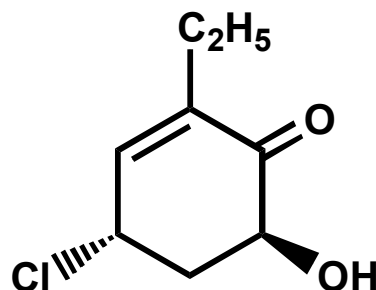


# ORGANICKÁ CHEMIE

## NÁZVOSLOVÍ



Pouze předpony:

Cl.. ...chlor (halogen)

NO<sub>2</sub>....nitro

NO.....nitroso

**(4S,6S)-2-Ethyl-6-hydroxy-4-chlorocyclohex-2-en-1-on**

**označení konfigurace**

**lokanty**

**předpony vyjadřující přítomnost substituentů**

**názvoslovný kmen**

**zakočení vyjadřující přítomnost násobných**

**vazeb a funkčních skupin**

### Tabulka C-III

Zakončení a prefixy užívané v substitučním názvosloví pro vyjádření přítomnosti některých charakteristických skupin v molekule (viz C-0.10.3)

Typ látky	Vzorec <sup>a</sup>	Prefix	Zakončení
Kationty	(+)	-onio- -onia-	-onium
Karboxylové kyseliny	—COOH	karboxy-	-karboxylová kyselina
Sulfonové kyseliny	—(C)OOH —SO <sub>3</sub> H	— sulfo-	-ová kyselina -sulfonová kyselina
Soli	—COOM —(C)OOM	— —	-karboxylat -oat, -at, -an
Estery	—COOR —(C)OOR	R-oxykarbonyl-	viz C-4
Halogenidy	—COX	halogenformyl-	-halogenid -ové kyseliny
Amidy	—(C)OX —CONH <sub>2</sub> —(C)ONH <sub>2</sub>	halogenkarbonyl- — karbamoyl- aminokarbonyl- —	-karbonylhalogenid -oylhalogenid -karboxamid -amid

### Tabulka C-III

Zakončení a prefixy užívané v substitučním názvosloví pro vyjádření přítomnosti některých charakteristických skupin v molekule (viz C-0.10.3)

Typ látky	Vzorec <sup>a</sup>	Prefix	Zakončení
Nitrily	$-\text{C}\equiv\text{N}$ $-(\text{C})\equiv\text{N}$	kyan-	-karbonitril -nitril
Aldehydy	$-\text{CHO}$ $-(\text{C})\text{HO}$	formyl- oxo-	-karbaldehyd -al
Ketony	$\begin{array}{l} \diagup \\ \text{(C)}=\text{O} \\ \diagdown \end{array}$	oxo-	-on
Alkoholy	$-\text{OH}$	hydroxy-	-ol
Fenoly	$-\text{OH}$	hydroxy-	-ol
Thioly	$-\text{SH}$	merkaptó-	-thiol
Hydroperoxydy	$-\text{O}-\text{OH}$	hydroperoxy-	—
Aminy	$-\text{NH}_2$	amino-	-amin
Iminy	$=\text{NH}$	imino-	-imin
Etery	$-\text{OR}$	R-oxy-	—
Sulfidy	$-\text{SR}$	R-thio-	—
Peroxydy	$-\text{O}-\text{O}-\text{R}$	R-dioxy-	—

<sup>a</sup> Atomy uhlíku uvedené v závorkách jsou zahrnuty do názvu základní sloučeniny, nikoliv však do zakončení nebo prefixu.

# Nasyčené uhlovodíky

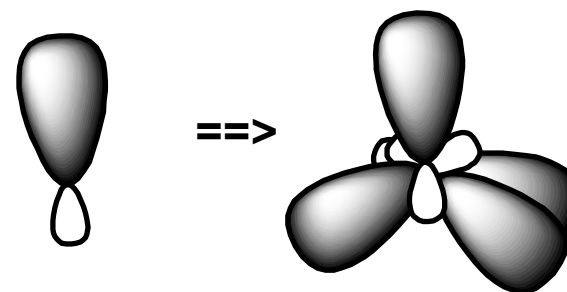
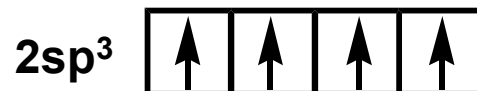
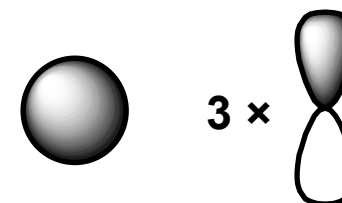
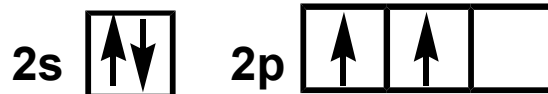
## ALKANY a CYKLOALKANY

Složené pouze z atomů uhlíku a vodíku, které jsou navzájem spojené jednoduchými vazbami typu sigma –  $\sigma$ .

Obecný vzorec:  $C_xH_y$ . Pro  $n$ -alkany  $y = 2x+2$ .

