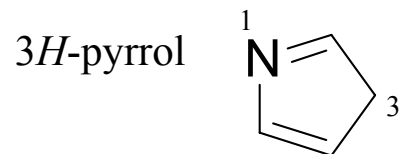
retro-

posun všech dvojných a jednoduchých vazeb v konjugovaném polyenu



vyznačený vodík

pomůže specifikovat polohy dvojných vazeb, píše se kursivou



takový vodík vyznačuje stav, kdy oproti tomu, kdy dvojná vazba by byla v dotčené poloze „přidáváme jeden nadbytečný“ vodík

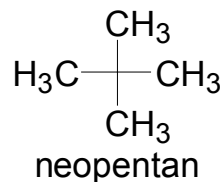
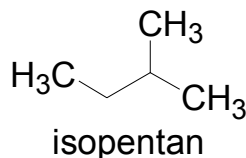
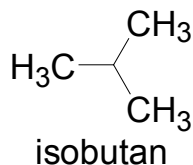
tak specifikujeme, který tautomer (v tomto případě pyrrolu) máme na mysli

vyznačený vodík uvádíme obvykle před názvem základního hydridu

základní hydridy

dříve se označoval jako „matečná sloučenina“

acyklické základní hydridy jsou vždy nevětvené (výjimkou je několik povolených názvů „triviálních“ (např. isobutan, isopentan, neopentan)



tyto struktury se nedoporučují používat pro odvození substitučních derivátů

jednojaderné hydridy - příklady

BH_3	boran
SiH_4	silan
OH_2	oxidan (voda)
SH_2	sulfan

CH_4	methan
NH_3	azan (amoniak)
ClH	chloran (chlorovodík)

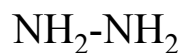
acyklické vícejaderné hydridy



heptan



trikosan



diazan



pentasilan

heterogenní hydridy

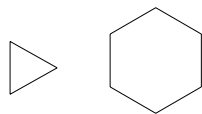


2,4,8,10-tetraoxaundekan



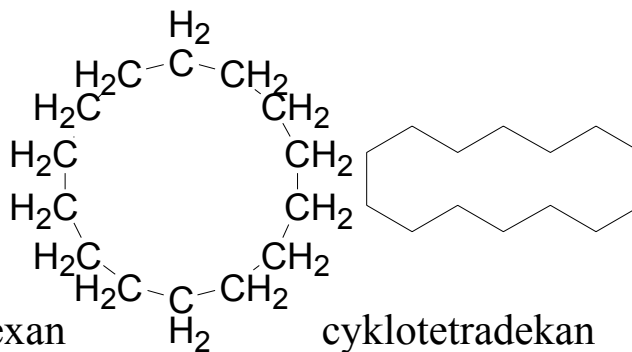
disilazan

uhlovodíky

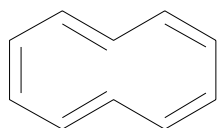


cyklopropan

cyklohexan

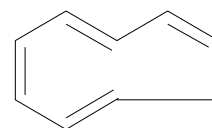


cyklotetradekan



cyklodekapaen

[10]annulen

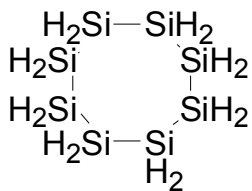


cyklonona-1,3,5,8-tetraen

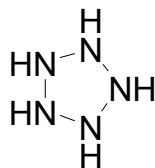
1*H*-[9]annulen

nesubstituované monocyklické polyeny s maximálním počtem nekumulovaných dvojných vazeb o více než 6 uhlících jsou [n]annuleny

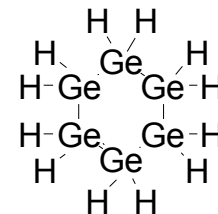
cyklické neuhlovodíkové hydridy



cyklooktasilan



cyklopentaazan



cyklohexagerman

heterocykly, Hantzschův-Widmanův systém

velikost	nenasyc.	nasyc.	velikost	nenasyc.	nasyc.
3	iren / irin	iran / iridin	7	epin	epan
4	et	etan / etidin	8	ocin	okan
5	ol	olan / olidin	9	onin	onan
6	in / inin	an / inan	10	ecin	ekan

kyslík

oxa

síra

thia

dusík

aza

fosfor

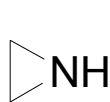
fosfa

křemík

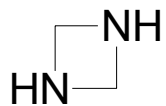
silá

bor

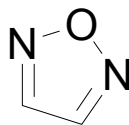
bora



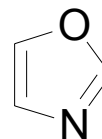
aziridin



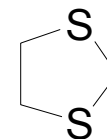
1,3-diazetidín



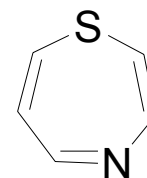
1,2,5-oxadiazol



1,3-oxazol



1,3-dithiolan



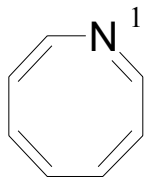
1,4-thizaepín

číslování heterocyklů

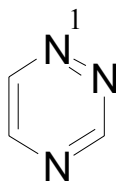
je-li jeden heteroatom má nejnižší číslo (lokant)

jsou-li dva mají taková čísla aby byla nejnižší

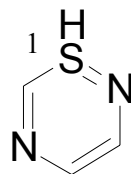
pokud obsahuje různé heteroatomy je nejnižší lokan u toho, který je v definiční tabulce nejvýše (pomůcka OSN)



azocin

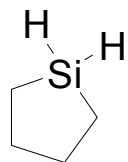


1,2,4-triazin

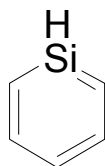


6*H*-1,2,5-thiadiazin
nikoli
2,1,4- či 1,3,6-

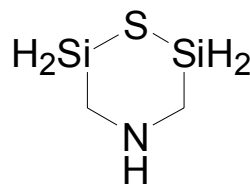
záměnný způsob



silacyklopentan
silolan



silabenzen
silin

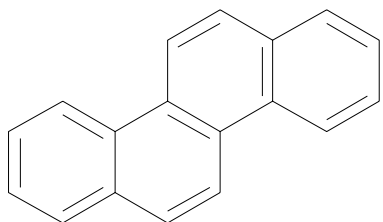


I-23-thia-4-aza-2,6-sisilacyklohexan
[1,4,2,6]thiazadisilinan

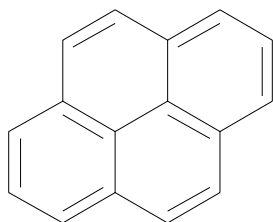
kondenzované kruhy

2 spoločné atomy *ortho*-kondenzované

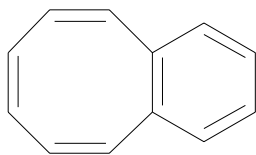
hlavní složka je taková pro kterou existuje triviální nebo polosystematický název
přednost má heterocyklus a větší kruh



