

# Základy organické chemie

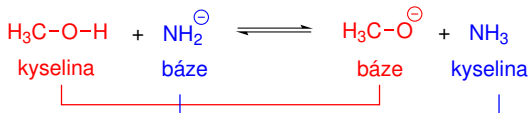
Jaromír Literák



# Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

**Kyselina** je zdrojem  $\text{H}^+$       **Báze** je akceptorem  $\text{H}^+$ .

V acidobazické reakci můžeme identifikovat dva konjugované páry kyselina-báze.



Pro kvantifikaci síly **kyseliny** (ve vodném) prostředí slouží rovnovážná konstanta reakce:



$$K_a = \frac{a(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot a(\text{X}^-)}{a(\text{HX}) \cdot a(\text{H}_2\text{O})}$$

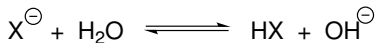
# Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

Aktivita vody  $a(\text{H}_2\text{O}) = 1$ :

$$K_a = \frac{a(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot a(\text{X}^-)}{a(\text{HX})}$$

Kyselina je tím silnější, čím je její konjugovaná báze stabilnější.

Pro **bázi** analogicky:



$$K_b = \frac{a(\text{HX}) \cdot a(\text{OH}^-)}{a(\text{X}^-) \cdot a(\text{H}_2\text{O})}$$

Aktivita vody  $a(\text{H}_2\text{O}) = 1$ :

$$K_b = \frac{a(\text{HX}) \cdot a(\text{OH}^-)}{a(\text{X}^-)}$$

Platí:

$$K_a \cdot K_b = \frac{a(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot a(\text{X}^-)}{a(\text{HX})} \cdot \frac{a(\text{HX}) \cdot a(\text{OH}^-)}{a(\text{X}^-)} = a(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot a(\text{OH}^-)$$

Iontový součin vody:  $K_w = a(\text{H}_3\text{O}^+) \cdot a(\text{OH}^-) = 10^{-14} \text{ mol}^2 \text{ dm}^{-6}$

Prakticky se častěji setkáváme s  $\text{p}K_a$  a  $\text{p}K_b$ :

$$\text{p}K_a = -\log K_a \qquad \text{p}K_b = -\log K_b$$

Čím silnější kyselina (báze), tím menší hodnota  $\text{p}K_a$  ( $\text{p}K_b$ ).

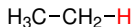
Vztah mezi  $\text{p}K_a$  kyseliny a  $\text{p}K_b$  konjugované báze ve vodě:

$$\text{p}K_a + \text{p}K_b = 14$$

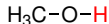
Konjugovaná báze silné kyseliny je slabá báze.

**Základní faktory ovlivňující kyselost** (podle důležitosti):

**1. Elektronegativita a velikost deprotonovaného atomu** – funguje dobře při srovnání atomů ve stejné periodě.



$$\text{p}K_a = 50$$



$$\text{p}K_a = 15,5$$

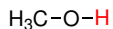
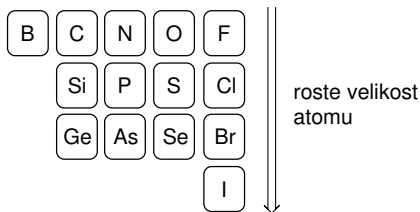


$$\text{p}K_a = 38$$

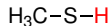


$$\text{p}K_a = 14$$

## 1. Elektronegativita a velikost deprotonovaného atomu



$$\text{p}K_a = 15,5$$



$$\text{p}K_a = 10,3$$



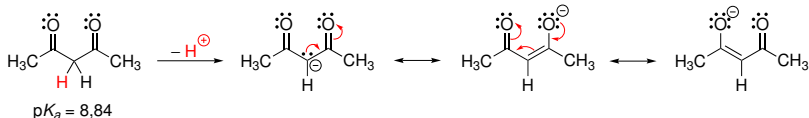
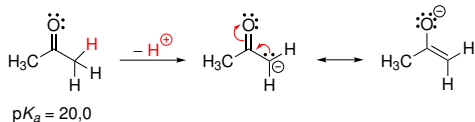
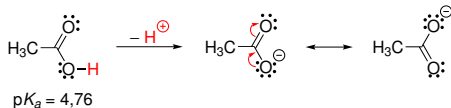
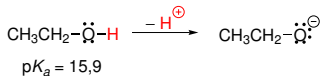
$$\text{p}K_a = 3,18$$



$$\text{p}K_a = -9$$

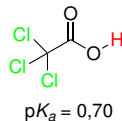
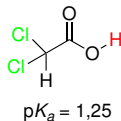
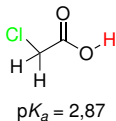
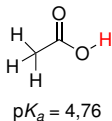
# Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

## 2. Konjugace (uplatnění M– efektu)



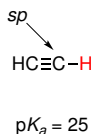
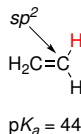
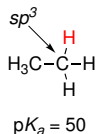
Konjugace elektronového páru s elektronakceptorní skupinou zvyšuje kyselost.

## 3. Indukční efekt



Skupiny s I- efektem kyselost zvyšují, skupiny s I+ efektem kyselost snižují.

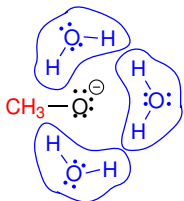
## 4. Typ orbitalu/hybridizace



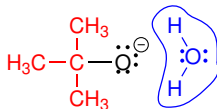
Větší podíl s orbitalu zvyšuje kyselost.



## 5. Vliv solvatace



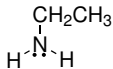
$$pK_a = 15,5$$



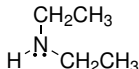
$$pK_a = 19,2$$



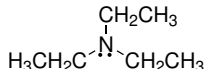
$$pK_b = 4,75$$



$$pK_b = 3,4$$



$$pK_b = 3,02$$

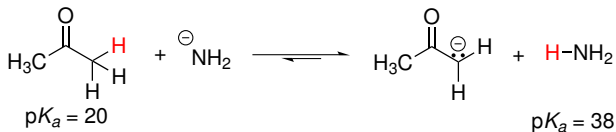
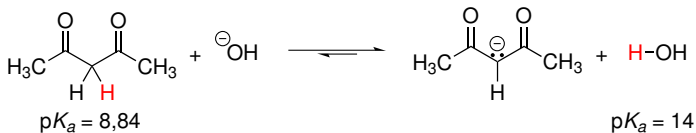
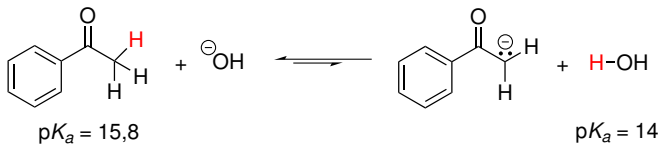


$$pK_b = 3,25$$


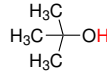
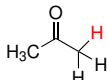

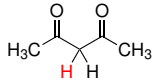




Účinnější solvatace konjugované báze zvyšuje její stabilitu a zvyšuje tak kyselost konjugované kyseliny.

# Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

## Odhad pozice acidobazické rovnováhy:



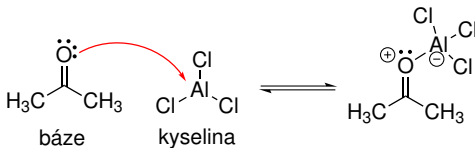
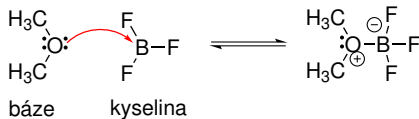
# Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

	$pK_a$		$pK_a$
$H_2SO_4$	-9	$CH_3CH_2OH$	15,9
	-2,9		19,2
$H_3O^+$	0		19,2
	4,76	$HC\equiv C-H$	25
	8,84		38
	9,9		45
$H_2O$	14,0		50
$CH_3OH$	15,5		

# Lewisova teorie kyselin a zásad

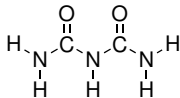
**Kyselina** – akceptor elektronového páru

**Báze** – donor elektronového páru



# Příklad č. 1

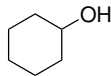
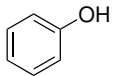
Najděte v molekule biuretu nejkyslejší atom.



**Řešení:**

## Příklad č. 2

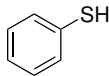
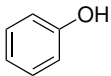
Vyberte kyselější sloučeninu:



**Řešení:**

## Příklad č. 3

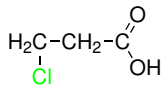
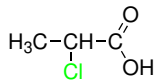
Vyberte kyselější sloučeninu:



**Řešení:**

## Příklad č. 4

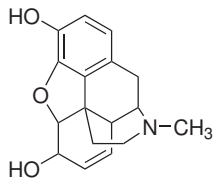
Vyberte kyselější sloučeninu:



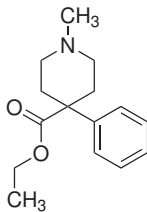
**Řešení:**



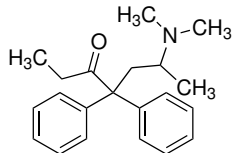
# Úvod do stereochemie



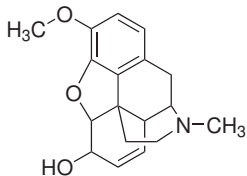
**morfin**



**pethidin**

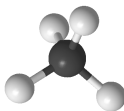


**metadon**



**kodein**

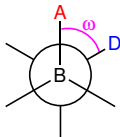
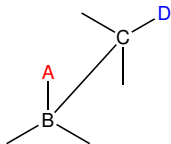
## Klíňkové vzorce



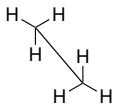
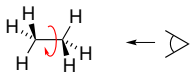
**Konformace** – jakékoliv prostorové uspořádání molekuly odvozené otáčením kolem  $\sigma$  vazby.

Konformační pohyb je umožněn symetrickým rozložením elektronové hustoty  $\sigma$  vazby kolem spojnice jader.

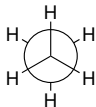
**Dihedrální (torzní) úhel** – úhel mezi rovinami ABC a BCD.



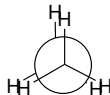
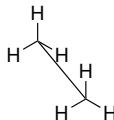
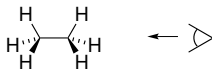
## Střídavá konformace



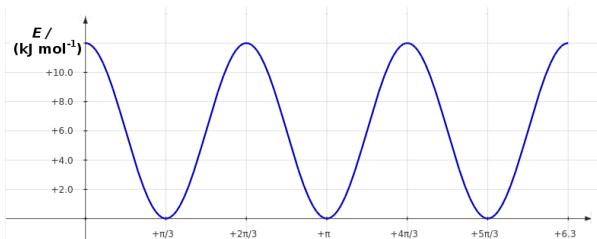
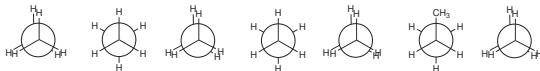
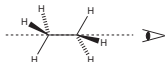
Newmanova  
projekce



## Zákrytová konformace



# Konformace ethanu

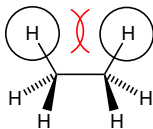


Velikost bariery u ethanu je  $12 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

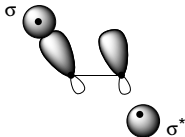
**Konformer** (konformační isomer) – lokální minimum (střídavá konformace u ethanu).

## Původ bariery:

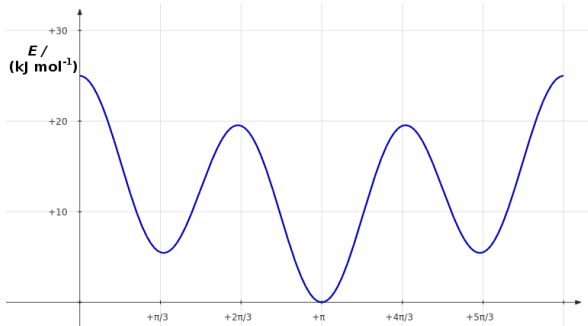
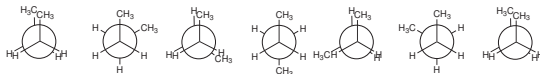
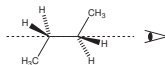
- **Sterická repulze** substituentů v zákrytové konformaci. U ethanu cca 10 % velikosti bariery.



- Interakce **zaplněného orbitalu  $\sigma$  vazby C–H s prázdným protivazebným  $\sigma^*$  orbitalem** ve střídavé konformaci. U ethanu cca 90 % velikosti bariery.

