

Základy organické chemie

Jaromír Literák

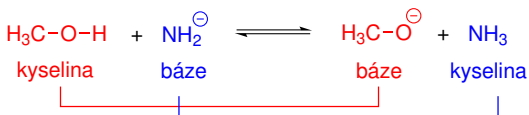


Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

Kyselina je zdrojem H^+

Báze je akceptorem H^+ .

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



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



$$K_a = \frac{a(H_3O^+) \cdot a(X^-)}{a(HX) \cdot a(H_2O)}$$

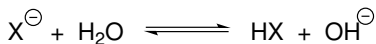
Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

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

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

Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

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 $\text{p}K_b$:

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

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

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:

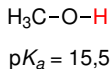
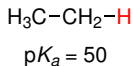
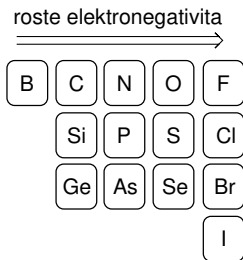
$$\text{p}K_a + \text{p}K_b = 14$$

Konjugovaná báze silné kyseliny je slabá báze.

Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

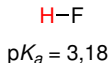
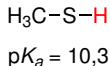
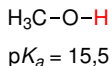
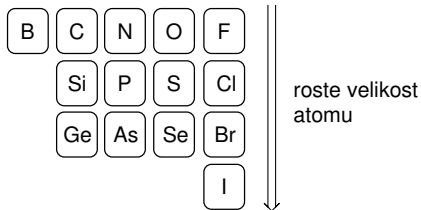
Základní faktory ovlivňující kyselost (podle důležitosti):

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



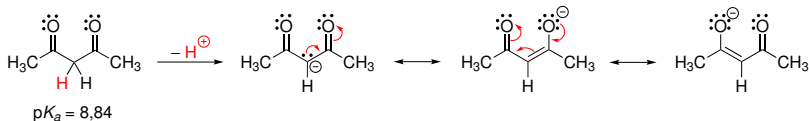
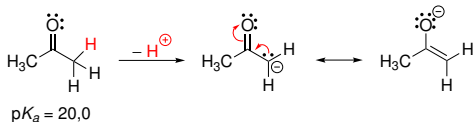
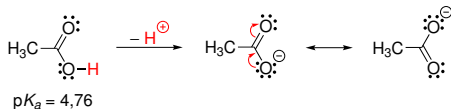
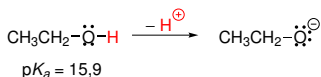
Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

1. Elektronegativita a velikost deprotonovaného atomu



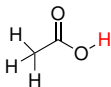
Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

2. Konjugace (uplatnění M– efektu)

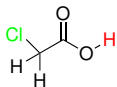


Konjugace elektronového páru s elektronakceptorní skupinou zvyšuje kyselost.

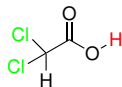
3. Indukční efekt



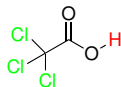
$$pK_a = 4,76$$



$$pK_a = 2,87$$



$$pK_a = 1,25$$



$$pK_a = 0,70$$

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

4. Typ orbitalu/hybridizace



$$pK_a = 50$$



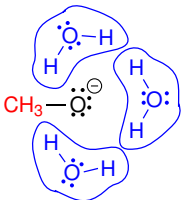
$$pK_a = 44$$



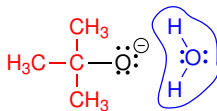
$$pK_a = 25$$

Větší podíl s orbitalu zvyšuje kyselost.

5. Vliv solvatace



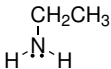
$$pK_a = 15,5$$



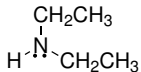
$$pK_a = 19,2$$



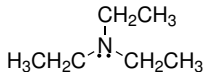
$$pK_b = 4,75$$



$$pK_b = 3,4$$



$$pK_b = 3,02$$

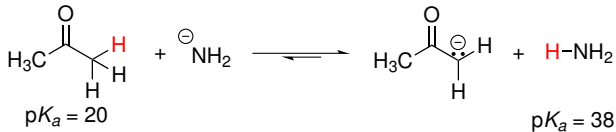
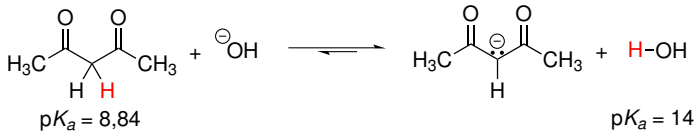
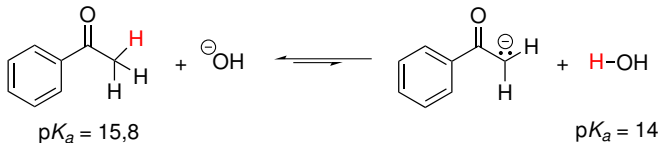


$$pK_b = 3,25$$


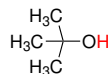
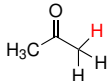

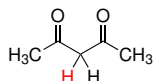




Účinnější solvatace konjugované báze zvyšuje její stabilitu a zvyšuje tak kyselost konjugované kyseliny.

Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

Odhad pozice acidobazické rovnováhy:



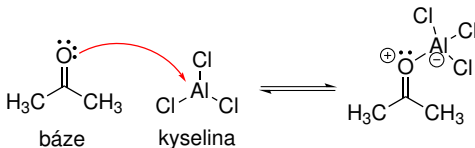
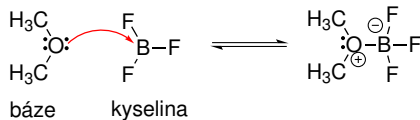
Brønstedova-Lowryho teorie kyselin a zásad

	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 kyselín a zásad

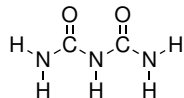
Kyselina – akceptor elektronového páru

Báze – donor elektronového páru



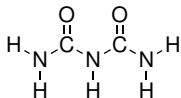
Příklad č. 1

Najděte v molekule biuretu nejkyselější atom.

