

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

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				

Tabulka 1.2. Disociační energie C-H vazeb v závislosti na struktuře uhlovodíkového zbytku v [$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$]

$\text{CH}_3\text{-H}$	427	$\begin{array}{l} \text{CH}_3 \\ \diagdown \\ \text{CH-H} \\ \diagup \\ \text{CH}_3 \end{array}$	393	$\text{C}_6\text{H}_5\text{-H}$	427
$\text{C}_2\text{H}_5\text{-H}$	405			$\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}_2\text{-H}$	326
$n\text{-C}_3\text{H}_7\text{-H}$	405	$(\text{CH}_3)_3\text{C-H}$	381	$\text{CH}_2=\text{CH-H}$	435

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

Tabulka 1.3. Průměrné délky vazeb v organických molekulách [nm]

C-C	0,154	C=C	0,134	C≡C	0,120
C-H	0,111	C-O	0,141	C=O	0,120
C-N	0,147	C=N	0,128	C≡N	0,116
C-S	0,181	C=S	0,156	C-F	0,138
C-Cl	0,178	C-Br	0,194	C-I	0,214

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

LA CHE MA pharmaceuticals
diagnostica
chemica

PERIODICKÁ SOUSTAVA PRVKŮ

Atomová hmotnost
značka (symbol)
protonové číslo

55.85	2	14	2
26	Fe	1.8	
26.00	Fe		

elektronová konfigurace
akronogalvita
český název
střínský název

II A III A IV A V A VI A VII A

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

I A		d										II A	III A	IV A	V A	VI A	VII A	VIII A																																																																																					
1,008 1 H vodík Hydrogenium	9,01 2 Li litium Lithium	6,94 3 Li litium Lithium	9,01 4 Be beryl Beryllium	20,18 11 Na natrium Natrium	24,31 12 Mg magnesium Magnesium	44,96 21 Sc skandium Scandium	47,88 22 Ti titan Titanium	50,94 23 V vanad Vanadium	52,00 24 Cr chrom Chromium	54,94 25 Mn mangan Manganum	58,93 26 Fe železo Ferrum	58,93 27 Co kobalt Cobaltum	58,93 28 Ni nikl Nickelium	63,55 29 Cu měď Cuprum	65,38 30 Zn zinek Zincum	69,72 31 Ga galien Gallium	72,64 32 Ge german Germanium	74,92 33 As arsen Arsenicum	78,96 34 Se selen Selenium	79,90 35 Br brom Bromum	83,80 36 Kr krypton Kryptonum	85,47 37 Rb rubidium Rubidium	87,62 38 Sr strontium Strontium	88,91 39 Y yttrium Yttrium	91,22 40 Zr zirkon Zirconium	92,91 41 Nb niobium Niobium	95,94 42 Mo molibden Molybdenum	97,91 43 Tc technetium Technetium	101,07 44 Ru rutilium Ruthenium	102,91 45 Rh rhodium Rhodium	106,42 46 Pd palladium Palladium	107,87 47 Ag stříbro Argentum	112,41 48 Cd kadmium Cadmium	118,71 49 In indium Indium	127,60 50 Sn olovo Stannum	127,60 51 Sb selenium Antimonium	127,60 52 Te tellingur Tellurium	126,91 53 I jod Iodum	131,30 54 Xe krypton Xenonum	132,91 55 Ba barium Barium	137,33 56 La lanthan Lanthanum	173,05 57 La lanthan Lanthanum	173,05 58 Ce cerium Cerium	173,05 59 Pr praseodym Praseodymium	173,05 60 Nd neodym Neodymium	173,05 61 Pm prometium Promethium	173,05 62 Sm samarium Samarium	173,05 63 Eu europium Europium	173,05 64 Gd gadolinium Gadolinium	173,05 65 Tb terbium Terbium	173,05 66 Dy dysprosium Dysprosium	173,05 67 Ho holmium Holmium	173,05 68 Er erubium Erbium	173,05 69 Tm thulium Thulium	173,05 70 Yb ytterbium Ytterbium	173,05 71 Lu lutecium Lutetium	137,33 57 Cs caesium Caesium	137,33 58 Ba barium Barium	137,33 59 La lanthan Lanthanum	173,05 60 Ce cerium Cerium	173,05 61 Pr praseodym Praseodymium	173,05 62 Nd neodym Neodymium	173,05 63 Pm prometium Promethium	173,05 64 Sm samarium Samarium	173,05 65 Eu europium Europium	173,05 66 Gd gadolinium Gadolinium	173,05 67 Tb terbium Terbium	173,05 68 Dy dysprosium Dysprosium	173,05 69 Ho holmium Holmium	173,05 70 Er erubium Erbium	173,05 71 Tm thulium Thulium	173,05 72 Yb ytterbium Ytterbium	173,05 73 Lu lutecium Lutetium	173,05 74 Hf hafnium Hafnium	173,05 75 Ta tantalum Tantalum	173,05 76 W wolfram Tungstenum	173,05 77 Re renium Rhenium	173,05 78 Os osmium Osmium	173,05 79 Ir iridium Iridium	173,05 80 Pt platina Platinum	173,05 81 Au zlato Aurum	173,05 82 Hg rtuť Mercurium	173,05 83 Tl thallium Thallium	173,05 84 Pb olovo Plumbum	173,05 85 Bi bismut Bismutum	173,05 86 Po polonium Polonium	173,05 87 At astat Astatinum	173,05 88 Rn radon Radonum	173,05 89 Ac aktinium Actinium	173,05 90 Th thorium Thorium	173,05 91 Pa protaktinium Protactinium	173,05 92 U uran Uranium	173,05 93 Np neptunium Neptunium	173,05 94 Pu plutonium Plutonium	173,05 95 Am amerikium Americium	173,05 96 Cm kurium Curium	173,05 97 Bk berkelium Berkelium	173,05 98 Cf kalifornium Californium	173,05 99 Es einsteinium Einsteinium	173,05 100 Fm fermium Fermium	173,05 101 Md mendelevium Mendelevium	173,05 102 No nobelium Nobelium	173,05 103 Lr lawrencium Lawrencium

