

ORGANICKÁ CHEMIE I

- 1. Chemické názvosloví. Principy tvorby systematického názvosloví organických sloučenin.**
 - 2. Předmět organické chemie. Vazby v organických sloučeninách, hybridní stav uhlíku, energie vazby, délka vazby, polarita vazby. Polarizovatelnost molekul. Jevy na vazbách; indukční a mesomerní efekt, konjugace.**
 - 3. Alkany a cykloalkany, chem. názvosloví. Isomerie řetězová, konformace alkanů a cykloalkanů se zvláštním zřetelem k cyklohexanovému kruhu. Spojování cyklohexanových kruhů. Newmannova projekce. Geometrická isomerie u cykloalkanů. Radikálové reakce jako typická reakce alkanů a jejich mechanismus.**
 - 4. Alkeny, geometrická isomerie u alkenů, nomenklatura isomerů (*cis-*, *trans-*, *E-*, *Z-*). Cahn, Ingold, Prelogova pravidla. Adiční reakce, mechanismus a stereochemie adičních reakcí. Polymerace.**
 - 5. Optická aktivita a symetrie molekul. Chiralita molekul, podmínky chiralit, zobrazování trojrozměrných molekul v rovině (perspektivní vzorce, Fischerova projekce). Optická isomerie (enantiomery), specifická rotace a její určování, optická čistota, racemická směs.**
 - 6. Zobrazování molekul se dvěma asymetrickými uhlíky. Určování absolutní konfigurace molekul a jejich překreslení do perspektivních vzorců a naopak. Mesoforma.**
-

30.3.12 7. Dieny a polyeny (kumulované, izolované, konjugované).
Reakce probíhající na konjugovaných dienech (podmínky pro 1,2- a 1,4- adice a jejich průběh, vysvětlení).
Isoprenoidy, monoterpeny, seskviterpeny, di-, tri- a tetraterpeny (zvláštní zřetel na karotenoidy).

8. Pericyklické reakce - elektrocyklizační reakce, pravidla pro jejich průběh, cykloadiční reakce (Dielsovy-Alderovy), sigmatropní přesmyky.

9. Alkyny a jejich struktura. Vlastnosti trojné vazby, adiční reakce (elektrofilní i nukleofilní reakce), kyselost atomů vodíku vázaných na sp-hybridní uhlík. pKa hodnoty.

20.4.12 10. Aromatický stav a jeho demonstrace (rezonanční-delokalizační energie). Benzoidní a nebenzoidní aromáty. Vlastnosti aromatických sloučenin, mechanismus elektrofilní aromatické substituce.

11. Vliv substituce na jádře na vstup elektrofilu na subst. aromát. Empirická Hammettova rovnice, význam konstant ρ a σ . Možnosti nukleofilních substitucí na aromatickém skeletu (S_N1 , S_N2 , eliminačně-adiční průběh).

12. Jednotlivé typy S_EAr , generace reagentu. Využití rozkladu diazoniových solí pro přípravu jiných derivátů. Adiční a oxidační reakce a jejich podmínky.

18.5.12 13. Reakce na kondensovaných aromatických sloučeninách.

ORGANICKÁ CHEMIE I

Mc Murry: Organická chemie, překlad z originálu 6. vydání, 2004, vydáno VUT Brno-nakladatelství VUTIUM a VŠCHT Praha, listopad 2007.

J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers. Organic Chemistry. Oxford University Press 2001

McMurry, John. *Fundamentals of organic chemistry*. 4th ed. Pacific Grove : Brooks/Cole publishing company, 1998. xxii, 566,. ISBN 0-534-35245-4.

Solomons, Graham T. W. *Organic chemistry [Solomons, 1996]*. 6th ed. New York : John Wiley & Sons, 1996. xxvii, 121. ISBN 0-471-01342-0.

Hrnčiar, Pavol. *Organická chémia*. 3. vyd. Bratislava: SPN, 1990.708 s. ISBN 80-08-00028-7.

ORGANICKÁ CHEMIE I

Červinka, Otakar. *Chemie organických sloučenin. Díl 1.* 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1985. 1131 s. r86U. r86.

Otakar Červinka: *Chemie organických sloučenin. Díl 2.* 1. vyd. Praha : Státní nakladatelství technické literatury, 1987. 1052 s. r88. r88U.

Potáček, Milan - Mazal, Ctibor - Janků, Slávka. *Řešené příklady z organické chemie.* 2. vyd. Brno : Masarykova univerzita v Brně, 2008. 243 s. ISBN 80-210-2274-4.