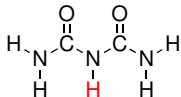


Příklad č. 1

Najděte v molekule biuretu nejkyselější atom.

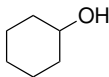
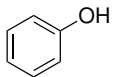


Řešení:



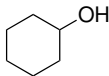
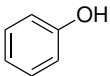
Příklad č. 2

Vyberte kyselější sloučeninu:

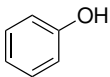


Příklad č. 2

Vyberte kyselejší sloučeninu:

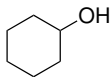


Řešení:



pK_a

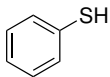
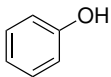
9,95



16

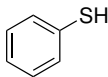
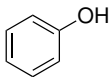
Příklad č. 3

Vyberte kyselejší sloučeninu:

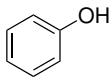


Příklad č. 3

Vyberte kyselější sloučeninu:

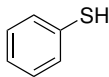


Řešení:



pK_a

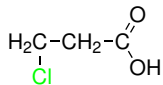
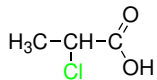
9,95



6,62

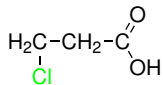
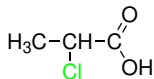
Příklad č. 4

Vyberte kyselější sloučeninu:

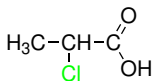


Příklad č. 4

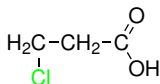
Vyberte kyselější sloučeninu:



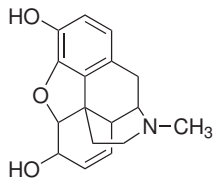
Řešení:



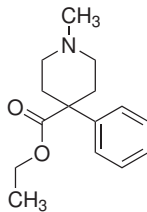
pK_a 2,83



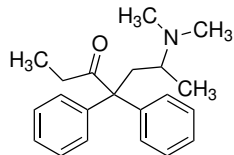
3,98



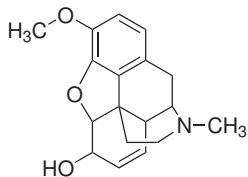
morfin



pethidin



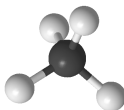
metadon



kodein

Konformace

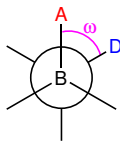
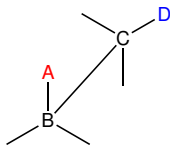
Klíčkové vzorce



Konformace – jakékoliv prostorové uspořádání molekuly odvozené otáčením kolem σ vazby.

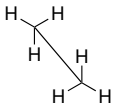
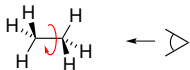
Konformační pohyb je umožněn symetrickým rozložením elektronové hustoty σ vazby kolem spojnice jader.

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

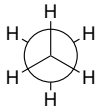


Konformace ethanu

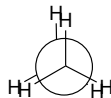
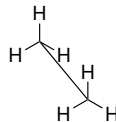
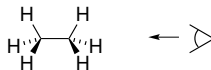
Střídavá konformace



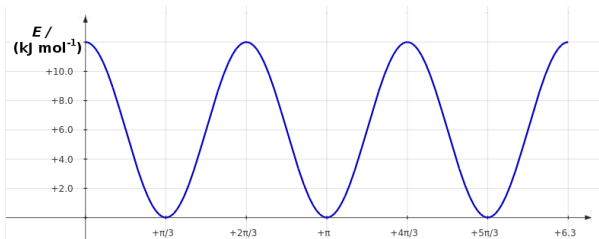
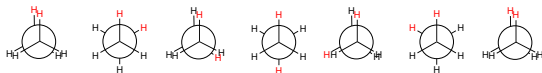
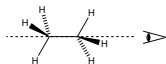
Newmanova
projekce



Zákrytová konformace



Konformace ethanu

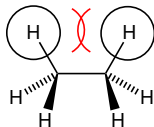


Velikost bariery u ethanu je 12 kJ mol^{-1} .

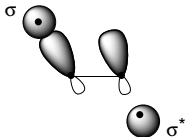
Konformer (konformační isomer) – lokální minimum (střídavá konformace u ethanu).

Původ bariery:

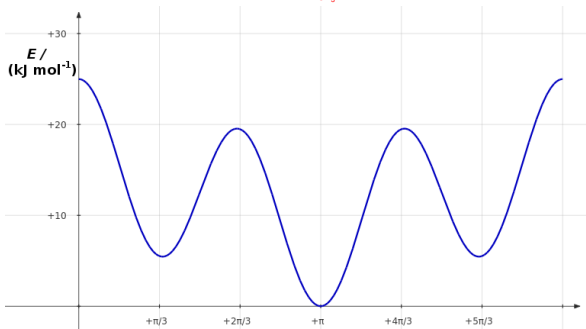
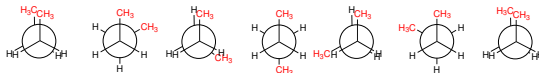
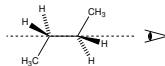
- **Sterická repulze** substituentů v zákrytové konformaci.
U ethanu cca 10 % velikosti bariery.



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

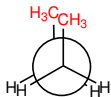
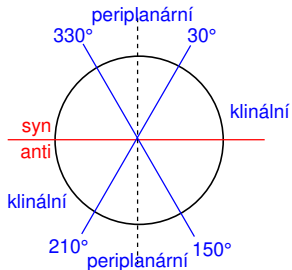


Konformace butanu

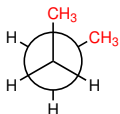


Butan má **tři konformery** odvozené rotací $\text{C}^2\text{-C}^3$.

