

1 Úvod

1.1 Organická chemie

Organická chemie se často nazývá *chemie sloučenin uhlíku*, protože základem organických sloučenin je uhlík. Organická chemie studuje především složitější sloučeniny uhlíku, v nichž uhlíkové atomy tvoří řetězce. Všechny ostatní prvky a jejich sloučeniny a také nejjednodušší sloučeniny uhlíku (CO , CO_2 , CS_2 , kyanidy, karbidy, H_2CO , a uhlíčitany), které se svými vlastnostmi anorganickým sloučeninám velmi podobají, studuje anorganická chemie. Počet známých organických sloučenin činí asi 5 milionů a mnohokrát tak převyšuje počet anorganických sloučenin, kterých je známo přibližně 100 tisíc.

Součástí organických sloučenin jsou především prvky C, H, O, N, S a P. Říkáme jim *prvky organogenní* nebo také *makrobiogenní*. V organických sloučeninách se mohou vyskytovat i další prvky jako halogeny, Si, B atd.

Organické sloučeniny lze získávat z přírodních zdrojů (z rostlin, živočichů, ropy, uhlí apod.), nebo se připravují (syntetizují) uměle v laboratořích. Jednu z prvních organických syntéz provedl v roce 1825 Friedrich Wöhler (kap. 6.10). Připravil organickou látku močovinu (NH_2CONH_2), která byla dříve izolována z moči, zahříváním anorganické sloučeniny kyanatanu amonného (NH_4OCN). Tím vyvrátil vitalistickou teorii, která tvrdila, že organické látky mohou vznikat pouze v živých organismech pomocí "životní síly" (*vis vitalis*).

Velká rozmanitost organických sloučenin je způsobena vlastnostmi uhlíku. Uhlík má schopnost tvořit řetězce, které mohou být různě dlouhé, lineární nebo cyklické, rozvětvené či nerozvětvené. Kromě toho má uhlík také schopnost tvořit různé typy vazeb (jednoduché, dvojné, trojné).

Organické sloučeniny jsou většinou *nepolární* nebo málo polární, protože obsahují velký počet nepolárních vazeb uhlík-uhlík a velmi slabě polárních vazeb uhlík-vodík. V anorganických sloučeninách bývají vazby silně polární nebo iontové.

Proto mají organické sloučeniny obvykle *nízkou teplotu tání a varu* (většinou do 200 °C), jsou často nerozpustné ve vodě, ale v organických rozpouštědlech (benzen, ether, aceton apod.) se rozpouštějí velmi dobře. Jejich roztoky ani taveniny obvykle nevedou elektrický proud, jsou to *neelektrolyty*. Organické látky jsou málo odolné vůči vyšším teplotám. Při zahřátí se snadno rozkládají, jsou těkavé a hořlavé. Jejich hořením vzniká CO_2 a voda.

Jenom organické sloučeniny obsahující ve svých molekulách polární skupiny, které mohou tvořit vodíkové můstky (např. $-\text{OH}$, $-\text{NH}_2$, $-\text{COOH}$), mají vyšší teploty varu a mnohé z nich se dobře rozpouštějí ve vodě.

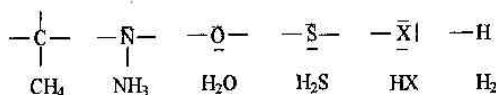
Chemické *reakce* organických sloučenin probíhají podle stejných chemických zákonů jako reakce sloučenin anorganických, *probíhají však pomaleji*, často mají složitý průběh (reakční mechanismus), jsou vratné nebo vzniká směs několika různých produktů.

1.2 Vazby v organických sloučeninách

Uhlík je základem všech organických sloučenin. Má schopnost tvořit různé typy vazeb. Na jeho vazebných schopnostech závisí vlastnosti organických sloučenin.

1.2.1 Vaznost prvků v organických sloučeninách

V organických sloučeninách má každý prvek svou **charakteristickou vaznost** vyplývající z jeho elektronové struktury. Tato vaznost je obvykle je shodná s počtem vazeb v nejjednodušší sloučenině daného prvku s vodíkem. Uhlík je čtyřvazný, vodík a halogeny jsou jednovazné, kyslík a síra jsou dvojevazné.



Elektronová konfigurace atomu uhlíku v *základním stavu* je:



V základním stavu má atom uhlíku jen *dva* nepárové elektrony a může tvořit jen *dvě* kovalentní vazby. V organických sloučeninách je však **uhlík vždy čtyřvazný**. Aby mohl vytvořit čtyři vazby, musí mít k dispozici *čtyři* nepárové elektrony. Tato situace nastává u atomu uhlíku v *excitovaném stavu*:



Atom uhlíku vytváří čtyři vazby, které vznikají z různých orbitalů (2s a 2p). Bylo však zjištěno, že všechny čtyři vazby jsou stejné, rovnocenné. To je způsobeno hybridizací orbitalů.

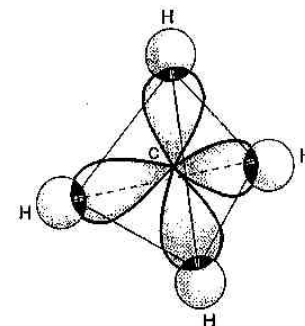
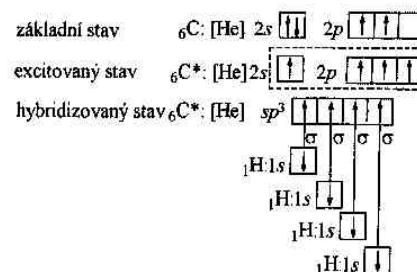
Hybridizace je *energetické sjednocení* různých orbitalů daného atomu. Vznikají rovnocenné orbitály, které mají stejnou energii, stejný tvar a nové prostorové uspořádání. Na základě teorie hybridizace můžeme objasnit prostorovou stavbu molekul (1. díl, kap. 6).