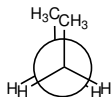
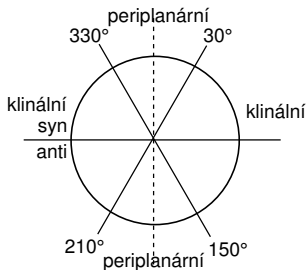


# Konformace butanu

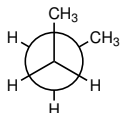


Butan má **tři konformery** odvozené rotací  $C^2-C^3$ .

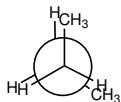
# Konformace butanu



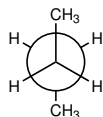
synperiplanární konformace



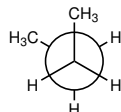
synklinální konformace (konformer)



antiklinální konformace



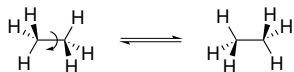
antiperiplanární konformace (konformer)



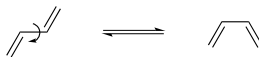
synklinální konformace (konformer)

## Gauche – synklinální konformace

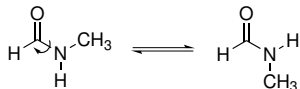
Velikost bariéry rotace kolem jednoduché vazby.



12 kJ mol<sup>-1</sup>



30 kJ mol<sup>-1</sup>



85 kJ mol<sup>-1</sup>



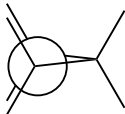
109 kJ mol<sup>-1</sup>

Za laboratorní teploty je už možné zachytit konformery amidu nebo 2,2'-diisopropylbifenyly.



## Původ vnitřního napětí cykloalkanů:

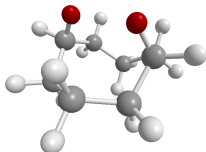
- **Torzní pnutí**



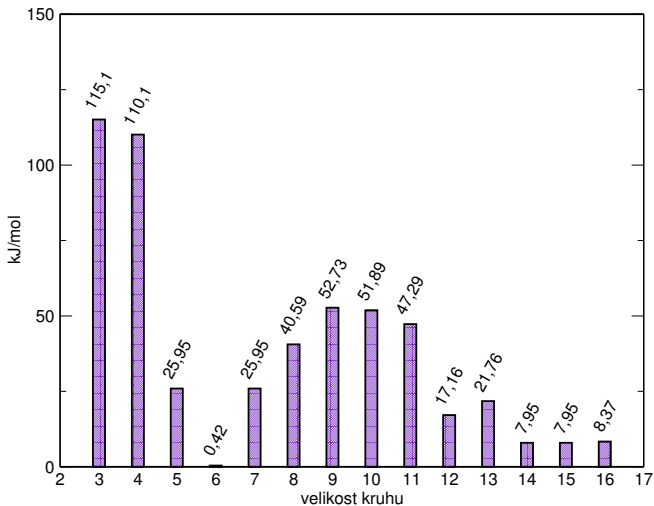
- **Úhlové pnutí** (nesoulad vnitřního úhlu n-úhelníku a vazebných úhlů)



- **Transanulární pnutí**

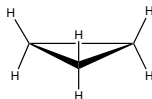


## Velikost vnitřního napětí v cykloalkanech



# Konformace cykloalkanů

**Cyklopropan** – planární



**Cyklobutan**



**Cyklopentan**



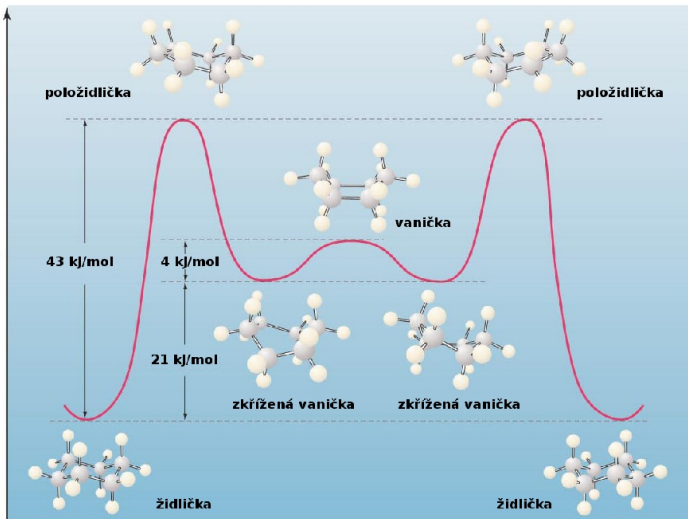
Obálka



Položidlička

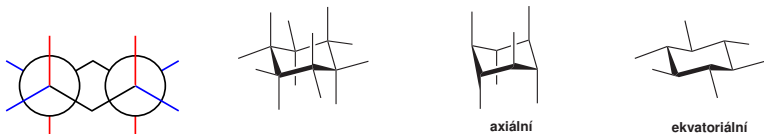
# Konformace cyklohexanu

Dva konformery – **židlička** a **zkřížená vanička**.

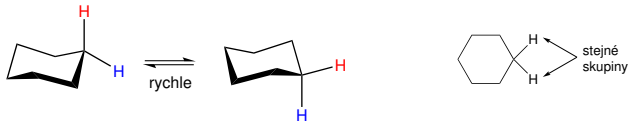


# Konformace cyklohexanu

V židličkové konformaci cyklohexanu existují dva druhy C–H vazeb – **axiální** a **ekvatoriální**.



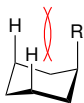
Při přechodu jedné židličky na druhou konformačním pohybem dochází k **rychlé** výměně axiálních a ekvatoriálních pozic.



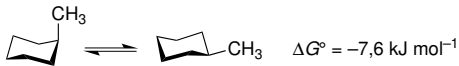
Proto můžeme nahradit reálnou židličku cyklohexanu **planárním šestiúhelníkem**.

# Konformace cyklohexanu

Monosubstituovaný cyklohexan – u naprosté většiny substituentů pozorujeme preferenci pro **ekvatoriální pozici**.



