

## VÝUKA CHEMIE

### MNEMOTECHNIKA PŘI VÝUCE STEREOCHEMICKÉHO NÁZVOSLOVÍ

FRANTIŠEK LIŠKA

Katedra chemie a didaktiky chemie, Pedagogická fakulta UK, M.D. Rettigové 4, 116 39 Praha 1  
Frantisek.Liska@pedf.cuni.cz

Patrně největší počet různých mnemotechnických prostředků ve výuce chemie se vymýšlí pro taková témata, která jsou náročná na paměť, nebo na pochopení daného tématu. Jsou to například názvy prvků v Periodické soustavě prvků<sup>1</sup>, triviální názvy karboxylových kyselin, monosacharidů apod.<sup>2,3</sup>, popis oxidačně-redukčních reakcí a jejich stechiometrie<sup>4,5</sup>. Patří k nim také prostředky pro odvozování stereodeskriptorů k vyjádření struktur molekul v prostoru.

Prostorovou stavbou molekul se zabývá dnes už samostatný vědní obor stereochemie. Jeho nedílnou součástí je také stereochemické názvosloví<sup>6–8</sup>, chiralita a pojmy s ní související<sup>9,10</sup>. Samostatné kapitoly ze stereochemie jsou již standardní součástí učebnic základní organické chemie<sup>11,12</sup>, jsou náplní studijních textů na vysokých školách<sup>12–17</sup> a pronikají i do vzorců v učebnicích na nižších stupních škol.

Do povědomí širší veřejnosti se dostala chiralita a absolutní konfigurace enantiomerů v 60. letech minulého století při tzv. konterganové aféře<sup>18</sup>. Ženám, které v době těhotenství používaly jako analgetikum racemický thalidomid (Contergan), se rodily děti s vrozenými tvarovými úchyly vzniklými během vývoje plodu. Dodatečně se zjistilo, že (*S*)-thalidomid je metabolizován na (*S*)-*N*-ftaloylasparagovou kyselinu, která potom vyvolává defektní vývoj plodu. Také (*R*)-thalidomid není zcela „neškodný“, neboť *in vivo* mění konfiguraci na stereogenním centru (epimerizuje) na (*S*)-thalidomid. Proto musí být u každého léčiva vyráběného v racemické formě známy toxické účinky obou enantiomerů (Schéma 1).

Molekuly organických sloučenin jsou prostorovými objekty podobně, jako jsou jimi sochy, stavby, různé průmyslové výrobky atd. Matematika popisuje takovéto objekty vlastnostmi topologickými, geometrickými a topografickými, a proto se topologie, geometrie a topografie uplatňují i v popisu struktur organických molekul<sup>19</sup>.

Struktura molekul v trojrozměrném prostoru se jednoznačně prezentuje pomocí vhodných molekulových modelů. Vyjadřuje se však i graficky v rovině nákretny. Podle konvence znázorňuje plná linka běžné tloušťky (—) vazbu ležící v této rovině, plná klínová linka (▶) vazbu směřující před tuto rovinu a příčně šrafovaná čára ve formě stejně dlouhých rovnoběžných čárek kolmých na osu vazby nebo příčně šrafovaná klínová linka se špičkou klí-

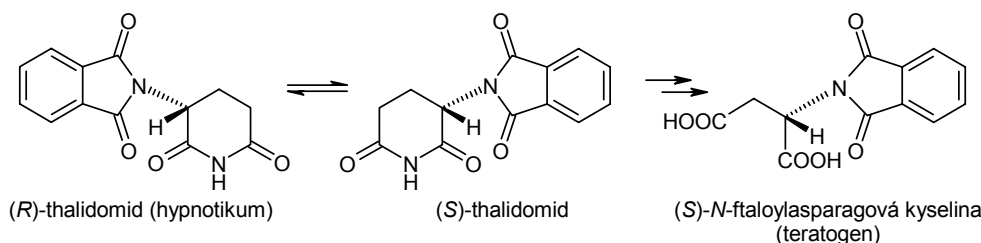


Schéma 1

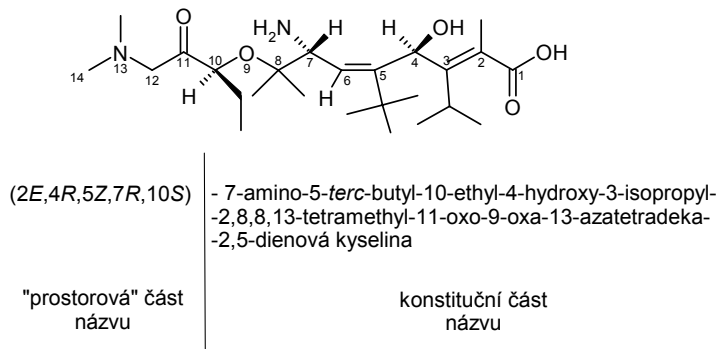


Schéma 2

nu připojenou k stereogennímu centru (·····) znázorňuje vazbu směřující za rovinu nákresny. Neméně jednoznačně a celosvětově srozumitelně je nutné popsat strukturu také slovně, třeba z důvodu řazení sloučenin v rejstřících.

Relativně největší potíže mívají studenti s kreslením trojrozměrných struktur do roviny nákresny.

Je nutné uvědomit si, že ne každý je vybaven dostatečně dobrou prostorovou představivostí a také, že ne vždy jsou po ruce vhodné molekulové modely. V obou případech mohou pomoci různé mnemotechnické postupy k odvození stereodeskriptorů pro vyjádření relativní či absolutní konfigurace v názvech organických sloučenin.

Bude účelné probrat uvedené vlastnosti – topologii, geometrii a topografii – v jednom kontextu na molekule této smyšlené karboxylové kyseliny (Schéma 2).

Jak je z uvedeného příkladu patrné, skládá se název ze dvou částí: z části konstituční, popisující, které atomy a jakými vazbami jsou spojeny, a z části „prostorové“, která jí předchází a ve které je pomocí stereodeskriptorů vyjádřena geometrie molekuly (relativní konfigurace *E*, *Z*) a topografie molekuly (absolutní konfigurace *R*, *S*).

## Topologický popis molekuly

Topologie představuje obecně ty vlastnosti objektu, které se po jeho deformaci a po opětovném navrácení do původního stavu, nezmění<sup>19</sup>. Pro představu lze nakreslit vzorec molekuly na pruh pryžové folie, například škrticího obinadla a sledovat, jak se vzorec bortí a opětovně navrácí do původního tvaru tak, jak se folie natahuje a opětovně smršťuje. Proto je topologie také nazývána geometrií na pryžovém plátně (geometry on a rubber sheet). Analogií topologie ve strukturách organických sloučenin je konstituce, vyjadřující, které atomy a jakými vazbami jsou navzájem spojeny.

Konstitučními vzorci a názvy lze jednoznačně vyjádřit konstituci a rozlišit navzájem konstituční isomery, sloučeniny shodného souhrnného vzorce, avšak odlišné konstituce. Názvy se tvoří pomocí systematického názvosloví (názvosloví IUPAC), aplikací názvoslovných principů (substutivního, adičního, záměnného, eliminačního a konjunktivního) shrnutých do názvoslovných pravidel, která jsou publikována a čas od času upravována a modifikována Mezinárodní unií pro chemii čistou a aplikovanou (International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC)<sup>6,7</sup>. Na uvedeném příkladu si je můžeme připomenout při skládání konstitučního názvu uvedené sloučeniny. Postup vyžaduje:

1. Vyhledat nejdelsí řetězec s maximem násobných vazeb a charakteristických skupin a vytvořit název základního hydridu, který tvoří kmen názvu: **tetradekan**.
2. Nalézt násobné vazby v základním řetězci: **tetradekadien**.
3. Vyhledat substituenty na základním skeletu a pojmenovat je příslušnými odlučitelnými předponami. Jsou to alkyly (**ethyl**, **terc-butyl**, **isopropyl**, **methyl**) a charakteristické skupiny (**amino**, **hydroxy**, **karboxy**, **oxo**)

a všechny dohromady seřadit podle abecedy.

4. Vyhledat heteroatomy v základním skeletu a pojmenovat je neodlučitelnými předponami (**aza**, **oxa**), které se řadí podle definovaného pořadí (mnemotechnika<sup>3</sup> „OSN“).
5. Nalézt hlavní charakteristickou skupinu (**-COOH**) a určit příponu či rozšířené zakončení (**-ová kyselina**).
6. Očíslovat skelet tak, aby hlavní charakteristická skupina měla co nejnižší lokant a vytvořit název podle algoritmu:

**předpony odlučitelné + předpony neodlučitelné + kmen (základ názvu) + přípony**

Předpony a v případě potřeby i přípony se v názvu uvádějí spolu se svými lokanty, od nichž se oddělují spojovníkem.

Konstituční název – 7-amino-5-terc-butyl-10-ethyl-4-hydroxy-3-isopropyl-2,8,8,13-tetramethyl-11-oxo-9-oxa-13-azatetradeka-2,5-dienová kyselina – vyjadřuje „jenom“ strukturu v rovině nákresny, a je tedy tou nejhrubší specifikací její struktury. Lze podle něho nakreslit pouze následující strukturu (Schéma 3).

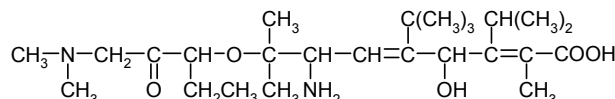


Schéma 3

Název nezohledňuje přítomnost stereogenních jednotek (stereogennů, stereoelementů), tj. takových seskupení atomů v molekule, která způsobují stereoisomerii, v uvedeném případě dvou dvojných vazeb a tří center chiralit (asymetrických uhlíků). Nedoporučuje se používat jinak užžitá pojmy, jako například chirální centrum, chirální uhlík, a už vůbec ne opticky aktivní uhlík apod., přijatelné jsou termíny chirální centrum, chirální uhlík.

Prostorové uspořádání (konfigurace) na takovýchto stereogenních centrech se vyjadřuje afixy označovanými jako stereodeskriptory. Pro dvojnou vazbu to jsou *cis* a *trans* nebo *E* a *Z*, pro asymetrické uhlíky (atomy) to jsou *R* a *S*, ve strukturách sacharidů a  $\alpha$ -aminokyselin také *D* a *L*. Protože to jsou afixy definované, vymýšlejí se pro jejich odvození a snadnější zapamatování různé mnemotechnické pomůcky.

## Vyjádřování relativní konfigurace (geometrie molekuly)

Kvalitativně vyšší informaci poskytují názvy sloučenin, ve kterých jsou podchyceny geometrické vlastnosti molekuly. Geometrická vlastnost objektu je v matematice pojímána jako vlastnost, která se nemění zrcadlením. Znamená to například, že předmět a jeho zrcadlový obraz jsou totožné. Promítnuto do struktury organických sloučenin jde o vyjádření tzv. relativní konfigurace, tzn. vyjádření vzájemné polohy ligandů (substutentů) vůči referenční

rovině společně oběma stereoisomerům. Tou může být dvojná vazba, ale i rovina kruhu nebo rovina acyklického uhlíkatého skeletu uspořádaného do zákrytové konformace. Takové stereoisomery se nazývají diastereomery; mají shodný souhrnný vzorec, liší se geometrií a liší se i svými fyzikálními vlastnostmi.