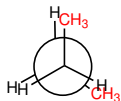
Konformace butanu



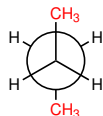
synperiplanární konformace



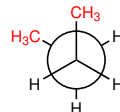
synklinální konformace (konformer)



antiklinální konformace



antiperiplanární konformace (konformer)

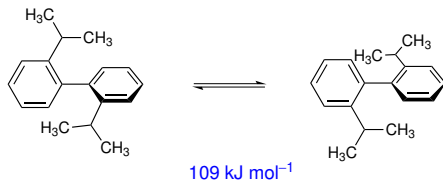
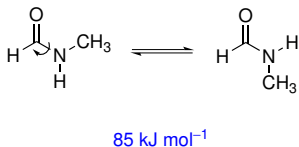
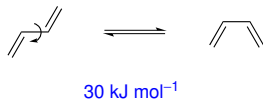
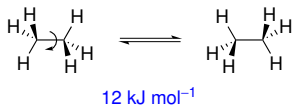


synklinální konformace (konformer)

Gauche – synklinální konformace

Konformace

Velikost bariéry rotace kolem jednoduché vazby.

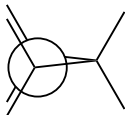


Za laboratorní teploty je už možné zachytit konformery amidu nebo 2,2'-diisopropylbifenyly.

Konformace cykloalkanů

Původ vnitřního napětí cykloalkanů:

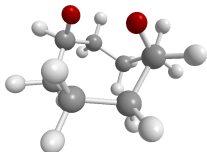
▶ Torzní pnutí



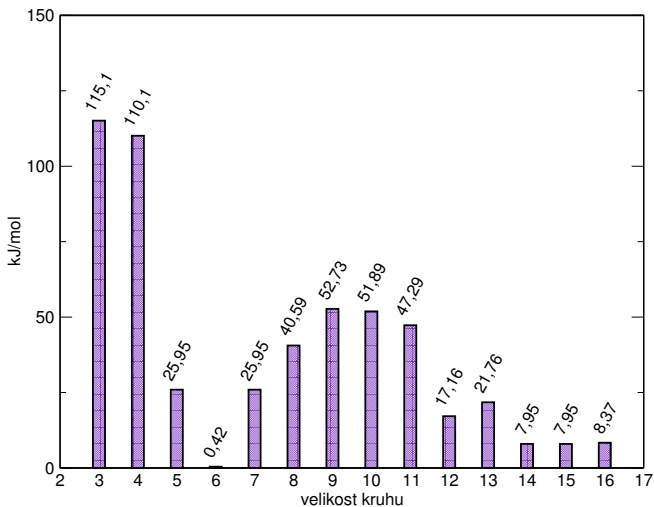
▶ Úhlové pnutí (nesoulad vnitřního úhlu n-úhelníku a vazebných úhlů)



▶ Transanulární pnutí

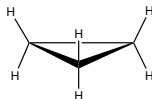


Velikost vnitřního napětí v cykloalkanech



Konformace cykloalkanů

Cyklopropan – planární



Cyklobutan



Cyklopentan



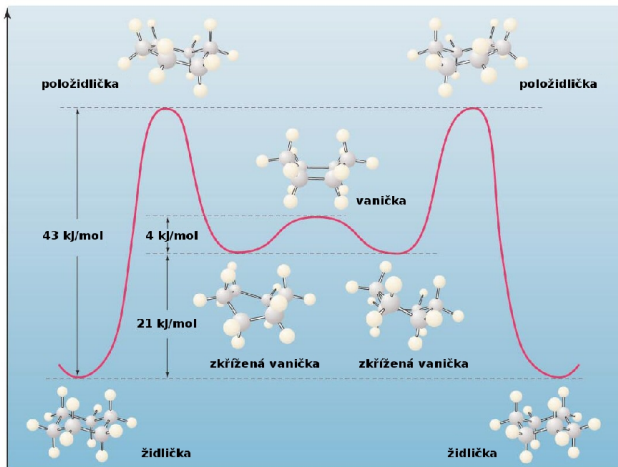
Obálka



Položidlička

Konformace cyklohexanu

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



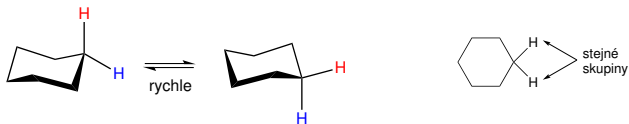
Za laboratorní teploty obsahuje cyklohexan cca **0,1 %** zkřížené vaničky, zbytek je tvořen židličkou.

Konformace cyklohexanu

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



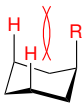
Při přechodu jedné židličky na druhou konformačním pohybem dochází k **rychlé** výměně axiálních a ekvatoriálních pozic.



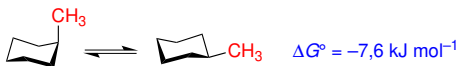
Proto můžeme nahradit reálnou židličku cyklohexanu **planárním šestiúhelníkem**.

Konformace cyklohexanu

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



1,3-diaxiální interakce



Za laboratorní teploty:

Substituent	A/(kJ mol ⁻¹)	ekvatoriální/axiální
-Cl	2,0	70:30
-OH	4,2	83:17
-CH ₃	7,6	95:5
-CH ₂ CH ₃	8,0	96:4
-CH(CH ₃) ₂	9,2	97:3
-C(CH ₃) ₃	22,8	999:1

Konformace dekalinu

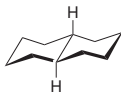
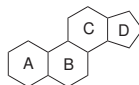
Dekalin – dekahydronaftalen



cis

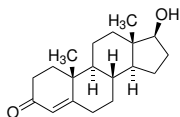


trans

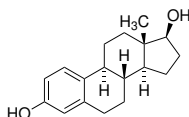


cis-Dekalin je konformačně pohyblivý, dochází k současnému překlápění obou židliček.