Literák, Jaromír - Janků, Slávka – Pinkas, Jiří. *Chemická syntéza – praktikum,* 1. vyd. Brno, 2012 ISBN 978-80-210-5776-0.

Potáček, Milan. *Organická chemie : pro biology.* 1. vyd. Brno : Vydavatelství Masarykovy univerzity, 1995. 208 s. Obsahuje bibliografii. ISBN 80-210-1125-4.

Chemické reakce a jejich průběh

Každou reakci lze považovat za rovnovážnou, za daných podmínek posunutou v rovnováze více či méně na jednu stranu rovnice



$$K = \frac{[C] \cdot [D]}{[A] \cdot [B]}$$

Pro reakce probíhající za konstantního tlaku je rovnováha reakce určována termodynamickou veličinou ΔG° - tzv. **změnou standardní Gibbsovy energie**

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \cdot \Delta S^\circ = - RT \cdot \ln K$$

kde ΔH° je změna standardní enthalpie

ΔS° je změna standardní entropie

T absolutní teplota

K rovnovážná konstanta

- termodynamické veličiny jsou závislé na teplotě a proto se objevuje při jejich vyjádření dole vpravo ještě teplota

- standardní stav je u plynů tlak 0,1 MPa, u pevných látek nejstabilnější modifikace při 0,1 MPa, roztoky ideální při koncentraci 1 M

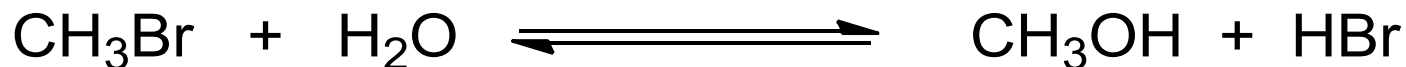
Chemické reakce a jejich průběh

Pro nejjednodušší systémy a reakce, kde nedochází k zásadní změně uspořádání systému (prostorové nároky jsou přibližně stejné na začátku i na konci reakce), pak se blíží $\Delta S^\circ = 0$ a vztah se zjednoduší:

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ = - RT \ln K$$

Na základě tepelného zbarvení reakce můžeme získat informaci o hodnotě rovnovážné konstanty K .

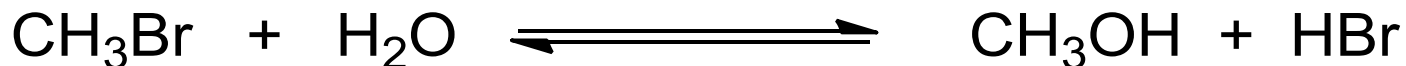
Tepelné zbarvení můžeme vypočítat na základě znalosti energií chemických vazeb:



Chemické reakce a jejich průběh

Tabulka 1.1. Disociační energie některých vazeb [$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$]

C-H	413	C-C	346	C=C	610	C≡C	837
C-N	309	C=N	615	C≡N	887	C-S	272
C-Cl	339	C-Br	284	C-I	213	N-N	163
O-O	166	O=O	498	S-S	226	F-F	153
I-I	151	H-O	463	H-N	391	H-S	347
H-Br	366	H-I	299	O-Cl	217	O-Br	201
C-O	357	C=O	737	C=S	535	C-F	444
N=N	418	N≡N	941	Br-Br	193	Cl-Cl	243
H-F	570	H-Cl	431				



Při reakci se štěpí vazba C-Br a vazba H-O

$$+284 + 463 = +747 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

při reakci vzniká vazba C-O a H-Br

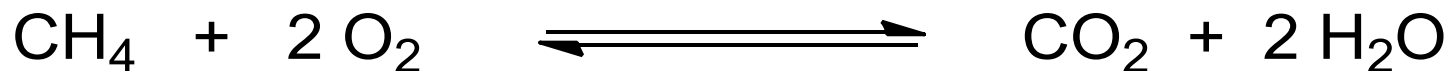
$$-357 + (-366) = -723 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

k tomu, aby reakce proběhla je třeba dodat energii $+747 - 723 = +24 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

reakce je endotermní

Chemické reakce a jejich průběh

Hodnota ΔH° za výše uvedených předpokladů nám umožňuje zjistit, jak je rovnováha v dané reakci posunuta, ale nehovoří nic o tom jak rychle rovnováhy lze dosáhnout.



$$4 \cdot 413 + 2 \cdot 166 = + 1984 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \qquad 2 \cdot (- 737) + 4 \cdot (- 463) = - 3326 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