Relativní konfigurace diastereomerů, které se liší vzájemnou polohou substituentů vůči rovině dvojně vazby, bývá často zahrnuta už v triviálních názvech jednotlivých stereoisomerů, a proto se u nich explicitně neuvádí (Schéma 4 a 5).

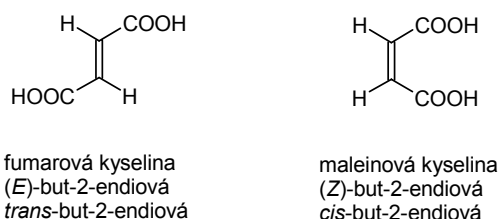
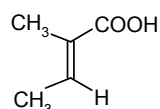


Schéma 4

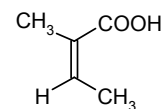
Pro stereoisomerní kyseliny s triviálními názvy angeliková a tiglinová či tiglová byla navržena mnemotechnická pomůcka<sup>2</sup> „Oh, how **trans**cendentially **angelic** it is to **tickle Cis**“, která však vyjadřuje vzájemnou polohu methylových skupin na dvojně vazbě (*cis* u kyseliny tiglinové a *trans* u kyseliny angelikové) (Schéma 6). V systematických názvech však stereodeskripty *cis* a *trans* vyjadřují relativní polohu methylové a karboxylové skupiny.

V systematických názvech sloučenin s dvojnou vazbou se vyjadřuje relativní konfigurace stereodeskripty *cis* a *trans* nebo *E* a *Z*. Zcela obecné použití, a to i pro případy, kde *cis* a *trans* nelze jednoznačně aplikovat, mají stereodeskripty *E* a *Z*, jako například Schéma 7.

Stereodeskripty *E* a *Z* se přiřazují podle pravidel posloupnosti<sup>7</sup> (viz dále) tak, že se určí preferovaný atom (v prvním přiblížení podle velikosti protonového čísla) nebo skupina na jednom z dvojně vázaných atomů, a srovnává se s preferovaným atomem nebo skupinou na druhém dvojně vázaném atomu. Leží-li vybrané atomy nebo skupiny na téže straně dvojně vazby, použije se stereodeskriptor

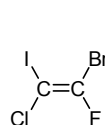


kyselina tiglinová  
(*E*)-2-methylbut-2-enová  
*trans*-2-methylbut-2-enová

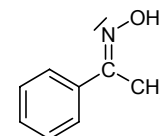


kyselina angeliková  
(*Z*)-2-methylbut-2-enová  
*cis*-2-methylbut-2-enová

Schéma 6



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



(E)-acetofenon-oxim

Schéma 7

*Z*, leží-li na opačných stranách, použije se *E*.

Stereodeskripty *E* a *Z* se pro snazší zapamatování uvádějí, jako by byly odvozeny od německých slov *entgegen* (naproti) a *zusammen* (dohromady). Jiný způsob doporučuje pro pomoc paměti využít tvaru písmen<sup>20</sup> *E* a *Z*.

Všechny uvedené stereodeskripty se píšou kurzivou, *E* a *Z* se v názvech vkládají do kulatých závorek a oba druhy se umísťují před konstituční název, od něhož se oddělují spojovníkem. Dříve široce používaný termín geometrické isomery se nahrazuje výrazy isomery na dvojně vazbě, isomery *cis/trans* nebo isomery *Z/E*. Je patřičné zdůraznit, že stereodeskripty *E* a *Z* se vyjadřuje jenom konfigurace na dvojně vazbě.

U cyklických sloučenin se nadále používají stereodeskripty *cis* a *trans*, a to u disubstituovaných derivátů i u vícesubstituovaných cykloalkanů, u kterých získává uhlík nesoucí hlavní charakteristickou skupinu lokant *l* a slouží jako referenční skupina (*r*), zbývající substituenty jsou k ní vztahovány tak, že se před odpovídající lokanty umístí malá písmena *c* (*cis*) a *t* (*trans*) (Schéma 8).

Mnemotechnika spojená s vyjadřováním relativní konfigurace na vicinálních atomech rovného uhlíkatého řetězce byla popisována v předcházejícím sdělení<sup>3</sup>, zejména na příkladech monosacharidů.

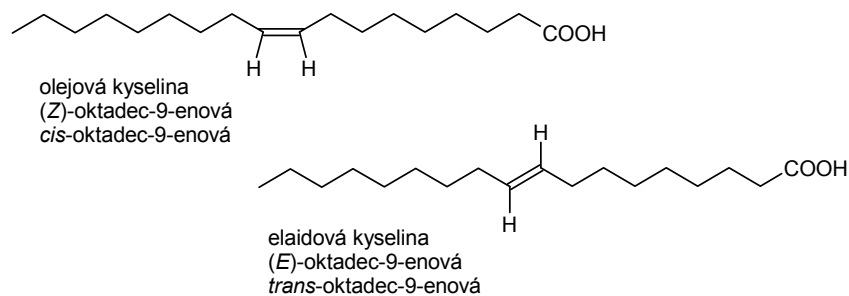


Schéma 5

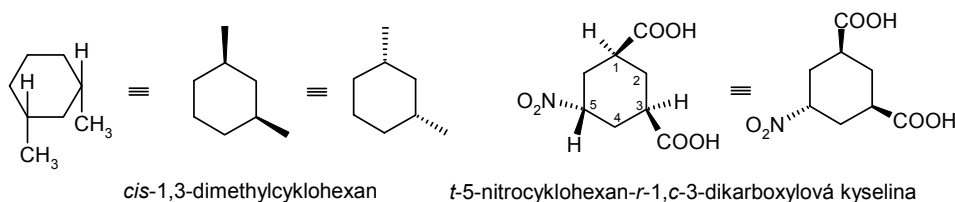


Schéma 8

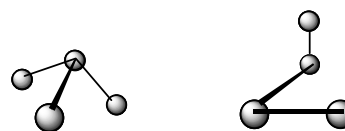
### Vyjadřování absolutní konfigurace (topografie molekuly)<sup>19</sup>

Ve strukturách organických sloučenin jsou „zabudovány“ vlastnosti nazývané topografické. Tyto vlastnosti se mění zrcadlením a mohou být popsány jen ve vztahu k systému koordinát. Molekuly s těmito vlastnostmi jsou chirální, což znamená, že nejsou identické se svým zrcadlovým obrazem. Příslušná vlastnost, tzn. neidentita předmětu a jeho zrcadlového obrazu, se obecně nazývá chiralitou. Chirální molekuly existují jako pár stereoisomerů, kterým se říká enantiomery. Enantiomery jsou ve vzájemném vztahu předmětu a jeho zrcadlového obrazu, a jsou tedy navzájem neztotožnitelné. Oba tyto stereoisomery mají stejnou konstituci, stejnou geometrii molekuly, stejné fyzikální vlastnosti. Liší se navzájem jenom absolutní konfigurací.

Všechny chirální molekuly jsou molekuly látek štěpitelných v enantiomery, které vykazují optickou aktivitu, tzn. stáčí rovinu polarizovaného světla o stejný úhel,

jeden však doprava (+), pravotočivý, druhý doleva (–), levotočivý, přičemž střed mezi oběma hodnotami se nemusi rovnat nule. Platí i obrácené tvrzení, že všechny molekuly opticky aktivních látek jsou chirální. Dřívější označení „optické antipody“ je už považováno za zastaralé a od jeho používání názvoslovná doporučení IUPAC silně odrazují.

S molekulami chirálních sloučenin se nejčastěji setkáváme buďto ve formě čistých enantiomerů, které jsou uváděny jako tzv. chirální neracemické sloučeniny nebo jsou ve formě racemátu (viz. dále).



tripodální jednotka

helikální jednotka

Schéma 9

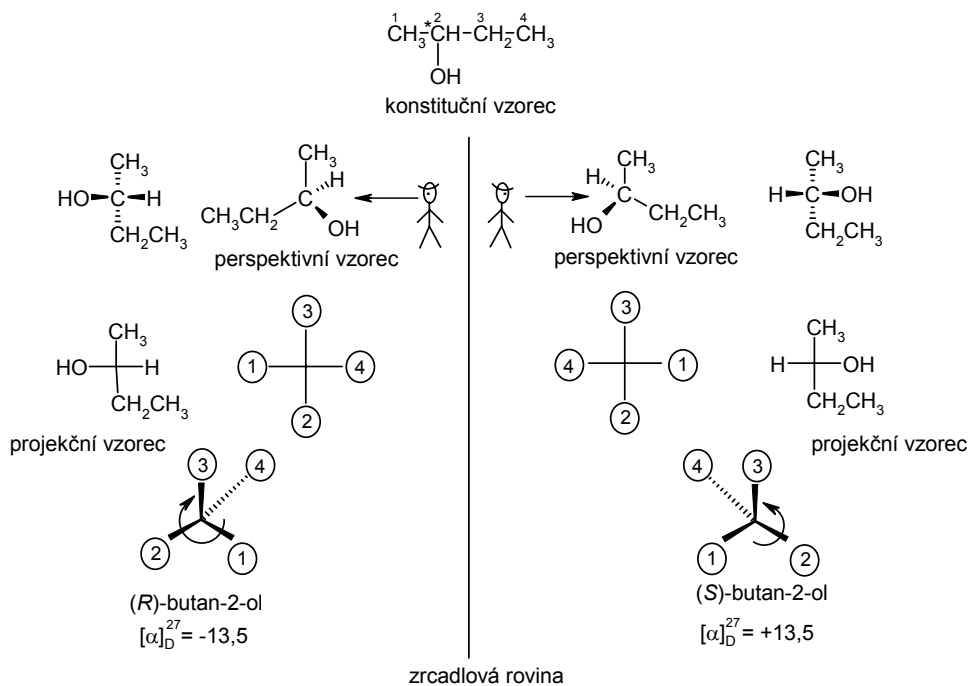


Schéma 10

Nejjednodušší chirální objekty lze vytvořit obecně ze čtyř bodů (atomů), které neleží v rovině. Tyto body může spojit minimálně třemi přímkami a vytvořit tak tripodální nebo helikální jednotku. Uvedené jednotky doplněné o vazby a ligandy se pak stávají stereogenními jednotkami (Schéma 9).

Nejčtenějšími reprezentanty sloučenin s tripodální jednotkou jsou centrálně (středově) chirální sloučeniny, obsahující v molekule tetraedrický atom uhlíku, k němuž jsou vázány čtyři různé ligandy – atomy nebo skupiny, z nichž žádná není zrcadlovým obrazem některé z ostatních. Takový atom uhlíku se nazývá asymetrický a ve strukturách molekul bývá označován hvězdičkou (\*).