Prvky

zásadotvorné
slabé

amfoterní

kyselinotvorná
slabé

inertní

umělé

Skupenství prvků (př 30°C):
He – plyné
Hg – kapalné
Fe – pevné

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

Elektronegativita prvků

C	2,55
H	2,20
O	3,44
N	3,04
Cl	3,16
Br	2,96
I	2,66
S	2,58

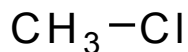
DIPOLOVÝ MOMENT

$$\mu = e \cdot d$$

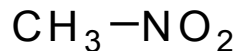
e je náboj atomu [C]
d vzdálenost [m]

Dipolový moment je vektor – má velikost a směr

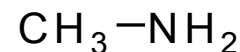
	μ		μ
H - C	1,33	C - N	0,73
H - N	4,36	C - O	2,46
H - O	5,03	C = O	7,65
		C \equiv N	11,65



$$\mu = 6,1 \cdot 10^{-30}$$



$$\mu = 11,7 \cdot 10^{-30}$$

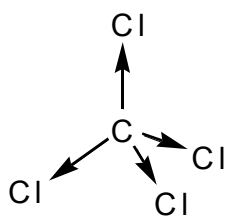


$$\mu = 4,4 \cdot 10^{-30}$$

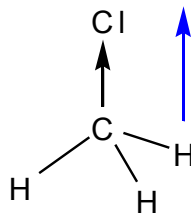
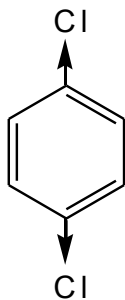
[C . m]

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

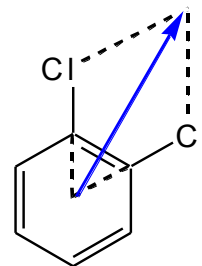
Dipolový moment - vektor



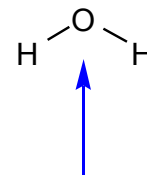
$$\mu = 0$$



$$\mu = 6,23 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$



$$\mu = 7,5 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$



$$\mu = 6,16 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

Většina reakcí probíhá v nějakém rozpouštědle, které solvatací může ovlivnit rozložení těžišť kladného a záporného náboje v molekule