1,3-diaxiální interakce



Za laboratorní teploty:

Substituent	$A/(\text{kJ mol}^{-1})$	ekvatoriální/axiální
-Cl	2,0	70:30
-OH	4,2	83:17
-CH <sub>3</sub>	7,6	95:5
-CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	8,0	96:4
-CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	9,2	97:3
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	22,8	999:1

# Konformace dekalinu

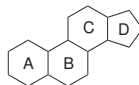
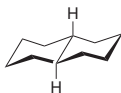
## Dekalin – dekahydronaftalen



*cis*

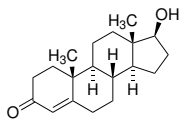


*trans*

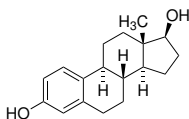


**cis-Dekalin** je konformačně pohyblivý, dochází k současnému překlápění obou židliček.

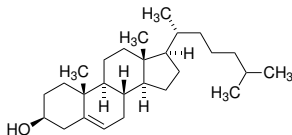
**trans-Dekalin** má mnohem menší konformační pohyblivost.



**testosteron**

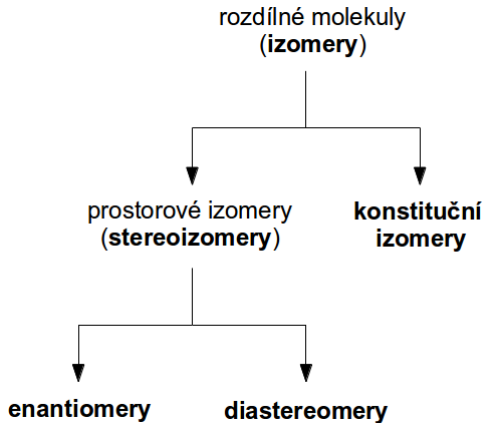


**estradiol**



**cholesterol**

**Isomery** – různé molekuly, které mají stejný sumární vzorec.





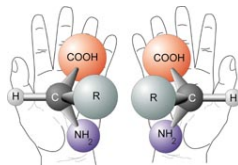
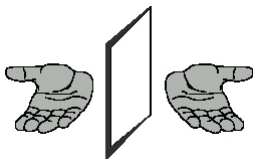
Zdrojem rozdílného prostorového uspořádání může být:

- **konformace** – prostorové uspořádání odvoditelné otáčením kolem  $\sigma$ -vazeb.
- **konfigurace** – prostorové uspořádání, které nelze odvodit konformačním pohybem.

**Stereogenní centrum** – část molekuly, která podmiňuje existenci stereoisomerů.

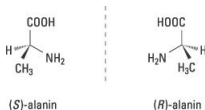


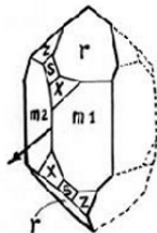
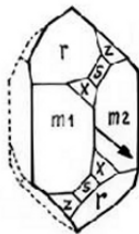
„Objekt neztotožnitelný se svým zrcadlovým obrazem“



$\chi\epsilon\iota\rho$  – ruka

Fenomén projevující se na mnoha úrovních – od chiralit makroskopických objektů (**enantiomorfy**), přes chiralitu molekul (**enantiomery**) po chiralitu matematických objektů.

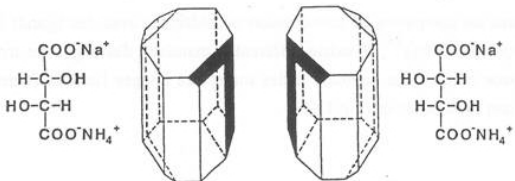




**1783** – **Immanuel Kant** diskutuje předměty, které zrcadlením poskytují neztotožnitelné obrazy.

**poč. 19. století** – francouzští fyzici **Arago** a **Biot** popisují stáčení roviny polarizovaného světla při průchodu krystalem křemene a některými kapalinami organického původu.

**1848** – **Louis Pasteur** rozdělil mechanicky krystaly vinanu sodno-amonného na enantiomery. Ukázal na spojitost chiralidy (dissymetrie) a optické aktivity, které byly do té doby spojeny s krystaly, s vlastnostmi jednotlivých molekul.

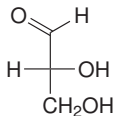


**1874** – **J. H. van 't Hoff** a **J. Le Bel**: tetraedrické uspořádání vazeb vycházejících z atomu uhlíku, chiralita spojena se čtyřmi různými substituenty atomu uhlíku.

**1884** – **lord Kelvin** zavádí pojem chiralita, jak jej dnes známe.

*„Atribut jakéhokoliv geometrického útvaru nebo množiny bodů, jehož obraz v ideálním zrcadle s ním nelze ztotožnit.“*

**1891 až 1894** – **Hermann Emil Fischer** určil konfiguraci všech známých cukrů a předpověděl existenci dalších možných isomerů.



**1951** – poprvé určena absolutní konfigurace chirální molekuly vinanu sodno-rubidného (**Johannes Martin Bijvoet**).

*„The result is that Emil Fisher's convention, which assigned the configuration of FIG. 2 to the dextrorotatory acid appears to answer the reality.“*

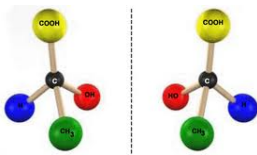


**1956** – předpověď (**Lee a Yang**) a experimentální prokázání (**Wu**) porušení parity slabé interakce.

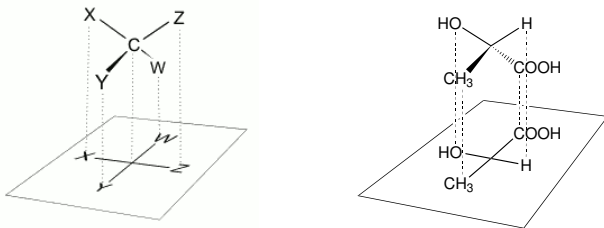
# Centrální chiralita

**Centrum chirality** – stereogenním centrem je nejčastěji atom uhlíku nesoucí čtyři rozdílné substituenty.

**Kyselina mléčná:**



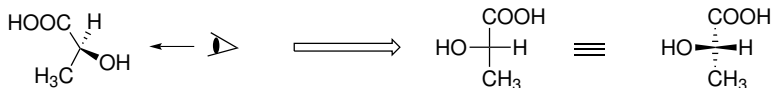
Reprezentace konfigurace na centru chirality **Fischerovou projekcí:**