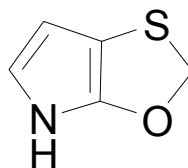
ortho



ortho,peri

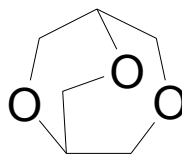
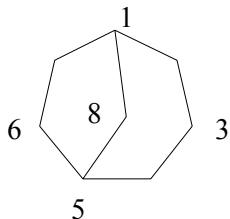


benzo[8]annulen
benzocyklookten



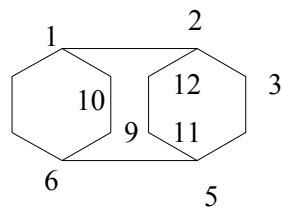
4*H*-[1,3]oxathio[5,4-*b*]pyrrol

mostované cykly



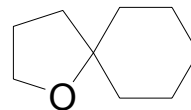
bicyklo[3.2.1]oktan 3,6,8-trioxa-bicyklo[3.2.2]nonan

polycyklické systémy s můstky



tricyklo[4.2.2.2^{2,5}]dodekan

spirosloučeniny

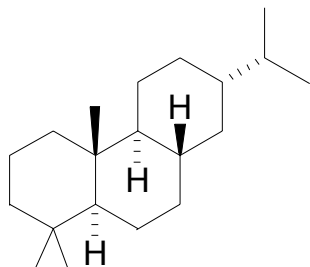


I-23-oxa-spiro[4.5]dekan

číslování začíná na menším kruhu atomem vedle spiroatomu

základní hydridy přírodních látek

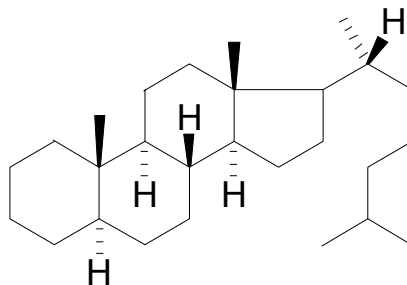
terpeny



abietan

7-isopropyl-1,1,4a-trimethyl-tetradekahydro-fenantren

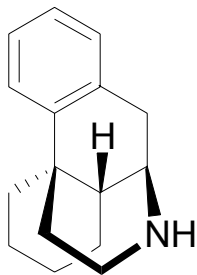
steroidy



5 α -cholestan

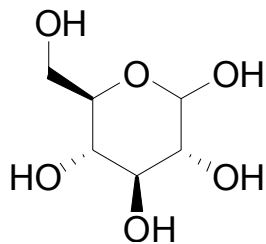
17-(1,5-dimethyl-hexyl)-10,13-dimethyl-hexadekahydro-cyklopenta[a]fenanthren

alkaloidy



morfinan

cukry

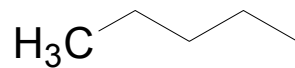


D-glukosa

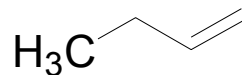
6-hydroxymethyl-tetrahydro-pyran-2,3,4,5-tetraol

předponové názvy odvozené ze základních hydridů

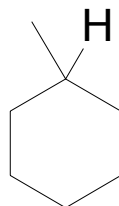
pentyl-



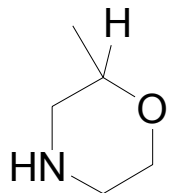
propan-1-23-yliden-



cyklohexyl-



morfolin-2-yl



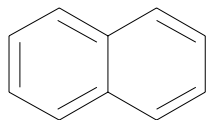
charakteristické (funkční) skupiny

nenasycenost

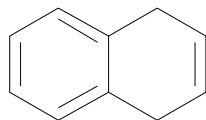
žádná	-an	
dvojná vazba	-en	-adien, -atrien, -atetraen ...
trojná vazba	-yn (dříve -in)	-adiyn ...

nasycení (stav hydrogenace, zavedení dvou vodíků)

dihydro-



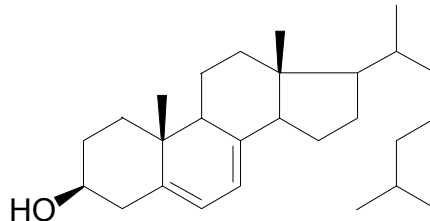
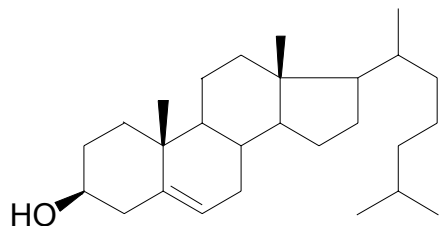
naftalen



1,4-dihydronaftalen

zavedení dvojně vazby (formálně odstranění dvou vodíků)

didehydro-



7,8-didehydrocholesterol
(cholesta-5,7-dien-3 β -ol)

charakteristické (funkční) skupiny

acylhalogenidy	-CO-Hal	halogenkarbonyl-	-oylhalogenid
	-(C)O-Hal		-karbonylhalogenid
aldehydy	-CHO	formyl-	-karbaldehyd
	-(C)HO	oxo-	-al
alkoholy, fenoly	-OH	hydroxy-	-ol
alkoholáty a fenoláty	-O ⁻	oxido-	-olát
amidy	-CO-NH ₂	karbamolyl-	-karboxamid
	-(C)O-NH ₂		-amid
amidiny	-C(=N)-NH ₂	karbamimidoyl-	-karboximidamid
	-(C)(=N)-NH ₂		-imidamid
aminy	-NH ₂	amino-	-amin
estery (karbox. kys.)	-COOR	R-oxykarbonyl-	R..-karboxylát
	-(C)OOR		R...-oát
ethery	-OR	R-oxy-	-
hydroperoxydy	-O-OH	hydroperoxy-	-
iminy	=NH	imino-	-imin
	=NR	R-imino-	

charakteristické (funkční) skupiny

karboxylové kyseliny	-COOH -(C)OH	karboxy-	-karboxylová kyselina -ová kyselina
karboxyláty	-COO ⁻ -(C)O ⁻	karboxylato-	-karboxylát -oát
ketony	>C=O	oxo-	-on
nitrily	-C≡N -(C)≡N	kyan-	-karbonitril -nitril
peroxydy	-O-OR	R-peroxy-	-
soli (karbox. kyselin)	-COO ⁻ M ⁺ -(C)OO ⁻ M ⁺	-	(kation) ... -karboxylát (kation) ... -át
sulfidy	-SR	R-sulfanyl-	-
sulfonové kyseliny	-SO ₂ -OH	sulfo-	-sulfonová kyselina
sulfonáty	-SO ₂ -O ⁻	sulfonato-	-sulfonát
thioly	-SH	sulfanyl-	-thiol
thioláty	-S ⁻	sulfido-	-thiolát

atom uhlíku (C) v závorce nepatří do skupiny

funkční záměna

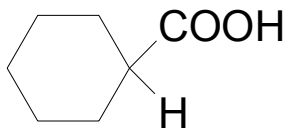
záměnu hydroxyskupiny či atomu kyslíku jinými atomy lze popsat předponami nebo infixy

$\text{CH}_3\text{-COOH}$ octová kyselina

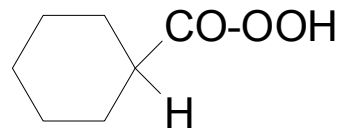
$\text{CH}_3\text{-COSH}$ thiooctová S-kyselina
 $\text{CH}_3\text{-CSOH}$ thiooctová O-kyselina

$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COOH}$
pentanová kyselina

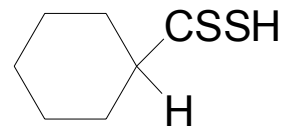
$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-COSH}$
pentanthiová kyselina
 $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-C(=N)-OH}$
pentanimidová kyselina



cyklohexankarboxylová kyselina



cyklohexanperoxykarboxylová kyselina



cyklohexankarbodithiová kyselina

důležitost funkčních skupin dle definice
(pouze jedna [kromě -en, -yn, -ium, -id, -yl]a to nejdůležitější skupina
smí být vyjádřena příponou)

radikály,
anionty, kationty, zwitteriontové sloučeniny
kyseliny, peroxy-, S, Se,
anhydridy
estery
halogenidy kyselin
amidy
hydrazidy
imidy
nitrily
aldehydy, thio-, seleno- ...
ketony, S, Se, Te ...
alkoholy, fenoly, thioly, selenoly ...
hydroperoxydy
aminy
iminy
hydraziny, fosfany,
ethery, sulfidy, selenidy ...
peroxydy, disulfidy, diselenidy ...