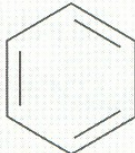
Ve starší literatuře se udávají hodnoty dipolových momentů v jednotkách **D**

$$1\text{D} = 3,33564 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

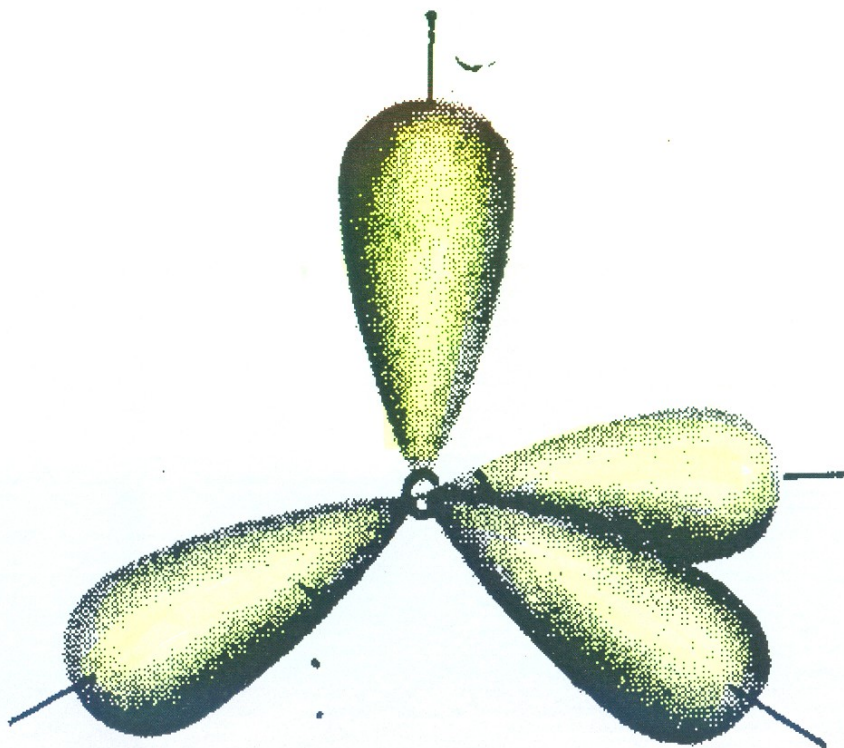
VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

Dipolový moment - vektor

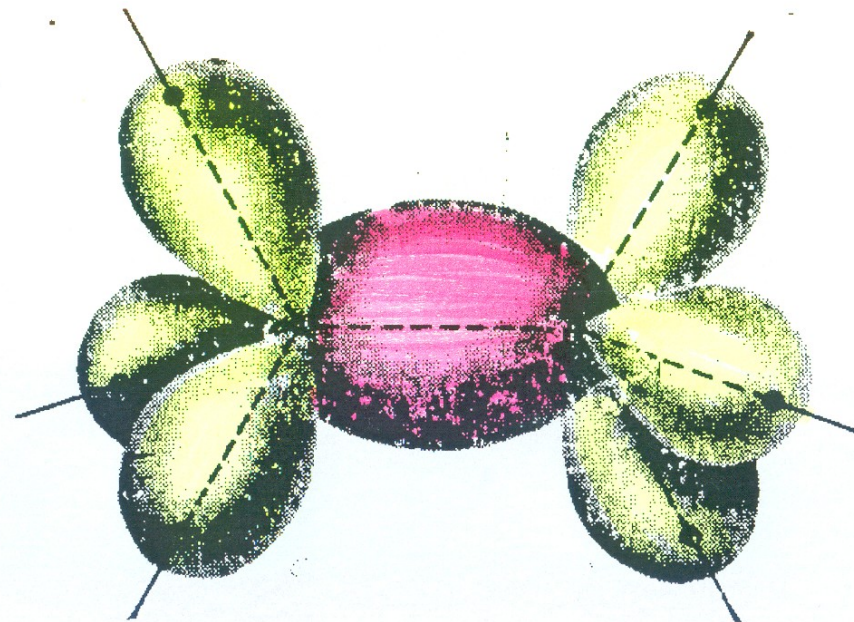
TABULKA 2.1 Elektrické dipólové momenty některých sloučenin