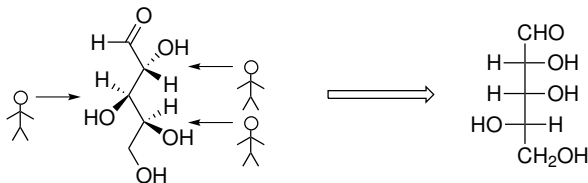
# Centrální chiralita

## Užití Fischerovy projekce

L-(+)-Kyselina mléčná – (S)-kyselina mléčná:



L-(–)-Lyxosa:



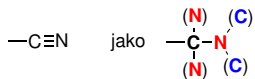


# Deskriptory absolutní konfigurace

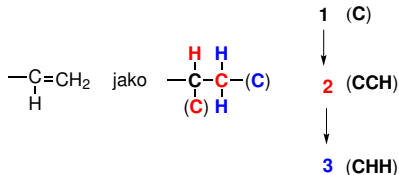
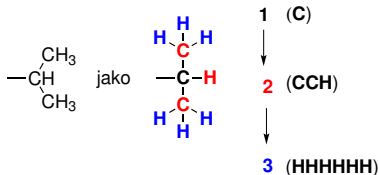
Algoritmus pro popis **konfigurace centra chiralidy** deskriptorem *R* nebo *S*.

Seřazení substituentů na centru chiralidy – **Cahnovy, Ingoldovy a Prelogovy pravidla** (CIP):

Postupně posuzujeme skupiny atomů vzdálených od centra chiralidy stejným počtem vazeb, rozhodujeme podle protonového čísla.



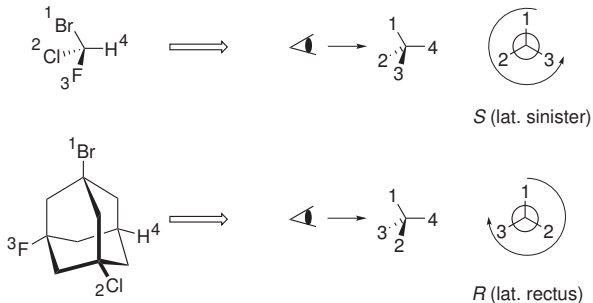
Srovnání skupin:



# Deskriptory absolutní konfigurace

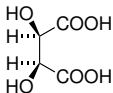
Podíváme se na centrum chiraloty tak, aby skupina s nejnižší prioritou byla v zákrytu.

Uurčíme, zda při pohybu  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$  točíme po nebo proti smyslu pohybu hodinových ručiček.

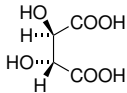
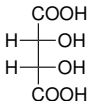


# Centrální chiralita

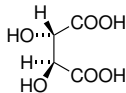
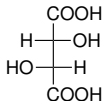
**Kyselina vinná** – existuje ve formě tří stereoisomerů



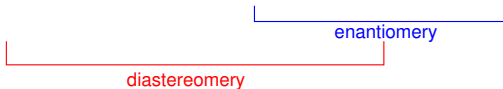
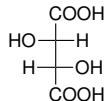
*meso*-vinná  
kyselina  
(*R*, *S*)



(-)-D-vinná  
kyselina  
(*R*, *R*)



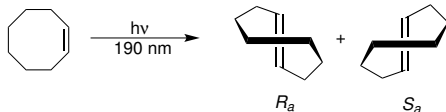
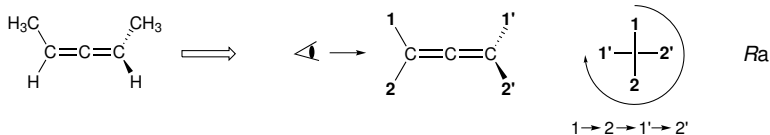
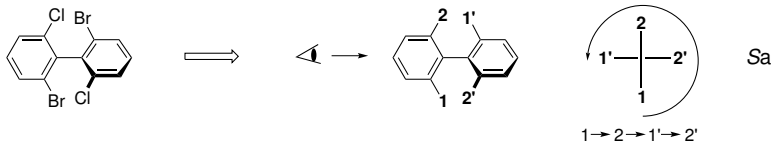
(+)-L-vinná  
kyselina  
(*S*, *S*)



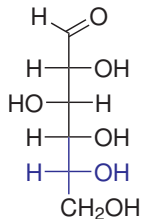
**Pokud najdeme v molekule rovinu symetrie, není chirální** (např. *meso*-vinná kyselina).

# Axiální chiralita

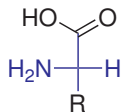
Stereogenním centrem je **osa chiralita** – deskriptory  $R_a$  a  $S_a$ .



# Homochiralita života



D-cukry

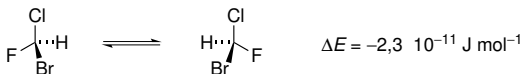


L-aminokyseliny



# Vlastnosti prostorových isomerů

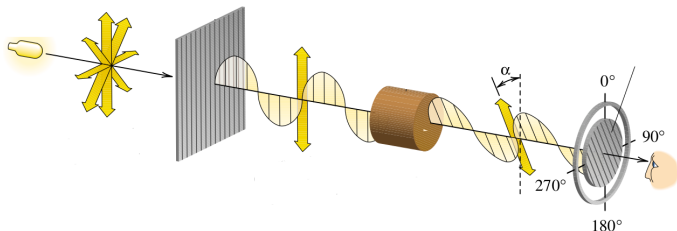
Enantiomery jsou prakticky **energeticky degenerované**, rozdíl způsobený porušením parity slabé interakce je zanedbatelný.



**Enantiomery** se v achirálním prostředí **neliší** svými vlastnostmi.

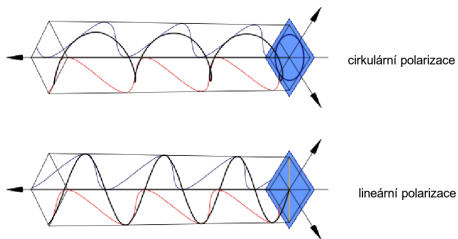
**Diastereomery** obecně nemají stejnou energii a **liši** se svými vlastnostmi.

Enantiomery **stáčíjí rovinu planárně polarizovaného světla**, každý stejnou měrou ale opačným směrem.



