



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

# CHEMIE OBECNÁ

## STAVBA ORGANICKÝCH MOLEKUL

# Úvod

# Výběr významných prvků v organické chemii

1													13	14	15	16	17	
H													B	C	N	O	F	
2	Li																	
	Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	
	K	Ca		Ti		Cr	Mn	Fe	Co		Cu	Zn			As	Se	Br	
						Mo				Pd		Cd		Sn			I	
												Hg		Pb				

Klíčové prvky: C, H, N, O

Významné prvky: halogeny, chalkogeny, kovy

Ostatní prvky: Li, Ti, Pd, Al

Toxické prvky: Cd, Hg, Pb, As

# Vaznost atomů

□ **Def:** Vazností sloučeného atomu rozumíme počet vazebných elektronových párů, které jej spojují s ostatními atomy.

- Obvyklá vaznost atomu (va) odpovídá u prvků 1-3 skupiny oxidačnímu číslu, u prvků 4-7 skupiny absolutní hodnotě záporného oxidačního čísla prvku. Počet elektronů okolo atomu je právě roven počtu valenčních elektronů ( $ve = va + ev$ ;  $ev$  jsou nevazebné elektrony)
- Pokud vaznost atomu není obvyklá, pak atom nese elektrický náboj, vzniká ion. Vaznost atomu je menší než obvyklá, pak anion, je větší, pak kation. (Neplatí pro uhlík: trojvazný **karboniový ion** (+), trojvazný s nevazebným párem **karbanion** (-); pro vodík nulvazný **vodíkový ion** (+), nulvazný s nevazebným párem **hydridový ion** (-))

Prvek	VE	Trojvazný	Čtyřvazný
Uhlík	4	$\text{>C}^+$ $\text{>C}^-$	$\begin{array}{c}   \\ -\text{C}- \\   \end{array}$ $\text{>C=}$ $-\text{C}\equiv$

VE: počet valenčních elektronů



evropský  
sociální  
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,  
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání  
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

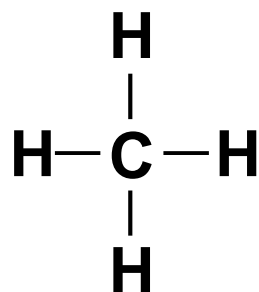
Úvod

3

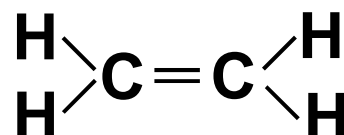
# Vaznost vybraných prvků

Prvek	VE	Nul-	Jedno-	Dvoj-	Troj-	Čtyř-
Vodík	1		H—	Pozor!	$\oplus \text{H}$	$\text{H} \ominus$
Kyslík	6	$\ominus \ominus   \text{O}  $	$\ominus   \text{O} —$	$— \text{O} —$ $\text{O} =$	$\oplus \text{O} —$ $ $	
Síra	6	$\ominus \ominus   \text{S}  $	$\ominus   \text{S} —$	$— \text{S} —$ $\text{S} =$	$\oplus \text{S} —$ $ $	
Dusík	5			$\ominus \text{N} —$ $ $	$— \text{N} =$ $\text{N} \equiv$ $\diagdown \text{N} \diagup$ $ $	$\oplus  $ $— \text{N} —$ $ $
Hal (X)	7	$\ominus   \text{X}  $	$  \text{X} —$	VE: počet valenčních elektronů		

# Vaznost příklady



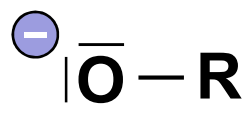
methan  
4 jednoduché vazby



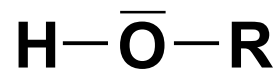
ethen; 1 dvojná,  
2 jednoduché vazby



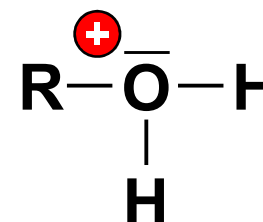
ethyn; 1 trojná,  
1 jednoduchá vazba



alkoholát, fenolát  
7 elektronů okolo O  
1 navíc,  $\ominus$



alkohol, fenol  
6 elektronů okolo O  
bez náboje



alkyloxonium  
5 elektronů okolo O  
1 chybí,  $\oplus$

# Délka (pm), energie vazby (kJ/mol)

Vazba	Délka	Energie	Vazba	Délka	Energie
<b>C—C</b>	154	345	<b>C—N</b>	147	305
<b>C=C</b>	133	610	<b>C=N</b>	136	615
<b>C≡C</b>	120	835	<b>C≡N</b>	135	890
<b>C—H</b>	109,6	413	<b>O—H</b>	97	462
<b>C—O</b>	143	358	<b>N—H</b>	101	390
<b>C=O</b>	134	736	<b>S—H</b>	134	347