Bude účelné vysvětlit základní pojmy související s chiralitou i způsoby zobrazování a pojmenovávání chirálních molekul na příkladu nejjednoduššího chirálního alkoholu, butan-2-olu. Struktury molekul chirálních sloučenin se jednoznačně zobrazují prostorovými (perspektivními) konfiguračními vzorci. Fischerovu projekci těchto vzorců podle dohodnuté konvence se získávají projekční konfigurační vzorce, tzv. Fischerovy vzorce<sup>21</sup> (Schéma 10).

Při kresbě perspektivních konfiguračních vzorců se umísťuje uhlíkatý skelet molekuly do roviny nákresny v „zig-zag“ konformaci a vazby vycházející ze stereogenního centra před rovinu uhlíkatého skeletu se vyznačují tučným klínkem, vazba jdoucí za tuto rovinu zase soustavou rovnoběžných šrafovaných čar. Uhlíkatý skelet se zpravidla umísťuje tak, aby na horním konci vzorce začínal nejnižším lokantem. Získá se tak prostorový vzorec jednoho enantiomeru. Analogicky se nakreslí prostorový vzorec odpovídajícího enantiomeru, nebo se prostě „obkreslí“ vzorec, který se zrcadlí v zrcátku kolmo přiloženém k prvnímu enantiomeru.

Při kreslení Fischerových vzorců se orientuje molekula v perspektivním zobrazení rovinou, v níž leží dvě vazby (zpravidla tvořící uhlíkatý skelet) vycházející ze stereogenního centra, svisle a kolmo k rovině nákresny tak, aby tyto vazby směřovaly od pozorovatele a aby na horní vertikální vazbě byly atomy s nejnižším lokantem. Tyto vazby se pak promítají do vertikály a na jejich horním a spodním konci jsou pozorované atomy (substituenty, ligandy). Zbývající dvě vazby ležící v rovině kolmé k rovině vertikálních vazeb a směřující k pozorovateli se promítají do horizontály: substituent viděný vpravo se zapisuje na pravou, substituent viděný vlevo se píše na levou horizontální vazbu. Umístí-li se stereogenní centrum do roviny nákresny, potom vertikální vazby směřují za nákresnu, horizontální vazby směřují před ní a v jejich průsečíku se nachází stereogenní centrum. Tato skutečnost se ve Fischerově projekci zpravidla nevyjadřuje.

Oba typy vzorců, perspektivní i projekční, mají stejnou vypovědní hodnotu a samy o sobě už vyjadřují směry vazeb vycházejících ze stereogenního centra do prostoru, tedy absolutní konfiguraci.

K označení absolutní konfigurace slouží dvě pravidla. Prvním pravidlem je pravidlo posloupnosti. Podle něho se řadí atomy (substituenty, ligandy) kolem stereogenního centra, třeba i hypotetického. Druhé pravidlo definuje smysl chiraloty.

Tato pravidla formulovali Robert Sidney Cahn (1899–1981), Sir Christopher Ingold (1893–1970) a Vladimír Prelog (1906–1998) a jsou proto uváděna jako konvence CIP<sup>22–27</sup>. Pravidlo posloupnosti představuje způsob, jakým se určuje nadřazenost skupin, substituentů či ligandů kolem stereogenního centra. V prvním přiblížení postačí pořadí podle klesajících protonových čísel atomů bezprostředně k němu vázaných, např. Cl > S > F > O > N > C; podobně se pokračuje v dalším přiblížení, např. CH<sub>2</sub>Cl > CH<sub>2</sub>OH > > CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub> > CH<sub>3</sub>. Substituentům se přiřadí čísla v pořadí klesající priority, tedy v pořadí **1** > **2** > **3** > **4**, kde symbol > znamená „je nadřazen“ ve smyslu pravidla posloupnosti. V případě našeho butan-2-olu tak bude hydroxyskupině náležet **1**, ethylu **2**, methylu **3** a vodíkovému atomu **4**. V některých textech se přiřazují substituentům písmena malé abecedy tak, že opět platí **a** > **b** > **c** > **d**. Vazby ze stereogenního centra (C\*) k substituentům charakterizovaným „posloupnostními čísly“ **1** → **2** → **3** vytvářejí pomyslný volant a vazba k substituentu **4** s nejnižší prioritou tvoří jeho osu.

Smysl chiraloty – absolutní konfigurace se poté odvozuje podle druhého pravidla, které definuje směr otáčení pomyslného volantu, a to ve směru klesající priority zbývajících substituentů (**1** → **2** → **3**). Otáčí-li se pomyslným volantem doprava, přiřazuje se stereogennímu centru (C\*) stereodeskriptor (symbol, afix) *R* (lat. *rectus*, pravý), otáčí-li se doleva, přiřazuje se afix *S* (lat. *sinister*, levý). V názvech sloučenin se afixy *R* a *S* píše kurzivou, umísťují se v závorkách před úplný název sloučeniny, od něhož se oddělují spojovníkem. Často se uvádějí spolu s lokanty.

Ekvimolární směs párů enantiomerů (1:1) se nazývá racemát. Racemát není opticky aktivní a jeho chemický vzorec či název se odlišuje od jednotlivých enantiomerů *R*, *S* předponou ± -, nebo *rac*- (resp. *racem*-), případně uvedením symbolů *RS* a *SR*, nebo použitím uvedených symbolů s hvězdičkou (*R\**, *S\**). Nedoporučuje se používat pojem racemická směs.

Bude užitečné uvést několik poznámek pro snazší manipulaci s prostorovými a s projekčními konfiguračními vzorci. Je nutné si uvědomit pravidla pro převod projekčního vzorce do Fischerovy projekce, zejména tu skuteč-

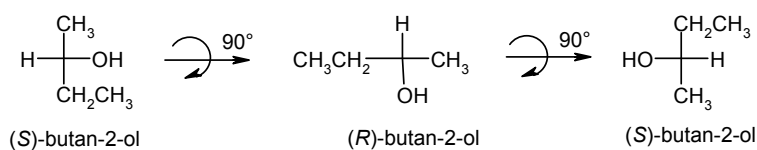


Schéma 11

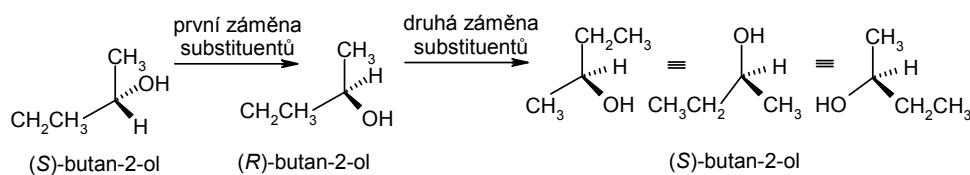


Schéma 12

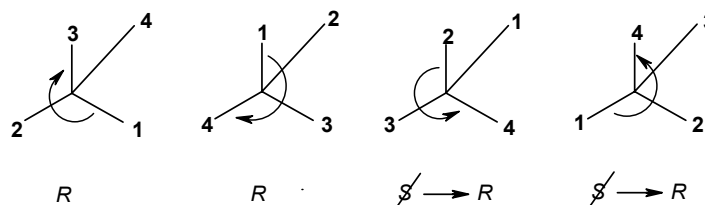


Schéma 13

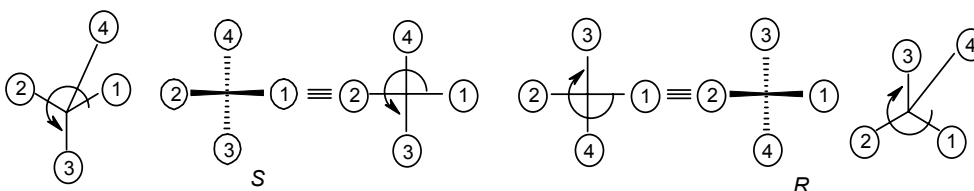


Schéma 14

nost, že vertikální vazby směřují podle konvence od pozorovatele, horizontální k němu. Proto nelze s Fischerovým vzorcem v rovině nákrešly libovolně otáčet. Otočením vzorce o  $90^\circ$  se získává vlastně projekční vzorec odpovídajícího enantiomeru, stereoisomeru s opačnou absolutní konfigurací. Otočením o  $180^\circ$  ( $2 \times 90^\circ$ ) se konfigurace stereogenního centra výchozího stereoisomeru nezmění (Schéma 11).

Stejně tak se mění konfigurace jednoduchou záměnou dvou (kterýchkoliv) substituentů na stereogenním centru, vede k opačnému enantiomeru, druhou záměnou dvou substituentů (opět kterýchkoliv) se vracíme na konfiguraci původní, k původnímu enantiomeru. Znamená to tedy, že dvojnásobnou záměnou kterýchkoliv dvou substituentů se konfigurace stereogenního centra nezmění (Schéma 12).

Tohoto „triku“ lze využít i při odvozování konfigurace z prostorových vzorců, v nichž vazba  $C^*H$  směřuje k pozorovateli a ten se nedokáže přenést v představě za rovinu nákrešly. Postačí potom provést dvojnásobnou vzájemnou záměnou kterýchkoliv substituentů tak, aby po ní vazba  $C^*H$  směřovala od pozorovatele (Schéma 12).

Cori<sup>29</sup> vychází rovněž z modelu otáčivého volantu a definuje obecnější pravidla pro odvození *R/S* konfigurace. Pokud je na ose volantu referenčním ligandem ligand se sudým posloupnostním číslem (**4** nebo **2**), potom je konfigurace vzešlá ze směru otáčení zbývajících ligandů **1**

> **2** > **3** nebo **1** > **3** > **4** stejná a správná. Je-li však na ose volantu ligand s lichým posloupnostním číslem (**1** nebo **3**), pak se konfigurace vzešlá ze směru otáčení pomyslného volantu (**2** → **3** → **4**) nebo (**1** → **2** → **4**) změní na opačnou, tzn. *R* na *S* nebo *S* na *R*, jak je patrné z obecně formulovaných vzorců jednoho a téhož enantiomeru (Schéma 13).

Konfiguraci stereogennímu centru lze, pomocí mnemotechniky, přiřadit i z Fischerových projekčních vzorců. Pro tento přístup existuje řada velmi podobných návrhů<sup>30–36</sup>, jejichž podstatu lze shrnout do následující mnemotechniky<sup>31</sup>. Je-li atom **4** (obecně skupina, ligand s nejnižší prioritou) v projekčním vzorci na vertikálních vazbách (nahore nebo dole), pak je situace „velmi dobrá“ a konfiguraci lze přiřadit na základě pomyslného volantu vytvořeného ze zbývajících substituentů na „Fischerově kříži“. Tato skutečnost má racionální základ v tom, že atom **4** vždy směřuje od pozorovatele, ať už je na horním či spodním konci vertikálních vazeb (Schéma 14).