Elektronová konfigurace uhlíku:

${}_6C: 1s^2, 2s^2p^2$



[http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/animations/chang\\_7e\\_esp/bom5s2\\_6.swf](http://www.mhhe.com/physsci/chemistry/animations/chang_7e_esp/bom5s2_6.swf)

## Snímek 4

---

**CM1**

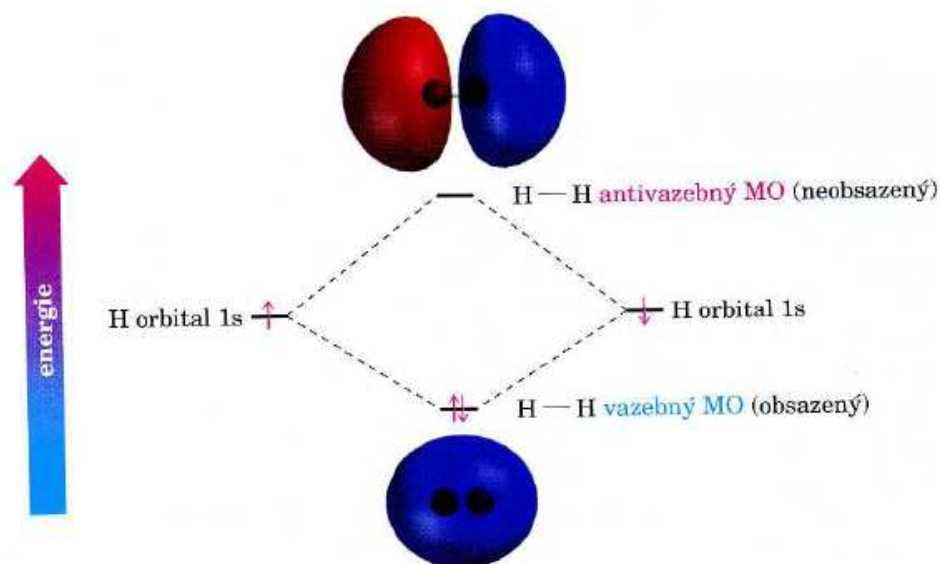
Doplnit názvosloví, fyzikální a biologické vlastnosti  
U SR doplnit oxidaci a další typy reakcí s příslušnými produkty.  
V grafech používat kJ  
Ctibor Mazal, 3/2/2011

# MOLEKULOVÉ ORBITALY

Vznik kovalentní vazby jako matematická operace kombinace vlnových funkcí atomových orbitalů v různých atomech. Výsledkem jsou *molekulové orbitaly*.

*Kombinaci daného počtu AO vzniká stejný počet MO.*

molekula H<sub>2</sub>



<http://www.chemtube3d.com/orbitals-s.htm>

# ALKANY a CYKLOALKANY

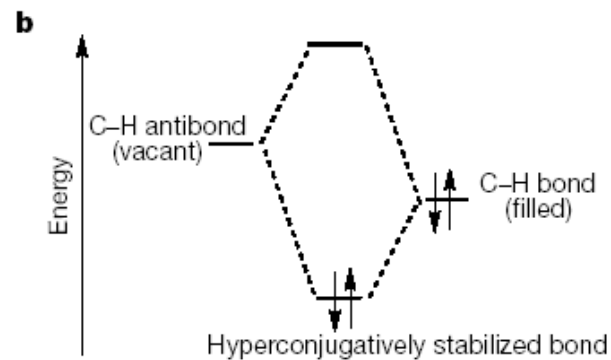
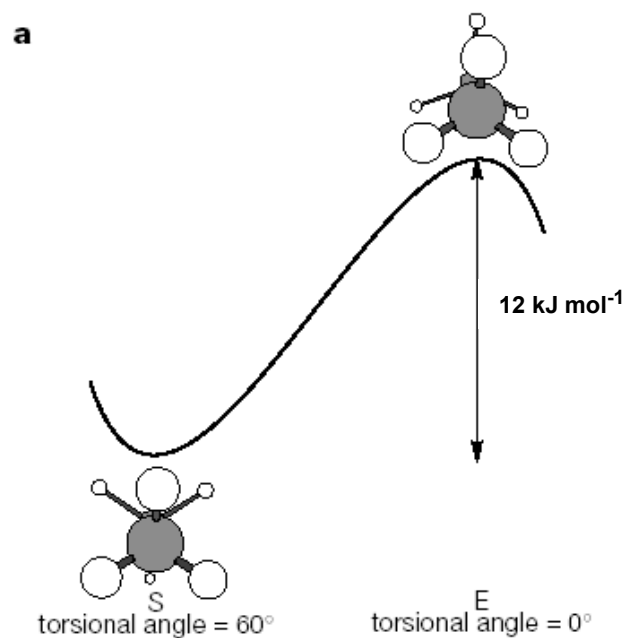
## KONFORMACE

Změna struktury molekuly spojená s rotací kolem jednoduchých ( $\sigma$ ) vazeb

Ethan: zákrytová a střídavá konformace



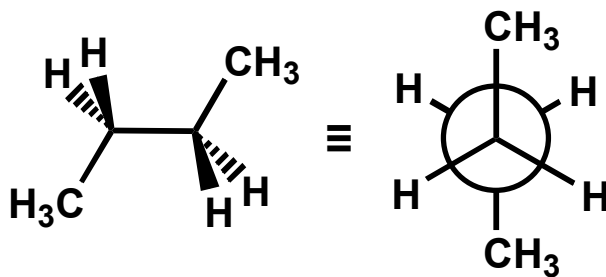
ethan\_energ.wrl



**Figure 1** Ethane energetics. **a**, Ethane staggered (S) and eclipsed (E) conformers. **b**, Vicinal hyperconjugative stabilization by overlap between an occupied and an unoccupied orbital on two methyl groups.