A Division of the American Chemical Society

The Latest CAS Registry Number® and Substance Count

Date	Sun Feb 3 05:09:09 EST 2002
Count	19,251,195 organic and inorganic substances
	16,894,487 sequences
Total	36,145,682 chemical substance registrations
CAS RN	389104-08-9 is the most recent CAS Registry Number



Jak se CAS Registry Numbers přidělují?

CAS RN je přiděleno každé látce když je zařazena do databáze CAS REGISTRY. Čísla se přidělují v pořadí pro každou novou látku, kterou pracovník CAS zařadí do databáze.

Co je to CAS Registry Number

Každé CAS Registry Number

- je jednoznačný číselný identifikátor,
- označuje pouze jedinou sloučeninu,
- nemá žádný chemický význam,
- je pro danou sloučeninu „propustkou“ do informačních bank.

Jak CAS RN vypadá?

CAS RN je numerický identifikátor skládající se z max. 9 číslic, rozdělený pomlčkami na 3 části:

- číslice vpravo je kontrolní znak ověřující pravost CAS RN
- jako příklad uveďme 58-08-2, což je CAS RN pro kofein.



Databáze CAS obsahuje nejrůznější entity, jako

- organické sloučeniny
- anorganické sloučeniny
- kovy
- slitiny
- minerály
- koordinační sloučeniny
- organokovové sloučeniny
- prvky
- isotopey
- jaderné částice
- proteiny a nukleové kyseliny
- polymery
- nestrukturované látky (Nonstructurable materials - UVCBs)



A Division of the American Chemical Society

Protože CAS RN nejsou závislé na jakémkoliv systému chemického názvosloví mohou

- poskytovat spojnici přes tyto systémy
- sloužit jako mezinárodní systém identifikátorů chemických látek používaných vědci, průmyslem i regulačními orgány

Chemické sloučeniny mohou být popsány rozličným způsobem:

- molekulárním vzorcem,
 - strukturním vzorcem
 - systematickým názvem
 - generickým jménem, vlastním názvem či chráněným názvem a triviálním názvem
- CAS Registry Number, je unikátní a specifické pouze pro jednu jedinou látku bez ohledu na to jakým jiným způsobem může být identifikována

Právní normy (m.j.) používají CAS RN pro sledování či definici látel neb:

- jsou jedinečné
- mohou být snadno ověřeny
- jsou mezinárodně uznané

ACX Number

Číslo ACX N je unikátní identifikátor a registrační číslo pro sloučeniny v databázi ChemACX, ChemFinder.Com

Čísla ACX N mohou být rozšířena tak, že udávají fyzikální vlastnosti a mohou být dále rozšířena např. o výrobce, kvalitu a velikost balení. V zásadě mohou odkazovat na libovolný údaj, např. na citaci v literatuře.

Databáze ChemFinder.Com zobrazuje část definujících vlastností sloučeniny pro číslo ACX , které je abstraktní reprezentací této sloučeniny.

www.chemfinder.com

DOT Number

U.S. Department of Transportation. A single substance may have multiple codes, depending on its concentration, physical state, etc.

EPA Code

U.S. Environmental Protection Agency to designate regulated contaminants in waste. A single substance may have multiple codes, depending on its concentration, physical state, etc.

RTECS

U.S. Registry of Toxic Effects of Chemical Substances, a database compiled, maintained, and updated by the National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH).

EINECS

European Inventory of Existing Commercial Chemical Substances by Official Journal of the European Communities

ELINCS

European List of Notified Chemical Substances. Substances entering commerce in the European Economic Community

CAS Registry Number

2-acetylthiazolidin

67399-73-9

WLN - Wieswesserův řádkový zápis

5-chlor-2-methylfenol

QRCGFO1

EINECS/ELINCSN-ethyl-N'-isopropyl-6-methylthio-
1,3,5-triazin-2,4-diyldiamin

212-634-7

ACX

chlorbenzen

X1001545-9

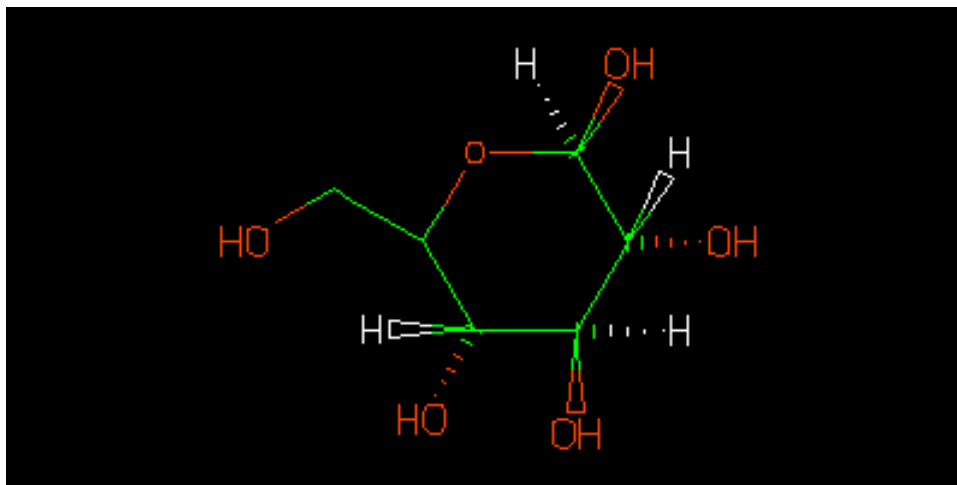
SMILES

benzen

C1=CC=CC=C1

glukosa

[H][C@](C([H])(CO)O[C@@]([H])(O)[C@@]1(O)[H])(O)[C@@]1(O)[H]



[H][C@](C([H])(CO)O[C@@]([H])(O)[C@@]1(O)[H])(O)[C@@]1(O)[H]

Simplified Molecular Input Line Entry Specification

SMILES

je řádkový zápis valenčního modelu molekuly

Názvoslovné programy

ACD Name
ACD

podle názvosloví IUPAC

ACD INDEX Name
ACD

podle názvosloví CAS

I-Lab
ACD

internetová verze ACD Name

AutoNom
Beilstein Institut

podle názvosloví Beilstein (prvý program na světě)