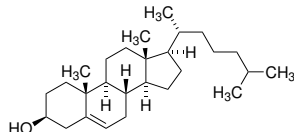
trans-Dekalin má mnohem menší konformační pohyblivost.



testosteron

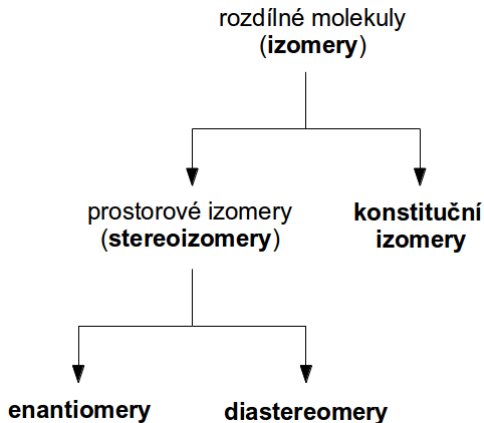


estradiol



cholesterol

Isomery – různé molekuly, které mají stejný sumární vzorec.



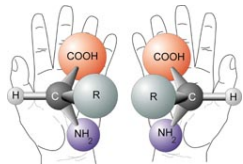
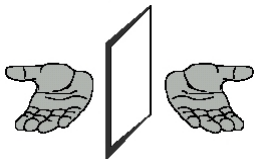
Zdrojem rozdílného prostorového uspořádání může být:

- ▶ **konformace** – prostorové uspořádání odvoditelné otáčením kolem σ -vazeb.
- ▶ **konfigurace** – prostorové uspořádání, které odlišuje prostorové isomery a které nelze odvodit konformačním pohybem.

Stereogenní centrum – část molekuly, která podmiňuje existenci stereoisomerů. Výměna dvou substituentů na stereogenním centru vede ke vzniku druhého stereoisomeru.



„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.

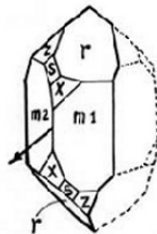
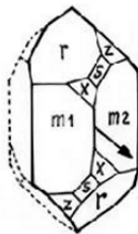


(*S*)-alanin



(*R*)-alanin

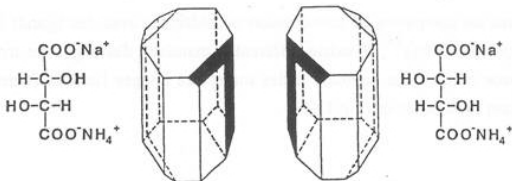




1783 – **Immanuel Kant** diskutuje předměty, které zrcadlením poskytují neztotožnitelné obrazy.

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 chiraloty (dissymetrie) a optické aktivity, které byly do té doby spojeny s krystaly, s vlastnostmi jednotlivých molekul.

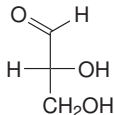


1874 – **J. H. van 't Hoff** a **J. Le Bel**: tetraedrické uspořádání vazeb vycházejících z atomu uhlíku, chiralita spojena se čtyřmi různými substituenty atomu uhlíku.

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.“

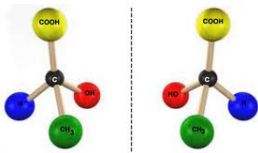


1956 – předpověď (**Lee a Yang**) a experimentální prokázání (**Wu**) porušení parity slabé interakce.

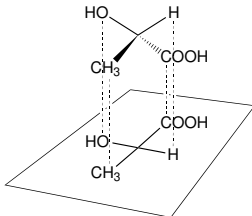
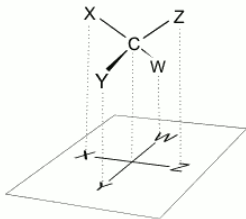
Centrální chiralita

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

Kyselina mléčná:



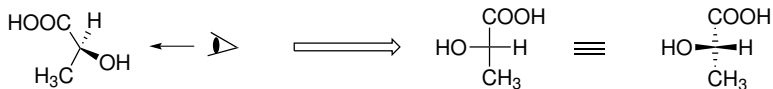
Reprezentace konfigurace na centru chirality **Fischerovou projekcí:**



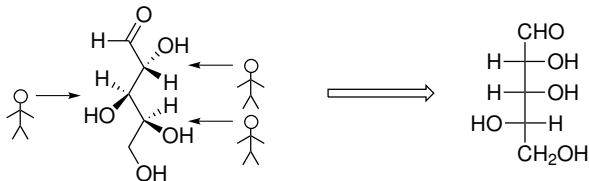
Centrální chiralita

Užití **Fischerovy projekce**

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



L-(–)-Lyxosa:



Deskriptory absolutní konfigurace

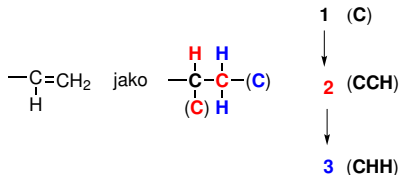
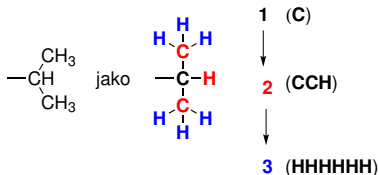
Algoritmus pro popis **konfigurace centra chiralidy** deskriptorem *R* nebo *S*.

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.