Pokud je ligand **4** v projekčním vzorci na horizontálních vazbách, potom je situace „hrozná“, vazba směřuje k pozorovateli, který může situaci řešit stejně jako v předcházejícím případě tak, že uvedeným postupem zjištěná konfigurace je opakem konfigurace reálné a správné, nebo tak, že substituent **4** se přemístí z horizontální vazby na vertikální vazbu, a aby se zachovala konfigurace ne-

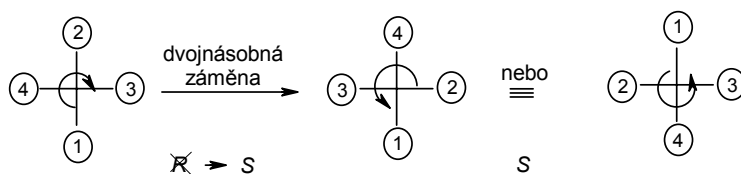


Schéma 15

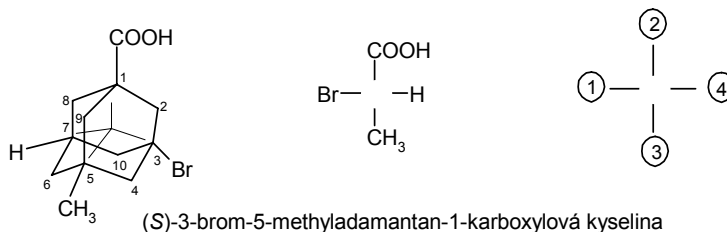


Schéma 16

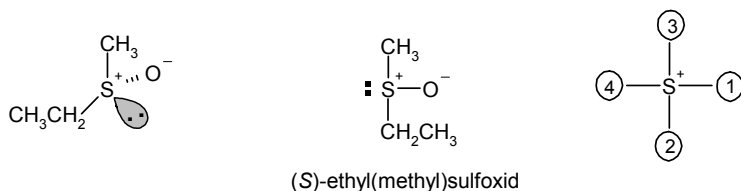


Schéma 17

změněná, vymění se navzájem ještě dva zbývající substituenty (ligandy) (Schéma 15).

Konvence CIP je obecně použitelná pro všechny typy centrálně (středově) chirálních sloučenin, včetně těch, s imaginárním (hypotetickým) centrem chiralit, jako je tomu například u molekuly 3-brom-5-methyladamantan-1-karboxylové kyseliny (Schéma 16), nebo je centrem chiralit heteroatom, jako je tomu například u dialkylsulfoxidů s nestejnými alkyly. U chirálních sulfoxidů se elektronový pár na heteroatomu považuje za atom s nulovou hmotností (fantomový atom), a tedy za atom s nejnižší prioritou (4) ve smyslu konvence CIP (Schéma 17).

Vraťme se nyní k naší vzorové molekule a doplňme v jejím názvu specifikaci její struktury v prostoru. Dvojně vazbě v poloze 2 náleží konfigurace *E* a dvojně vazbě v poloze 5 konfigurace *Z* (Schéma 18).

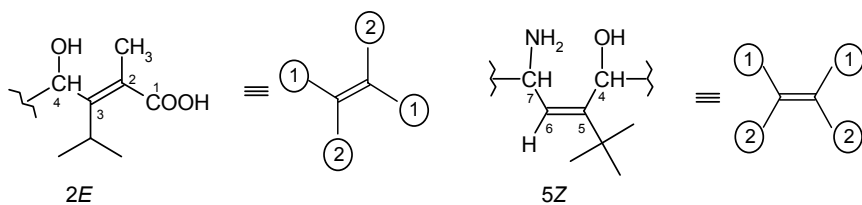


Schéma 18

K přiřazení stereodeskriptorů na asymetrických uhlících postačí myšlenkově vyjmout příslušný fragment z dané struktury a promítnout jej ve smyslu Fischerovy projekce. Podmínkou je, aby se valenční úhel příslušného asymetrického uhlíku (C–C\*–C) pozoroval vždy ze strany vypuklého úhlu (Schéma 19).

Získané stereodeskriptory popisující relativní konfiguraci (*E* a *Z*) a absolutní konfiguraci na stereogenních centrech (*R* a *S*) se seřadí spolu s příslušnými lokanty a takto získaná „prostorová“ část názvu se uvede před jeho konstituční část, jak je uvedeno v úvodní části příspěvku.

Kromě již uvedených mnemotechnických pomůcek, existuje řada dalších. Všechny však vyžadují znalost kreslení konfiguračních perspektivních vzorců, Fischerových projekčních konfiguračních vzorců a znalost zásad konvence CIP. Lze je v zásadě rozdělit do dvou skupin – ma-

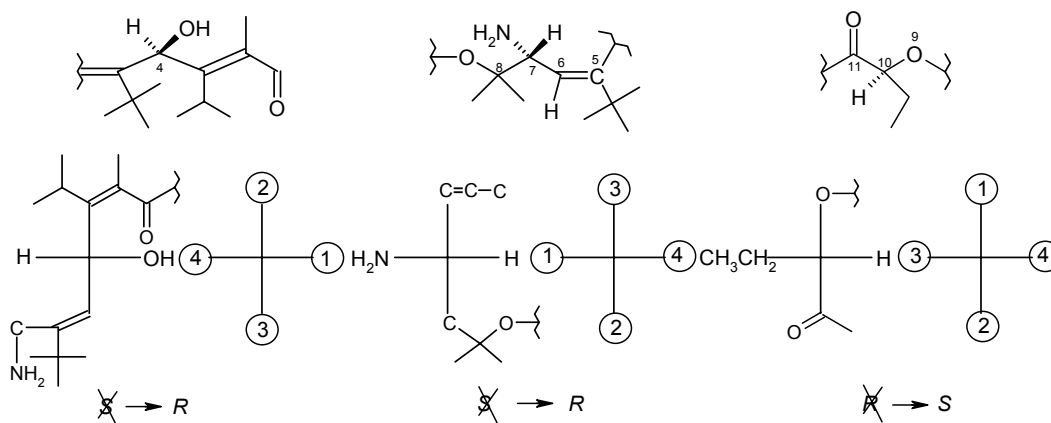


Schéma 19

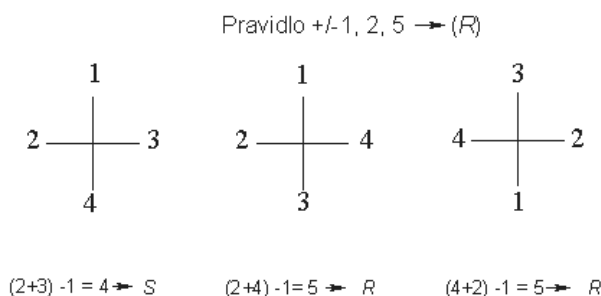


Schéma 20

tematických a „ručních“.

Do skupiny matematických pomůcek patří postup, podle kterého se přiřazuje absolutní konfigurace přímo z Fischerovy projekce na základě priority jednotlivých ligandů. Nazývá se pravidlem<sup>37</sup>  $+/-1, 2$  a  $5$ . Podle něho se sečtou posloupnostní čísla na horizontálních vazbách. Od tohoto součtu se odečte horní číslo na vazbě vertikální za předpokladu, že levé horizontální číslo je menší než pravé. Je-li tomu naopak, odečítá se od součtu horizontálních čísel spodní vertikální číslo. Pokud jsou výsledkem těchto operací čísla  $+/-1$ ,  $+/-2$ ,  $+/-5$ , má stereogenní centrum konfiguraci *R*, jakýkoliv jiný číselný výsledek indikuje konfiguraci *S* (Schéma 20).

Jiná „matematická“ metoda pro přiřazení stereodeskriptorů *R/S* spočívá na tzv. násobících pravidlech<sup>38</sup>. Je

obecně použitelná pro stereogenní centra v prostorových i ve Fischerových vzorcích, v Newmanově projekci a je použitelná i pro sloučeniny axiálně chirální. Podle nich se zvolí kterýkoliv z ligandů 1 až 4 jako referenční. Pokud směřuje referenční ligand před rovinu nákresny, dostává znaménko (+), směřuje-li za rovinu nákresny, dostává znaménko (-). Je-li jeho posloupnostní číslo liché (1 a 3), dostává druhé znaménko (+), je-li sudé (2 a 4), dostává znaménko (-). Poslední, třetí znaménko se získává ze směru otáčení zbývajících tří ligandů v pořadí klesající priority. Otáčí-li se pomyslným volantem doprava, získává se znaménko (+), doleva (-). Odpovídající stereodeskriptor *R/S* je výsledkem součinu těchto tří znamének; výsledné znaménko (+) odpovídá konfiguraci *R*, znaménko (-) odpovídá konfiguraci *S* (Schéma 21).

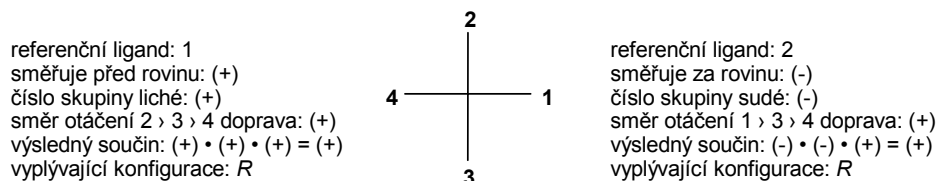


Schéma 21

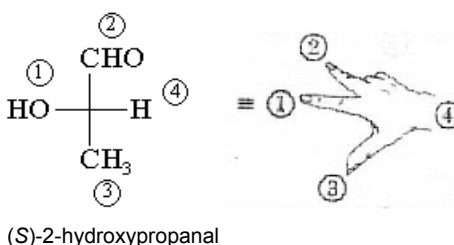
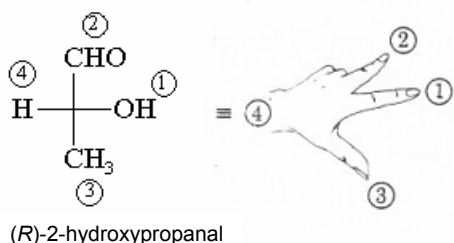


Podobný postup<sup>39</sup> je doporučován pro všechny trojrozměrné (3D) struktury. Kterýkoliv z ligandů (substituentů) s přiřazeným posloupnostním číslem může být opět zvolen za referenční, ať už směřuje k pozorovateli nebo od něho. Správná konfigurace *R* nebo *S* se odvozuje ze směru otáčení pomyslným volantem tvořeným zbývajících ligandy a ze znaménka (+) nebo (–), které náleží referenčnímu ligandu podle toho, směřuje-li k pozorovateli či od něho a které je uvedeno v následující tabulce.

směr k pozorovateli	+	–	+	–
posloupnostní číslo ligandu	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>
směr od pozorovatele	–	+	–	+

Znaménko (+) znamená, že deskriptor *R* nebo *S* získaný ze směru otáčení pomyslným volantem doprava nebo doleva je správný, znaménko (–) znamená, že takto získaný deskriptor správný není a musí být změněn na opačný (*R* na *S* nebo *S* na *R*). Uvedenou tabulku si není nutné pamatovat. Lze ji kdykoliv odvodit, uvědomíme-li si, že podle konvence CIP „otáčivého volantu“ musí mít ligand **4** při správné orientaci směrem od pozorovatele symbol (+). Symboly (+) a (–) se poté přiřazují střídavě zbývajícím ligandům. Postup lze ukázat na Fischerově vzorci obecně formulovaného enantiomeru z předcházejícího příkladu volbou aspoň dvou ligandů coby referenčních substituentů:

a) Ligand **1**: směřuje k pozorovateli a podle uvedené tabulky mu přísluší znaménko (+). Řazení zbývajících ligandů **2** > **3** > **4** je ve směru chodu hodinových ručiček, a resultující konfigurace *R* je tedy správná.



a resultující konfigurace *S* je proto nesprávná a je nutné změnit ji na *R*.