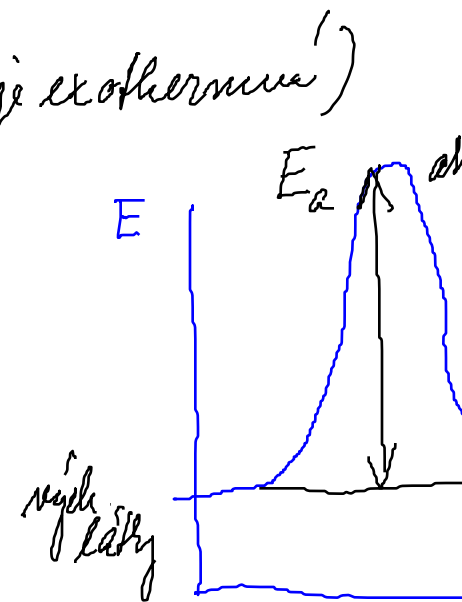
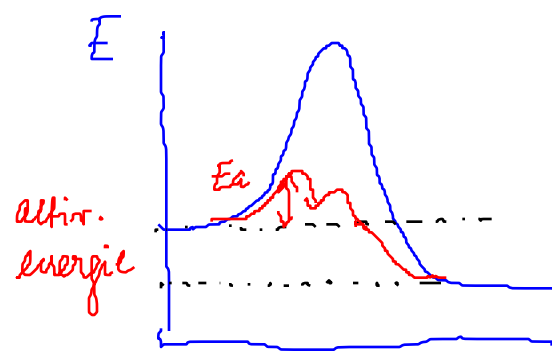
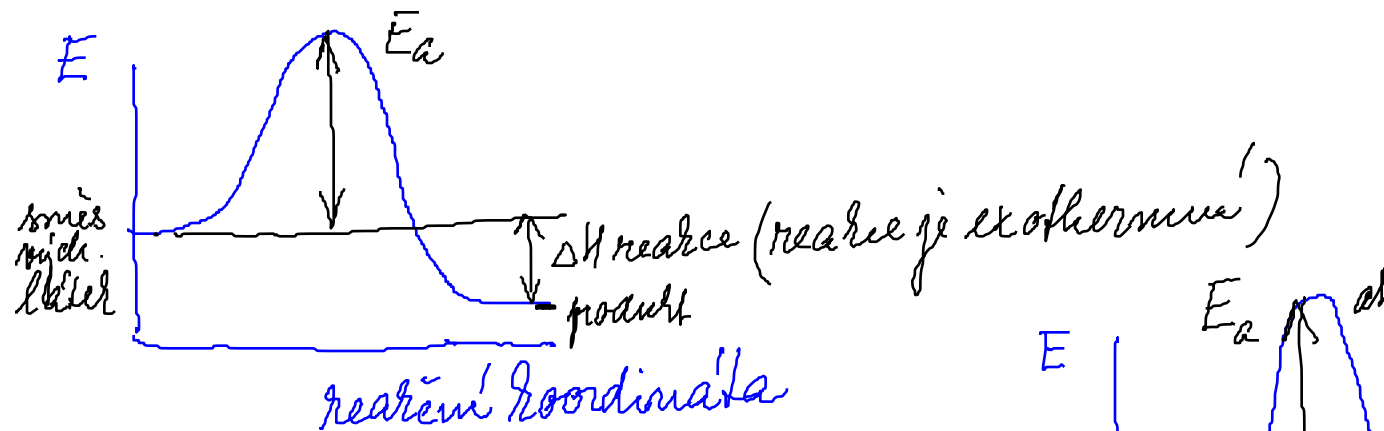
exotermní reakce $\Delta H^\circ = - 1342 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

Pokud obě složky, které by měly reagovat smícháme a necháme je stát uvidíme, že se na první pohled nic neděje. I když tato reakce je exotermická, reakce bez iniciace neprobíhá.

Aby reakce nastala musí se dodat určité množství energie, aby se překonala energetická bariéra, která se nazývá aktivační energie E_a a na její velikosti bude potom záviset rychlost reakce.