# ALKANY a CYKLOALKANY - KONFORMACE

Butan:  $C_4H_{10}$

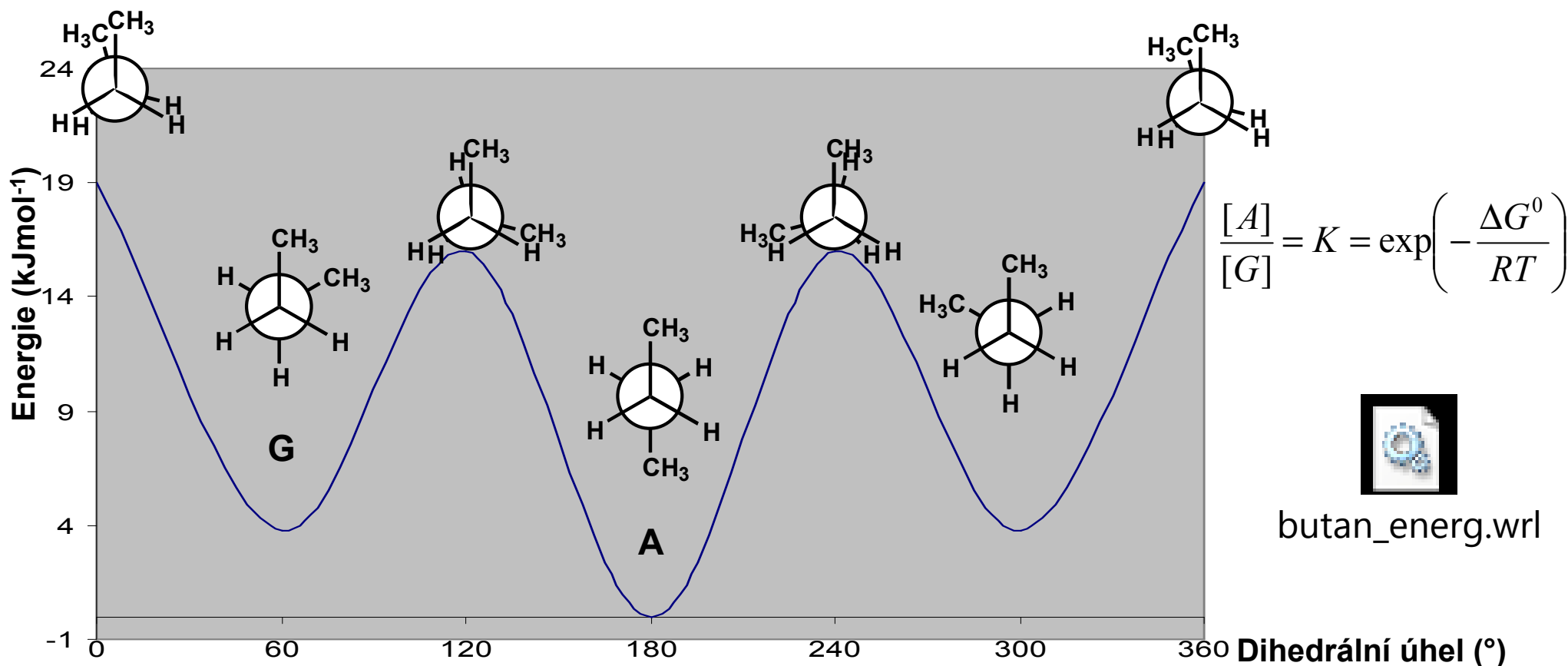


Newmanova projekce

Dihedrání úhel

konformace

0	synperiplanární
60	synklinální (gauche)(+)
120	antiklinální (+)
180	antiperiplanární (A)
240	antiklinální (-)
300	synklinální (-)