Pravidla druhé skupiny využívají ruce, které lze považovat za alternativní modely s kvazi-tetraedrickým uspořádáním. Postupuje se následujícím způsobem<sup>40,41</sup>:

1. Paže (zápěstí) se ztotožní s vazbou spojující ligand **4** s asymetrickým uhlíkem. Palec, ukazovák a prostředník se ztotožňují s vazbami směřujícími k substituentům vyšší priority (**1**→**2**→**3**). Zbývající dva prsty, prsteník a malíček, zůstávají staženy do dlaně.
2. Je-li ve Fischerově projekci substituent **4** na horizontálních vazbách vlevo od vertikály, použije se levá ruka, je-li vpravo, použije se pravá ruka. V obou případech se první tři prsty umístí nad vazby směřující k substituentům **1**→**2**→**3** tak, aby je v prostoru přesně kopírovaly.
3. Jednotlivým prstům se přiřadí odpovídající vazby se substituenty s „posloupnostními“ čísly **1**, **2** a **3**.
4. Poté se ruka otočí k obličejí tak, aby paže (vazba k substituentu **4**) směřovala od obličejí. Zbývající prsty (substituenty) se pozorují v pořadí klesající priority (**1**→**2**→**3**). Jsou-li seřazeny ve směru chodu hodinových ručiček, získává C\* konfiguraci *R*, jsou-li seřazeny proti směru pohybu hodinových ručiček, získává konfiguraci *S* (Schéma 22).

Předcházející postup byl modifikován<sup>42</sup> v tom smyslu, že priorita prvních tří substituentů byla předem přisouzena určitým prstům; prostředníku byl přisouzen substituent **1**, s nejvyšší prioritou, ukazováku substituent **2** a palci substituent **3**. Vazba k substituentu **4** se potom kryje s loktem pravé či levé ruky. Při tomto způsobu si student nemusí

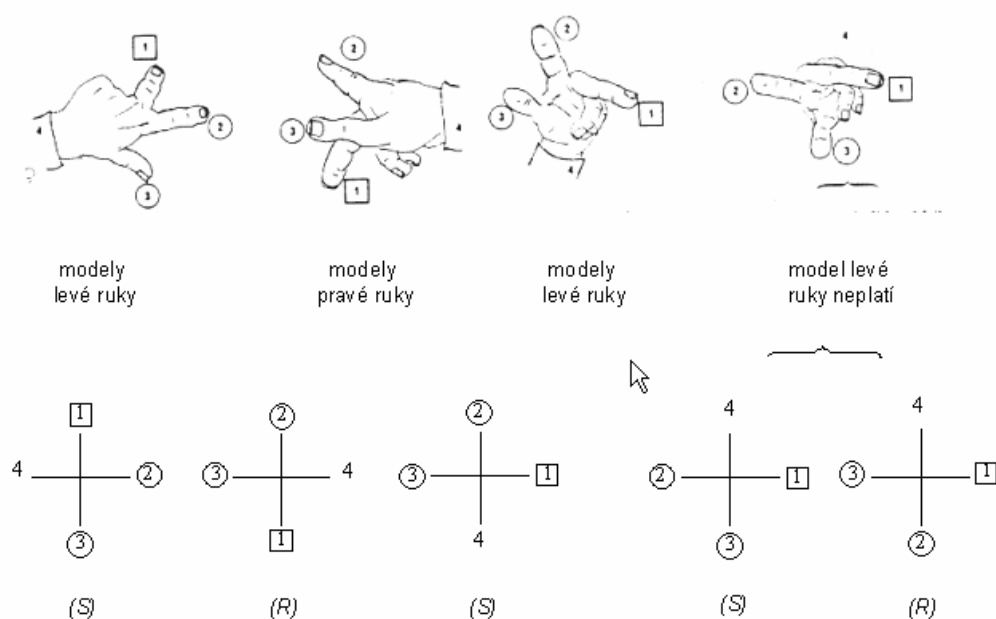


Schéma 23

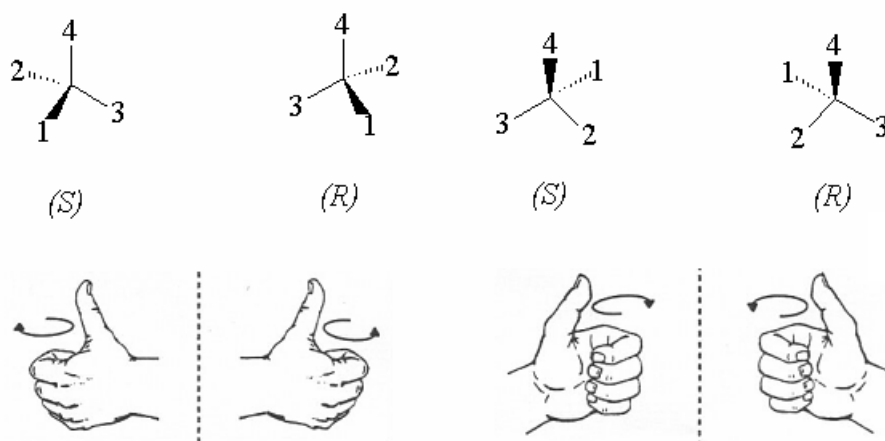


Schéma 24

pamatovat identitu prstů se substituenty (ligandy), ani nemusí sledovat směr otáčení pomyslného volantu. Sleduje pouze, jestli pořadí substituentů ve Fischerově projekci odpovídá prioritě jednotlivých prstů; jsou-li to prsty levé ruky, má asymetrický uhlík konfiguraci *S*, jsou-li to prsty pravé ruky, má konfiguraci *R* (Schéma 23).

Ruce, jakožto model pro chirální objekt, mohou být použity k přiřazení stereodeskriptorů *R/S* na základě pravidla pravé ruky<sup>43–45</sup>, připomínající stejnojmenné pravidlo pro učení směru magnetických siločar kolem vodiče, kterým prochází elektrický proud. Podle něj se dlaň pravé

ruky umístí na stereogenní centrum, palec se ztotožní s osou  $C^*-4$  a sleduje se, jestli jsou zbývající substituenty (ligandy) seřazeny ve směru zbyvajících ohnutých prstů, jakoby obepínajících tuto vazbu, a to v pořadí klesající priority  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$  nebo  $2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$  nebo  $3 \rightarrow 1 \rightarrow 2$ , protože posloupnost je cyklická. Je-li tomu tak, přiřadí se konfigurace *R*. Pokud tomu tak není, např. posloupnost je  $1 \rightarrow 3 \rightarrow 2$ , jsou předcházející požadavky splněny pro levou ruku a konfigurace stereogenního centra je *S* (Schéma 24).

## Struktury s helikální stereogenní jednotkou<sup>9,19,46</sup>

Zvláštním případem chiralidy je helicity. Setkáváme se s ní u sloučenin s helikální (šroubovicovou) strukturou. Molekuly takových sloučenin obsahují ve své struktuře tzv. helikální stereogenní jednotku, kterou představuje řetězec čtyř atomů, které neleží v rovině a které vytvářejí helix (šroubovici). Šroubovice je už sama o sobě chirální. Je definována: a) osou, b) smyslem závitů a c) chodem závitů, tj. poměrem parametrů určujících posun ve směru osy a rotací kolem osy. Smysl závitů odpovídá smyslu chiralidy, absolutní konfiguraci. Pravotočivý helix spojuje posun podél osy ve směru od pozorovatele s otáčením souhlasným s pohybem hodinových ručiček. Tato absolutní konfigurace se vyjadřuje u sloučenin stereodeskriptorem *P* (plus). Levotočivý helix se označuje u sloučenin stereodeskriptorem *M* (minus) a spojuje naopak posun s otáčením proti směru chodu hodinových ručiček (Schéma 25).

Specifikace helicity, která je ekvivalentní smyslu chiralidy, vyžaduje proto volbu preferované helikální jednotky, a tou je ta, která obsahuje ligandy nejvyšší priority podle konvence *R/S*. Přiřazení příslušných stereodeskriptorů *P* a *M* závisí potom na tom, kterým směrem musíme otáčet vazbou mezi atomy 1 a 2 kolem vazby 2–3, aby přešla do zákrytové konformace s vazbou mezi atomy 3 a 4. Při otáčení doprava se přiřazuje stereodeskriptor *P*, při otáčení doleva stereodeskriptor *M*. Oba stereodeskriptory se píšou kurzivou, uvádějí se v závorkách před název sloučeniny, od něhož se oddělují spojovníkem.

Do kategorie sloučenin, ve kterých je stereogenní jednotkou šroubovice, patří sloučeniny s osou chiralidy, nazývané axiálně chirální sloučeniny, a sloučeniny s rovinou chiralidy, tzv. planárně chirální sloučeniny.

Ve skutečnosti se pro vyjádření absolutní konfigurace uvedených typů sloučenin používají jak symboly chiralidy (*R/S*), tak i helicity (*P/M*). Při použití *R/S* systému bývají tyto afixy uváděny jako  $R_a/S_a$  pro axiálně chirální sloučeniny nebo  $R_p/S_p$  pro sloučeniny s planární chiralitou.

## Axiálně chirální sloučeniny<sup>9,19,46</sup>

Mezi axiálně chirální sloučeniny – sloučeniny s nerovinným uspořádáním čtyř skupin po dvou párech okolo osy chiralidy (chiralitní osy) – náležejí například deriváty allenu, alkylidencykloalkany, spiroalkany, deriváty adamantanu a konformační enantiomery s omezenou rotací, zvané atropoisomery.

Při odvozování absolutní konfigurace se perspektivní vzorce odpovídajících enantiomerů promítnou do nákretné projekce podobným Newmanově projekci tak, že se molekuly pozorují ve směru jejich os chiralidy. Při projekci nezáleží na směru pozorování, protože projekce získané pohledem z obou směrů vedou ke stejnému stereodeskriptoru.