AutoNomStandard
Beilstein Institut

internetová verze AutoNom

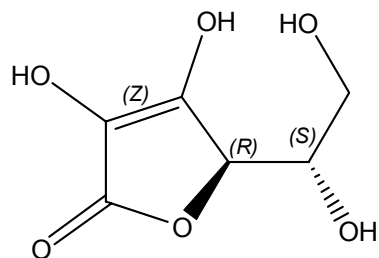
Nomenclator / NamExpert
ChemInnovation

podle názvosloví IUPAC

IUPAC NameIt / DrawIt
Bio-Rad Laboratories

podle názvosloví IUPAC

- (R)-5-((S)-1,2-dihydroxy-ethyl)-3,4-dihydroxy-5H-furan-2-one
(Beilstein Chemical Name)
- 5-(1,2-dihydroxy-ethyl)-3,4-dihydroxy-5H-furan-2-one (Beilstein Autonom)
- L-Ascorbic acid (Official Chemical Abstracts indexing name)
- Ascorbic Acid
- Vitamin C
- C₆H₈O₆
- 3-keto-L-Gulofuranolactone
- 3-Oxo-L-gulofuranolactone
- 50-8I-23-7 (CAS Registry Number)

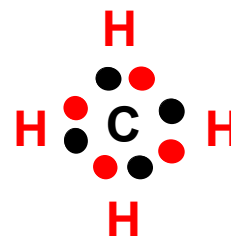


- kyselina askorbová

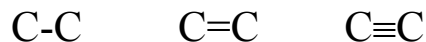
Uhlíkaté sloučeniny a chemická vazba

hlavním projevem sloučenin uhlíku je jejich řetězení
obvykle je spojení uhlíků mezi sebou a mezi uhlíky a dalšími atomy realizován
vazbou kovalentní

kovalentní vazba jednoduchá znamená sdílení dvojice elektronů
dvojitá sdílení dvou dvojic
trojitá sdílení dvojic tří



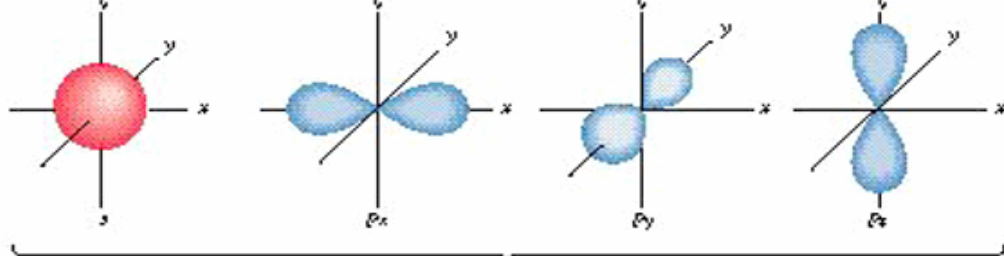
protože znázorňování dvojic elektronů mezi atomy je nepraktické vžilo se
znázorňování těchto vazeb zjednodušeně



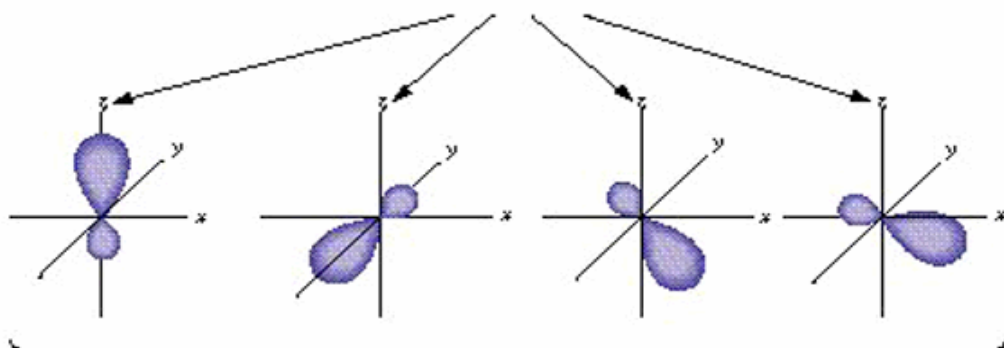
a to i přesto, že fyzikální i chemický podtext těchto spojnic není ve všech šesti
případech stejný

-

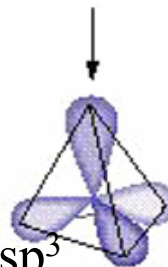
podle počtu valenčních elektronů hovoříme o vaznosti atomu



bor má tři elektrony $2s^2 2p^1$ může tudíž vstupovat do tří kovalentních „sdílení“

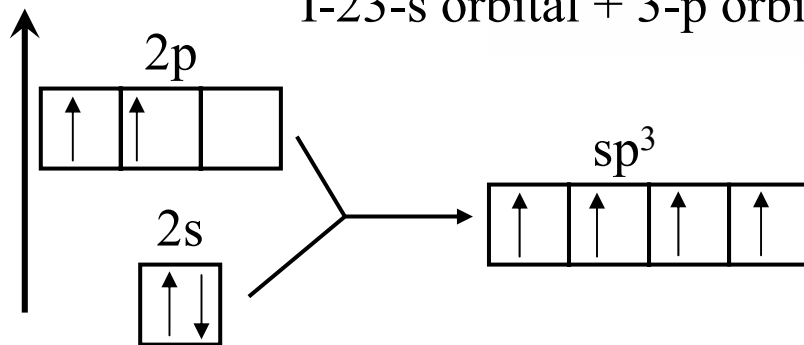


uhlík z jednoho s orbitalu a 3 orbitalů p vznikne hybrid sp^3



tetraedrání
 109.5°

$1s$ - $2s$ orbital + 3- p orbitaly = sp^3



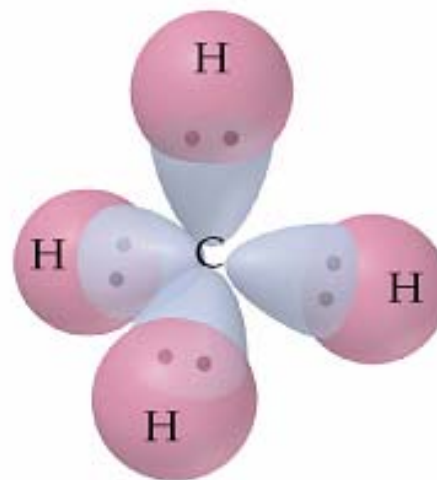


4 orbitaly sp³ uhlíku

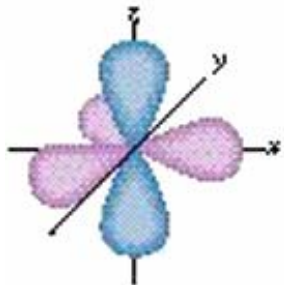
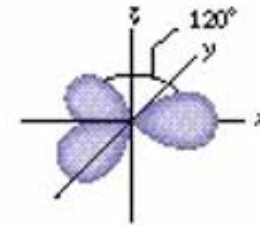
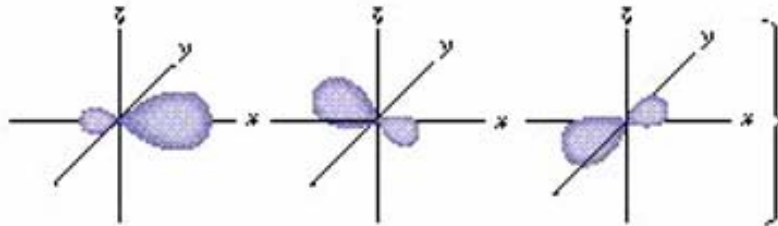
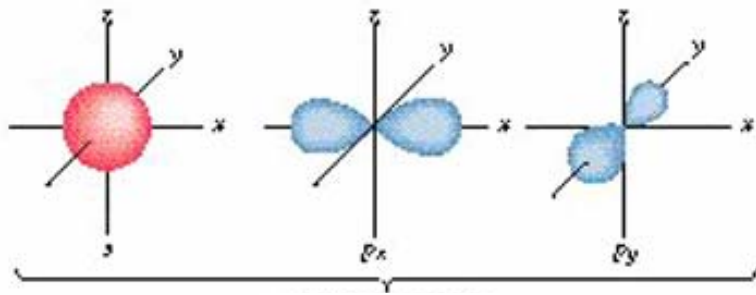
+