1.2.2 Hybridizace atomu uhlíku

a) **sp^3 hybridizace** - hybridizuje *jeden* orbital s a *tři* orbitály p. Vznikají *čtyři* rovnocenné hybridní orbitály sp^3 směřující do vrcholů pravidelného *tetraedru* (čtyřlístku). Vazby svírají úhel $109,5^\circ$.

sp^3 hybridizaci má atom uhlíku, ze kterého vycházejí *čtyři* vazby σ .

Příklad: molekula methanu:



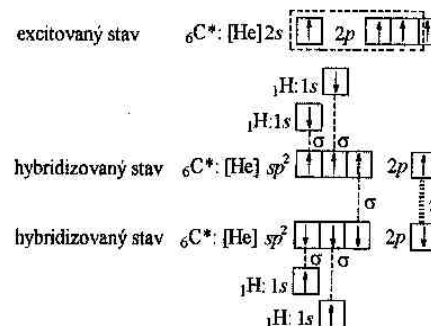
Model molekuly methanu

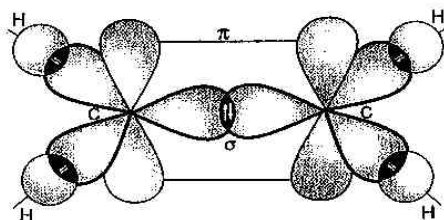
b) **sp^2 hybridizace** - hybridizuje *jeden* orbital s a *dva* orbitály p. Vznikají *tři* rovnocenné hybridní orbitály sp^2 směřující do vrcholů *rovnostranného trojúhelníku*. Vazby svírají úhel 120° .

sp^2 hybridizaci má atom uhlíku, ze kterého vycházejí *tři* vazby σ a *jedna* vazba π , tedy atom uhlíku s jednou dvojnou vazbou ($\text{C}=\text{C}$).

Pozor!! Atomové orbitály, které tvoří vazbu π , nehybridizují!!

Příklad: molekula ethenu (ethylenu) $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}_2$



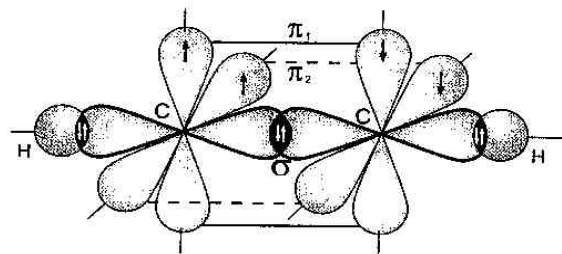
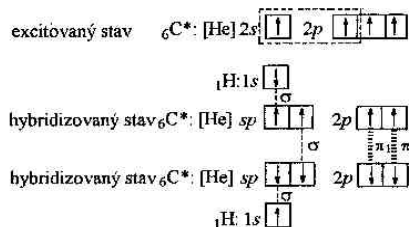


Model molekuly ethenu (ethylen)

c) **sp hybridizace** - hybridizuje jeden orbital s a jeden orbital p. Vznikají dva rovnocenné hybridní orbitály sp, které svírají úhel 180°. Hybridní orbitály sp jsou lineární.

sp hybridizaci má atom uhlíku, ze kterého vycházejí dvě vazby σ a dvě vazby π , tedy atom uhlíku s trojnou vazbou ($\text{C}\equiv$) nebo se dvěma dvojnými vazbami ($\text{C}=\text{C}$).

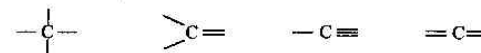
Příklad: molekula ethinu (acetylen) $\text{HC}\equiv\text{CH}$



Model molekuly ethinu (acetylen)

1.2.3 Zásady strukturní teorie

1) Uhlík je v organických sloučeninách vždy čtyřvazný.



2) Všechny čtyři vazby atomu uhlíku jsou rovnocenné. Nahradíme-li kterýkoliv atom vodíku v molekule methanu atomem chlóru, vždy dostaneme stejnou sloučeninu CH_3Cl .

3) Vazby v nasycených sloučeninách, tj. ve sloučeninách s jednoduchými vazbami, svírají úhel 109°. Všechny atomy uhlíku mají hybridizaci sp^3 .

4) Sloučeniny s dvojnou vazbou jsou v místě dvojné vazby planární (rovinné). Úhly mezi vazbami jsou 120°. Atomy uhlíku s dvojnou vazbou mají hybridizaci sp^2 .

5) Sloučeniny s trojnou vazbou jsou v místě trojné vazby lineární, vazby svírají úhel 180°. Atomy uhlíku s trojnou vazbou mají hybridizaci sp .

6) Jednoduché vazby jsou volně otáčivé, násobné vazby otáčivé nejsou. Otáčením skupin atomů kolem jednoduchých vazeb vznikají různé konformery (kap. 3.3). Volná otáčivost jednoduchých vazeb může být někdy omezena prostorově (stericky) a k jejímu omezení dochází také v cyklických sloučeninách.

7) Každá sloučenina má snahu zaujmát nejvýhodnější prostorové uspořádání. Při takovém uspořádání jsou nevazebné interakce v molekule minimální. Tato situace nastává, jsou-li atomy nebo skupiny atomů maximálně vzdáleny od sebe.

8) Vlastnosti organických sloučenin závisí na jejich struktuře. Ze znalosti struktury můžeme předvídat vlastnosti sloučeniny a naopak. Abychom mohli předpovědět vlastnosti sloučeniny, musíme znát její strukturní nebo geometrický (prostorový) vzorec. Znalost molekulového vzorce látky v organické chemii nestačí, vzhledem k existenci izomerie (kap. 3).