# Délka vazby (r/pm) a vazebné okolí

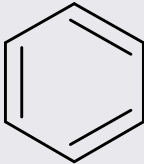
vzorec	r/pm	název	vzorec	r/pm	název
<b>H—CHO</b>	111,8	methanal	<b>H—CH=CH<sub>2</sub></b>	108,5	ethen
<b>H—COCH<sub>3</sub></b>	111,4	ethanal	<b>H—C<sub>6</sub>H<sub>5</sub></b>	108,6	benzen
<b>H—CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub></b>	110,2	ethan	<b>H—CCl<sub>3</sub></b>	107,2	trichlor- methan
<b>H—CH<sub>2</sub>CN</b>	110,2	ethannitril	<b>H—C≡CH</b>	106,0	ethyn
<b>H—CH<sub>3</sub></b>	109,3	<i>methan</i>	<b>H—C≡CCH<sub>3</sub></b>	105,8	propyn

Délka vazby u methanu je průměrnou hodnotou

# Chemické vzorce

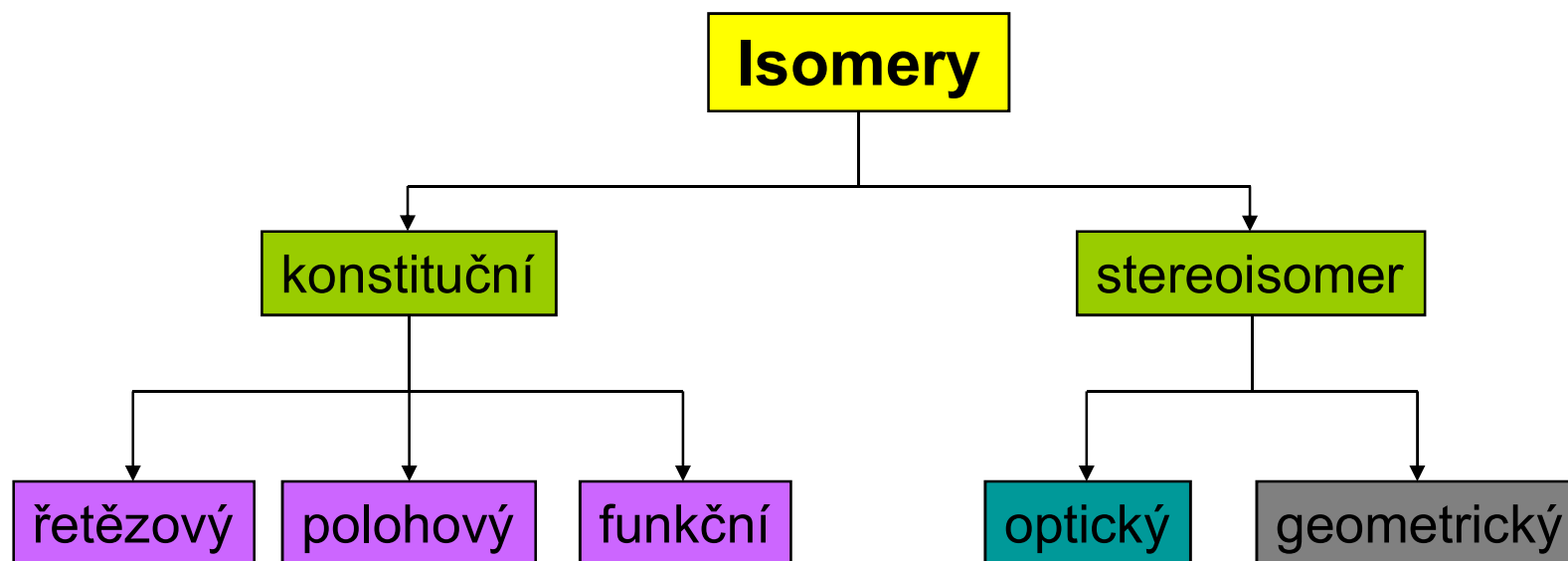
- ☐ stechiometrické: uvádí pouze, které prvky látku tvoří a jaký je poměr těchto prvků; někdy jsou zcela nepoužitelné.
  - ☐ molekulové: stechiometrický vzorec je doplněn údajem o velikosti molekuly.
  - ☐ funkční: pokud jsou v látce funkční skupiny, sdružují se, čímž se zlepšuje čitelnost
  - ☐ strukturní: uvádí všechny atomy látku tvořící a všechny vazby mezi nimi, mohou uvádět i geometrii molekul či konfiguraci u isomerů.
  - ☐ strukturní elektronové vzorce: ve strukturním vzorci jsou uvedeny i nevazebné valenční elektrony.
- ↓
- ☐ poznámka 1: ve směru šipky se zvyšuje množství informace o dané látce.
  - ☐ poznámka 2: často se používají vzorce zcela nebo zčásti schematické, pravidla pro tvorbu a čtení těchto vzorců se mohou lišit dle typů látek.
  - ☐ poznámka 3: některé schematické vzorce jsou velmi běžné, typicky např. benzen.
  - ☐ poznámka 4: existují i další typy, např. konformační vzorce, o nich bude diskuse dále