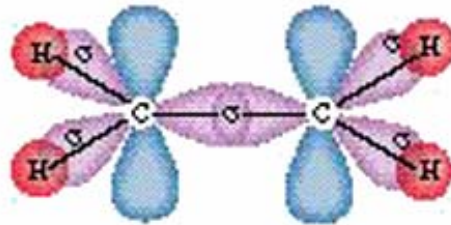
4 s orbitaly vodíku



METHAN

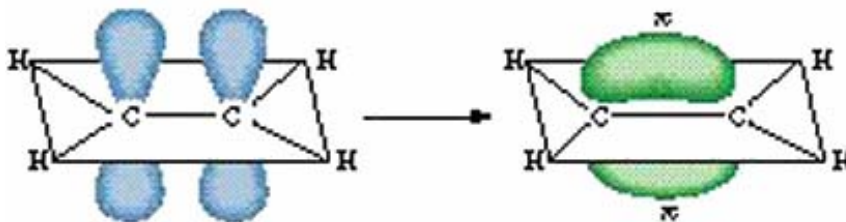


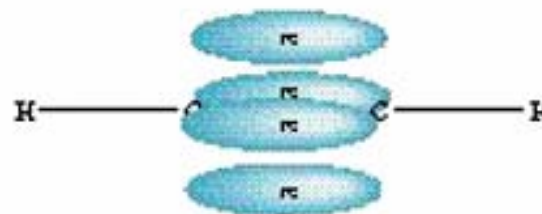
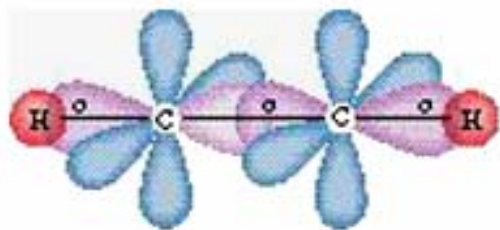
$sp^2 + p$



σ

ze dvou p orbitalů p a jednoho s vznikne hybrid sp^2
 sp^2 se váží σ vazbou
 zbylý p orbital utvoří vazbu π



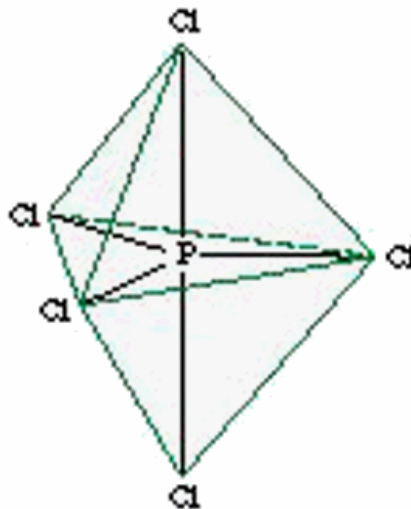


hybridizace sp vzniká z 1 s a 1 p orbitalu - spolu pak vytvoří σ vazbu

zbylé orbitaly p utvoří dvě π vazby

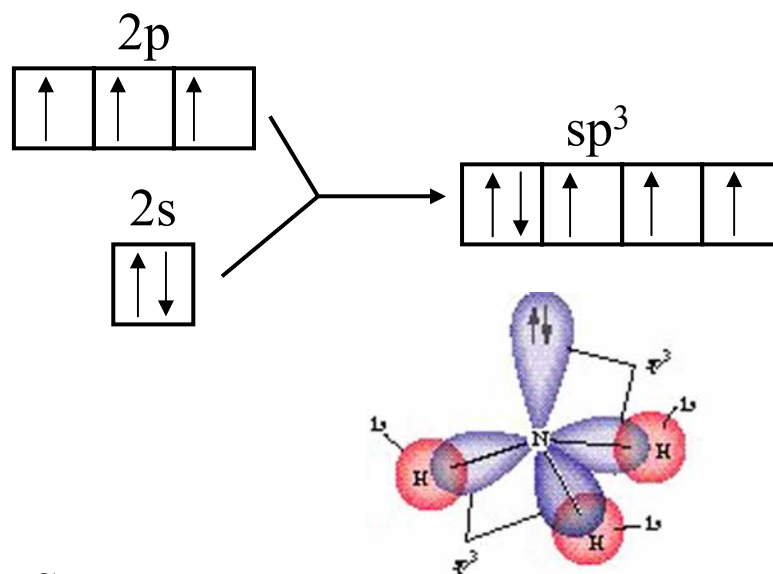


sp^3d

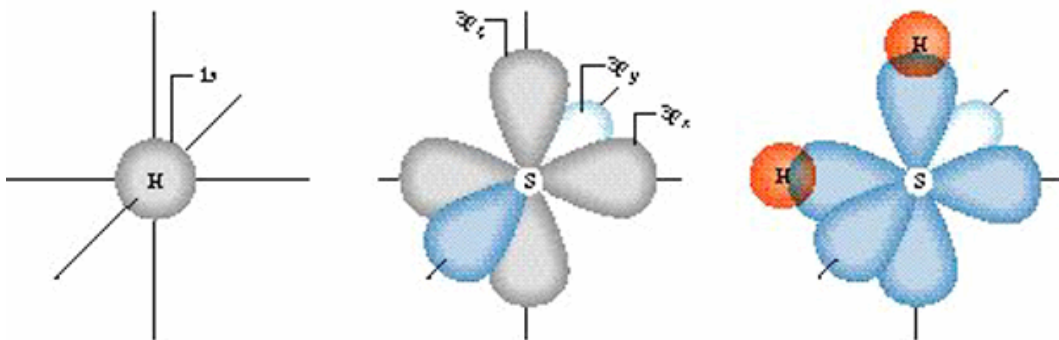


příklady „vyšších“
hybridizací

případ NH_3



případ H_2S



popis kovalentní vazby

kovalentní vazba se vyznačuje značnou pevností

tato pevnost je různá u spojení různých atomů a je modifikována i okolím
pevnost stoupá od jednoduché vazby k trojně