1.2.4 Vlastnosti jednoduchých a násobných vazeb mezi atomy uhlíku

Typ vazby	C-C	C=C	C $\equiv$ C
Délka vazby v pm (10^{-12} m)	154	134	120
Disociační energie vazby v kJ/mol (celková)	347	611	847
Disociační energie vazby σ v kJ/mol	347		
Disociační energie vazby π , v kJ/mol		264	
Disociační energie vazby π_2 v kJ/mol			236

Z tabulky vyplývá, že čím je vazba násobnější, tím je kratší a pevnější. Nejpevnější je vazba trojná, protože má nejvyšší disociační energii.

Z tabulky dále vyplývá, že vazba σ je pevnější (stálejší) než vazba π , protože má vyšší disociační energii. Nejméně stálá je vazba π , trojné vazby. Jednoduché vazby jsou tedy méně reaktivní než vazby násobné, proto jsou organické sloučeniny s násobnými vazbami reaktivnější než organické sloučeniny s jednoduchými vazbami.

2 Nomenklatura organických sloučenin

Organická sloučenina může mít několik názvů, které vznikají různým způsobem.

Triviální názvy

mají historický původ. Nemají vztah ke struktuře ani ke složení dané sloučeniny. Souvisí zpravidla s vlastnostmi sloučeniny nebo s jejím původem (zdrojem) - např. aceton, kyselina octová, chloroform, močovina.

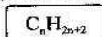
Systematické názvy

vyjadřují složení sloučeniny, stechiometrické poměry a event. informují o její struktuře. Tvoří se podle určitých pravidel.

Principy systematické nomenklatury ustavila mezinárodní společnost International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) a jsou mezinárodně platné. Základem systematické nomenklatury jsou názvy nerozvětvených alkanů.

2.1 Alkany s nerozvětveným řetězcem

Alkany (parafiny) jsou nasycené alifatické uhlovodíky. Mají obecný vzorec



Alkany tvoří *homologickou řadu*. Její členové se nazývají **homology**. Mají stejný obecný vzorec a každý následující člen se liší od předcházejícího o stejnou skupinu atomů, *homologický rozdíl* nebo *přírůstek* (skupina $-CH_2-$).

V každé homologické řadě platí, že s rostoucím počtem atomů uhlíku v řetězci roste teplota tání, teplota varu a hustota. Chemické vlastnosti jsou stejné.

Název alkanu má sufix **-an**

Nomenklatura alkanů

Počet atomů uhlíku	Název	Molekulový vzorec	Racionální vzorec
1	methan	CH_4	CH_4
2	ethan	C_2H_6	CH_3CH_3
3	propan	C_3H_8	$CH_3CH_2CH_3$
4	butan	C_4H_{10}	$CH_3(CH_2)_2CH_3$
5	pentan	C_5H_{12}	$CH_3(CH_2)_3CH_3$
6	hexan	C_6H_{14}	$CH_3(CH_2)_4CH_3$
7	heptan	C_7H_{16}	$CH_3(CH_2)_5CH_3$
8	oktan	C_8H_{18}	$CH_3(CH_2)_6CH_3$
9	nonan	C_9H_{20}	$CH_3(CH_2)_7CH_3$
10	dekan	$C_{10}H_{22}$	$CH_3(CH_2)_8CH_3$

První čtyři alkyany mají triviální názvy. Názvy ostatních alkanů vznikají z řecké číslovky (podle počtu atomů C) a sufixu **-an**.

Alkany s nerozvětveným řetězcem někdy označujeme jako *normální* alkyany (*n*-butan až *n*-dekan).

2.2 Uhlovodíkové zbytky

Uhlovodíkové zbytky odvozujeme odtržením atomu vodíku z uhlovodíku. Uhlovodíkové zbytky se také nazývají radikály a obecně se označují **R-**.

Název: sufix **-yl**.

Např. <i>alkan</i>	→ alkyl	(zbytek nasyceného uhlovodíku)
<i>alken</i>	→ alkenyl	(zbytek nenasyčeného uhlovodíku s dvojnou vazbou)
<i>alkin</i>	→ alkinyl	(zbytek nenasyčeného uhlovodíku s trojnou vazbou)
<i>aren</i>	→ aryl	(zbytek aromatického uhlovodíku)

Existují tři různé typy uhlovodíkových zbytků:

$R-CH_2-$	<i>primární</i>	Jeden R- a dva atomy vodíku se váží na uhlík s volnou vazbou (volná vazba je na konci řetězce).
$\begin{array}{c} R \\ \\ R-CH- \end{array}$	<i>sekundární (sek.)</i>	Dva R- a jeden atom vodíku se váží na uhlík s volnou vazbou (volná vazba je uprostřed řetězce).
$\begin{array}{c} R \\ \\ R-C- \\ \\ R \end{array}$	<i>terciární (terc.)</i>	Tři R- se váží na uhlík s volnou vazbou (volná vazba je v místě rozvětvení)

Příklady uhlovodíkových zbytků:

1) Jednovazné

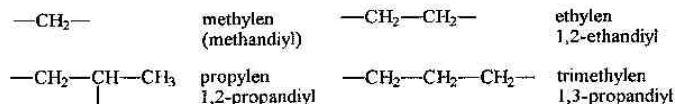
a) nasycené (alkyly)