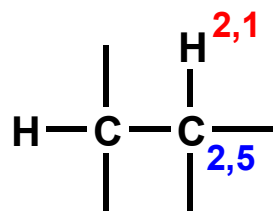




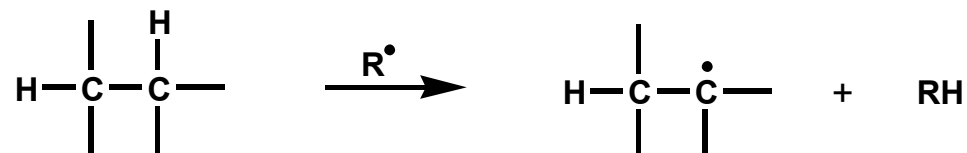
# ALKANY a CYKLOALKANY

## Chemická reaktivita

### Obecná struktura



Kovalentní nepolární  $\sigma$  vazby upřednostňují homolýzu



Radikál ( $R\cdot$ ) částice (reagent) s nepárovým elektronem

Alkany a cykloalkany preferují radikálové reakce – typickou reakcí je

Substituce radikálová -  $S_R$

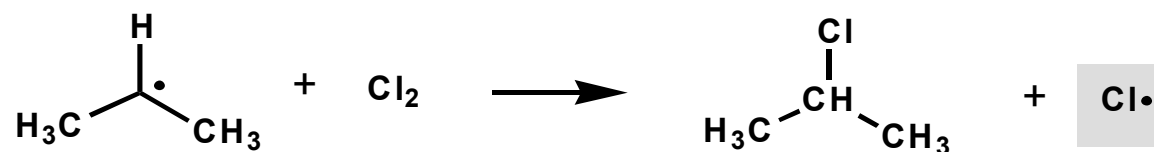
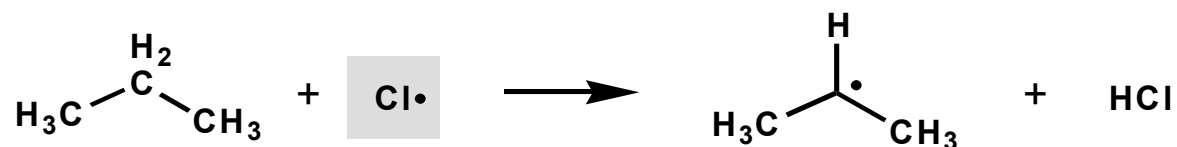
# Substituce radikálová – S<sub>R</sub>

## Chlorace propanu

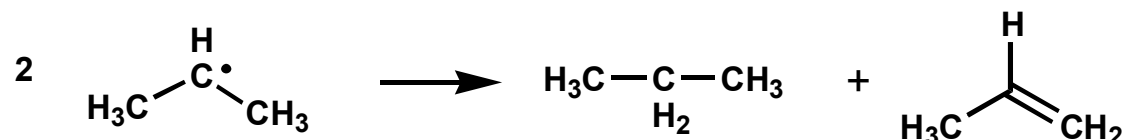
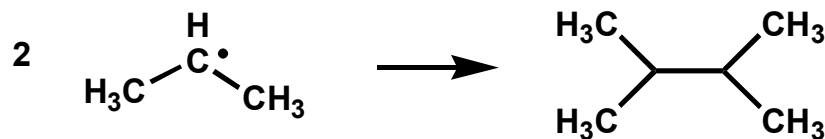
Iniciace:



Propagace:



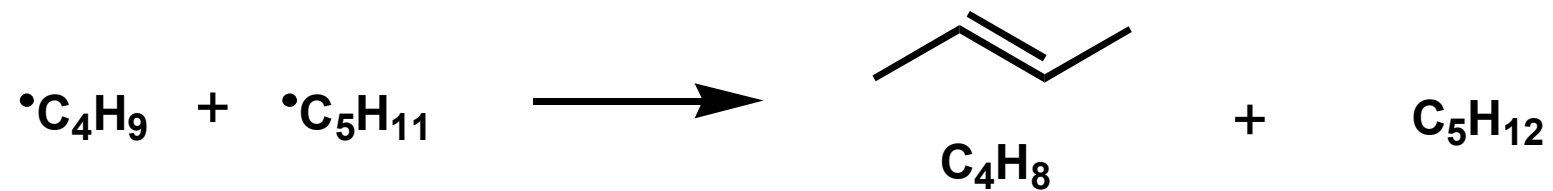
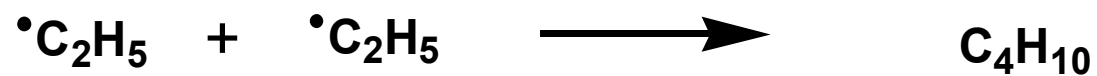
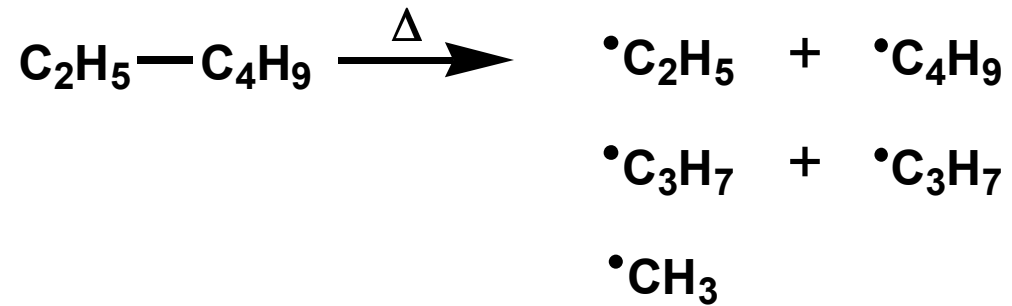
Terminace:



## Disociační energie jednoduchých vazeb (kJ/mol)

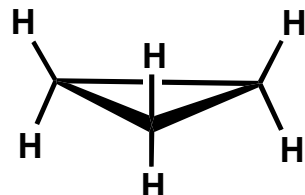
	H	C	N	O	S	F	Cl	Br	I
H	435	413	391	463	347	570	431	366	299
C		346	309	257	272	444	339	284	213
N			163			272	201		
O				166		184	217	201	
S					226	297	255	222	
F						153	255	255	
Cl							243	218	214
Br								193	180
I									151