Sloučenina	Dipólový moment		Sloučenina	Dipólový moment	
	10^{30} C m	D		10^{30} C m	D
NaCl	30,02	9,0	NH ₃	4,90	1,47
$\text{H}_3\text{C}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\overset{+}{\text{N}}}-\text{O}^-$ nitromethan	11,54	3,46	CH ₄	0	0
CH ₃ Cl	6,24	1,87	CCl ₄	0	0
H ₂ O	6,17	1,85	CH ₃ CH ₃	0	0
CH ₃ OH	5,67	1,70	 benzen	0	0
$\text{H}_2\text{C}=\overset{+}{\text{N}}=\text{N}^-$ diazomethan	5,00	1,50	BF ₃	0	0

Vazby v molekulách



Uhlík v sp^3 hybridním stavu



Vazba C-C překrytím dvou orbitalů sp^3 hybridních

VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

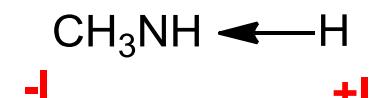
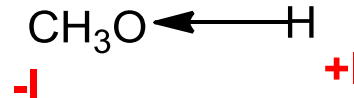
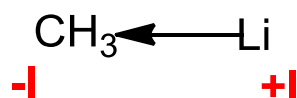
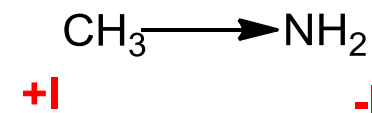
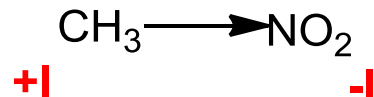
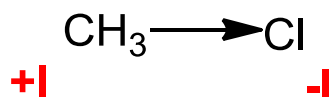
Elektronegativita prvků

C	2,55
H	2,20
O	3,44
N	3,04
Cl	3,16
Br	2,96
I	2,66
S	2,58

Polarita vazby Indukční efekt

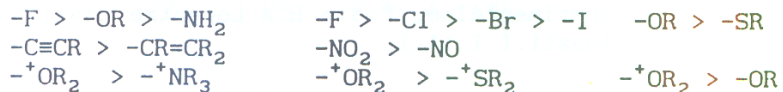
Na základě rozdílné elektronegativity vzájemně vázaných atomů dochází k posunům elektronů na vazbách směrem k některému z atomů.