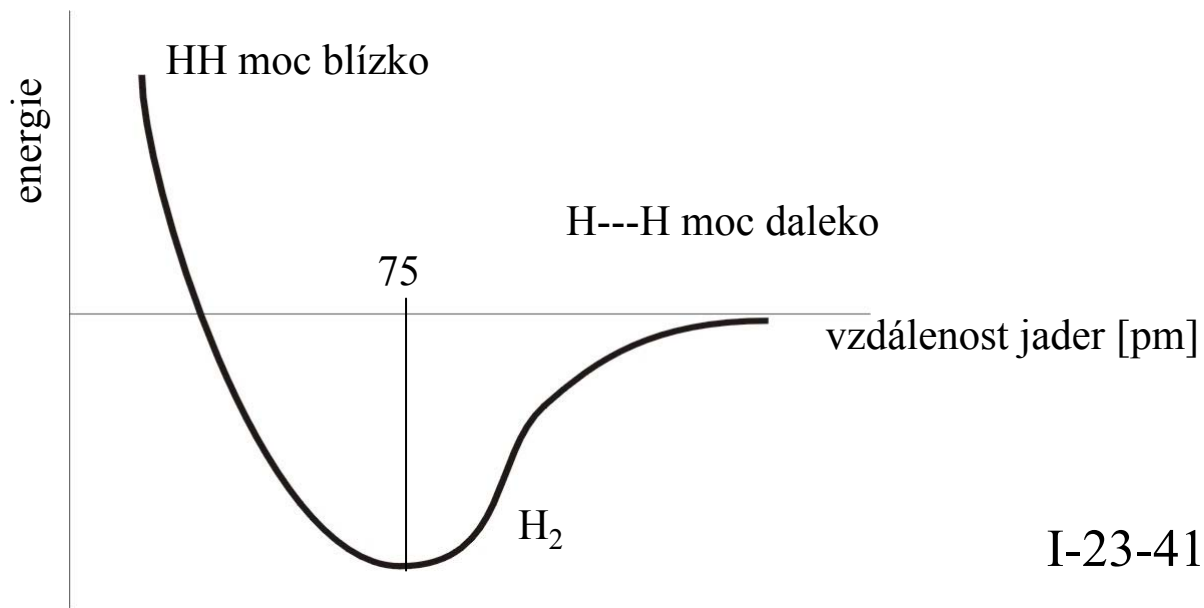
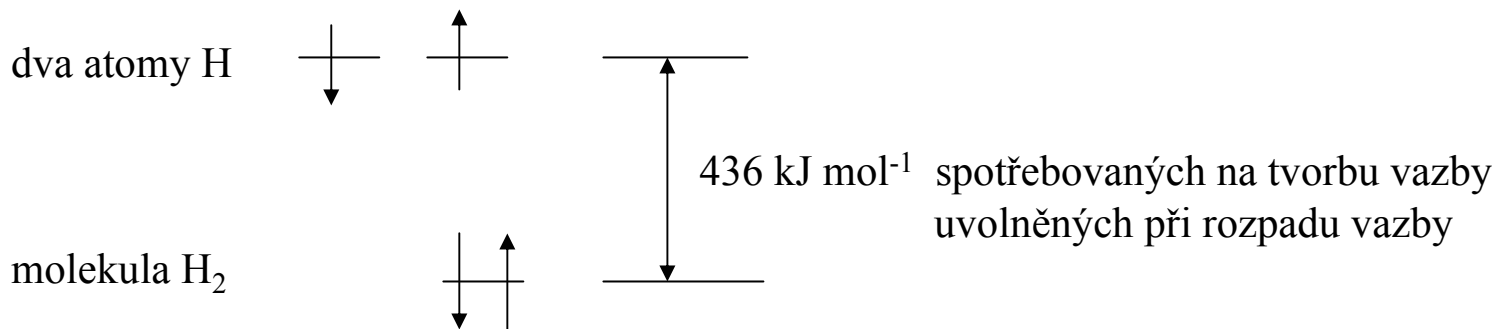
při vzniku vazby se uvolňuje energie, při jejím rozštěpení se naopak spotřebovává
taková energie potřebná na „rozpojení“ vazby se nazývá disociační energie

srovnání disociační energie vazeb a jejího řádu s délkou vazby

vazba	energie [kJ mol ⁻¹]	řád vazby	délka [pm]
C-H	414	1	109
C-O	439	1	143
C=O	732	2	123
C-C	347	1	154
C=C	611	2	134
C≡C	837	3	120

popis kovalentní vazby

sdílení elektronů v jednoduché kovalentní vazbě si můžeme popsat na vzniku molekuly vodíku



polární vazba

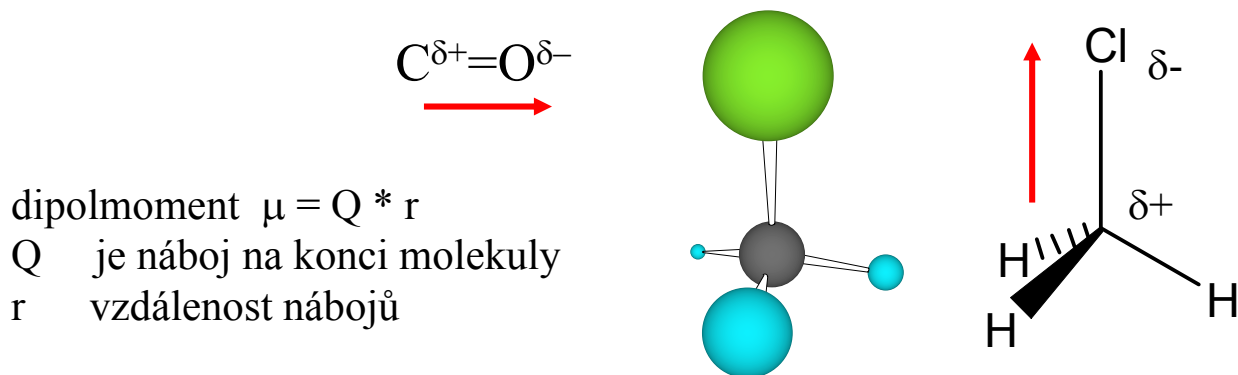
jednoduché vazby můžeme v případě, že spojují dva rozdílné atomy, které svou rozdílnou elektronegativitou způsobí posun symetrického sdílení elektronů od určité „rovnovážné“ polohy jinam jako POLÁRNÍ

taková vazba se „polarizuje“ tj. dostává na jednom konci částečný kladný náboj a na konci druhém stejně velký náboj záporný

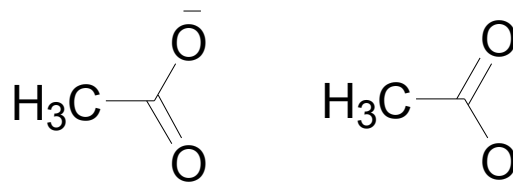
částečné náboje označujeme symbolem $\delta+$ a $\delta-$

polarita (nebo indukovaná polarizace) vazeb hraje v chemii velkou úlohu, neboť díky tomuto jevu se lokalizují v molekulách různě (částečně) nabitá centra, která jsou pak jinými nabitými částicemi napadána a dochází k chemickým reakcím

polarizovat se mohou i vazby násobné, typickým příkladem je karbonyl C=O



Celá řada struktur se popisuje velmi obtížně, pokud nevezmeme v úvahu, že se jednak strukturální prvky ovlivňují a jednak, že mezní struktury našich modelů přecházejí jedna na druhou



takový jev nazýváme rezonance a struktury rezonančními

podobně v některých případech dochází nejenom k výskytu různých rezonančních struktur, ale fakt, že tyto struktury dohromady mají podstatně nižší energii byl u vybraných cyklických uhlovodíků nazván aromaticita