Postup lze uvést na příkladu enantiomerů 1,3-dichlorpropadienu. V projekčních konfiguračních vzorcích se jednotlivé ligandy (substituenty) označí podle již zmíněných pravidel posloupnosti (CIP) systému tak, že se začne nejprve se substituenty (ligandy) v přední části molekuly (vždy souvislá čára), které získávají číselné označení 1 a 2, a pokračuje se v zadní části molekuly, kde substituenty (vycházející až z obvodu nakresleného kroužku) dostávají čísla 3 a 4. Jsou-li substituenty v takto získaném projekčním vzorci řazeny 1 → 2 → 3 ve směru chodu hodinových ručiček, získává molekula konfiguraci  $R_a$ , jsou-li řazeny proti chodu hodinových ručiček, obdrží konfiguraci  $S_a$  (Schéma 26).

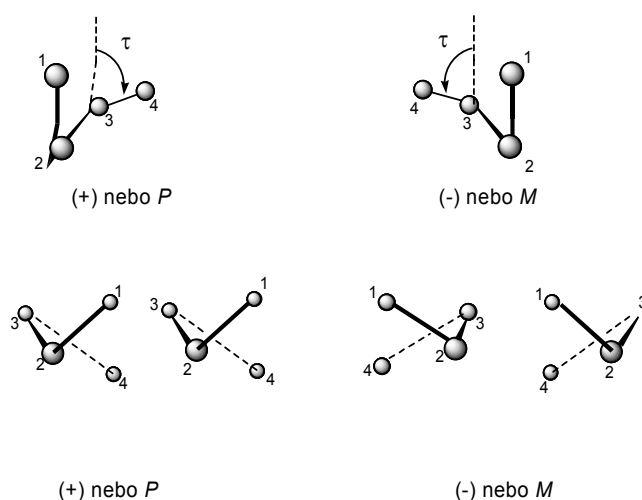


Schéma 25

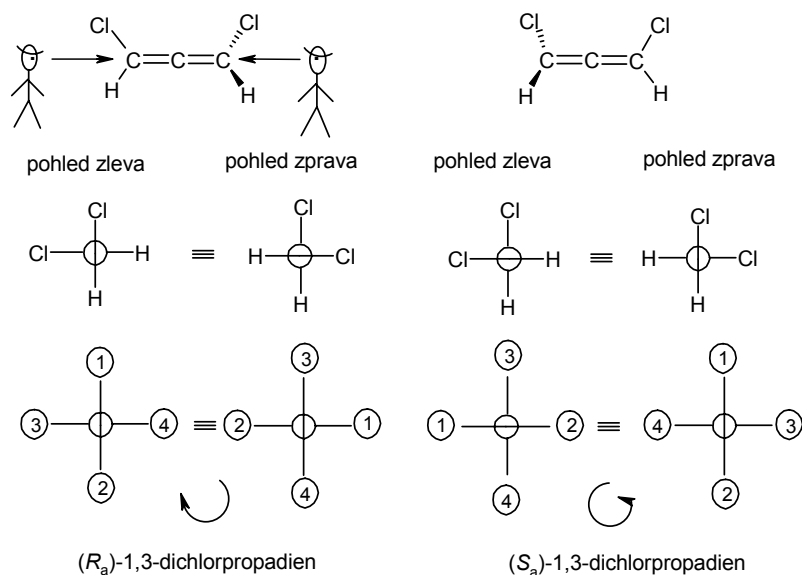
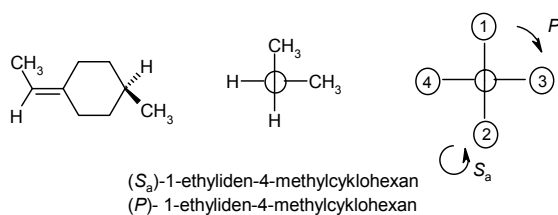


Schéma 26



Schéma 27



Při odvozování stereodeskriptorů  $P$  a  $M$  se označí koncové atomy helikální jednotky čísly 1 až 4 a poté se otáčením vazby mezi atomy 1 a 2 okolo vazeb 2 až 3 tak, aby přešla tato vazba do zákrytové konformace s vazbou mezi atomy 3 a 4, získá příslušný stereodeskriptor (Schéma 27).

K tomuto účelu lze použít i uvedené Newmanovy projekce. Otáčením vazby nesoucí ligand 1 kolem osy molekuly tak, aby přešla do zákrytové konformace s vazbou nesoucí ligand 3, se získá stereodeskriptor  $P$ , je-li směr torzního úhlu kladný, nebo  $M$ , je-li záporný.

Popsaný postup lze dále ukázat vždy na jednom enantiomeru vhodně substituovaného alkylidencyklohexanu, spiroalkanu, adamantanu (schéma 28), nebo substituovaného bifenyly, u něhož je znemožněna volná otáčivost kolem jednoduchých vazeb (jev zvaný atropisomerie) (Schéma 29), případně molekul, jejichž chiralita je vyvolaná násilným vybočením uhlíkatého skeletu z roviny, jako je tomu například u molekuly hexahelicenu (Schéma 30).

Je nutné upozornit na souvislost mezi stereodeskriptory  $R_a/S_a$  a  $P/M$  u axiálně chirálních sloučenin, afixu  $R_a$  odpovídá afix  $M$  a afixu  $S_a$  odpovídá afix  $P$  a obráceně.

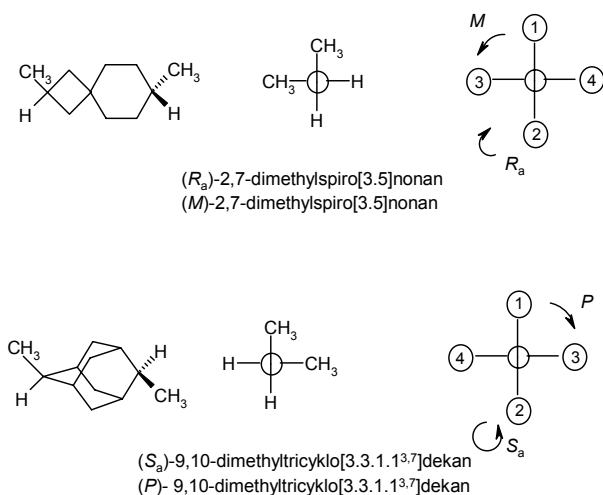


Schéma 28

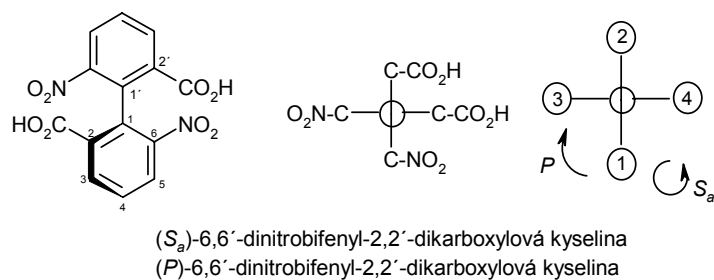


Schéma 29

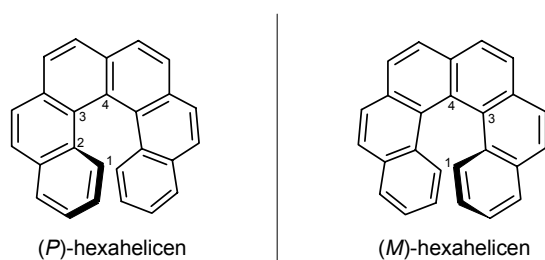


Schéma 30

Také u axiálně chirálních sloučenin lze pro přiřazení konfigurace *R/S*, vedle předchozích postupů, použít již zmíněné pravidlo pravé ruky. Po označení ligandů posloupnostními čísly 1 až 4 se přiloží palec ruky podél osy chiraloty tak, aby směřoval k ligandu s posloupnostním číslem 4 a sleduje se pořadí zbývajících ligandů ve směru zbylých prstů, jakoby obepínajících osu chiraloty v pořadí 1 → 2 → 3 resp. 2 → 3 → 1 či 3 → 1 → 2, neboť posloupnost je cyklická. Je-li uvedená posloupnost splněna pro pravou ruku, přiřadí se stereodeskriptor *R* nebo *M*, není-li tomu tak, pak je splněna pro levou ruku a konfigurace stereogenního centra je *S* nebo *P* (Schéma 31).

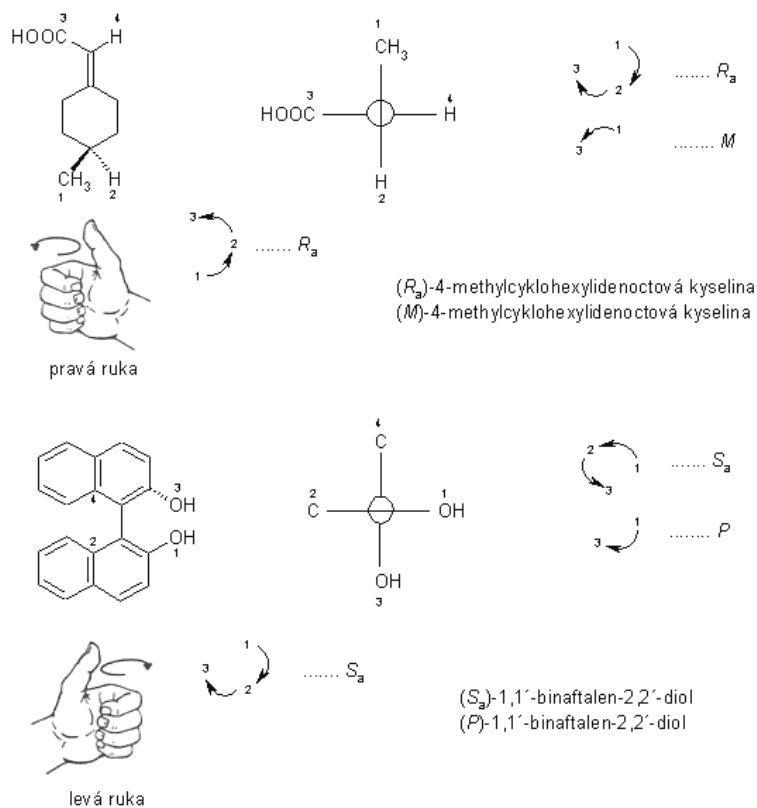


Schéma 31

## Topicita<sup>46–48</sup>

V souvislosti s přednostním vznikem jednoho z enantiomerů při tzv. enantioselektivních reakcích je nutné vyjadřovat nejen absolutní konfiguraci vzniklých produktů, ale i směr, ve kterém reakční částice přistupuje k reakčnímu centru, tzv. topicitu. Stereochemická neekvivalence ligandů (a jednotlivých stran molekul) se označuje jako heterotopicita, (*heteros*, řec. rozdílný a *topos*, řec. místo).