CH_3-	methyl	CH_3-CH_2-	ethyl
$CH_3-CH_2-CH_2-$	propyl	$\begin{array}{c} CH_3-CH- \\ \\ CH_3 \end{array}$	isopropyl 2-propyl
$CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-$	butyl	$\begin{array}{c} CH_3-CH-CH_2-CH_3 \\ \\ CH_3 \end{array}$	sek. butyl 2-butyl
$\begin{array}{c} CH_3-CH-CH_2- \\ \\ CH_3 \end{array}$	isobutyl	$\begin{array}{c} CH_3 \\ \\ CH_3-C- \\ \\ CH_3 \end{array}$	terc. butyl

b) nenasyčené (alkenyly a alkinyly)

$CH_2=CH-$	vinyl (ethenyl)	$CH\equiv C-$	ethinyl
$CH_3=CH-CH_2-$	allyl (2-propenyl)	$CH\equiv C-CH_2-$	2-propinyl

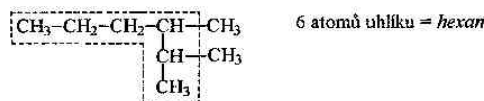
2) dvojvazné - mají sufix *-diyl*, ale stále se užívá i starší sufix *-ylen*



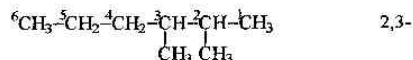
2.3 Alkany s rozvětveným řetězcem

2.3.1 Tvoření názvů

1. Určíme *nejdelší* uhlíkový řetězec. Tento řetězec tvoří základ názvu:



2. Nejdelší řetězec *očíslovujeme* tak, aby polohy alkylů nebo substituentů měly minimální možné číslo (lokant):

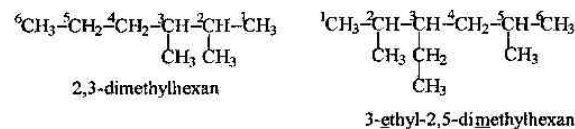


3. Před název nejdelšího řetězce napíšeme:

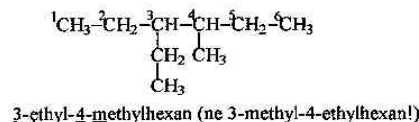
- a) *polohu (lokant)* alkylu nebo substituentu (tj. číslo uhlíku, na kterém je substituent vázán)
b) *název* alkylu nebo substituentu

Různé typy substituentů řadíme v názvu v *abecedním pořadí* (ne podle lokantů).

Větší počet *stejných* substituentů vyjadřují prefixy di-, tri-, tetra- atd. Numerický prefix nemá vliv na abecední pořadí!



4) Jsou-li dva různé alkylu nebo substituenty ve stejných polohách (symetrické číslování), má *nižší číslo* (lokant) ten substituent, který je *dříve* v *abecedě*:

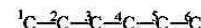


Poznámka: Dříve se řadily substituenty podle složitosti - jednodušší substituent měl nižší číslo.

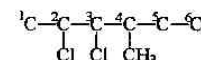
2.3.2 Psaní vzorců

Příklad: 2,3-dichlor-4-methylhexan

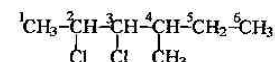
1) Napíšeme *hlavní uhlíkový řetězec* (hexan) a očíslováme.



2) Na příslušné atomy uhlíku připojíme *substituenty* (atomy Cl na uhlíky č. 2 a 3, skupinu CH_3 na uhlík č. 4).



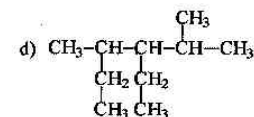
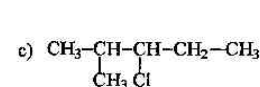
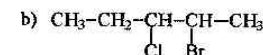
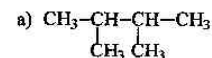
3) Doplňme *atomy vodíku* tak, aby každý atom uhlíku byl čtyřvazný.



Cvičení:

- Co jsou alkany? Jaký mají obecný vzorec?
- Vyjmenujte homologickou řadu nerozvětvených alkanů ($\text{C}_1 - \text{C}_{10}$).
- Co jsou uhlovodíkové zbytky? Jak odvozujeme alkylu z alkanů?
- Jaké typy alkylů znáte? Čím se liší?
- Napište všechny alkylu odvozené od butanu a určete, které z nich jsou primární, sekundární a terciární.
- Napište racionální vzorce těchto sloučenin:

a) 2-methylpentan	b) 1,3,5-trichlorhexan
c) 3-chlor-2,4-dimethylheptan	d) 2,3,4-trimethylpentan
e) 3-ethyl-2,4-dimethylhexan	f) 2-brombutan
- Napište názvy těchto sloučenin:



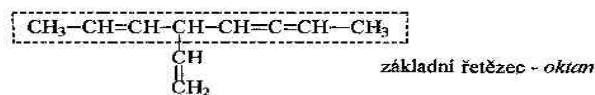
2.4 Nenasycené uhlovodíky

Název nenasyčeného uhlovodíku tvoříme takto:

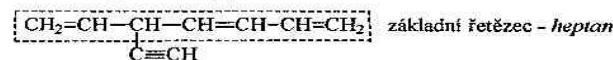
- 1) Určíme *základní řetězec* - to je řetězec s *maximem násobných vazeb* (tento řetězec nemusí být nejdelší).



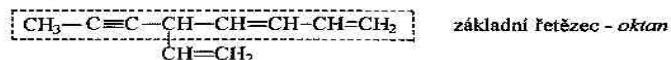
- a) Máme-li dva řetězce se stejným počtem násobných vazeb, zvolíme *delší*.



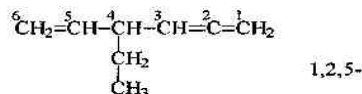
- b) Máme-li dva řetězce se stejným počtem násobných vazeb i uhlíkových atomů, zvolíme řetězec s větším počtem *dvojných* vazeb.