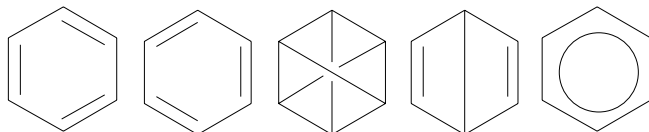
později byly zjištěny fyzikální důvody vzniku tohoto jevu

jde o ploché cyklické systémy s rezonančními strukturami jejichž vnitřní energie je nižší než očekávaná (cyklohexatrien vs. benzen je výše o 150 kJ mol⁻¹)

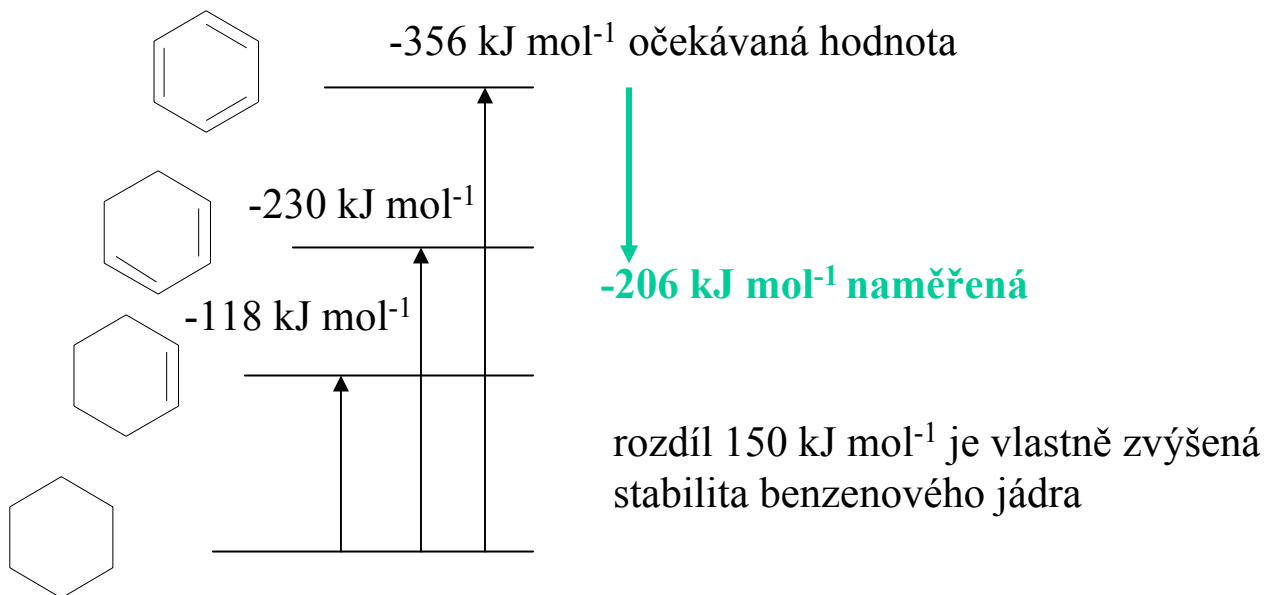
Hückel formuloval požadavek na vznik aromatického systému tak, že jde o systém s $4n+2 \pi$ elektrony (tj. 2, 6, 10, 14, 18 ...)

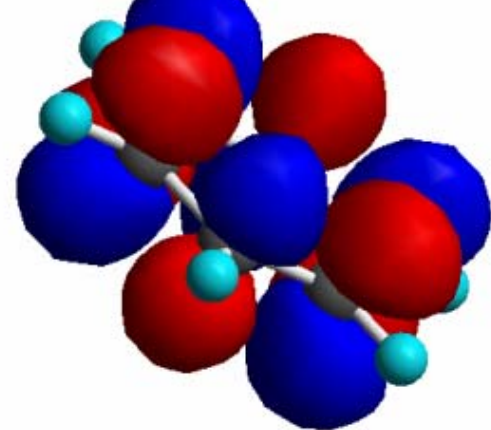
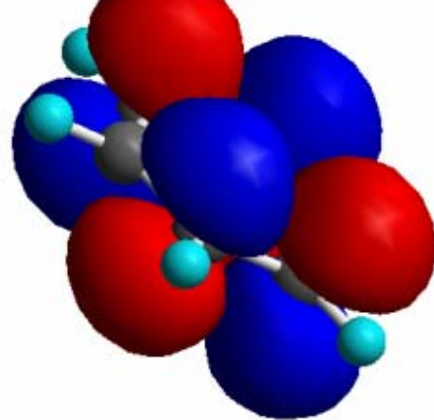
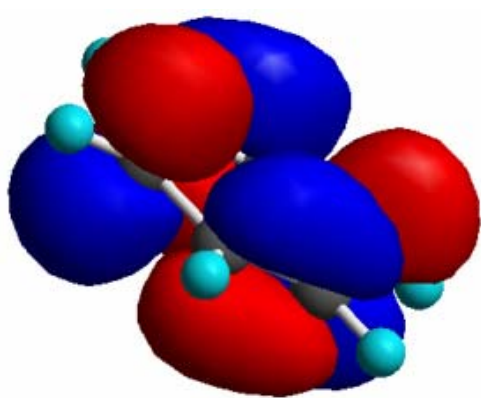
benzen je typickým příkladem takového systému

resonanční struktury benzenu:



hydrogenační energie:



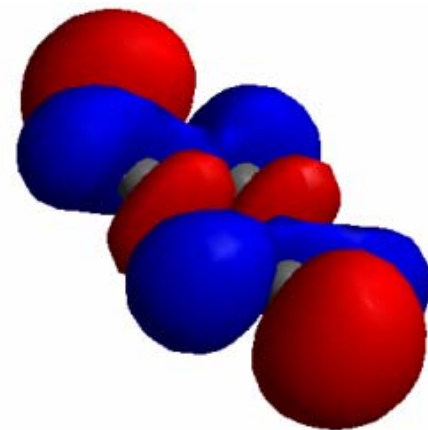
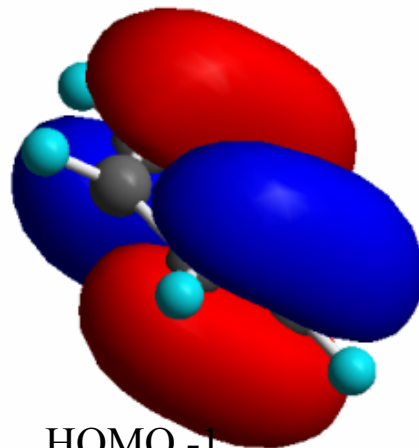
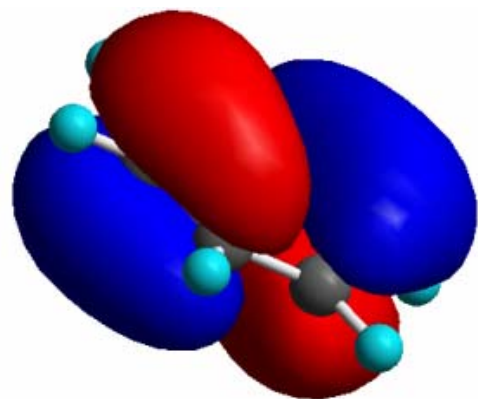
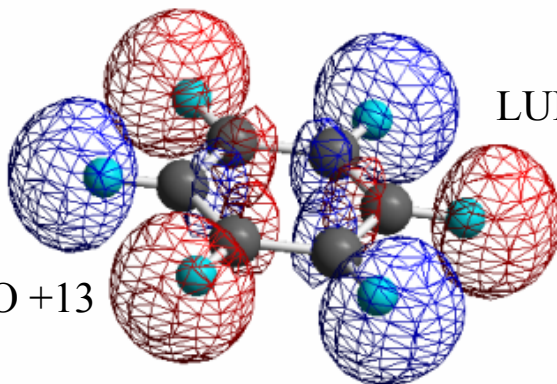