## Krakovací a reformační proces



# CYKLOALKANY

cyklopropan

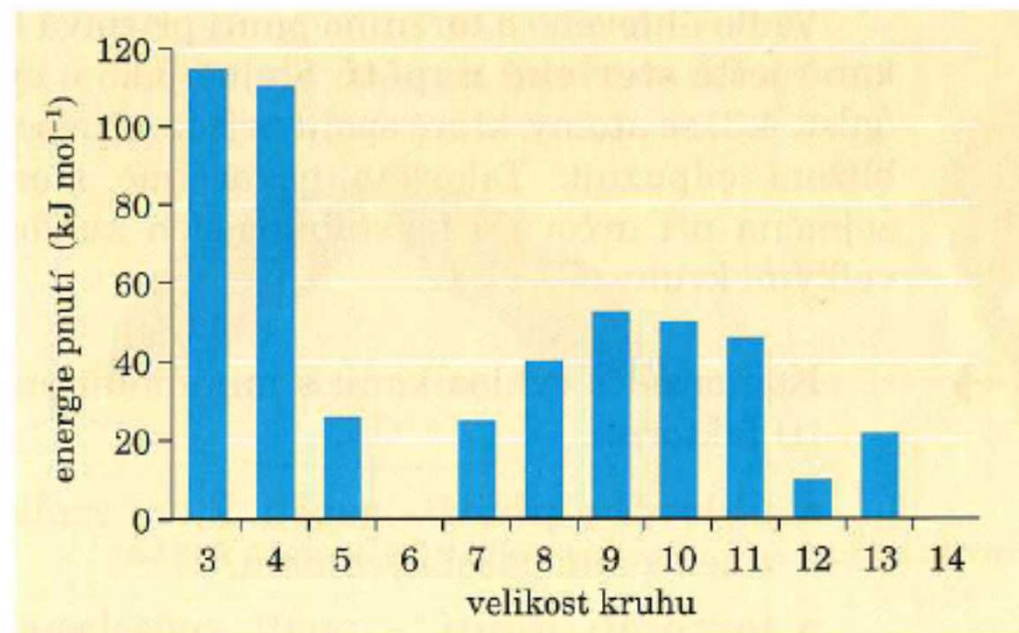


Celkové napětí (CN v  $\text{kJmol}^{-1}$ ) u cykloalkanů s  $n$  uhlíky

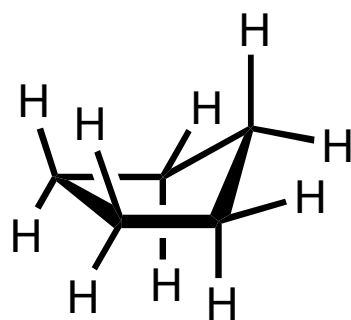
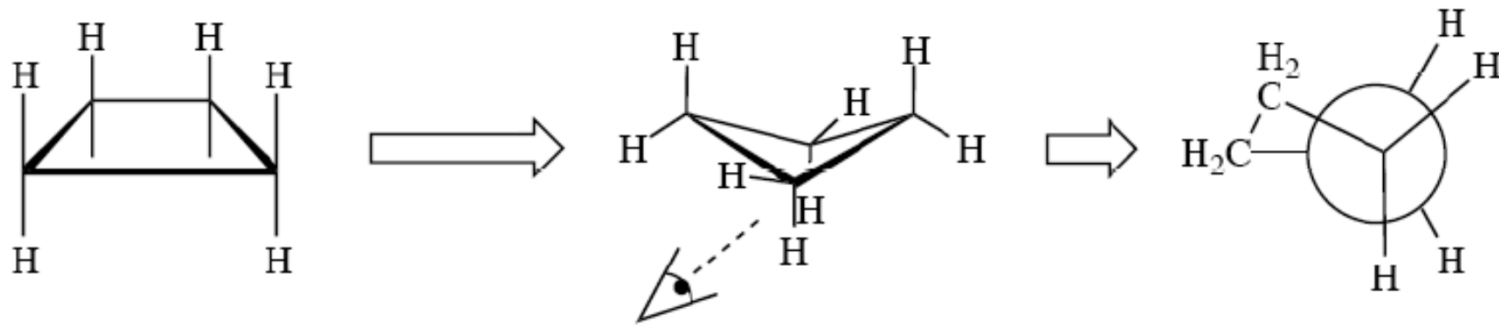
$n$	CN	$n$	CN	$n$	CN	$n$	CN	$n$	CN
3	115,1	4	110,1	5	26,0	6	0,5	7	26,2
8	40,5	9	52,7	10	51,8	11	47,3	12	17,2
13	21,5	14	8,0	15	7,8	16	8,0		

