

CHEMIE DIRADIKÁLŮ

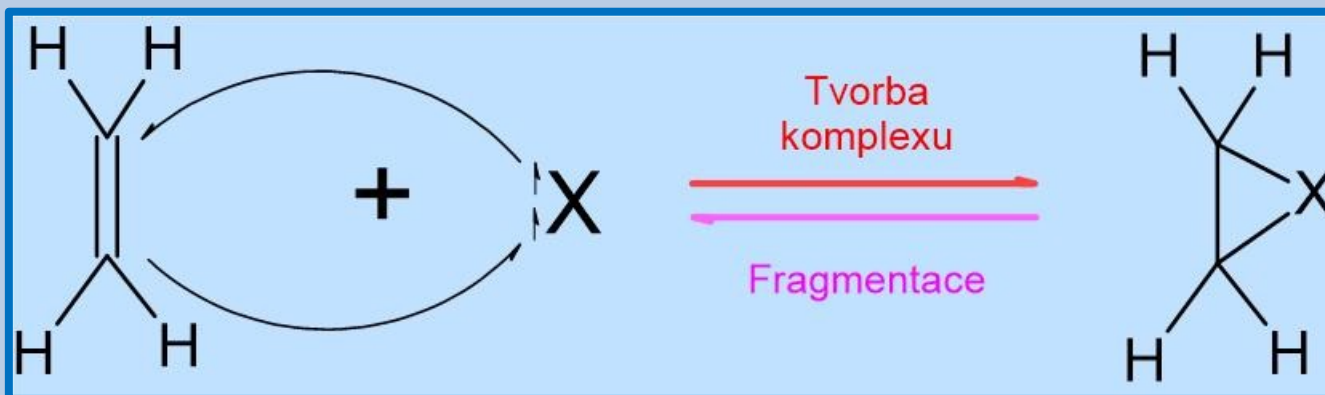
2022

Tomáš Pelikán
(484772)

Chemie diradikálů

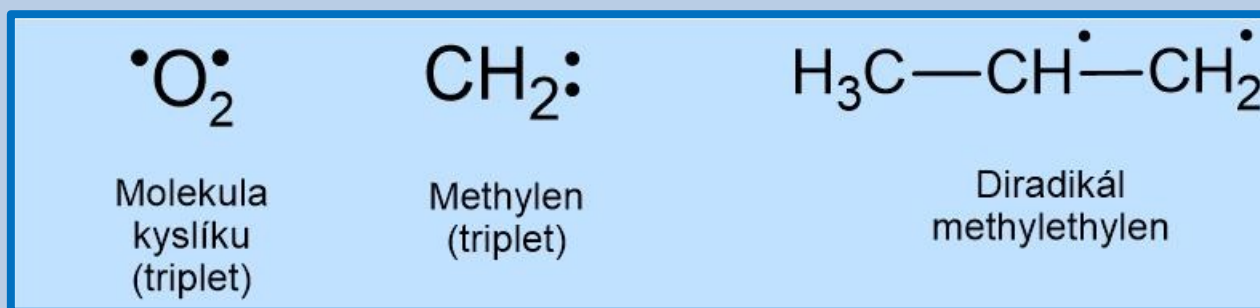
Radikály a **diradikály** mají jeden stejný atribut. Tím je existence nepárového elektronu v jejich orbitalech.

Diradikály se od normálních radikálů ale liší tím, že takové elektrony nemají pouze jeden, ale rovnou **dva**. Nejsou společně v páru a proto se mohou chovat jako dvojnásobné radikály.



Chemie diradikálů

Diradikálový charakter mají například tyto molekuly:



Existují takzvané **diradikálové singlety** a **diradikálové triplety**. Liší se od sebe **elektronovým spinem** ve svých degenerovaných orbitalech.

Elektronový spin elektronů je jejich vlastností a jedná se o rotaci kolem vlastní osy. Značíme jej písmenem s a nabývá hodnot $+1/2$ a $-1/2$.