Achirální molekuly, které při enantioselektivních reakcích poskytují chirální produkty se nazývají prochirální, jeví tzv. prochiralitu. Za centrum prochiralitu nebo také prostereogenní centrum se považuje atom, který by se stal centrem chiralitu (chiralitním), kdybychom dva nerozlišitelné substituenty pokládali za rozdílné. Takovýmto stereoheterotopickým ligandům na prostereogenním centru se přiřazují stereodeskriptory *pro-R* a *pro-S*, a to na základě hypotetické substituce jednoho z nich těžším isotopem. Stereotopický ligand, jehož substitucí vzniká enantiomer konfigurace *R*, pak získává označení *pro-R* a zcela analogicky druhý ligand získává označení *pro-S*. Uvedené afixy nemusí nezbytně znamenat, že obecnou substitucí ligandu *pro-R* (nebo *pro-S*) by mělo vzniknout stereogenní centrum konfigurace *R* (nebo *S*). Neexistuje žádný vtaž mezi deskriptory *pro-R/pro-S* a konfigurací produktu *R/S*, která se přiřazuje nezávisle podle pravidel posloupnosti, jak je zřejmé z příkladů substituce atomů chloru v molekule 2,2-dichlorbutanu (Schéma 32).

Mnemotechnika<sup>48</sup> umožňující přiřazení stereodeskriptorů *pro-R*, *pro-S* vychází z Fischerových konfiguračních vzorců. Pokud jsou ligandy (v případě ethanolu vodíkové atomy) na prostereogenním centru na horizontálních vazbách a ze zbývajících substituentů je posloupnostně vyšší substituent na horní vertikální vazbě, potom, podle mnemotechniky „top-right“, získává deskriptor *pro-R* (resp.  $H_R$ ) ligand (vodík) vpravo, je-li posloupnostně vyšší substituent na spodní, vertikální vazbě, platí zase „bottom-left“ (Schéma 33).

Pokud jsou ligandy na vertikálních vazbách a zbývající substituenty na horizontálních, mění se mnemotechnika z „top-right“ na „right-top“ a z „bottom-left“ na „left-bottom“ (Schéma 34).

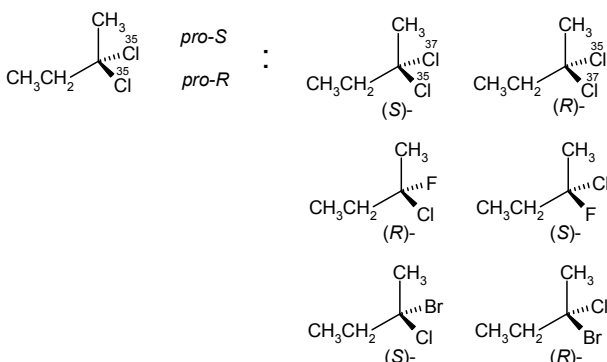


Schéma 32

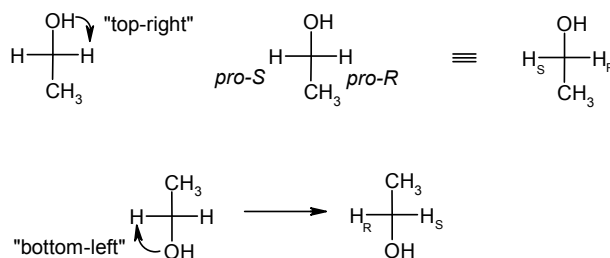


Schéma 33

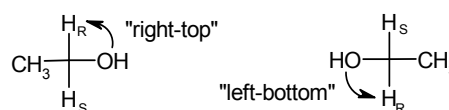


Schéma 34

## Stanovení počtu a druhu stereoisomerů<sup>49</sup>

Stanovení počtu stereoisomerů (enantiomerů, diastereomerů, mesoform) u molekul se značným stupněm symetrie a s větším počtem asymetrických uhlíků nečiní zpravidla potíže, pokud je znázorníme ve Fischerových vzorcích. Charakteristickým příkladem mohou být stereoisomery kyseliny vinné, která existuje v jedné mesoformě (achirální kyselina mesovinná) a ve dvou enantiomerech, (kyselina D-vinná a L-vinná) (Schéma 35).

Výrazné snížení počtu zdánlivých stereoisomerů lze pozorovat u molekuly 2,3,4-trihydroxypentandiové (Schéma 36). Nakreslíme-li je všechny ve Fischerově projekci, zjistíme, že kyselina může existovat jenom ve formě čtyř stereoisomerů, z nichž dva jsou mesoformou (**a**, **e**) a dva jsou enantiomery (**c**, **d**). Stereoisomery **a** a **b** jsou identické a odpovídají kyselině ribarové. Také stereoisomery **e** a **f** jsou identické a odpovídají kyselině xyloarové. Obě kyseliny **a** a **e** jsou mesoformami, zdánlivě asymetrický uhlík, který leží v rovině symetrie je označován jako pseudoasymetrický a jeho absolutní konfigurace se označuje malými písmeny *r* a *s*, která se odvozují podle uvedených posloupnostních pravidel s tím, že ligand s konfigurací *R* je nadřazen ligandu s konfigurací *S*. Otočením stereoisomeru **c** o 180° v rovině nákresny jej ztotožníme se stereoisomerem **g** (**c** = **g**) a analogicky isomer **d** ztotožníme s isomerem **h** (**d** = **h**).

U sloučenin s vysokým stupněm symetrie, které zahrnují různé druhy stereogenních jednotek, není vždy jednoduché z nakreslených stereoisomerů identifikovat jejich vzájemné vztahy (enantiomery, diastereomery, shodné struktury). Jako příklad může posloužit axiálně chirální spirocyklický diol zahrnující ve své struktuře tři stereogenní jednotky – osu chiralitu a dva asymetrické uhlíky (Schéma 37).

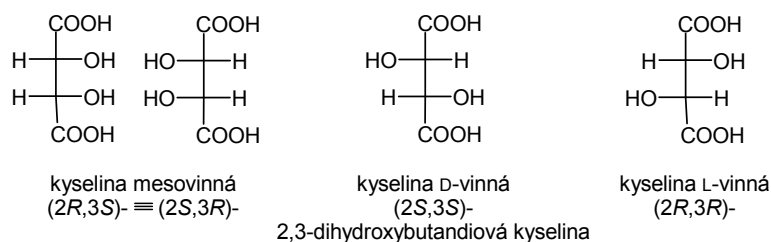


Schéma 35

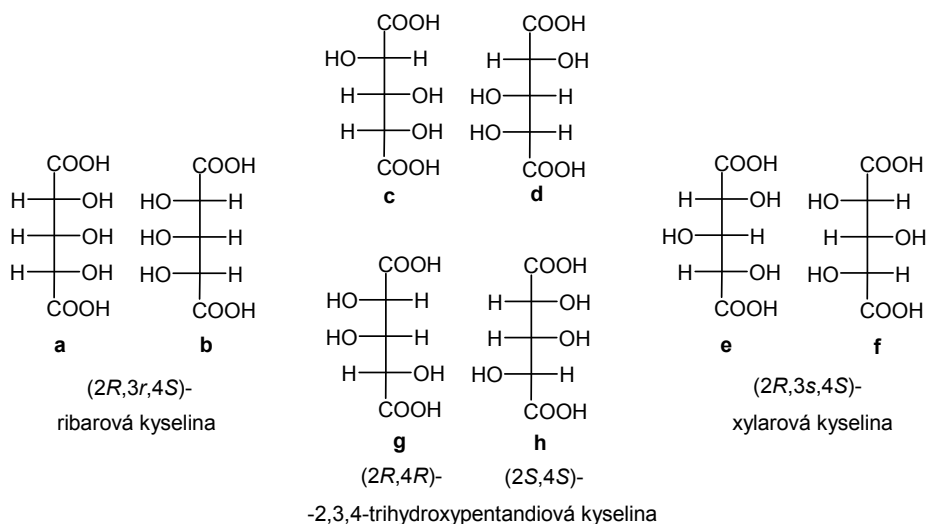


Schéma 36

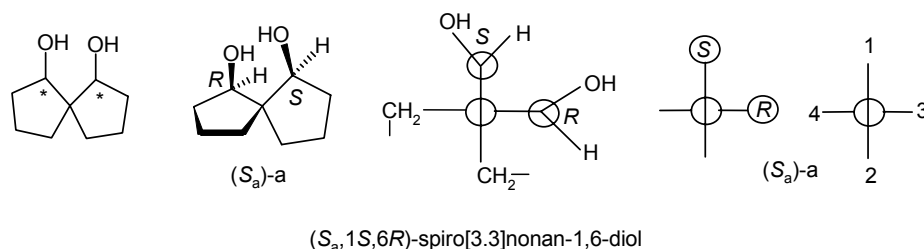


Schéma 37

Podobně, jako jsme kreslili projekční konfigurační vzorec jednoho stereoisomeru – (*S<sub>a</sub>*)-a, můžeme nakreslit projekční konfigurační vzorec zbývajících sedmi zdánlivě možných stereoisomerů, jejichž celkový počet je dán vztahem  $2^3 = 8$  (Schéma 38).

K identifikaci případně shodných struktur navrhnul Haudrechy<sup>49</sup> jako mnemotechnickou pomůcku dvě manipulace s uvedenými projekčními vzorci, při nichž zůstává konfigurace na všech stereogenních centrech zachována. První manipulací je rotace projekčního vzorce podle vertikální osy o 180° (obrácení) a druhou je otočení projekčního vzorce o 90° v rovině nákresny. Spojením obou mani-

pulací zjistíme, že stereoisomer (*S<sub>a</sub>*)-a je shodný se stereoisomerem (*S<sub>a</sub>*)-b (Schéma 39) a podobně, že stereoisomer (*R<sub>a</sub>*)-a je shodný se stereoisomerem (*R<sub>a</sub>*)-b (Schéma 40). Znamená to, že uvedený spirodiol existuje ve formě tří párů enantiomerů – (*S<sub>a</sub>*)-a=b / (*R<sub>a</sub>*)-a=b, (*S<sub>a</sub>*)-c / (*R<sub>a</sub>*)-c a (*S<sub>a</sub>*)-d / (*R<sub>a</sub>*)-d. Všechny ostatní vztahy mezi uvedenými strukturami jsou vztahy diastereomerní.