Posuny na jednoduchých (σ -vazbách) nazýváme **indukční efekt**

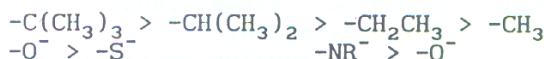


Tabulka 1.5. Indukční efekt některých atomů a skupin

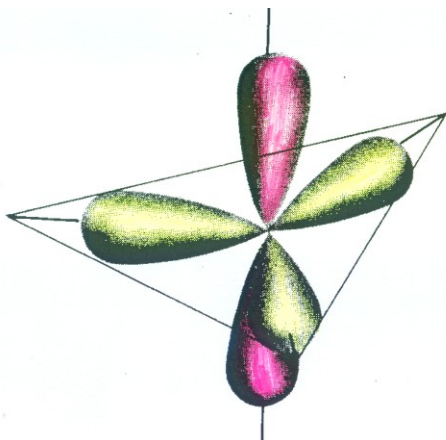
-I efekt



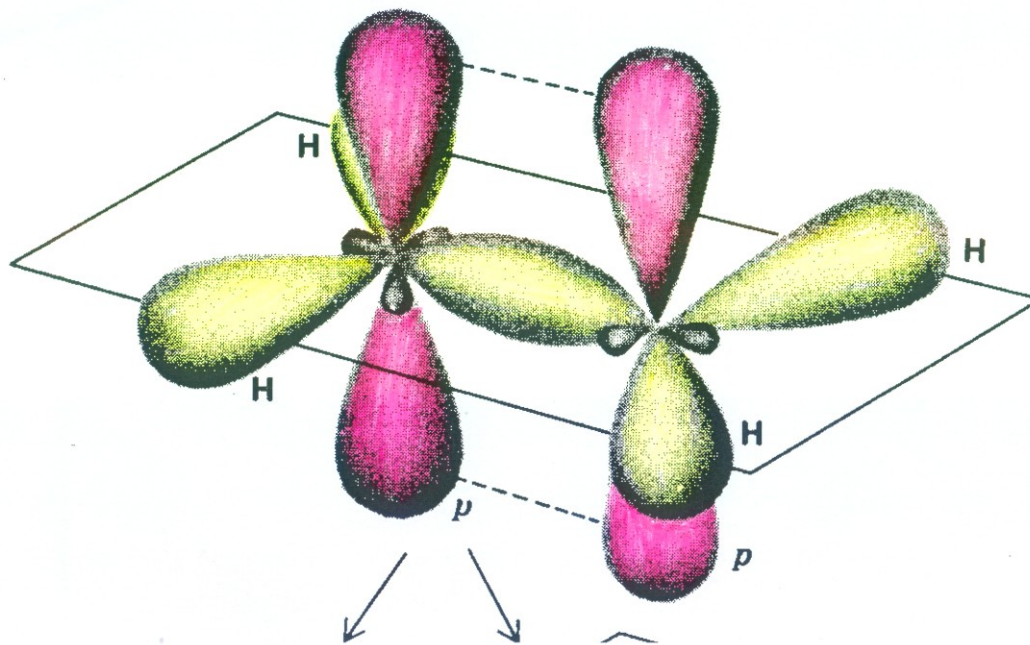
+ I efekt



Vazby v molekulách



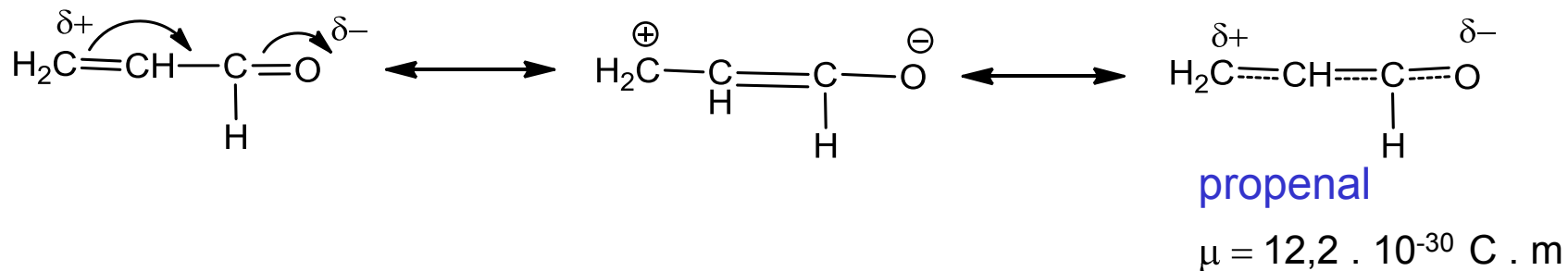
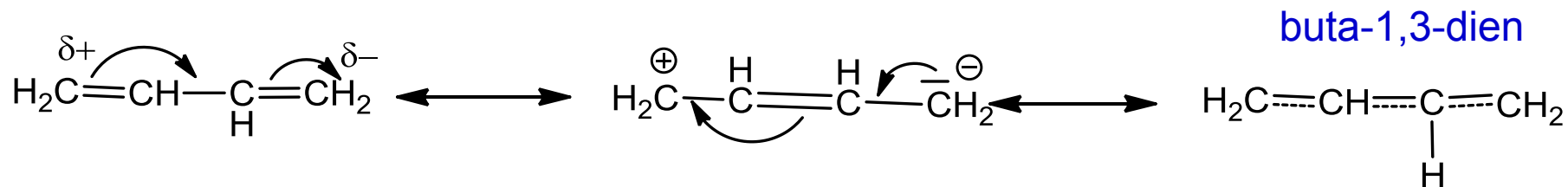
C atom v sp^2 hybrid. stavu