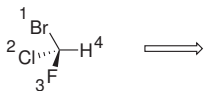
Srovnání skupin:



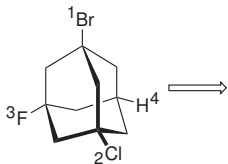
Deskriptory absolutní konfigurace

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

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



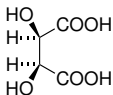
S (lat. sinister)



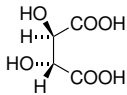
R (lat. rectus)

Centrální chiralita

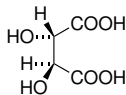
Kyselina vinná – existuje ve formě tří stereoisomerů



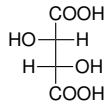
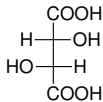
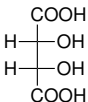
meso-vinná
kyselina
(*R, S*)



L-(+)-vinná
kyselina
(*R, R*)



D-(-)-vinná
kyselina
(*S, S*)



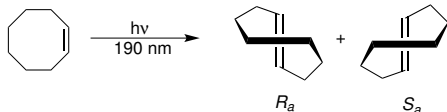
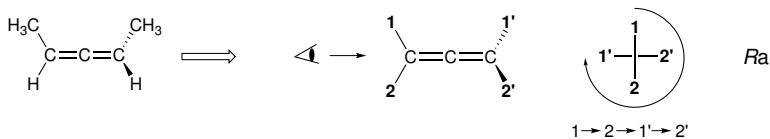
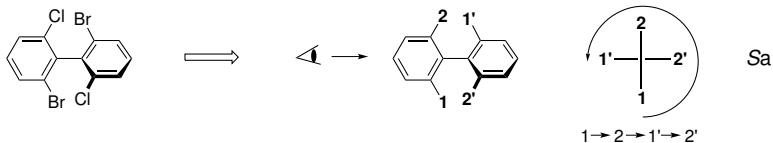
enantiomery

diastereomery

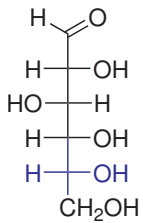
Pokud najdeme v molekule rovinu symetrie, není chirální (např. *meso*-vinná kyselina).

Axiální chiralita

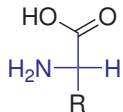
Stereogenním centrem je **osa chiralita** – deskriptory R_a a S_a .



Homochiralita života



D-cukry

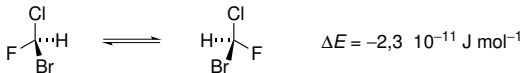


L-aminokyseliny



Vlastnosti prostorových isomerů

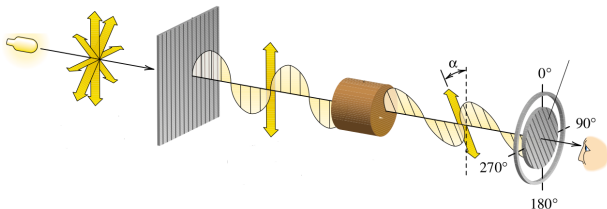
Enantiomery jsou prakticky **energeticky degenerované**, rozdíl způsobený porušením parity slabé interakce je zanedbatelný.



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

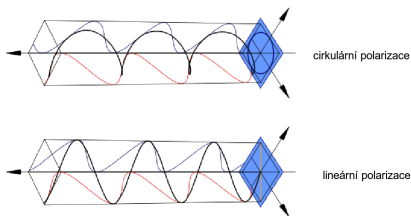
Diastereomery obecně nemají stejnou energii a **liši** se svými vlastnostmi.

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



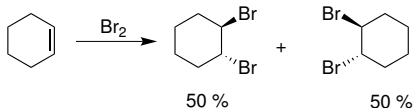
Vlastnosti prostorových isomerů

Planárně polarizované světlo je superpozicí levotočivě a pravotočivě polarizovaného světla.



Racemát – směs obsahující stejná množství jednoho a druhého enantiomeru.

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

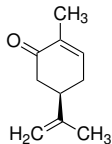


Vlastnosti prostorových isomerů

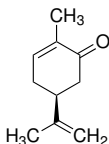
Enantiomery se liší při interakci s biomolekulami, které jsou chirální
– vzniká **diastereomerní vztah**.



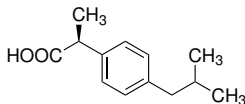
Mentha spicata



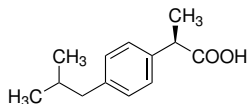
(*R*)-karvon
máta



(*S*)-karvon
kmín



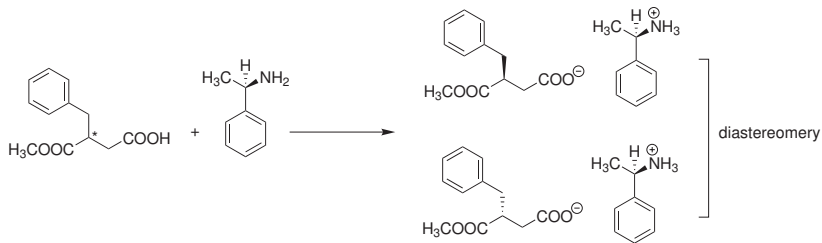
(*S*)-ibuprofen
analgetikum



(*R*)-ibuprofen
neaktivní

Vlastnosti prostorových isomerů

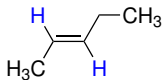
Dělení enantiomerů, např. užití chirálních aminů k oddělení enantiomerů kyselin, kdy vzniklé soli jsou ve vztahu diastereomerů a liší se rozpustností.