# Chemické vzorce

stechiometrický	molekulový	funkční	strukturní	elektronový	schematický
H	H <sub>2</sub>		H-H		
H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O	H <sub>2</sub> O	$\begin{array}{c} \text{H}-\text{O}-\text{H} \\   \\ \text{H}-\text{O}-\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H}-\text{O}^--\text{H} \end{array}$	
H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		NH <sub>4</sub> NO <sub>3</sub>			
CH <sub>2</sub> O	CH <sub>2</sub> O		$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{C}=\text{O} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{C}=\text{O}^- \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \diagup \\ \text{C}=\text{O} \\ \diagdown \end{array}$
CH <sub>2</sub> O	(CH <sub>2</sub> O) <sub>6</sub> C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>		dále viz sacharidy		
CH	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>		$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}=\text{C}=\text{H} \\   \quad \quad   \\ \text{H}-\text{C}=\text{C}=\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$		

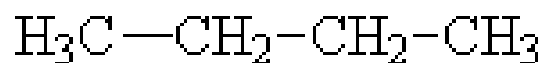
# Isomerie

**Def:** Isomerní jsou molekuly dvou různých látek se stejným sumárním vzorcem (stejnou molární hmotností), ale různou strukturou. Jejich vlastnosti se mohou výrazně lišit. Např. dimethylether/ethanol. Isomerace (změna uspořádání atomů v molekule) vyžaduje dodat energii odpovídající chemické vazbě.

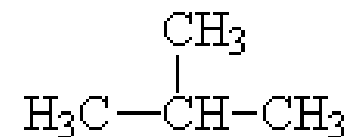


# Konstituční isomerie

řetězová

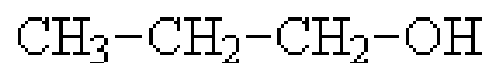


butan

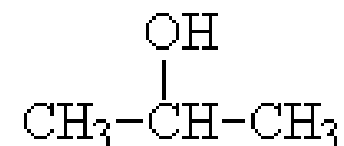


isobutan

polohová

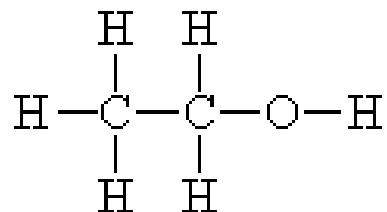


propan – 1 - ol

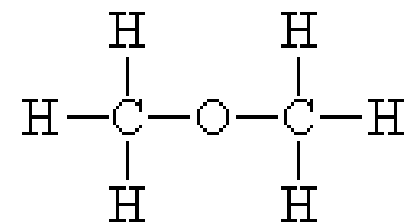


propan – 2 - ol

funkční



ethanol

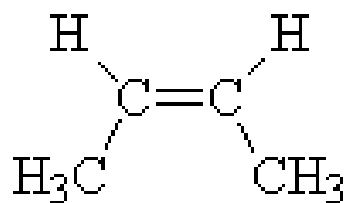


dimethylether

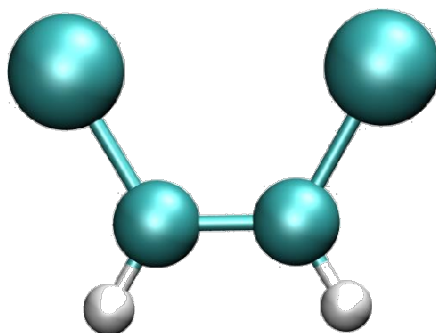
# Stereoisomerie

geometrická

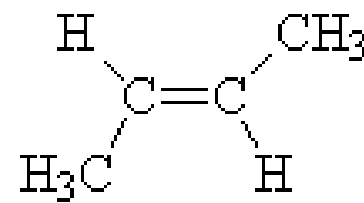
*cis-* nebo (*Z*)