Náznak π vazby mezi uhlíkovými atomy v sp^2 hybridním stavu

Vazby v molekulách

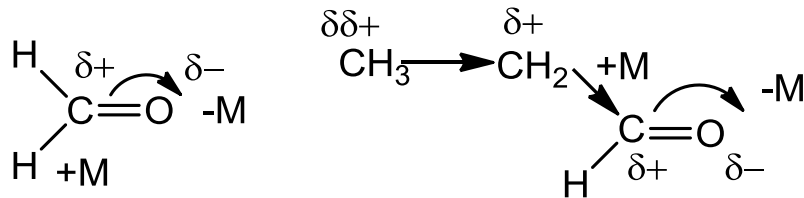
Konjugované molekuly – mezomerní (konjugační efekt) + M , - M



VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

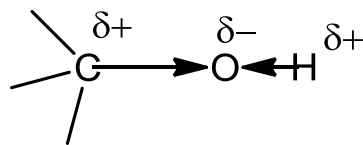
MESOMERNÍ (KONJUGAČNÍ) EFEKT

Mesomerní efekt se uplatňuje na násobných vazbách (π – vazbách)

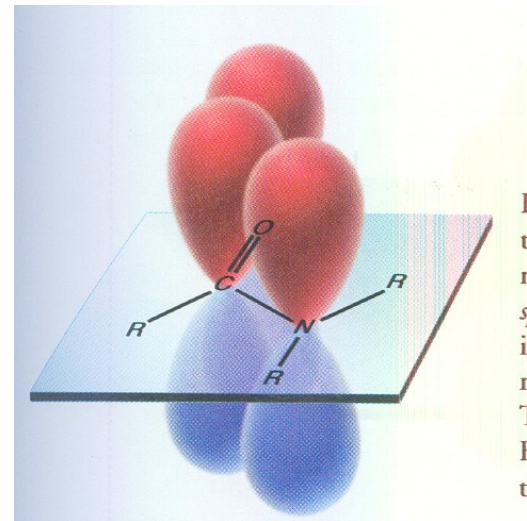


$$\mu = 7,6 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

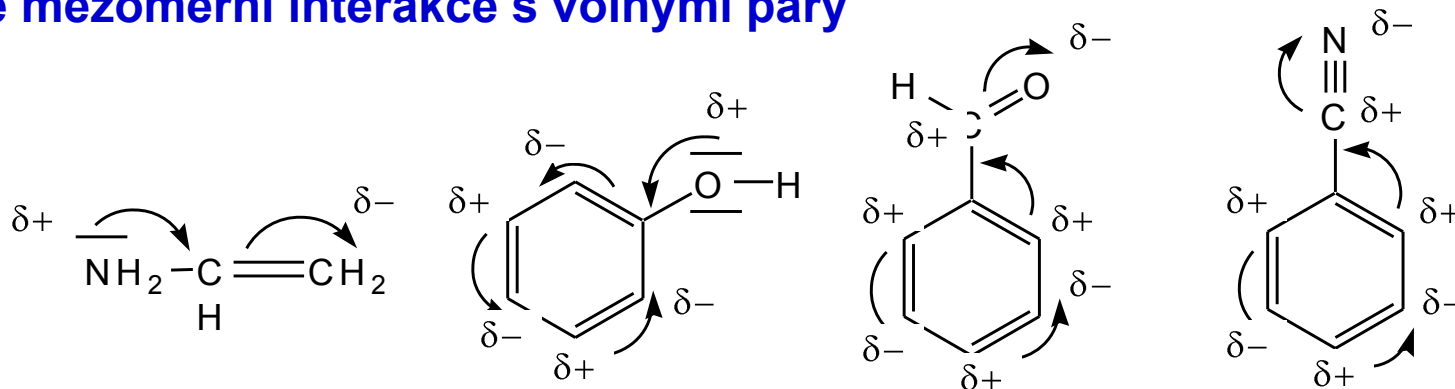
$$\mu = 9,0 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$