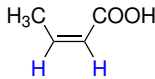
Isomerie na dvojně vazbě a na cyklu

Popis konfigurace:

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

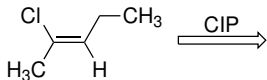


trans-pent-2-en

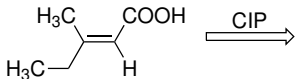


cis-but-2-enová kyselina

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



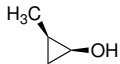
(*Z*)-2-chloropent-2-en
(*Z* – zusammen)



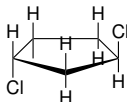
(*E*)-3-methylpent-2-enová kyselina
(*E* – entgegen)

Isomerie na dvojn  vazb  a na cyklu

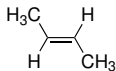
U disubstituovan ch cykl  u iv me pouze deskriptory *cis* a *trans*.



cis-2-methylcyklopropan-1-ol



trans-1,3-dichlorocyklopentan



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

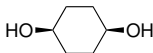


cis-stilben
(*Z*)-stilben



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

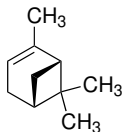
ale
pouze



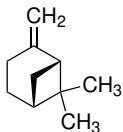
cis-cyklohexan-1,4-diol

Příklad č. 5

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



(+)- α -pinen

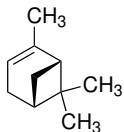


(+)- β -pinen

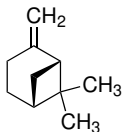
- 1 Identické
- 2 Konstituční izomery
- 3 Enantiomery
- 4 Diastereomery

Příklad č. 5

V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



(+)- α -pinen

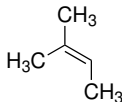
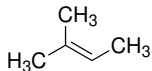


(+)- β -pinen

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

Příklad č. 6

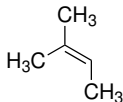
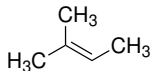
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 6

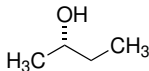
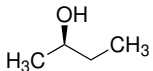
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 7

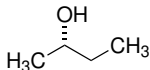
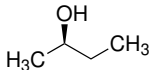
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 7

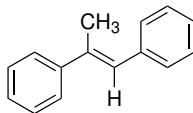
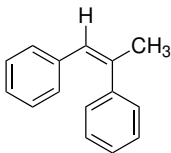
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 8

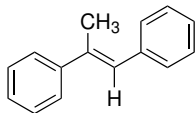
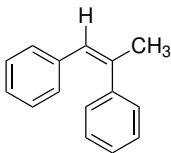
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



- 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

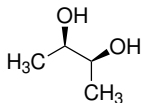
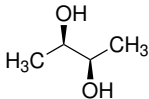
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 10

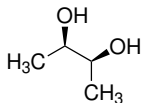
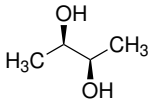
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

Příklad č. 10

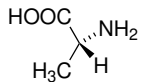
V jakém vztahu jsou následující dvojice molekul?



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

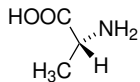
Příklad č. 11

Převeďte následující molekulu alaninu do Fischerovy projekce.

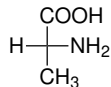
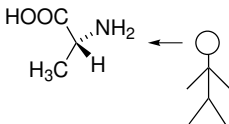


Příklad č. 11

Převeďte následující molekulu alaninu do Fischerovy projekce.

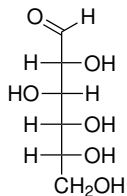
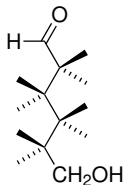


Řešení:



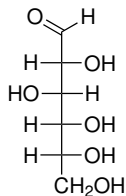
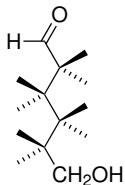
Příklad č. 12

Převeďte molekulu sacharidu z Fischerovy projekce do klínkového vzorce.

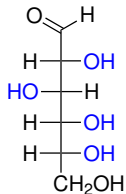
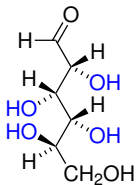


Příklad č. 12

Převeďte molekulu sacharidu z Fischerovy projekce do klínkového vzorce.

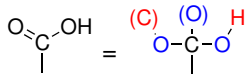
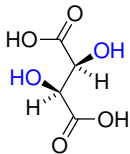


Řešení:



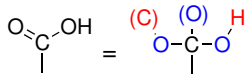
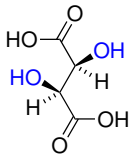
Příklad č. 13

Najděte v molekule centra chiralit a určete jejich absolutní konfiguraci.

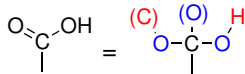
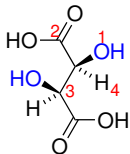


Příklad č. 13

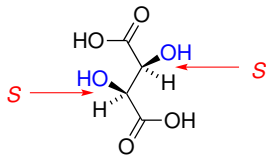
Najděte v molekule centra chiralitity a určete jejich absolutní konfiguraci.



Řešení:

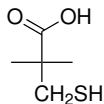
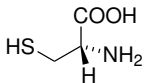


Řešení:



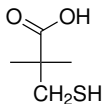
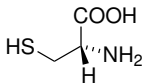
Příklad č. 14

Klínkový vzorec následující aminokyseliny převedte do Fischerovy projekce a určete deskriptor absolutní konfigurace centra chiralidy.

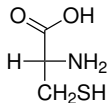
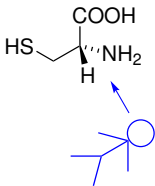


Příklad č. 14

Klínkový vzorec následující aminokyseliny převedte do Fischerovy projekce a určete deskriptor absolutní konfigurace centra chiralidy.



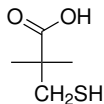
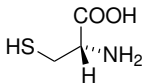
Řešení:



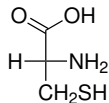
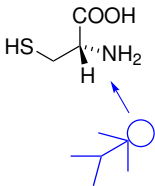
D-cystein

Příklad č. 14

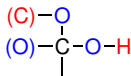
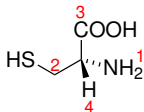
Klínkový vzorec následující aminokyseliny převedte do Fischerovy projekce a určete deskriptor absolutní konfigurace centra chiralidy.