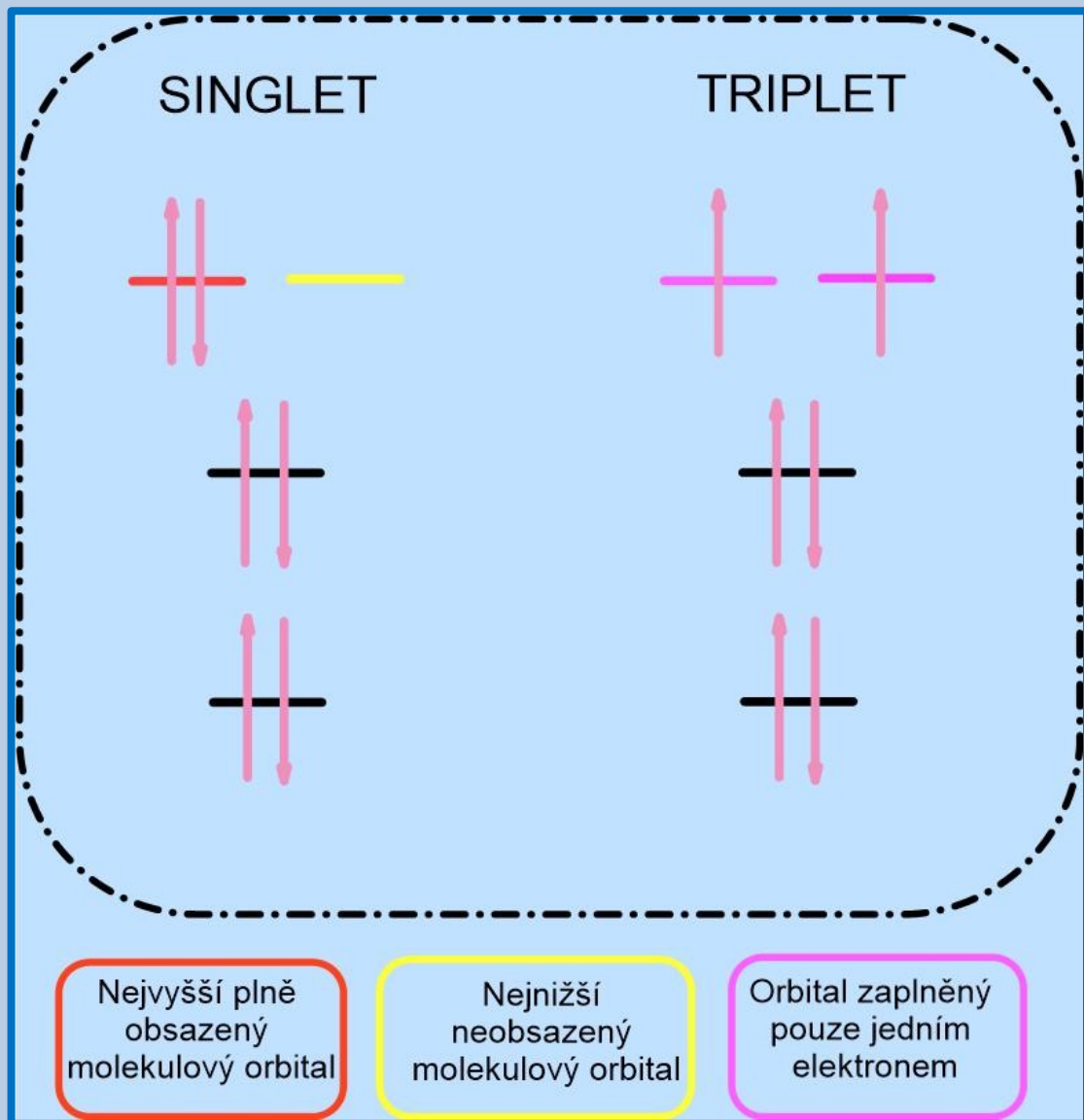
Degenerované orbitaly jsou ty, které mají stejnou energii.

Chemie diradikálů

Singletové diradikály mají plně zaplněný jeden z nejvyšších orbitalů. Druhý je však zcela prázdný.

Tripletové diradikály mají ve svých degenerovaných orbitalech v každém po jednom elektronu se stejným spinem.

Varianta, ve které by byly obsazeny oba orbitaly, ale elektrony s opačným spinem – nestabilní.



Chemie diradikálů

Každý orbital je schopný pojmout maximálně dva elektrony. Pomocí takzvané **multiplicity** (značíme M), můžeme zjistit proč se singlet a triplet diradikály označují právě takto.

Podle rovnice:

$$M = 2|S| + 1$$

S ... celkový součet všech kvantových spinových čísel s.