Pozor! Pokud je počet násobných vazeb v obou řetězcích stejný, je délka uhlíkového řetězce důležitější než typ násobné vazby.



- 2) Řetězec očíslováme tak, aby *polohy násobných vazeb* měly *minimální možná čísla* (lokanty). Polohu násobné vazby udává atom uhlíku s nižším lokantem. Polohy násobných vazeb napíšeme před název základního řetězce.



Jsou-li dvojná a trojná vazba ve stejných polohách (symetrické číslování), má dvojná vazba nižší lokant.

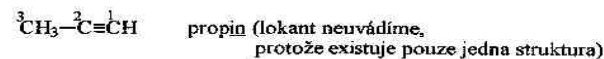
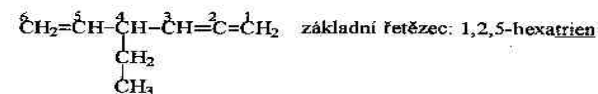


- 3) Přítomnost násobných vazeb vyjádříme *suffixem*:

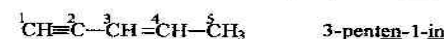
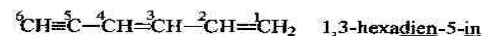
- a) **-en** pro *dvojnou* vazbu (obecně alken)
b) **-in** pro *trojnou* vazbu (obecně alkin)

Větší počet násobných vazeb v molekule vyjádříme prefixem di-, tri- atd.

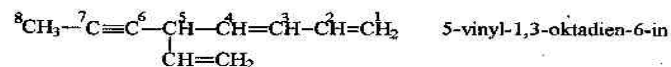
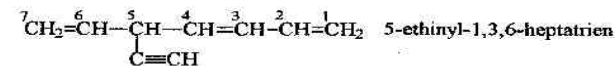
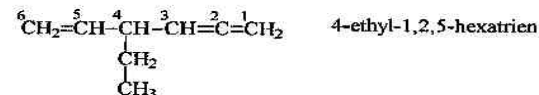
Příklad: 2 dvojně vazby **dien**
3 dvojně vazby **trien**
2 trojně vazby **diin**



Je-li v uhlovodíku *dvojná i trojná vazba*, řadíme suffixy **-en** a **-in** podle abecedy. Název uhlovodíku s dvojnou i trojnou vazbou se tvoří takto:



- 4) Další postup tvoření názvů je stejný jako u rozvětvených uhlovodíků:



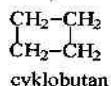
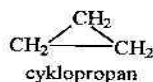
Poznámka: Podle nejnovějších pravidel IUPAC pro názvy organických sloučenin píšeme lokant (polohu) vždy těsně před sufix, například:

2-buten	nově	but-2-en
1,3,5-hexatrien	nově	hexa-1,3,5-trien
1-buten-3-in	nově	but-1-en-3-in

2.5 Alicyklické uhlovodíky

1) **Základním řetězcem** je kruh (cyklus). V názvu je prefix **cyklo-** + název odpovídajícího uhlovodíku. Další postup tvoření názvů je stejný jako u alifatických uhlovodíků.

a) **cykloalkany**



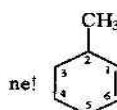
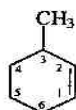
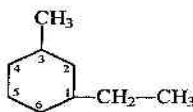
Vzorce cykloalkanů často vyjadřujeme zjednodušeně:



b) **nenasycené alicyklické uhlovodíky**



c) **substituované alicyklické uhlovodíky**



Cvičení:

1) Definujte nebo vysvětlete tyto termíny:

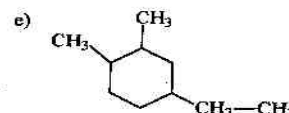
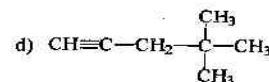
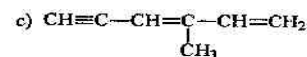
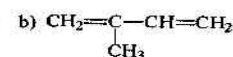
- | | |
|--------------------------|---------------------------|
| a) nasycené uhlovodíky | b) homologická řada |
| c) alkyl | d) alkeny |
| e) nenasyčené uhlovodíky | f) sp^3 hybridizace |
| g) obecný vzorec alkanů | h) alicyklické uhlovodíky |

2) Jaký obecný název mají uhlovodíky, které ve svých molekulách obsahují:

- dvě trojné vazby
- cyklus se dvěma dvojnými vazbami
- jednu dvojnou a jednu trojnou vazbu

3) Co jsou cykloalkiny?

4) Napište názvy těchto uhlovodíků:



5) Napište vzorce těchto sloučenin:

a) 2,3-dimethyl-1,4-hexadien

b) 3,5-dimethylcyklopenten

c) 3,3-diethyl-1-pentin

d) 1-hexen-5-in

e) 1,2-butadien

f) 2-hexen

g) 4-chlor-3-methyl-1-hexin

h) 1,2-dichlor-5,5,6-trimethyl-3-okten

i) cyklobuten

j) 1-brom-3-ethyl-1-hepten

k) ethylcyklopentan

l) 3-penten-1-in

m) 3-ethyl-1,2-dimethyl-4-propylcyklohexan

n) 3,6-diethyl-2,4-dimethyl-4-propyl-1,7-oktadien

o) 4,5-diethyl-2,3,3-trimethyl-5-propyl-1-nonen

6) Určete, které z následujících sloučenin jsou:

a) alifatické uhlovodíky

b) alkadieny

c) aromatické uhlovodíky

d) alicyklické uhlovodíky

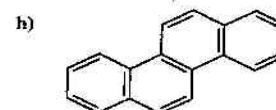
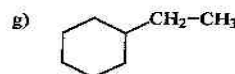
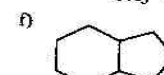
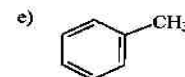
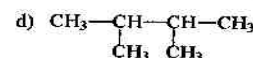
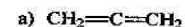
e) alkany

f) alkeny

g) nenasyčené alifatické uhlovodíky

h) alkiny

i) cykloalkany



3 Izomerie

Izomerie je jev, kdy sloučeniny mají *stejný sumární vzorec*, ale *různou strukturu* nebo *prostorové uspořádání*. Takové sloučeniny se nazývají *izomery*. Různá struktura podmiňuje různé fyzikální a chemické vlastnosti izomerů.