## Stabilita cykloalkanů:

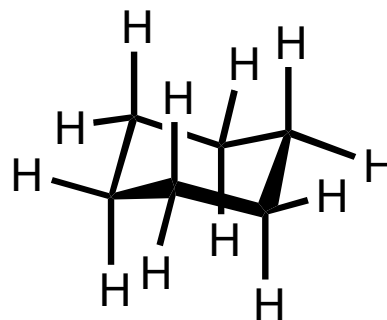
- úhlové napětí – Baeyer
- torzní pnutí – Pitzer
- sterická transanulární repulze – Prelog



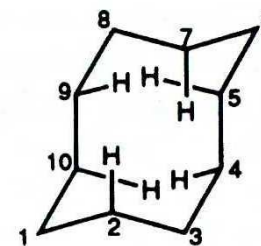
## cyklobutan



cyklopentan

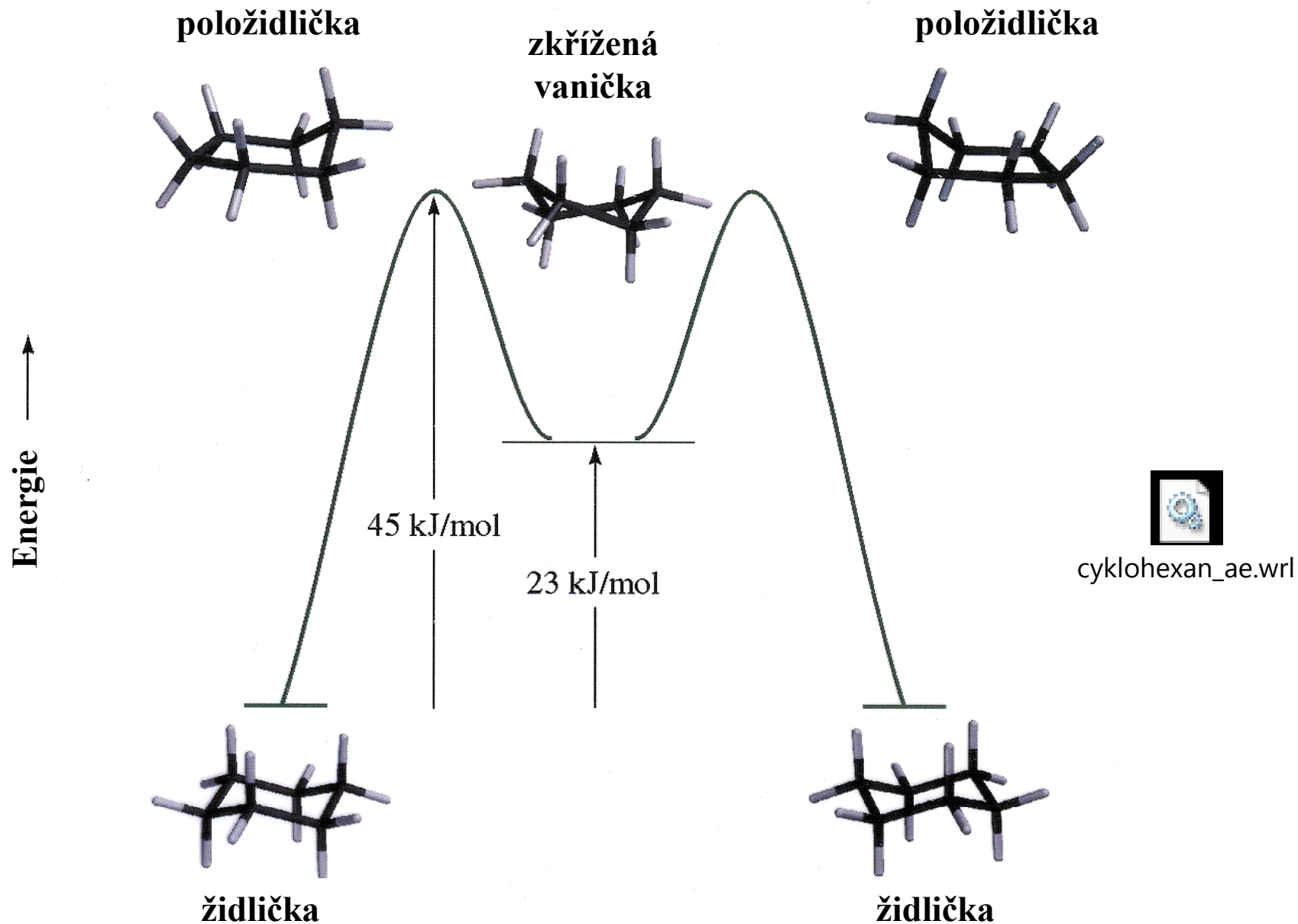


cyklohexan



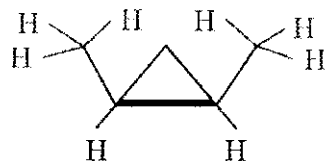
cyklodekan

# KONFORMACE CYKLOHEXANU

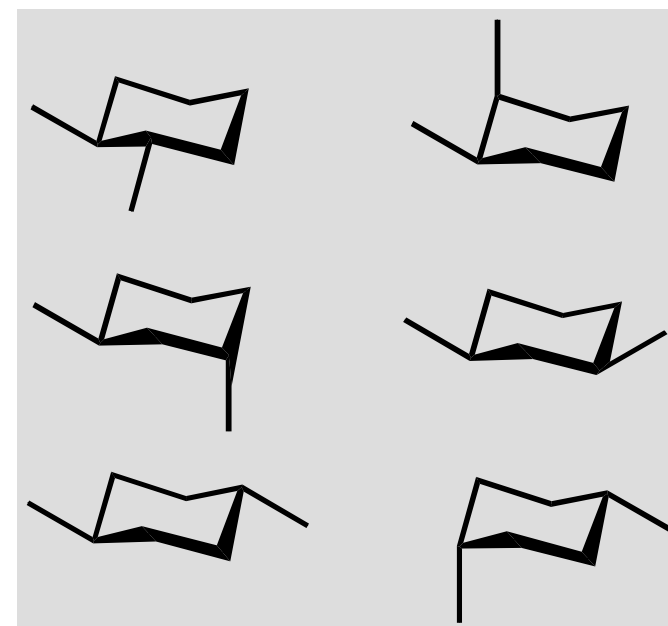
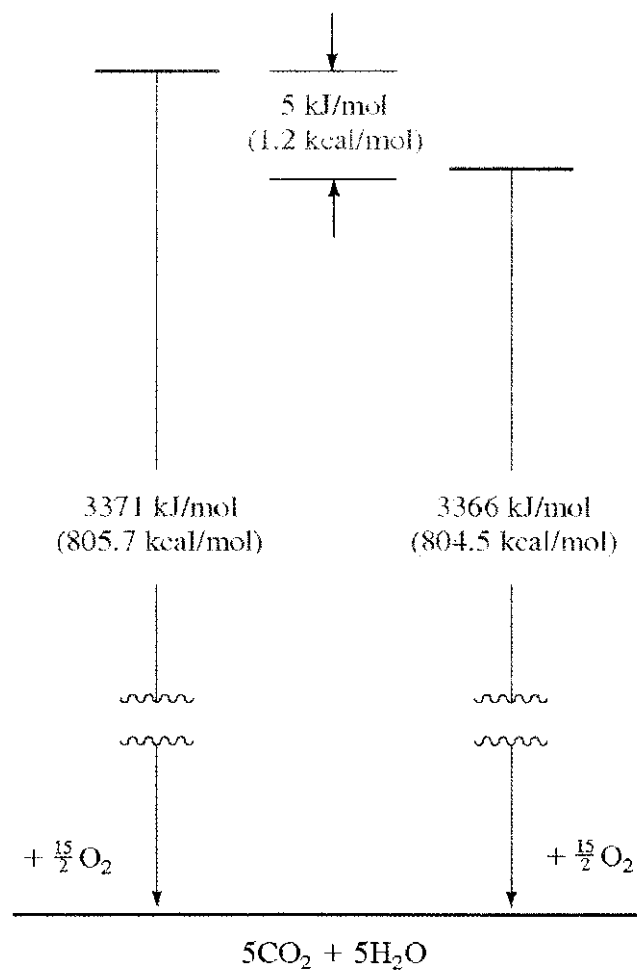
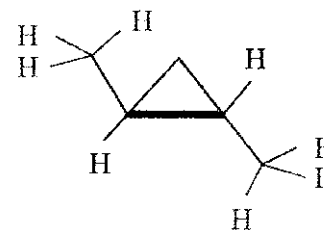