$$\mu = 2,46 \cdot 10^{-30}$$



Velmi častá je mezomerní interakce s volnými páry heteroatomů



VAZBY V ORGANICKÝCH MOLEKULÁCH

Pravidla pro práci s rezonančními strukturami

Jednotlivé rezonanční struktury nejsou skutečné, jsou imaginární. Skutečná struktura je složenina, neboli rezonanční hybrid (kříženec) různých struktur. Sloučeniny jako nitromethan, benzen či acetátový ion nemají dvě rozdílné struktury - mají jedinou neměnnou strukturu, která mezi rezonančními strukturami neosciluje. Jediný rozdíl mezi nimi a jinými sloučeninami je způsob, kterým se jejich vzorce musí znázorňovat na papíře.

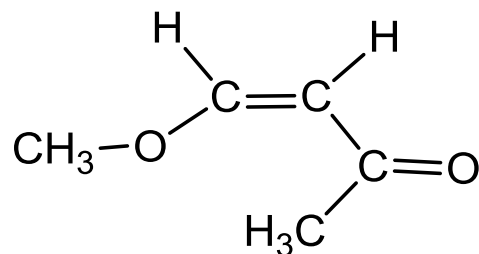
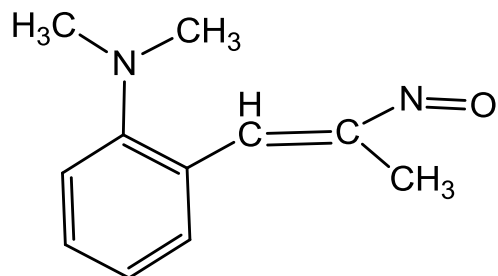
Rezonanční struktury se liší pouze polohou elektronů π nebo nevazebných elektronů. Při přechodu od jedné rezonanční struktury k druhé se nemění ani poloha, ani hybridizace žádného z atomů. V nitromethanu má např. atom dusíku hybridizaci sp^2 a atomy kyslíku si zachovávají v obou rezonančních strukturách svoji polohu. Liší se jen polohou elektronů π ve vazbě $N=O$ a polohou volných elektronových párů na atomu kyslíku. Při přechodu od jedné rezonanční struktury k druhé se někdy tento posun elektronů znázorňuje zahnutými šipkami. **Zahnutá šipka vždy znázorňuje posun elektronů, nikoliv posun atomů.** Konec šipky ukazuje, že elektronové páry se **pouze formálně** posunují **směrem od** atomu nebo vazby **směrem k** atomu nebo k vazbě na čele šipky.

Vazby v molekulách

Při posuzování rozložení elektronů v molekule se často setkáváme **současně s indukčním i mesomerním efektem**.

Pokud mají efekty stejné znaménko (stejný směr), není problém posoudit rozložení elektronové hustoty.

V případě, že se efekty ve svém směru liší, **rozhodující efekt je efekt mesomerní - efekt na násobných vazbách, poněvadž π elektrony jsou polarizovatelnější, snadněji se přesouvají**.

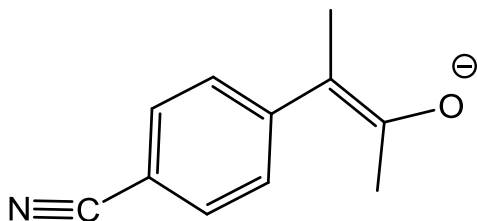
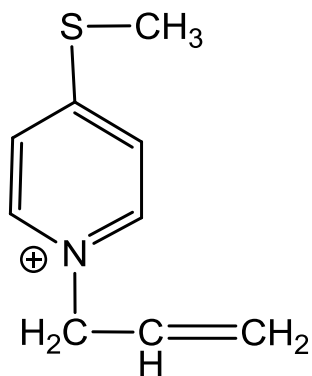


Vazby v molekulách

Při posuzování rozložení elektronů v molekule se často setkáváme **současně s indukčním i mesomerním efektem.**