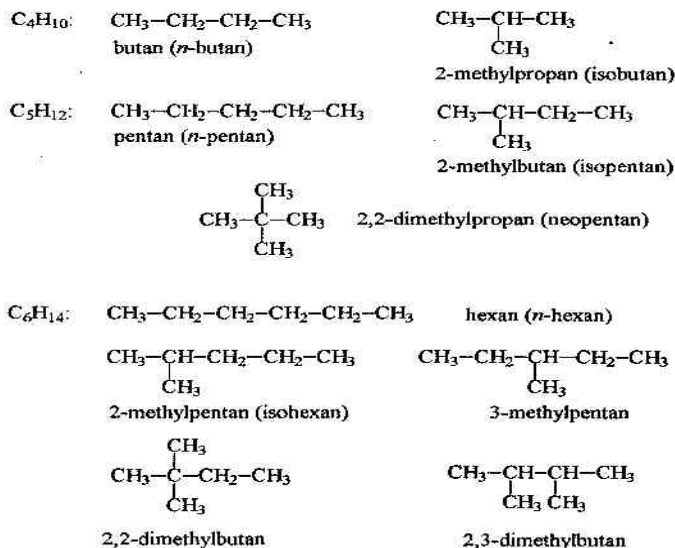
3.1 Konstituční (strukturní) izomerie

Konstituční izomery mají *stejný sumární vzorec*, ale *různý strukturní vzorec*. Liší se svou konstitucí, tj. pořadím atomů a pořadím a druhem vazeb v molekulách.

3.1.1 Řetězcová izomerie

Izomery se *liši uspořádáním* (tvarem) uhlíkového *řetězce*, ale patří ke stejné homologické řadě.

Příklady:

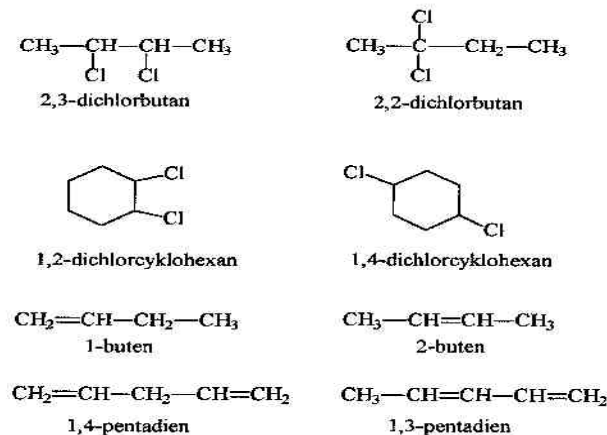


Prefix *iso-* se užívá k označení methylové skupiny na druhém uhlíkovém atomu v řetězci.

3.1.2 Polohová izomerie

Polohové izomery se liší *polohou substituentů* nebo *polohou násobné vazby* v molekule.

Příklady:

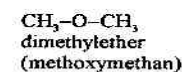
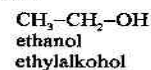


3.1.3 Skupinová (funkční) izomerie

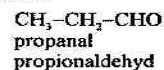
Skupinové izomery se liší *typem funkční skupiny*, a proto patří k různým homologickým řadám. Mají velmi rozdílné chemické i fyzikální vlastnosti.

Příklady:

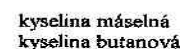
1) alkohol a ether



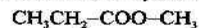
2) aldehyd a keton

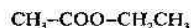


3) karboxylová kyselina a estery



S kyselinou máselnou jsou izomerní tyto estery:





ethylester kyseliny octové
ethylacetát



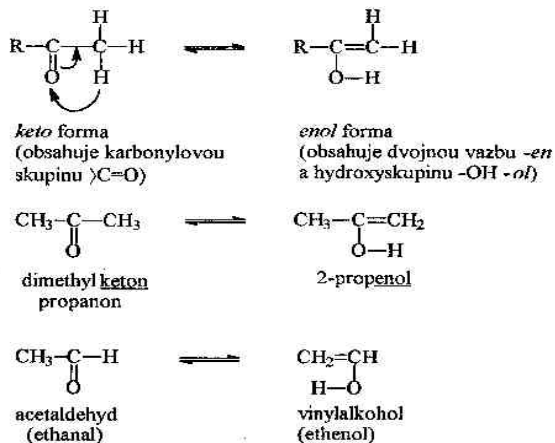
propylester kyseliny mravenčí
propylformiát

3.1.4 Tautomerie

Tautomery se liší *polohou vodíku a typem a polohou dvojné vazby*. Uhlíkový řetězec je stejný. Obě formy (tautomery) jsou v dynamické rovnováze a podle podmínek se mohou vzájemně přeměňovat (přesmykovat).

Tautomery mají stejný empirický a molekulový vzorec, ale různý strukturní a racionální vzorec.