Řešení:



D-cystein



Funkční skupiny



alkan



alken



alkyn



aren



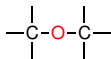
alkylhalogenid



alkohol



fenol



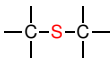
ether



epoxid



thiol



sulfid



(primární) amin

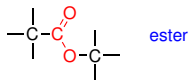
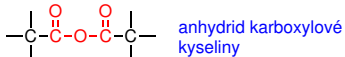
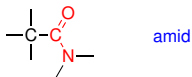
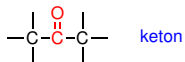


nitroderivát



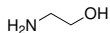
aldehyd

Funkční skupiny



Názvosloví organických sloučenin

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



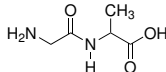
2-aminoethan-1-ol



methylalkohol
methanol



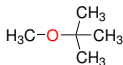
azan
pyridin



glycylalanin

Název musí být vždy jednoznačný!

Radikálově (skupinově) funkční názvosloví



methyl(*tert*-butyl)ether



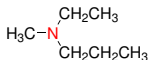
methylbromid



dimethylketon



isopropylalkohol



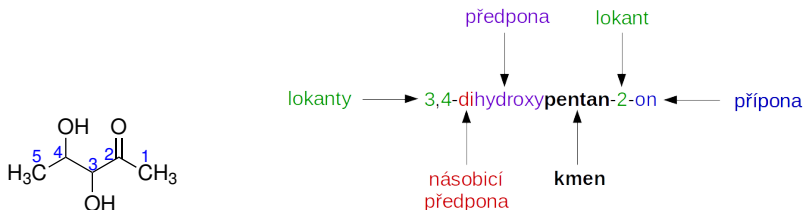
ethyl(methyl)propylamin

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.



SMILES: CC(C(C(C)=O)O[H])O[H]

Pozor, české názvosloví nereflektuje novější anglické názvosloví!

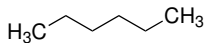
Názvosloví uhlovodíků

Alkany:

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

Názvosloví uhlovodíků

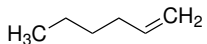
Cykloalkany a nenasycené uhlovodíky:



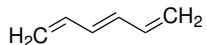
hexan



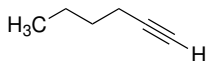
cyklohexan



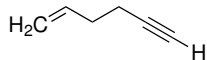
hex-1-en



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.

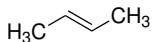
Skupiny seřazené podle priority:

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

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

Tvorba názvu

Lokanty – čísla nebo písmena latinské nebo řecké abecedy.
S výjimkou názvů triviálního původu se lokanty umisťují **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

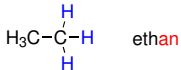
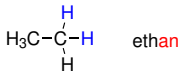
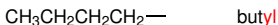
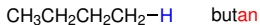
Skupina	Vzorec	Předpona	Přípona
Karboxylová kyselina	-COOH	karboxy-	-karboxylová kys.
	-(C)OOH	-	-ová kyselina
Sulfonová kys.	-SO ₃ H	sulfo-	-sulfonová kyselina
Ester karbox. kyseliny	-COOR	(R)oxykarbonyl-	(R)-...-karboxylát
	-(C)OOR	-	(R)-...-oát
Acyhalogenid	-CO-halogen	halogenkarbonyl-	-karbonylhalogenid
	-(C)O-halogen	-	-oylhalogenid
Amid	-CO-NH ₂	karbamoyl-	-karboxamid
	-(C)O-NH ₂	-	-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 ₂	amino-	-amin
Imin	=NH	imino-	-imin

Přípony a předpony pro vybrané skupiny

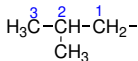
Některé skupiny jsou vyjádřené **pouze předponou**.

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

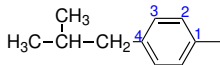
Názvosloví substituentů odvozených od uhlovodíků:



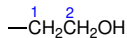
substituovaný substituent:



2-methylpropyl
(isobutyl)



4-(2-methylpropyl)fenyl
4-isobutylfenyl



2-hydroxyethyl

Uhlovodíkové zbytky **číslyjeme od atomu s volnou valencí.**

Tvorba názvu

Povolené triviální a semitriviální názvy:



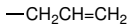
isopropyl



terc-butyl



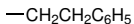
vinyl



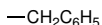
allyl



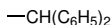
fenyl



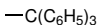
fenethyl



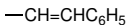
benzyl



benzhydryl



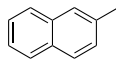
trityl



cinnamyl



3-pyridyl



2-naftyl

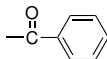
Názvy acylů – zbytků karboxylových kyselin:



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**:

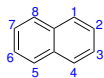
1. Nejdelší nevětvený acyklický řetězec nesoucí **maximum skupin vyjádřených příponou**.
2. Řetězec s **maximem násobných vazeb**.
3. Řetězec s **maximem dvojných vazeb**.
4. Absolutně **nejdelší řetězec**.

Pravidla pro číslování základní struktury:

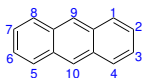
Při číslování základní struktury se snažíme dosáhnout **nejnižší sady lokantů**.

Postupujeme podle těchto bodů až do jednoznačného rozhodnutí:

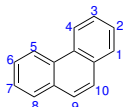
- ▶ **Stanovené číslování** (polycyklické aromatické uhlovodíky, heterocykly).



naftalen



anthracen

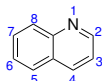


fenanthren

- ▶ Nejnižší lokanty pro **heteroatomy v heterocyklech**.



pyridin



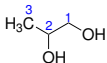
chinolin



pyrrol

Pravidla pro číslování základní struktury (pokračování):

- ▶ Nejnižší lokanty pro skupiny pojmenované příponou.