# Cis- Trans IZOMERIE CYKLOALKANŮ

*cis*-1,2-Dimethylcyclopropane



*trans*-1,2-Dimethylcyclopropane



**trans**

**cis**



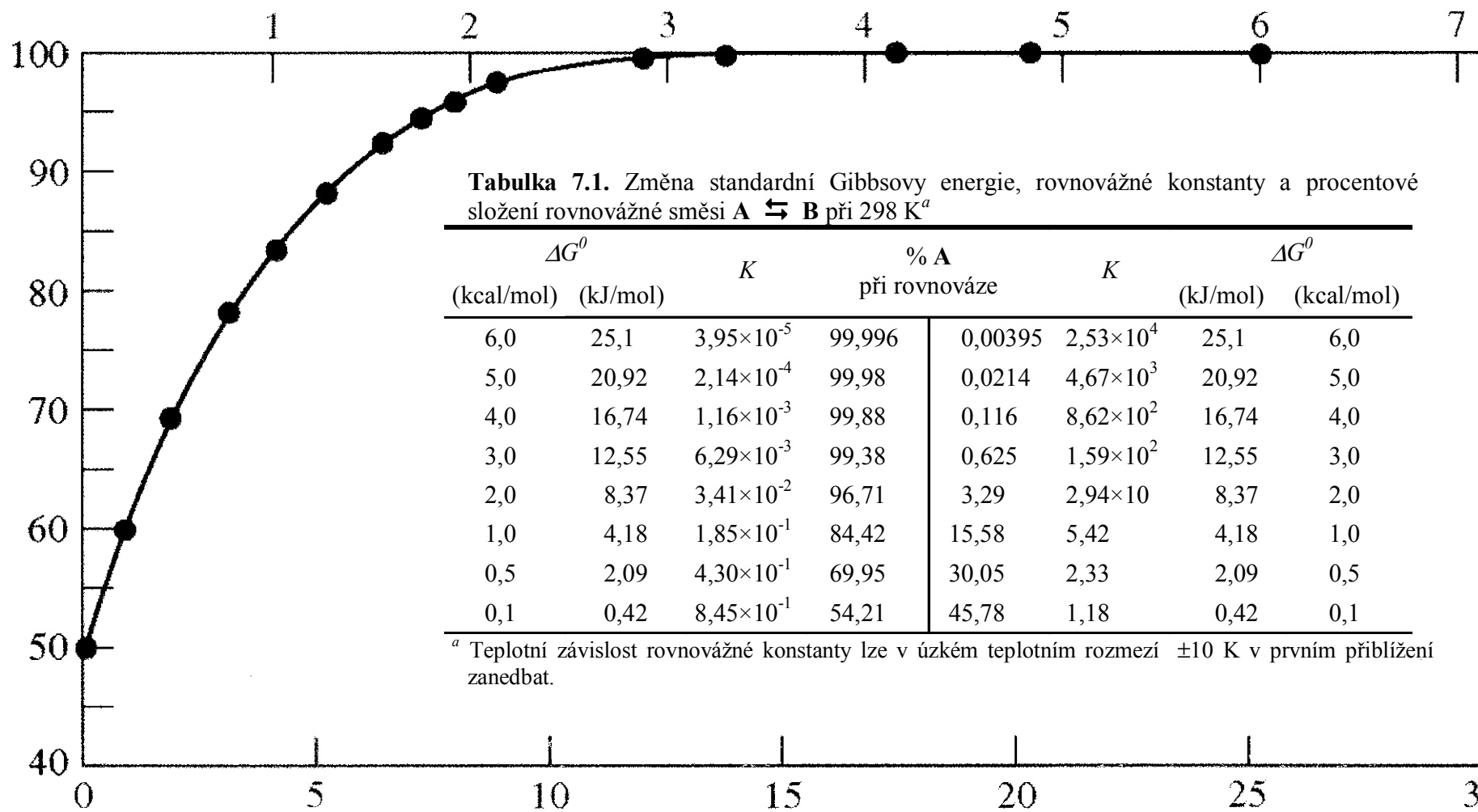
**Tabulka 7.2.7.** Konformační preference u židličkových forem monosubstituovaných cyklohexanů v  $\Delta G^0_{ax-eq}$  (kJmol<sup>-1</sup>) a velikosti Chartonových sterických konstant  $v$

Substituent	$\Delta G^0(A)$ /při K	$v$	Substituent	$\Delta G^0(A)$ /při K	$v$
Me	7,28/300	0,52	F	1,05-1,75/180-248	0,27
Et	7,49/300	0,56	Cl	2,22-2,68/180-248	0,55
Ethynyl	1,71-2,18/182		Br	2,01-2,80/193-248	0,65
Vinyl	6,3/173		I	1,97-2,55/180-298	0,78
Pr		0,68	CN	0,84/178-194	
<i>i</i> -Pr	9,25/300	0,76	OH(v hexanu)	2,51/298	
Bu		0,68	OH(v CS <sub>2</sub> )	4,35/190	
<i>terc</i> -Bu	20,5/153	1,24	CF <sub>3</sub>	10,0-10,5/300	0,91
CH <sub>2</sub> OH	7,36/300		ClCH <sub>2</sub>		0,60
MeOCH <sub>2</sub>	7,20/300		Cl <sub>2</sub> CH		0,81
Ph	11,71/172	1,66	Cl <sub>3</sub> C		1,38
Bn	7,03/202	0,70	ICH <sub>2</sub>		0,67
PhCH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub>		0,70	I <sub>2</sub> CH		0,97
HgCl	<b>-1,05/183</b>		MgBr	3,26/198	
HgOAc	<b>-1,3/183</b>		I <sub>3</sub> C		1,79
NCCH <sub>2</sub>	7,41/300	0,89	BrCH <sub>2</sub>	7,49/300	0,89
Me <sub>3</sub> Si	10,5/306	1,40	SH	5,06/193	
OTs	2,09/190		OPh	2,02/180	
N <sub>3</sub>	1,88-2,59/90-170		NC	0,84/170-183	
NCO	1,84-2,13/193-203		NCS	1,05/194-203	
SCN	5,15/194		NO <sub>2</sub>	4,8/183-198	
NH <sub>2</sub> (toluen)	6,15/173-193		NH <sub>2</sub> (aq. alk.)	7,1/298	
<b>CH<sub>3</sub>-CD<sub>3</sub></b>	<b>0,048/300</b>		Cyklohexyl	9,2/309	0,87
OBz	2,09/181		CO <sub>2</sub> Me	5,0-5,4/200-298	

# Závislost procentového složení rovnovážné směsi na rozdílech volné energie

rozdíly ve volné energii  $\Delta G$  kcal/mol

Procenta hlavní složky v rovnováze, 25 °C



<sup>a</sup> Teplotní závislost rovnovážné konstanty lze v úzkém teplotním rozmezí  $\pm 10$  K v prvním přiblížení zanedbat.

rozdíly ve volné energii  $\Delta G$  kJ/mol