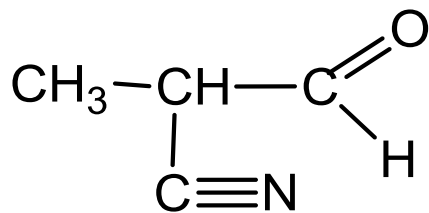
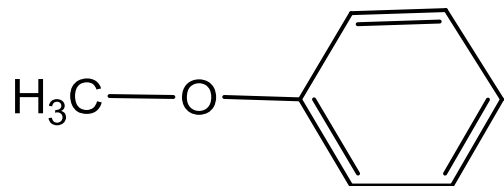
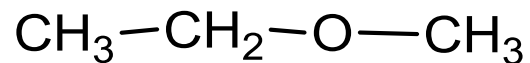
Pokud mají efekty stejné znaménko (stejný směr), není problém posoudit rozložení elektronové hustoty.

V případě, že se efekty ve svém směru liší, **rozhodující efekt je efekt mesomerní - efekt na násobných vazbách, poněvadž π elektrony jsou polarizovatelnější, snadněji se přesouvají**



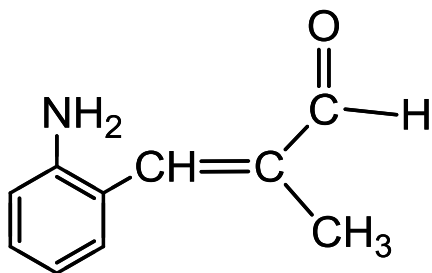
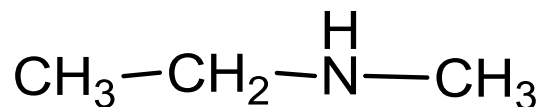
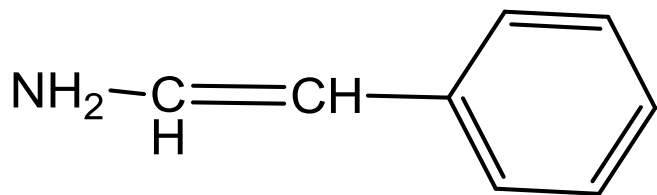
Vazby v molekulách

!!Pozor na možný rozdíl ve vlivu stejných skupin na skeletu alifatickém a aromatickém!!



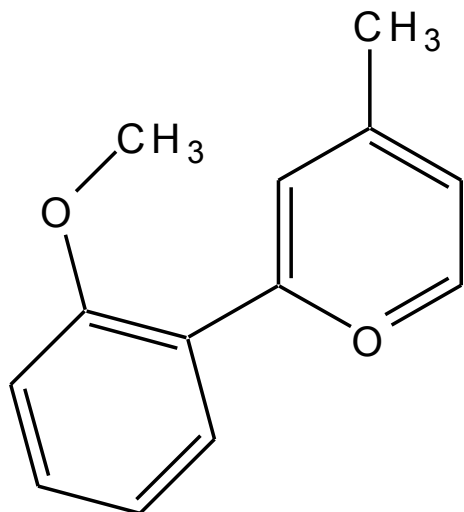
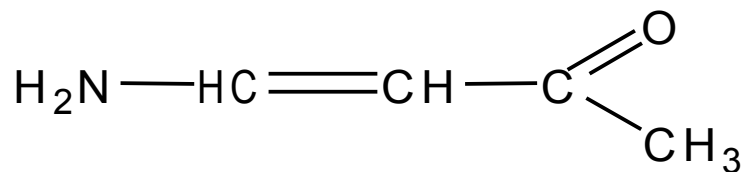
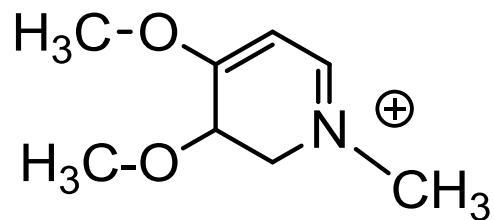
Vazby v molekulách

!!Pozor na možný rozdíel ve vlivu stejných skupin na skeletu alifatickém a aromatickém!!



Vazby v molekulách

!!Pozor na možný rozdíl ve vlivu stejných skupin na skeletu alifatickém a aromatickém!!



Vazby v molekulách

Konjugované molekuly