LUMO

LUMO + 1

LUMO + 2

LUMO + 13



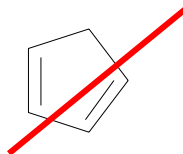
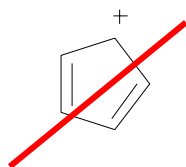
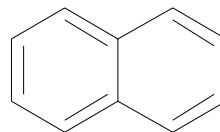
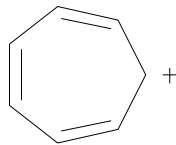
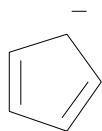
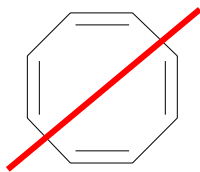
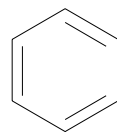
HOMO

HOMO - 1

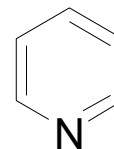
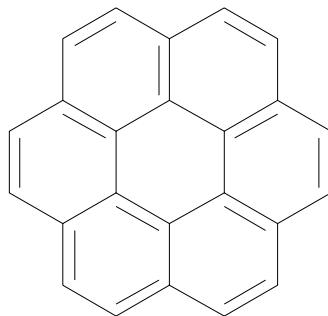
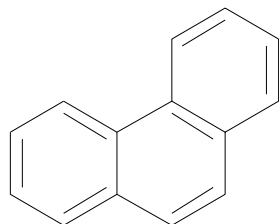
HOMO - 2

I-23-45

příklady aromatických sloučenin:



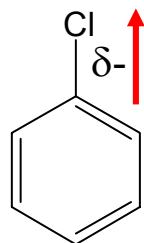
system s $4n+2$ π elektrony (tj. 2, 6, 10, 14, 18 ...)



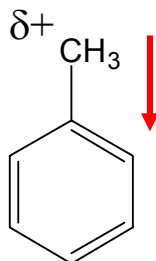
induktivní (indukční), mezomerní efekt

(bude nutno probrat podrobněji u chemických reakcí)

a/ hovoříme li o schopnosti atomu polarizovat vazbu, hovoříme o induktivním efektu

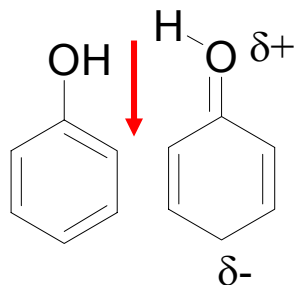
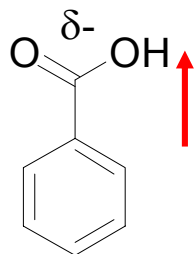


odtahování elektronů ze struktury
negativní indukční efekt, -I efekt



poskytnutí elektronů struktuře
pozitivní induktivní efekt, +I efekt

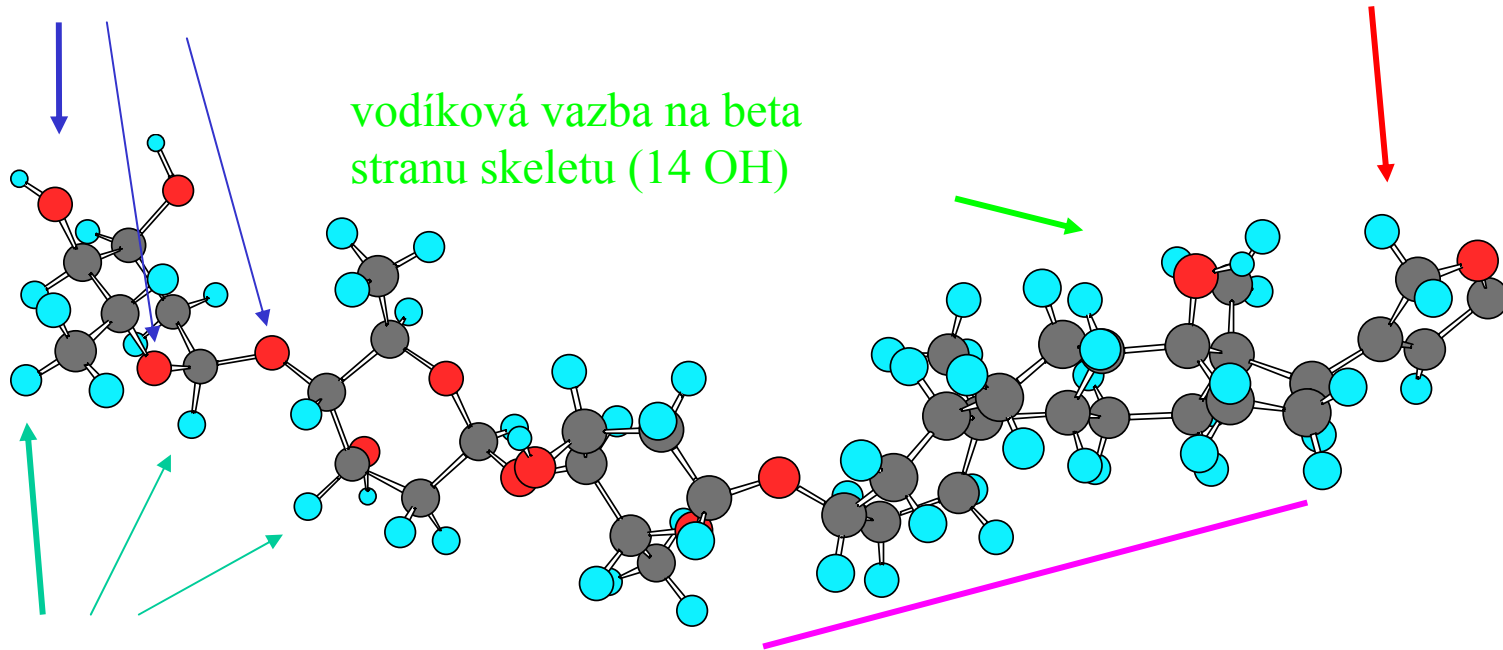
b/ mesomerní (rezonanční) efekt podobně poskytuje prostřednictvím π elektronů struktuře elektrony nebo je odebírání (+M efekt a -M efekt)



struktura organické sloučeniny jako její prvořadý atribut pro interakce s biologickými systémy

vodíková
vazba
cukerného
zbytku

interakce s bočním řetězcem se dvěma pravdě-
podobnými vazebnými místy s polární interakcí
elektron deficientního beta uhlíku a vodíkovou
vazbou dvojně vázaného heteroatomu



vodíková vazba na beta
stranu skeletu (14 OH)

hydrofobní
interakce C5'

hydrofobní interakce se
steroidním skeletem