Příklad: aldehydy a ketony vykazují **keto-enol** tautomerii



Cvičení:

- Co jsou izomery?
- Jaké typy konstituční izomerie znáte? Jak se vzájemně liší?
- Napište racionální vzorce všech řetězcových izomerů heptanu C_7H_{16} a pojmenujte je.
- Napište všechny polohové izomery:
 - dichlorpropanu
 - hexadienu
 - dimethylcyklohexanu
- Co jsou tautomery? Jaké typy tautomerů znáte?
- Která z uvedených sloučenin tvoří jen jeden monohalogenderivát?
 - propin
 - propan
 - 2,2-dimethylpropan
 - 2-methylpropan
- Kolik alkylů můžeme odvodit od *n*-pentanu?
- Jaký typ izomerů jsou pentan a isopentan?
- Napište všechny polohové a všechny řetězcové izomery pentenu.

10) 1-buten a cyklobutan jsou:

- izomery konstituční
- nejsou izomery

- izomery konfigurační
- jsou homology

11) Hexan a cyklohexan jsou:

- izomery konfigurační
- nejsou izomery

- nejsou homology
- jsou izomery konstituční

3.2 Konfigurační izomerie (stereoizomerie)

Stereoizomery (prostorové izomery) se liší pouze prostorovým uspořádáním (*konfigurací*) atomů nebo jejich skupin. Mají proto různý konfigurační (geometrický) vzorec.

3.2.1 Geometrická izomerie (*cis-trans*)

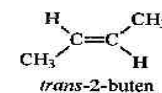
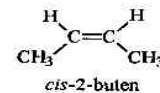
Izomery *cis-trans* se liší konfigurací substituentů na dvojně vazbě nebo na cyklu. Mají rozdílné fyzikální i chemické vlastnosti. Tento typ izomerie se vyskytuje u některých sloučenin s dvojnou vazbou a u substituovaných nebo rozvětvených cykloalkanů.

cis-izomer: substituenty jsou na *stejně* straně dvojně vazby nebo roviny kruhu

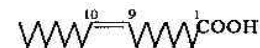
trans-izomer: substituenty leží na *opačných* stranách dvojně vazby nebo roviny kruhu

Příklady:

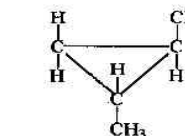
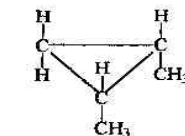
a) *alkeny* - dvojná vazba není volně otáčivá. Jsou-li na každém uhlíku dvojně vazby vázané substituenty nebo radikály, pak existují dva izomery *cis* a *trans*.



b) *nenasycené karboxylové kyseliny*

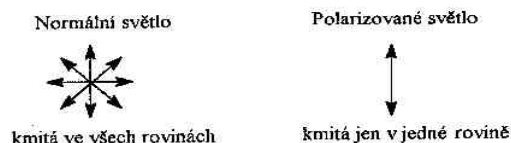


c) *cykloalkany* - volná rotace substituentů kolem jednoduché vazby je v cyklu omezena, což je příčinou existence *cis-trans* izomerie u cykloalkanů.



3.2.2 Optická izomerie (chiralita)

Některé organické sloučeniny mají schopnost *otáčet rovinu polarizovaného světla*. Tato schopnost se nazývá *optická aktivita*, takové sloučeniny jsou *opticky aktivní*.



Optická aktivita se vyskytuje u molekul, které nemají rovinu ani střed symetrie. Většina opticky aktivních látek obsahuje v molekule alespoň jeden **asymetrický uhlíkový atom (chirální uhlík, chirální centrum)**. Asymetrický uhlík je atom, který váže *čtyři různé substituenty*. Ve vzorci jej označujeme C*.

V uspořádání substituentů na asymetrickém uhlíku mohou nastat dvě možnosti:



Tyto dvě formy jsou svými *zrcadlovými obrazy* a ani otáčením v prostoru je nelze ztožnit. Je mezi nimi chirální vztah, stejný jako je vztah mezi pravou a levou rukou (starořecky chira = ruka). Takové optické izomery se nazývají **enantiomery** nebo také **optické antipody**. Většina jejich fyzikálních i chemických vlastností je stejná, enantiomery se však liší ve své optické aktivitě. Mohou se lišit také v biochemických reakcích.

Optické antipody otáčejí rovinu polarizovaného světla o *stejný úhel, ale opačným směrem*.

Otáčivost opticky aktivních sloučenin zjišťujeme měřením v *polarimetru*. Určujeme směr otáčení a velikost úhlu otočení.

pravotočivý antipod - otáčí rovinu polarizovaného světla **doprava**.
Označujeme jej (+).



levotočivý antipod - otáčí rovinu polarizovaného světla **doleva**.
Označujeme jej (-).



Směs dvou optických antipodů o stejné koncentraci (ekvimolární směs) se nazývá **racemická směs** nebo **racemát**. Tato směs je *opticky inaktivní*, protože optické účinky obou antipodů se navzájem ruší.

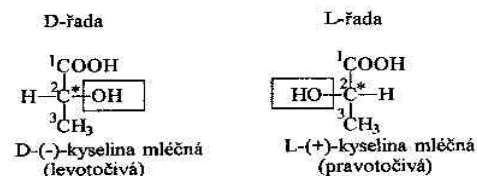
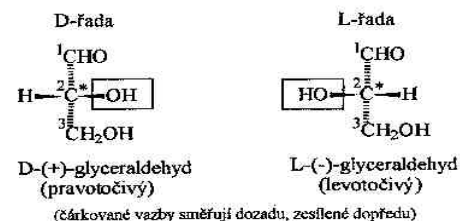
Pro vyjádření **konfigurace na asymetrickém uhlíku** používáme označení **D-** a **L-**. Tato písmena nesouvisí se směrem otáčení roviny polarizovaného světla! Opticky aktivní látky mohou mít označení D(+), D(-), L(+) nebo L(-).