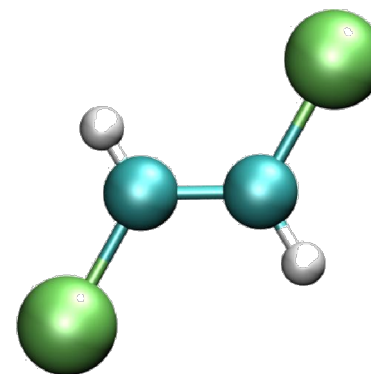
(*Z*) – but-2-en



*trans-* nebo (*E*)



(*E*) – but-2-en

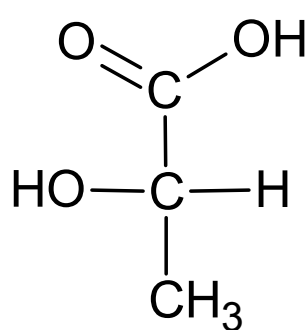


# Stereoisomerie

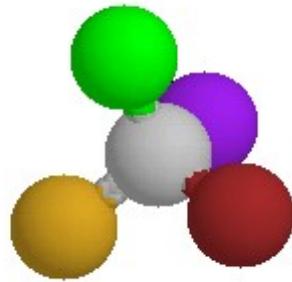
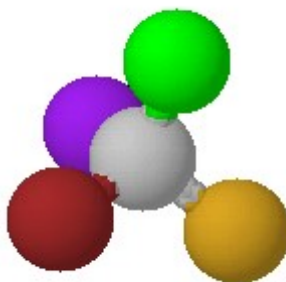
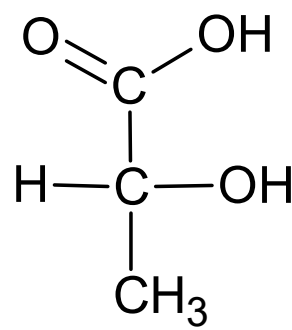
optická

čtyři různé substituenty na atomu uhlíku

L – mléčná kyselina



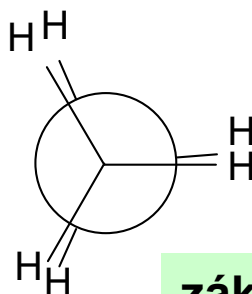
D – mléčná kyselina



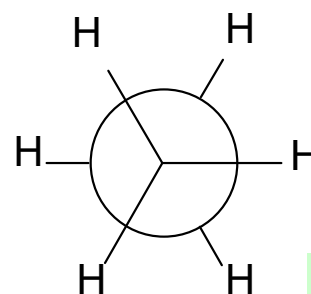
# Konformace

**Def:** Konformace souvisí s uspořádáním molekul jedné a téže látky. Rozdíl vlastností konformerů je méně výrazný. Změna konformace vyžaduje jen malou energii.