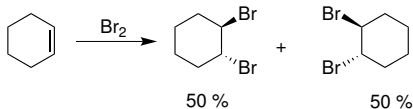
# Vlastnosti prostorových isomerů

Planárně polarizované světlo je superpozicí levotočivě a pravotočivě polarizovaného světla.



**Racemická směs** – směs obsahující stejná množství jednoho a druhého enantiomeru.

Pokud při reakci z achirálních látek vzniká chirální produkt, vzniká racemická směs:

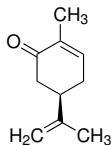


# Vlastnosti prostorových isomerů

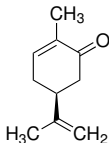
Enantiomery se liší při interakci s biomolekulami, které jsou chirální – vzniká **diastereomerní vztah**.



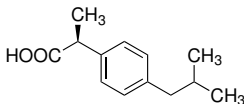
*Mentha spicata*



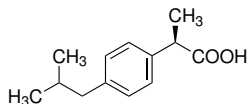
(*R*)-karvon  
máta



(*S*)-karvon  
kmín



(*S*)-ibuprofen  
analgetikum

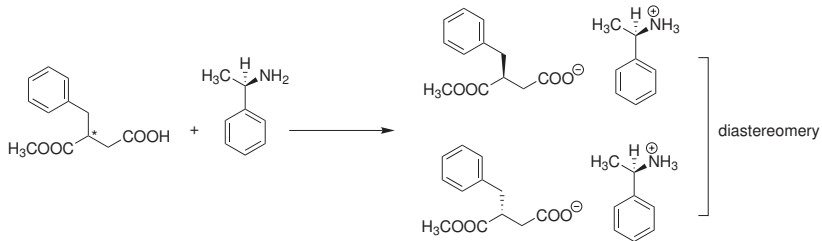


(*R*)-ibuprofen  
neaktivní



# Vlastnosti prostorových isomerů

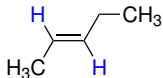
Dělení enantiomerů, např. užití chirálních aminů k oddělení enantiomerů kyselin, kdy vzniklé soli jsou ve vztahu diastereomerů a liší se rozpustností.



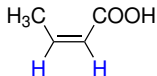
# Isomerie na dvojně vazbě a na cyklu

## Popis konfigurace:

Dvojná vazba nesoucí dvě stejné referenční skupiny koncích dvojně vazby – deskriptory *cis* a *trans*:

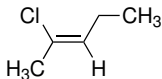


*trans*-pent-2-en

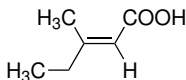


*cis*-but-2-enová kyselina

Univerzálnější deskriptory *E* a *Z* – priority substituentů určíme pomocí CIP.



(*Z*)-2-chlorpent-2-en  
(*Z* – zusammen)



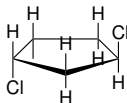
(*E*)-3-methylpent-2-enová kyselina  
(*E* – entgegen)

# Isomerie na dvojně vazbě a na cyklu

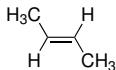
U disubstituovaných cyklů užíváme pouze deskriptory *cis* a *trans*.



*cis*-2-methylcyklopropan-1-ol



*trans*-1,3-dichlorocyklopentan



*trans*-but-2-en  
(*E*)-but-2-en

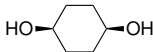


*cis*-stilben  
(*Z*)-stilben



*trans*-1-chlorprop-1-en  
(*E*)-1-chlorprop-1-en

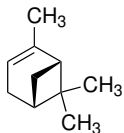
ale  
pouze



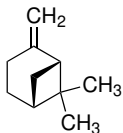
*cis*-cyklohexan-1,4-diol

## Příklad č. 5

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



(+)- $\alpha$ -pinen

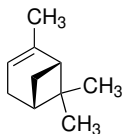


(+)- $\beta$ -pinen

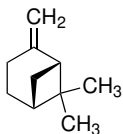
- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 5

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



(+)- $\alpha$ -pinen

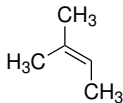
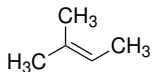


(+)- $\beta$ -pinen

- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 6

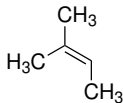
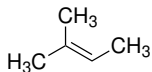
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 6

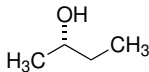
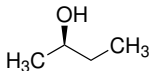
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 7

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?

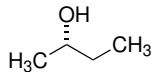
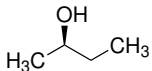


- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery



## Příklad č. 7

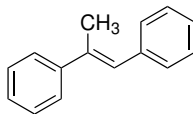
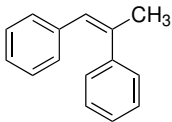
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 8

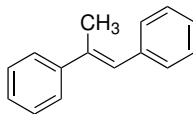
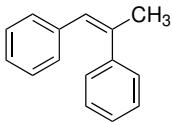
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 8

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 9

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 9

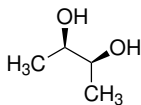
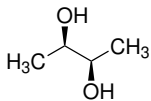
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

# Příklad č. 10

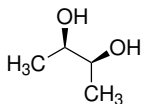
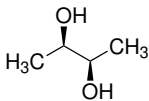
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

## Příklad č. 10

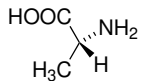
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

# Příklad č. 11

Převeďte následující molekulu alaninu do Fischerovy projekce.

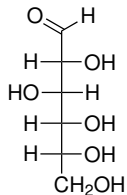
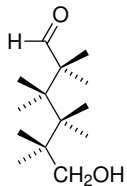


**Řešení:**



## Příklad č. 12

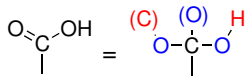
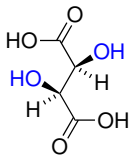
Převeďte molekulu sacharidu z Fischerovy projekce do klínkového vzorce.



**Řešení:**

# Příklad č. 13

Najděte v molekule centra chiralitity a určete jejich absolutní konfiguraci.