Pro znázornění D- a L-forem se používá standardní *Fischerova projekce*, pro kterou platí tato pravidla:

- uhlík č. 1 je nahoře
- vertikální vazby daného C* směřují dozadu (pod rovinu nákresny)
- horizontální vazby daného C* směřují dopředu (před rovinu nákresny)

Podle konfigurace na asymetrickém uhlíku označujeme optické izomery:

D- (dexter) - funkční skupina je *napravo*
L- (laevus) - funkční skupina je *nalevo*



Je-li v molekule několik chirálních uhlíků, formu D- nebo L- určíme podle konfigurace na *posledním chirálním uhlíku*, tj. na chirálním uhlíku s nejvyšším lokantem (kap. 8.1.1).

S optickými antipody se setkáváme i v biochemii. V živých organismech se například vyskytují pouze L-aminokyseliny, ale jenom D-cukry. Enzymy mají schopnost tyto struktury rozlišit.

3.3 Konformace

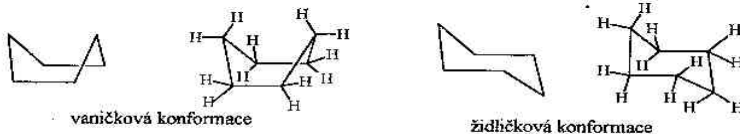
Konformace jsou *různá prostorová uspořádání* molekul stejné sloučeniny. Tyto formy se nazývají *konformery*. Vznikají *rotací* jednotlivých částí molekuly *kolem jednoduchých vazeb*.

Konformery mají rozdílnou potenciální energii. Čím jsou nevazebné interakce uvnitř molekuly slabší (atomy a jejich skupiny co nejdál od sebe), tím je molekula stabilnější. Konformer s nejnižší potenciální energií je nejstabilnější.

Mezi konformery se ustavuje *rovnováha*. Při určité teplotě vzniká směs konformerů, ve které převládá konformer, který je při dané teplotě nejstabilnější.

Například cykloalkany, počínaje cyklohexanem, se vyskytují v několika konformacích. Energeticky nejméně a tedy nejstabilnější konformace cyklohexanu je *konformace židlíčková*, naopak energeticky nejbohatší je *konformace vaničková*. S rostoucí teplotou bude tedy růst poměrně zastoupení vaničkové konformace ve směsi.

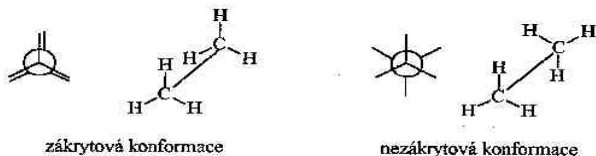
Příklad: konformace *cyklohexanu*



Podobné konformace se vyskytují například u sacharidů se šestičlennými cykly.

U ethanu má nejnižší potenciální energii ze všech možných konformací *konformace nezakrytá*, nejvyšší naopak *konformace zakrytá*.

Příklad: konformace *ethanu*



Poznámka: Někteří autoři řadí konformery mezi prostorové izomery (stereoizomery).

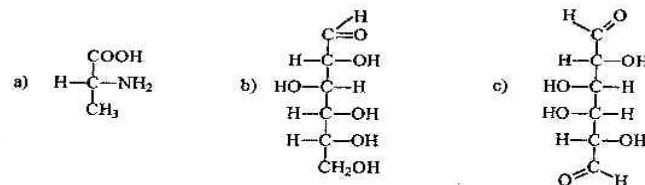
• Cvičení:

- 1) Čím se liší stereoizomery? Jaké typy stereoizomerie znáte?
- 2) U kterých sloučenin existuje geometrická (*cis-trans*) izomerie?
- 3) Čím se liší *cis* a *trans* izomery?
- 4) Nakreslete vzorce geometrických izomerů 2-pentenu a pojmenujte je.
- 5) Co je optická aktivita? Které sloučeniny jsou opticky aktivní?
- 6) Co jsou enantiomery? Co jsou optické antipody? Co je racemická směs?
- 7) Napište racionální vzorec nejjednoduššího uhlovodíku, který obsahuje asymetrický uhlík.

8) Které z uvedených sloučenin mohou mít *zakrytovou konformaci*:

- a) propan b) propen c) 1-buten d) 1,2,3-butatrien

9) V uvedených sloučeninách označte chirální uhlíky. Ke každé sloučenině napište její enantiomer a označte formu D- a L-.



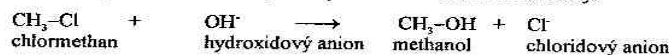
4 Reakce organických sloučenin

4.1 Typy reakcí podle jejich průběhu

a) Substituce (nahrazování, záměna)

Při substituci se nahrazuje jeden nebo více atomů nebo skupin vázaných na uhlík jiným atomem nebo funkční skupinou. Hybridizace atomu uhlíku v reakčním centru se nemění, násobnost vazby se nemění.

Substituce je charakteristická pro nasycené a aromatické uhlovodíky.



b) Adice

Při adici se další atomy váží na násobné vazby. Dvě částice se spojují v jednu. Násobnost vazby klesá, hybridizace atomů uhlíku v reakčním centru se zvyšuje ($sp^2 \rightarrow sp^3$ nebo $sp \rightarrow sp^3$).

Adice je charakteristická pro nenasyčené uhlovodíky.



Podle toho, která látka se aduje, rozlišujeme tyto adice:

hydrogenace - adice vodíku H_2

halogenace - adice halogenu X_2 (stejný termín však může být použit i pro substituci)

hydrohalogenace - adice halogenovodíku HX

hydratace - adice vody

polymertizace - je mnohonásobná adice nenasyčených molekul (monomerů). Vznikají polymery (makromolekulární látky)