## Řetězců



**zákrytová**

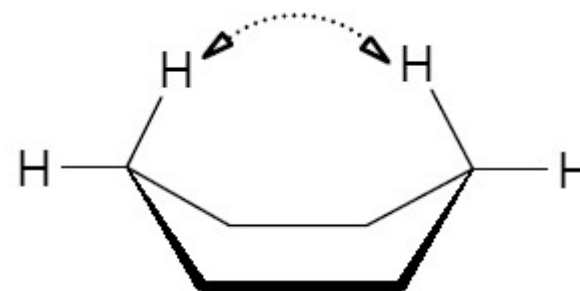


**nezákrytová**

## Kruhů

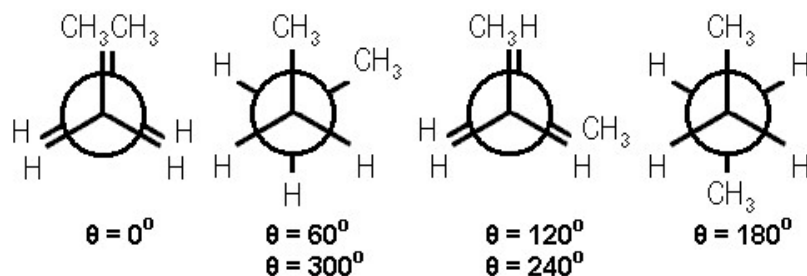


**židličková**  
(energeticky výhodnější)

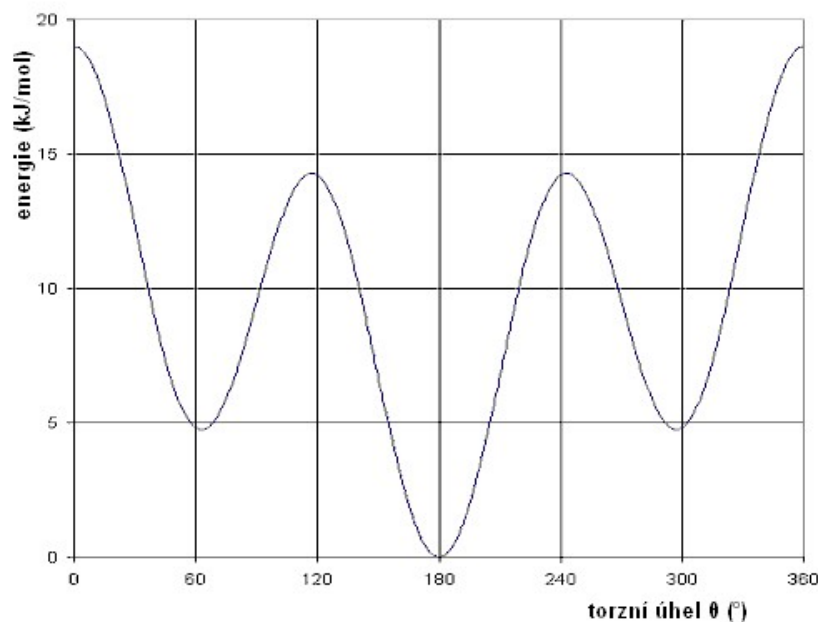


**vaničková**  
(energeticky méně výhodná)

# Konformace



Konformace butanu v Newmanově projekci



Závislost energie při rotaci kolem středové vazby C-C v butanu

**Možné mezní konformace butanu a závislost jejich energie na torzním úhlu  $\theta$ .**

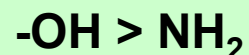
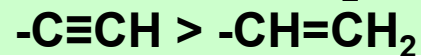
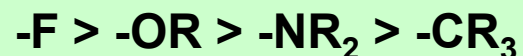
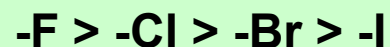
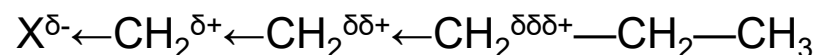
Maximum energie je pro synperiplanární (plně zákrytovou) konformaci ( $\theta = 0^\circ$ ), minimum pro antiperiplanární konformaci ( $\theta = 180^\circ$ ). Ostatní možné konformace (synklinální:  $\theta = 60^\circ$ , resp.  $300^\circ$  a antiklinální  $\theta = 120^\circ$ , resp.  $240^\circ$ ) mají energii v těchto mezích.

# Elektronové vlivy – indukční efekt

- ❑ Indukční efekt je změna elektronové hustoty působením substituentu s rozdílnou elektronegativitou.
- ❑ Vyskytuje se a šíří se po  $\sigma$  – vazbách.
- ❑ Atomy a jejich skupiny, které přitahují elektrony (elektronegativnější než vazebný partner) působí **záporný** indukční efekt (-I).
- ❑ Atomy a jejich skupiny, které poskytují elektrony (elektropozitivnější než vazebný partner) působí **kladný** indukční efekt (+I).
- ❑ Efekt se přenáší po 3 – 4  $\sigma$  – vazbách.