Pro singlet:

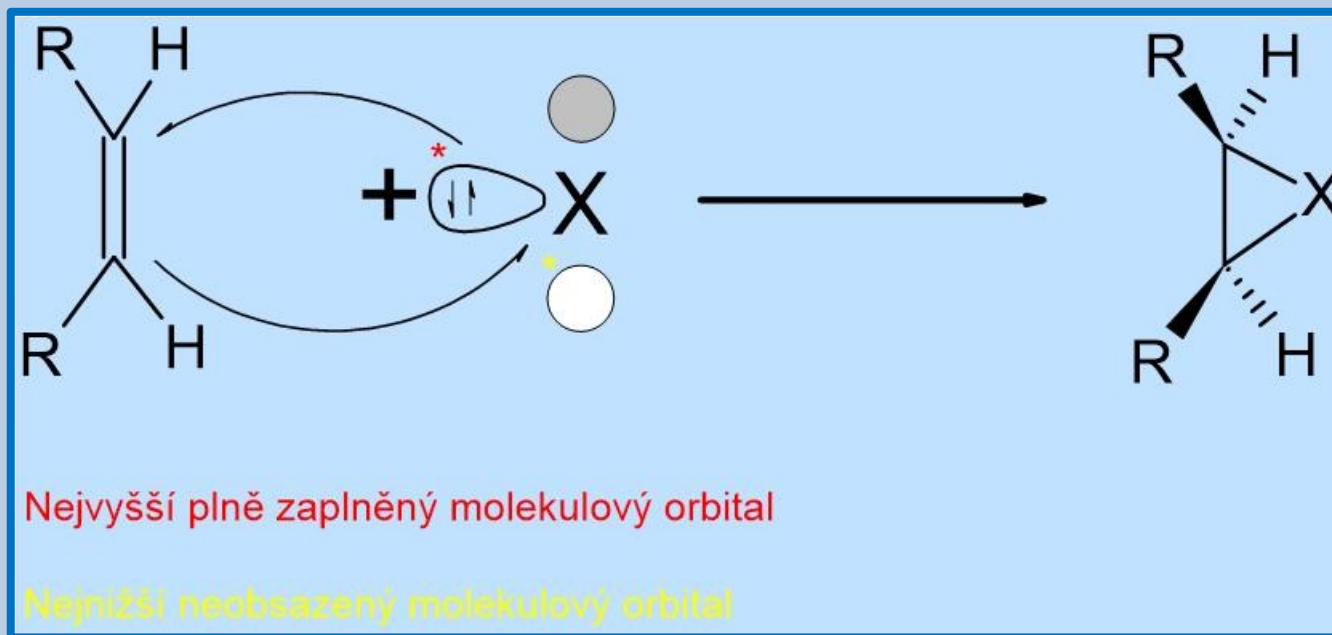
$$S = 3(0,5) + 3(-0,5) = 0 \rightarrow M = 2 \cdot 0 + 1 = \mathbf{1}$$

Pro triplet:

$$S = 4(0,5) + 2(-0,5) = 1 \rightarrow M = 2 \cdot 1 + 1 = \mathbf{3}$$

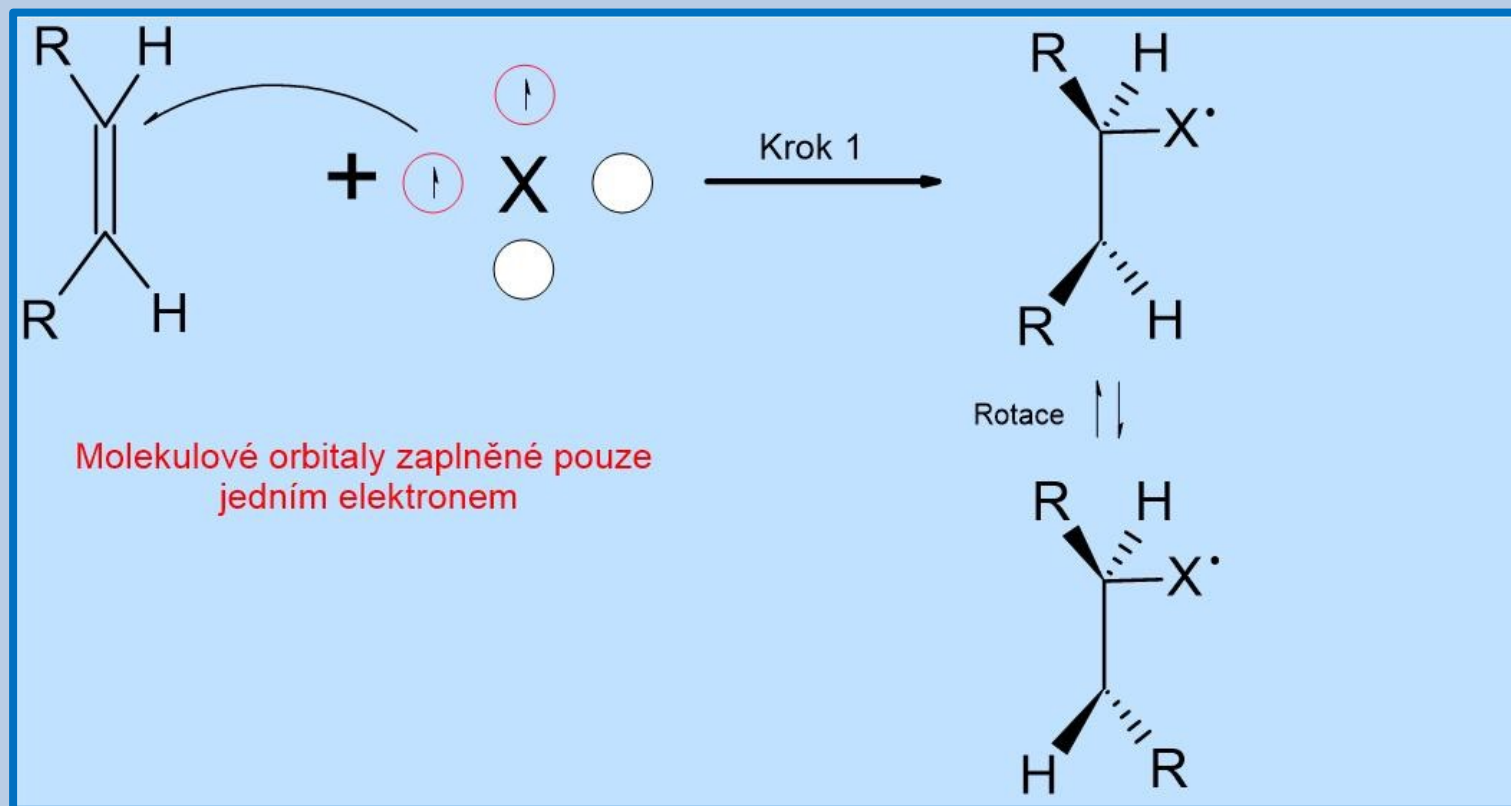
Chemie diradikálů – singlet

Díky plně obsazenému a zcela prázdnému orbitalu dochází k adiční reakci, která probíhá v jednom kroku.