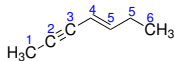


propan-1,2-diol

~~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:



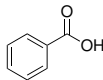
anilin



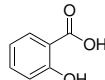
fenol



benzaldehyd



benzoová
kyselina



salicylová
kyselina



formaldehyd



acetaldehyd



kyselina
mravenčí



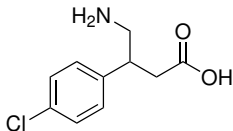
kyselina
octová



kyselina
akrylová

Příklad č. 14

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

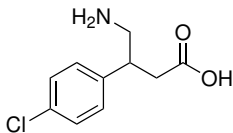


baklofen

Řešení:

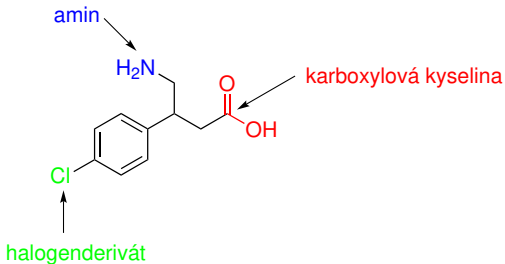
Příklad č. 14

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



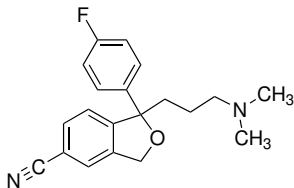
baklofen

Řešení:



Příklad č. 15

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

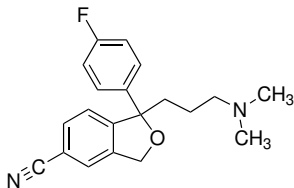


citalopram

Řešení:

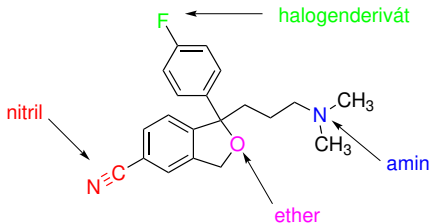
Příklad č. 15

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



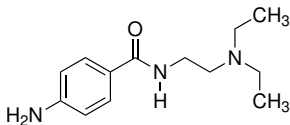
citalopram

Řešení:



Příklad č. 16

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

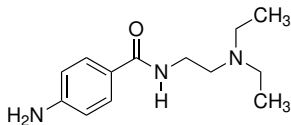


prokainamid

Řešení:

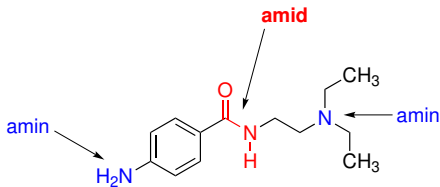
Příklad č. 16

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



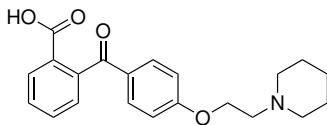
prokainamid

Řešení:



Příklad č. 17

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

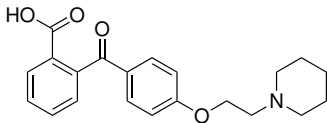


pitofenon

Řešení:

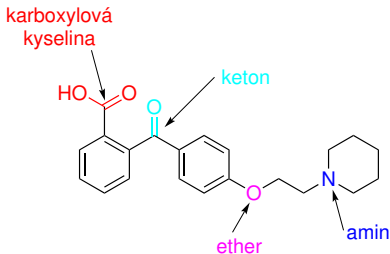
Příklad č. 17

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



pitofenon

Řešení:



Příklad č. 18

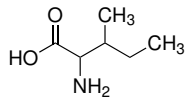
Napište strukturní vzorec 2-amino-3-methylpentanové kyseliny.

Řešení:

Příklad č. 18

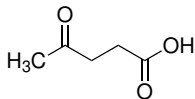
Napište strukturní vzorec 2-amino-3-methylpentanové kyseliny.

Řešení:



Příklad č. 19

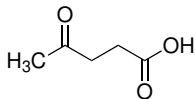
Systematicky pojmenujte kyselinu levulovou:



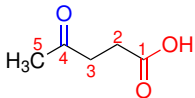
Řešení:

Příklad č. 19

Systematicky pojmenujte kyselinu levulovou:



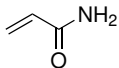
Řešení:



4-oxopentan-1-ová kyselina

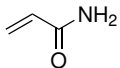
Příklad č. 20

Systematicky pojmenujte akrylamid:

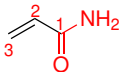


Příklad č. 20

Systematicky pojmenujte akrylamid:



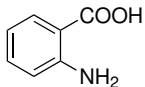
Řešení:



prop-2-en-1-amid

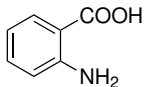
Příklad č. 21

Systematicky pojmenujte kyselinu anthranilovou:

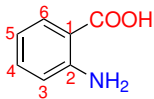


Příklad č. 21

Systematicky pojmenujte kyselinu anthranilovou:



Řešení:

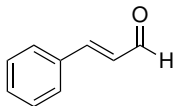


2-amino**benzen**-1-**karboxylová** kyselina

2-amino**benzoová** kyselina

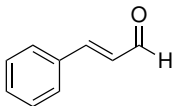
Příklad č. 22

Systematicky pojmenujte cinnamaldehyd:

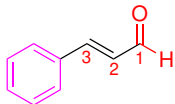


Příklad č. 22

Systematicky pojmenujte cinnamaldehyd:



Řešení:



3-fenylprop-2-en-1-al