Chemické reakce a jejich průběh

Průběh reakce z hlediska energetického - **reakční kordináta**



katalyzátor snižuje hodnotu aktiv. energie (děje se podílí dělejších př.)

role katalyzátoru

Chemické reakce a jejich průběh



$$v = \frac{d[C]}{dt} = \frac{d[D]}{dt} = - \frac{d[A]}{dt} = - \frac{d[B]}{dt} = k \cdot [A] \cdot [B]$$

v je rychlost chemické reakce

k rychlostní konstanta (rychlost reakce při jednotkové koncentraci látek)

t čas

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

Arrheniova rovnice

kde e je základ přirozeného logaritmu

A Arrheniova konstanta

CHEMICKÉ NÁZVOSLOVÍ

Struktura názvu:

Kmen-lokant-zakončení

Propan-2-ol

Lokant-prefix-kmen-zakončení

4-hydroxybutanal

2-amino-cyklohexanon

4-nitrobut-2-enová kyselina

Lokant, lokant-násobící prefix-kmen-zakončení

2,3-dimethyl-cyklopentankarboxylová kyselina

Afix-lokant-prefix-lokant-prefix-kmen-zakončení

Skupina	Vzorec	Předpona	Přípona
Kationty	(+)	-onin-	-onium -ium
Karboxylové kyseliny	-COOH	karboxy-	-karboxylová kyselina
	-(C)OOH	---	-ová kyselina
Sulfonové kyseliny	-SO ₂ -OH	sulfo-	-sulfonová kyselina
Anhydridy	-CO-O-CO-	---	-karboxanhydrid
	-(C)O-O-(C)O-	---	-anhydrid (anhydrid ...ové kyseliny)
Soli	-COO M ⁺	---	(kation)-...karboxylát
	-(C)OO M ⁺	---	(kation)-...-oát
			(kation)-...-át
Karboxyláty	-COO ⁻	karboxylato-	-karboxylát
Sulfonáty	-SO ₂ -O ⁻	sulfonato-	-sulfonát
Estery karb. kys.	-COOR	R-oxykarbonyl	R-...karboxylát
	-(C)OOR	---	R-...-oát (R-ester ...ové kyseliny)
Acylhalogenidy = halogenidy karbox. kys.	-CO-halogen	halogenkarbonyl	-karbonylhalogenid
	-(C)O-halogen	---	-oylhalogenid (halogenid ...ové kyseliny)
Amidy	-CO-NH ₂	karbamoyl-	-karboxamid
	-(C)O-NH ₂	---	-amid (amid ...ové kyseliny)
Hydrazidy	-CO-NH-NH ₂	---	-karbohydrazid
	-(C)O-NH-NH ₂	---	-ohydrazid
Imidy	-CO-NH-CO-	---	-dikarboximid

- halogenidy karbox. kys.	-(C)O-halogen	---	-oynhalogenid (halogenid ...ové kyseliny)
Amidy	-CO-NH ₂	karbamoyl-	-karboxamid
	-(C)O-NH ₂	---	-amid (amid ...ové kyseliny)
Hydrazidy	-CO-NH-NH ₂	---	-karbohydrazid
	-(C)O-NH-NH ₂	---	-ohydrazid
Imidy	-CO-NH-CO-	---	-dikarboximid
	-(C)O-NH-(C)O-	---	-imid
Nitrily	-C≡N	kyan-	-karbonitril
	-(C)≡N	---	-nitril, -nitril
Aldehydy	-CHO	formyl-	-karbaldehyd
	-(C)HO	oxo-	-al
Ketony	>C=O	oxo-	-on
Alkoholy, fenoly	-OH	hydroxy-	-ol
Alkoholáty, fenoláty	-O ⁻	oxido-	-olát
Thioly	-SH	sulfanyl-	-thiol
Thioláty	-S ⁻	-sulfido	-thiolát
Aminy	-NH ₂	amino-	-amin
Iminy	=NH	imino-	-imin
Hydraziny	-NH-NH ₂	hydrazino-	-hydrazin
Ethery	-OR	R-oxy	---
Sulfidy	-SR	R-sulfanyl (dříve: R-thio)	---
Halogensloučeniny	-X	halogen-	---
Nitrosoučeniny	-NO ₂	nitro-	---

CHEMICKÉ NÁZVOSLOVÍ

Skupina	prefix	skupina	prefix
-Br	brom-	-IO	jodosyl-
-Cl	chlor-	-N ₂	diazo-
-ClO	chlorosyl-	-N ₃	azido-
-ClO ₂	chloryl-	-NO	nitroso-
-ClO ₃	perchloryl-	-NO ₂	nitro-
-F	fluor-	-OR	R-oxy-
-I	jod-	-SR	R-sulfanyl

CHEMICKÉ NÁZVOSLOVÍ