**Řešení:**

# Příklad č. 13

**Řešení:**

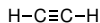
# Funkční skupiny



alkan



alken



alkyn



aren



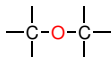
alkylhalogenid



alkohol



fenol



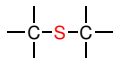
ether



epoxid



thiol



sulfid



(primární) amin

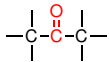


nitroderivát



aldehyd

# Funkční skupiny



keton



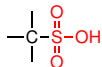
amid



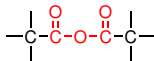
keten



acylhalogenid  
(halogenid kyseliny)



sulfonová kyselina



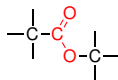
anhydrid karboxylové  
kyseliny



karboxylová kyselina



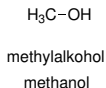
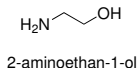
nitril



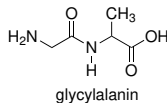
ester

# Názvosloví organických sloučenin

Díky velké strukturní variabilitě organických sloučenin je obtížné najít jeden univerzální názvoslovný princip.

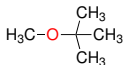


azan  
pyridin



Název musí být vždy jednoznačný!

Radikálově (skupinově) funkční názvosloví



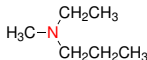
methyl(*tert*-butyl)ether



dimethylketon



isopropylalkohol

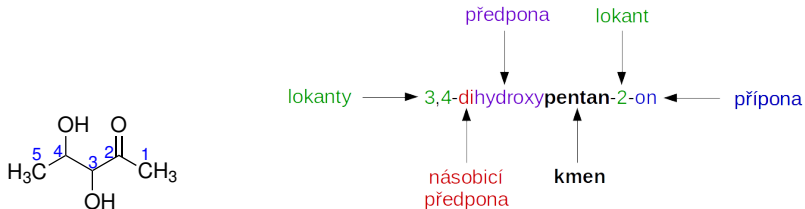


ethyl(methyl)propylamin

# Substituční názvosloví podle IUPAC

Sloučeninu odvodíme **náhradou** (substitucí) atomů vodíku v **základní struktuře**.  
**Předpony** a **přípony** vyjadřují modifikaci základní struktury.

**Morfemy názvu:** kmen, přípony, předpony, rozšířená zakončení, lokanty a násobící předpony.



**Pozor, české názvosloví nereflektuje novější anglické názvosloví!**

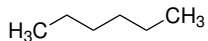
# Názvosloví uhlovodíků

## Alkany:

<b>Sumární vzorec</b>	<b>Název</b>	<b>Sumární vzorec</b>	<b>Název</b>
CH <sub>4</sub>	Methan	C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	Tridekan
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	Ethan	C <sub>20</sub> H <sub>42</sub>	Ikosan (eikosan)
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	Propan	C <sub>21</sub> H <sub>44</sub>	Henikosan (heneikosan)
C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	Butan	C <sub>22</sub> H <sub>46</sub>	Dokosan
C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	Pentan	C <sub>23</sub> H <sub>48</sub>	Trikosan
C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	Hexan	C <sub>24</sub> H <sub>50</sub>	Tetrakosan
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	Heptan	C <sub>30</sub> H <sub>62</sub>	Triakontan
C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	Oktan	C <sub>31</sub> H <sub>64</sub>	Hentriakontan
C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	Nonan	C <sub>32</sub> H <sub>66</sub>	Dotriakontan
C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	Dekan	C <sub>33</sub> H <sub>68</sub>	Tritriakontan
C <sub>11</sub> H <sub>24</sub>	Undekan	C <sub>40</sub> H <sub>82</sub>	Tetrakontan
C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	Dodekan	C <sub>50</sub> H <sub>82</sub>	Pentakontan



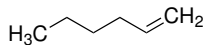
## Cykloalkany a nenasycené uhlovodíky:



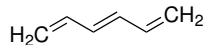
hexan



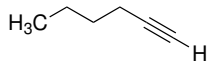
cyklohexan



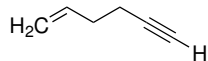
hex-1-en



hexa-1,3,5-trien



hex-1-yn



hex-1-en-5-yn

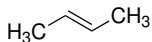
**Hlavní skupina** – skupina s nejvyšší názvoslovnou prioritou, je vyjádřena příponou nebo na konci názvu.

Skupiny seřazené podle priority:

1. Radikály
2. Anionty
3. Kationty
4. Zwitteriontové sloučeniny
5. Kyseliny
6. Anhydridy kyselin
7. Estery kyselin
8. Halogenidy kyselin
9. Amidy
10. Hydrazidy kyselin
11. Imidy kyselin
12. Nitrily
13. Aldehydy
14. Ketony
15. Alkoholy a fenoly následované thioley
16. Hydroperoxydy
17. Aminy
18. Iminy
19. Etery následované sulfidy
20. Peroxydy následované disulfidy

**Substituent** – atom nebo skupina, která nahrazuje jeden nebo více atomů vodíku základního hydridu.

**Lokanty** – čísla nebo písmena latinské nebo řecké abecedy. S výjimkou názvů triviálního původu se lokanty umísťují **před příslušný morfem**.



but-2-en

~~2-buten~~

Lokanty se oddělují **spojovníkem (-)**, ne pomlčkou (·).

**Násobící předpony:**

1	mono-	5	penta-	9	nona-
2	di-	6	hexa-	10	deka-
3	tri-	7	hepta-	11	undeka-
4	tetra-	8	okta-	12	dodeka-

**Počty substituovaných skupin:**

2	bis-	3	tris-	4	tetrakis-
---	------	---	-------	---	-----------

# Přípony a předpony pro vybrané skupiny

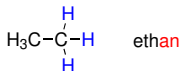
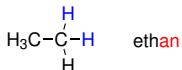
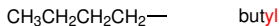
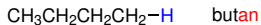
Skupina	Vzorec	Předpona	Přípona
Karboxylová kyselina	-COOH	karboxy-	-karboxylová kys.
	-(C)OOH	–	-ová kyselina
Sulfonová kys.	-SO <sub>3</sub> H	sulfo-	-sulfonová kyselina
Ester karbox. kyseliny	-COOR	(R)oxykarbonyl-	(R)-...-karboxylát
	-(C)OOR	–	(R)-...-oát
Acyhalogenid	-CO-halogen	halogenkarbonyl-	-karbonylhalogenid
	-(C)O-halogen	–	-oylhalogenid
Amid	-CO-NH <sub>2</sub>	karbamoyl-	-karboxamid
	-(C)O-NH <sub>2</sub>	–	-amid
Nitril	-C≡N	kyan-	-karbonitril
	-(C)≡N	–	-nitril
Aldehyd	-CHO	formyl-	-karbaldehyd
	-(C)HO	oxo-	-al
Keton	>C=O	oxo-	-on
Alkohol / fenol	-OH	hydroxy-	-ol
Thiol	-SH	sulfanyl-	-thiol
Amin	-NH <sub>2</sub>	amino-	-amin
Imin	=NH	imino-	-imin

# Přípony a předpony pro vybrané skupiny

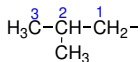
Některé skupiny jsou vyjádřené **pouze předponou**.