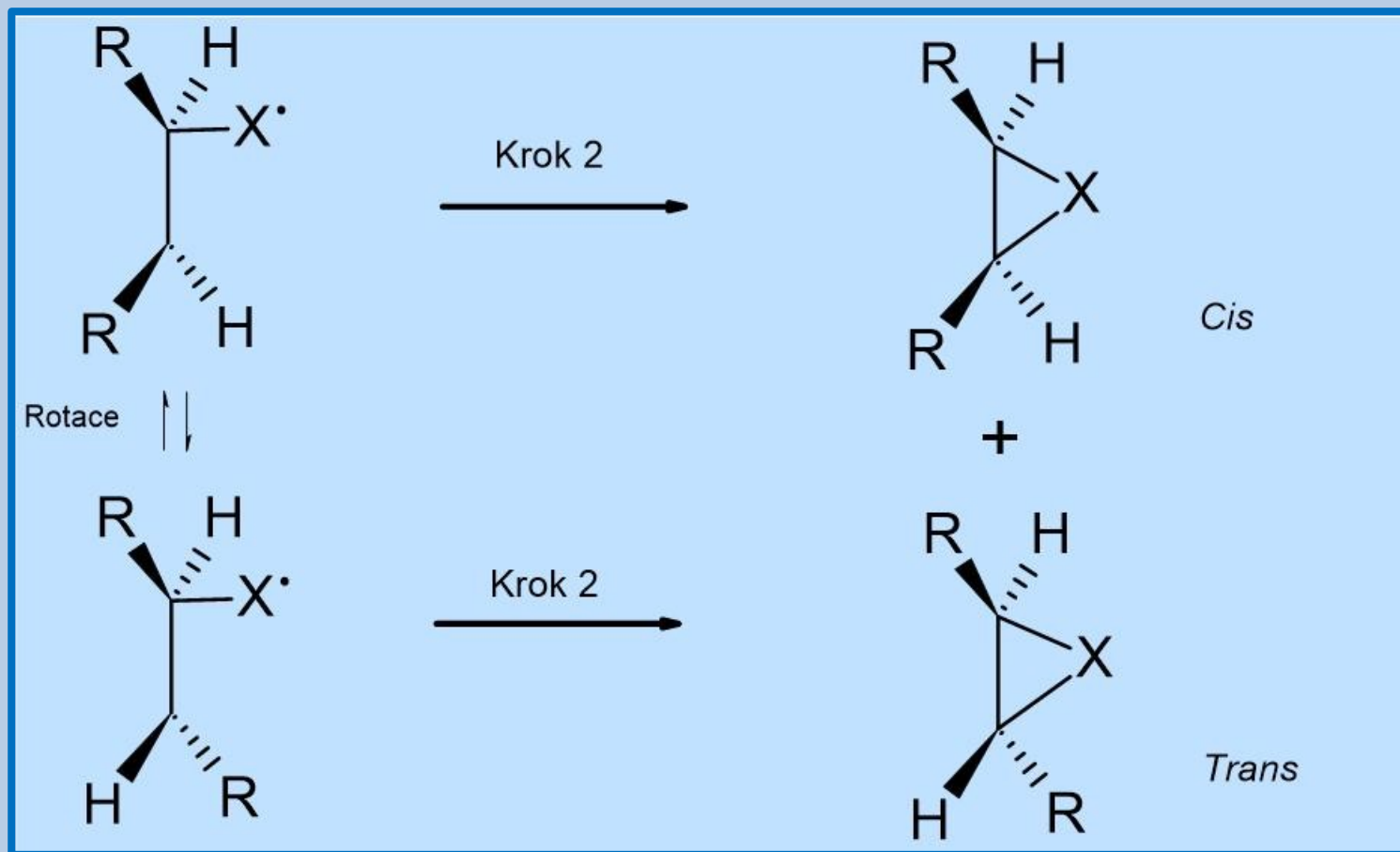
Chemie diradikálů – triplet

Tripletové diradikály mají dva orbitály zaplněné pouze jediným elektronem a reakce má dva kroky. V prvním dojde k narušení násobné vazby a navázání jedním elektronem.



Chemie diradikálů – triplet

V druhém kroku dochází k úplnému navázání diradikálu k molekule. Může dojít k rotaci na dvojně vazbě – vznikají stereochemické izomery.



Seznam zdrojů

- Benešová, M., Pfeiferová, E., & Satrapová, H. (c2014). *Odmaturuj! z chemie*. Nakladatelství DIDAKTIS spol. s.r.o.
- Kafka, Z., Kupková, M., & Zemánek, F. (1986). *Organická chemie: Příruční naučná slovník*. Praha: SNTL.
- Kučera, M. (1984). *Mechanismus a kintetika polymerací: celost. vysokošk. příručka pro vys. školy chemickotechnologické*. Praha: Academia.
- Leach, R. M. (1999). *The Chemogenesis Web Book*. [The Chemogenesis Web Book | Title Page \(meta-synthesis.com\)](#)
- Panchartek, J. (1981). *Reakční mechanismy v organické chemii*. Praha: SNTL.
- Večeřa, M. (1987). *Laboratorní příručka organické chemie: organická syntéza v otázkách a odpovědích*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury.
- McMurry, J. (1998). *Fundamentals of organic chemismy* (4th ed.). Pacific Grove: Brooks/Cole publishing company.
- Solomons, T. W. G. (1992). *Organic chemismy* (5th ed.). New York: John Wiley & Sons.
- Orchin, M. (1986). *Organická chemie: příruční naučný slovník*. Praha: Státní nakladatelství technické literatury.
- Kratochvíl, M., Potáček, M., & Šibor, J. (2004). *Principy a modely organické chemie I* (1. vyd.). Brno: Masarykova univerzita.
- Kratochvíl, M., Potáček, M., & Šibor, J. (2004). *Principy a modely organické chemie I* (1. vyd.). Brno: Masarykova univerzita.