Co říci závěrem? Některé z uvedených mnemotechnik pro přiřazení konfigurace *R/S* vyvolávají dojem, jako by vyžadovaly další mnemotechniku pro jejich zapamatování. Nepochybně postačí zvládnout jenom jednu mnemotechniku pro odvození konfigurace z prostorového vzorce a jed-

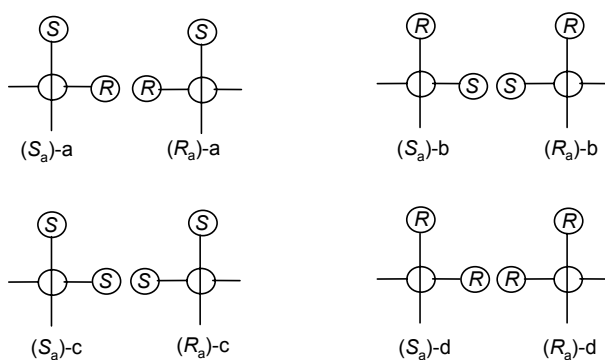


Schéma 38

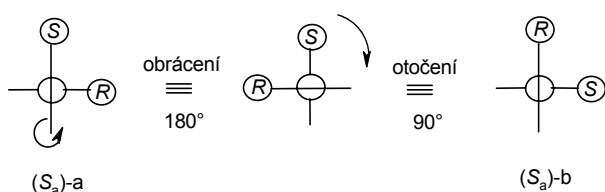


Schéma 39

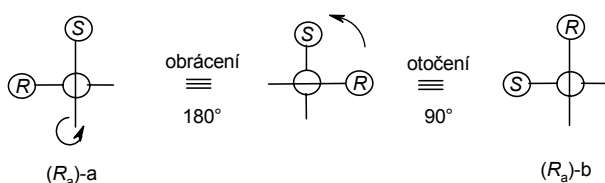


Schéma 40

nu z Fischerovy projekce, ale i ty jsou pro mnohé jenom dočasně užitečné, alespoň do doby, než si natrénují prostorovou představivost. Velký počet navrhovaných mnemotechnik svědčí nejen o didaktické závažnosti daného tématu, ale i o tom, jak rádi si chemici myšlenkově pohrávají se strukturami organických molekul. A tato strukturální grafická názvoslovná hra je jenom prvním krokem k tomu, aby se později začali zabývat otázkami, jak podobné molekuly syntetizovat, a jak případně „ošálit“ přírodu tím, že začnou připravovat látky, které příroda nemá ve svém syntetickém repertoáru a které mohou být i účinnější nežli látky přírodní.

V současné době existují chemické strukturální editory<sup>50,51</sup>, jako například Hyperchem nebo ACD/ChemSketch, které umožňují vyčíst ze strukturálního perspektivního vzorce správně konfiguraci *R/S* nebo *Z/E*. Dokáží však také z názvu obsahujícího správně strukturální deskriptory a lokanty nakreslit strukturu molekuly v trojrozměrném prostoru. Lze je využít zvláště v případech složitých struktur ke kontrole odvozené konfigurace.

Autor děkuje paní Martině Kovandové za pečlivě nakreslení obrázků a panu PhDr. Martinu Adamcovi za přečtení textu a připomínky k němu.

## LITERATURA

1. a) Matoušek J.: Chem. Listy 72, 398 (1978); b) Kamýček Z.: Chem. Listy 77, 424 (1983); c) Košťil J.: Věda a technika mládeži 11, 18 (1986).
2. DeLoach W. S.: J. Chem. Educ. 37, 367 (1960).
3. Liška F.: Chem. Listy 95, 234 (2001).
4. Kolb D.: J. Chem. Educ. 55, 326 (1978); 56, 181 (1979); 58, 642 (1981).
5. Liška F.: Chem. Listy 79, 485 (1985).
6. Bláha K., Ferles M., Staněk J.: *Nomenklatura organické chemie, Pravidla IUPAC 1979, oddíl A,B,C,D a F*. Academia, Praha 1985.
7. Panico R., Powell W. H., Richer J.-C.: *Průvodce názvoslovím organických sloučenin podle IUPAC. Doporučení 1993*. Academia, Praha 2003.
8. Moss G.P.: *Basic Terminology of Stereochemistry. IUPAC Recommendations 1996*; Pure Appl. Chem. 68, 2193 (1996).
9. Červinka O.: Chem. Listy 93, 294 (1999).
10. Jonas J.: Chem. Listy 90, 410 (1996).
11. McMurry J.: *Organická chemie*, VUTIUM Brno - VŠCHT Praha, 2007.
12. a) Carey F. A.: *Organic Chemistry*, McGraw-Hill Companies, New York 1996, b) Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P.: *Organic Chemistry*, Oxford University Press, 2001, c) Wade L. G., Jr.: *Organic Chemistry*. Prentice Hall, New York 2003.
13. Jonas J., Mazal C.: *Konspekt ze základů organické stereochemie*, Masarykova Univerzita, Brno 2002.
14. a) Kniežo L., Klinot J.: *Stereochemia organických zlúčenin*, UK Praha, Praha 1984, b) Liška F.: *Konstituce, konformace, konfigurace v názvech organických sloučenin*, VŠCHT Praha, Praha 2008.
15. Eliel E. L.: *Stereochemie uhlikatých sloučenin*, Academia, Praha 1970.
16. Potapov V. M.: *Stereochemie*, SNTL, Praha 1986.
17. Bláha K., Červinka O., Kovář J.: *Základy stereochemie a konformačního rozboru*, SNTL, Praha 1966.
18. Hampel F., Paleček J., Rádl S.: *Farmakochemie*, VŠCHT Praha, Praha 2007.
19. Helmchen G.: *Nomenclature and Vocabulary of Organic Stereochemistry*. in Houben-Weyl: *Methods of Organic Chemistry*, 4. vyd. Stereoselective Synthesis. George Thieme Verlag, Stuttgart 1995.
20. Thomas C. W.: J. Chem. Educ. 65, 44 (1988).
21. Starkey L. S.: J. Chem. Educ. 78, 1486 (2001).
22. Cahn R. S., Ingold C. K., Prelog V.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 5, 385 (1966).
23. Prelog V., Helmchen G.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 21, 567 (1982).
24. Cahn R. S.: J. Chem. Educ. 41, 116 (1964).
25. Eliel E. L.: J. Chem. Educ. 48, 163 (1971).
26. Starkey R.: J. Chem. Educ. 72, 315 (1995).



27. Mandal D. K.: J. Chem. Educ. 77, 866 (2000).
28. Fernelius W. C., Loening K., Adams R. M.: J. Chem. Educ. 51, 735 (1974).
29. Cori O.: J. Chem. Educ. 49, 461 (1972).
30. Idoux J. P.: J. Chem. Educ. 59, 553 (1982).
31. Epling G. A.: J. Chem. Educ. 59, 650 (1982).
32. Ayorinde F. O.: a) J. Chem. Educ. 60, 928 (1983), b) J. Chem. Educ. 62, 297 (1985).
33. Brun Y., Leblanc P.: J. Chem. Educ. 60, 403 (1983).
34. Ruekberg B.: J. Chem. Educ. 64, 1034 (1987).
35. Reddy K. R. N.: J. Chem. Educ. 66, 480 (1989).
36. Yongsheng H., Cailan W.: J. Chem. Educ. 69, 273 (1992).
37. Dietzel R. A.: J. Chem. Educ. 56, 451 (1979).
38. Wang J.-X., Yang C.: J. Chem. Educ. 69, 373 (1992).
39. Eliel E. L.: J. Chem. Educ. 62, 223 (1985).
40. Thoman C. J.: J. Chem. Educ. 53, 502 (1976).
41. Beauchamp P. S.: J. Chem. Soc. 61, 666 (1984).
42. Mattern D. L.: J. Chem. Educ. 62, 191 (1985).
43. Aalund M. P., Pincock J. A.: J. Chem. Educ. 63, 600 (1986).
44. Huheey J. E.: J. Chem. Soc. 63, 598 (1986).
45. Barta N. S., Stille J. R.: J. Chem. Educ. 71, 20 (1994).
46. Aitken R. A.: in *Asymmetric Synthesis* (Aitken R. A., Kilényi S. N., ed.), Blackie Academic & Professional, London 1992.
47. Nasipuri D.: J. Chem. Educ. 66, 483 (1989).
48. Thall E.: J. Chem. Educ. 71, 1034 (1994).
49. Haudrechy A.: J. Chem. Educ. 77, 864 (2000).
50. Drašar P., Valter B., Paleta O.: Chem. Listy 97, 1027 (2003).
51. Pacák J., Drašar P.: Chem. Listy 95, 650 (2001).

**F. Liška** (*Charles University in Prague, Faculty of Chemical Education, Department of Chemistry and Chemical Education*): **Mnemonic in Stereochemical Nomenclature Teaching**

The chemical mnemonic devices enabling students to assign the appropriate configurational descriptor to a stereogenic unit – double bond (*cis/trans*, *E/Z*), stereogenic centre (*R/S*), stereogenic axis ( $R_a/S_a$ , *P/M*) and prostereogenic centre (*pro-R/pro-S*) – are gathered and discussed. In addition to the inspection of stereoforulas, some other mnemonics are included, e.g. the „Rule of Multiplication“, the „Right-Hand Rule of Organic Chemistry“, the „Vertical-4-Verity Rule“, the „Very good Fischer Projection“ and so on. All these devices are applicable both to the perspective formulas and to the Fischer projection formulas.

**Česká společnost chemická  
a Ústav chemie a technologie sacharidů VŠCHT Praha**

pořádají

**mezinárodní konferenci „Polysacharidy IV“.**

Datum a místo konání: 13.–14. 11.2008, na Novotného lávce 5, Praha 1

Konference bude zaměřena na výrobu, přípravu a využití polysacharidů, výskyt, vlastnosti a strukturu biologicky aktivních polysacharidů a deriváty polysacharidů.

Uzávěrka přihlášek je 15. září 2008. Předpokládá se zájem účastníků a společností bez odborného příspěvku.

Úvodní přednášky:

Ing. Jiří Trnka, ředitel odboru environmentální politiky a obnovitelných zdrojů energie, Ministerstvo zemědělství ČR: Koncepce rozvoje biopaliv na bázi škrobnatých a celulózných surovin v ČR a Evropské unii.

Maciej Fiedorowicz Ph.D., Dr. Sc., Department of Chemistry, University of Agriculture, Cracow, Poland: The effect of illumination of polarized light on polysaccharides and polysaccharide degrading enzymes.

Vložené:

Člen ČSCH nebo SCHS 900 Kč, ostatní 1000 Kč. Po 15. září 2008 činí vložené 1200 Kč.

Vložené zahrnuje: CD s plnými texty přednášek a posterů (bude obsahovat ISBN), výtisk Chemických listů č. 9 s abstrakty přednášek a posterů, občerstvení a organizační náklady.

Je možné zajistit ubytování na kolejích na Jižním městě.

Bližší informace na adrese <http://www.csch.cz>

Kontaktní adresa: Česká společnost chemická, Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1,  
tel.: 221 082 370, tel/fax: 222 220 184, e-mail: [chem.listy@csvts.cz](mailto:chem.listy@csvts.cz), [chem.spol@csvts.cz](mailto:chem.spol@csvts.cz)