Skupina	Vzorec	Předpona
Bromderiváty	-Br	brom-
Chlorderiváty	-Cl	chlor-
Fluorderiváty	-F	fluor-
Jodderiváty	-I	jod-
Diazosloučeniny	=N <sub>2</sub>	diazo-
Azidy	-N <sub>3</sub>	azido-
Nitrososloučeniny	-NO	nitroso-
Nitrososloučeniny	-NO <sub>2</sub>	nitro-
Ethery	-OR	(R)oxy-
Sulfidy	-SR	(R)sulfanyl-

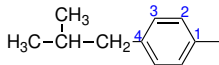
## Názvosloví substituentů odvozených od uhlovodíků:



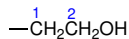
### substituovaný substituent:



2-methylpropyl  
(isobutyl)



4-(2-methylpropyl)fenyl  
4-isobutylfenyl



2-hydroxyethyl

# Tvorba názvu

## Povolené triviální a semitriviální názvy:



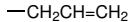
isopropyl



terc-butyl



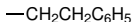
vinyl



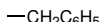
allyl



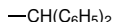
fenyl



fenethyl



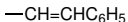
benzyl



benzhydryl



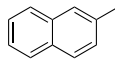
trityl



cinnamyl



3-pyridyl



2-naftyl

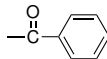
## Názvy acylů – zbytků karboxylových kyselin:



formyl



acetyl



benzoyl

**Zkratky pro některé substituenty:** Et (ethyl), Me (methyl), Pr (propyl), *i*-Pr (isopropyl), Ph (fenyl), Bu nebo *n*-Bu (butyl), Ar (aryl – zbytek aromatického uhlovodíku), Bn (benzyl), *t*-Bu (*terc*-butyl).

## Hledání základního uhlovodíku:

U **cyklických derivátů** je základem obvykle cyklus.

U **acyklických derivátů:**

- 1 Nejdelší nevětvený acyklický řetězec nesoucí maximum skupin vyjádřených příponou
- 2 Řetězec s maximem násobných vazeb
- 3 Řetězec s maximem dvojných vazeb
- 4 Absolutně nejdelší řetězec

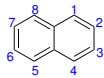


## Pravidla pro číslování základní struktury:

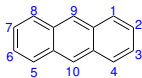
Při číslování základní struktury se snažíme dosáhnout **nejnižší sady lokantů**.

Postupujeme podle těchto bodů až do jednoznačného rozhodnutí:

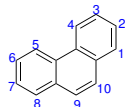
- Stanovené číslování (polycyklické aromatické uhlovodíky, heterocykly).



naftalen



anthracen

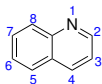


fenanthren

- Nejnižší lokanty pro heteroatomy v heterocyklech.



pyridin



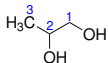
chinolin



pyrrol

## Pravidla pro číslování základní struktury (pokračování):

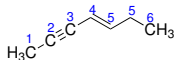
- Nejnižší lokanty pro skupiny pojmenované příponou.



propan-1,2-diol

~~propan-2,3-diol~~

- Nejnižší lokanty pro heteroatomy v necyklické základní struktuře.
- Nejnižší lokanty pro násobné vazby (-en/-yn).



hept-4-en-2-yn

~~hept-3-en-5-yn~~

- Nejnižší lokanty pro skupiny pojmenované předponou.

## Často používané triviální názvy:



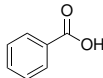
anilin



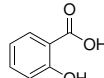
fenol



benzaldehyd



benzoová  
kyselina



salicylová  
kyselina



formaldehyd



acetaldehyd



kyselina  
mravenčí



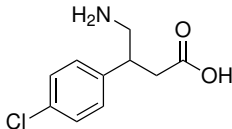
kyselina  
octová



kyselina  
akrylová

## Příklad č. 14

Identifikujte v molekule funkční skupiny a určete, která z těchto skupin by měla nejvyšší prioritu v substitučním názvosloví.

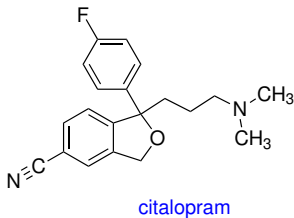


baklofen

**Řešení:**

## Příklad č. 15

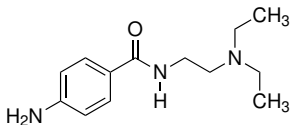
Identifikujte v molekule funkční skupiny a určete, která z těchto skupin by měla nejvyšší prioritu v substitučním názvosloví.



**Řešení:**

## Příklad č. 16

Identifikujte v molekule funkční skupiny a určete, která z těchto skupin by měla nejvyšší prioritu v substitučním názvosloví.

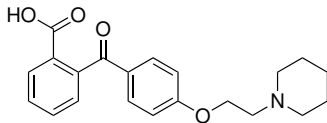


prokainamid

**Řešení:**

## Příklad č. 17

Identifikujte v molekule funkční skupiny a určete, která z těchto skupin by měla nejvyšší prioritu v substitučním názvosloví.



pitofenon

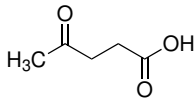
**Řešení:**

Napište strukturální vzorec 2-amino-3-methylpentanové kyseliny.

**Řešení:**



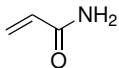
Systematicky pojmenujte kyselinu levulovou:



**Řešení:**

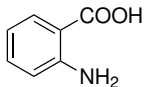
## Příklad č. 20

Systematicky pojmenujte akrylamid:



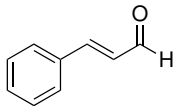
**Řešení:**

Systematicky pojmenujte kyselinu anthranilovou:



**Řešení:**

Systematicky pojmenujte cinnamaldehyd:



**Řešení:**