# Elektronové vlivy – indukční efekt

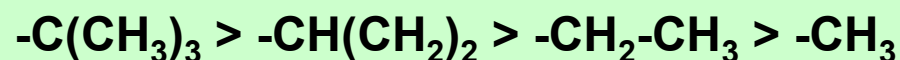
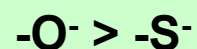
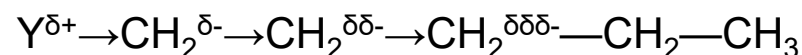
## Záporný indukční efekt (-I)



Význam - příklady:

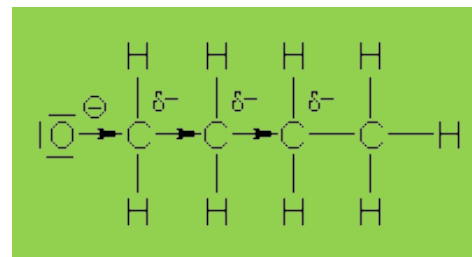
- vznik reakční center pro atak činidel
- zvyšuje (-I) nebo snižuje (+I) sílu karboxylových kyselin

## Kladný indukční efekt (+I)



lonty kovů:  $Li^+$ ,  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Mg^{2+}$

Pozor:

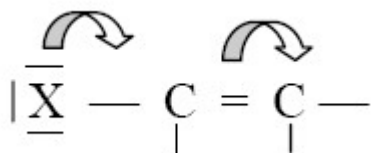


# Elektronové vlivy – mezomerní efekt

- ❑ Mezomerní efekt (též konjugační) je posun  $\pi$  - elektronové hustoty, příp. i volných elektronových párů působením substituentu či funkčních skupin. Podmínkou vzniku je přítomnost konjugovaného systému násobných vazeb nebo násobné vazby a volného elektronového páru. Vznikají tak různé rezonanční struktury.
- ❑ Substituenty, které poskytují elektrony do konjugace působí **kladný** mezomerní efekt (+M), substituenty, které odebírají elektrony působí **záporný** mezomerní efekt (-M).
- ❑ Efekt se přenáší v prostoru  $\pi$  - elektronové hustoty.

# Elektronové vlivy – mezomerní efekt

## Kladný mezomerní efekt (+M)

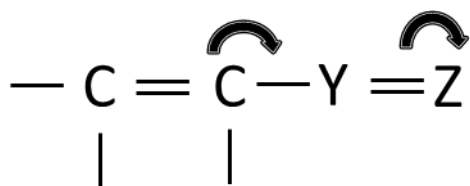


X je např.:

-F, -Cl, -Br, -I, -OH, -OR, -NH<sub>2</sub>, -NHR, -NR<sub>2</sub>, -SH, -SR

Obecně atomy vázané jednoduchou vazbou a nesoucí alespoň jeden volný elektronový pár.

## Záporný mezomerní efekt (-M)



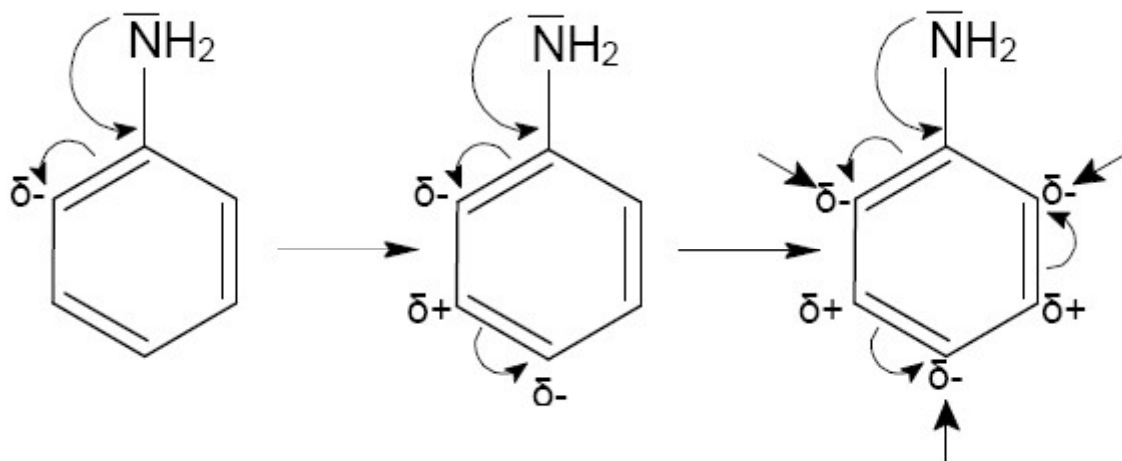
Y=Z je např.:

-CH=O, -RC=O, -C(OH)=O, -C(OR)=O, -C(NH<sub>2</sub>)=O, -NO<sub>2</sub>,  
-SO<sub>3</sub>H, -C≡N

Atomy Z obecně vázané násobnou vazbou a nesoucí alespoň jeden volný elektronový pár, současně mají větší elektronegativitu než Y

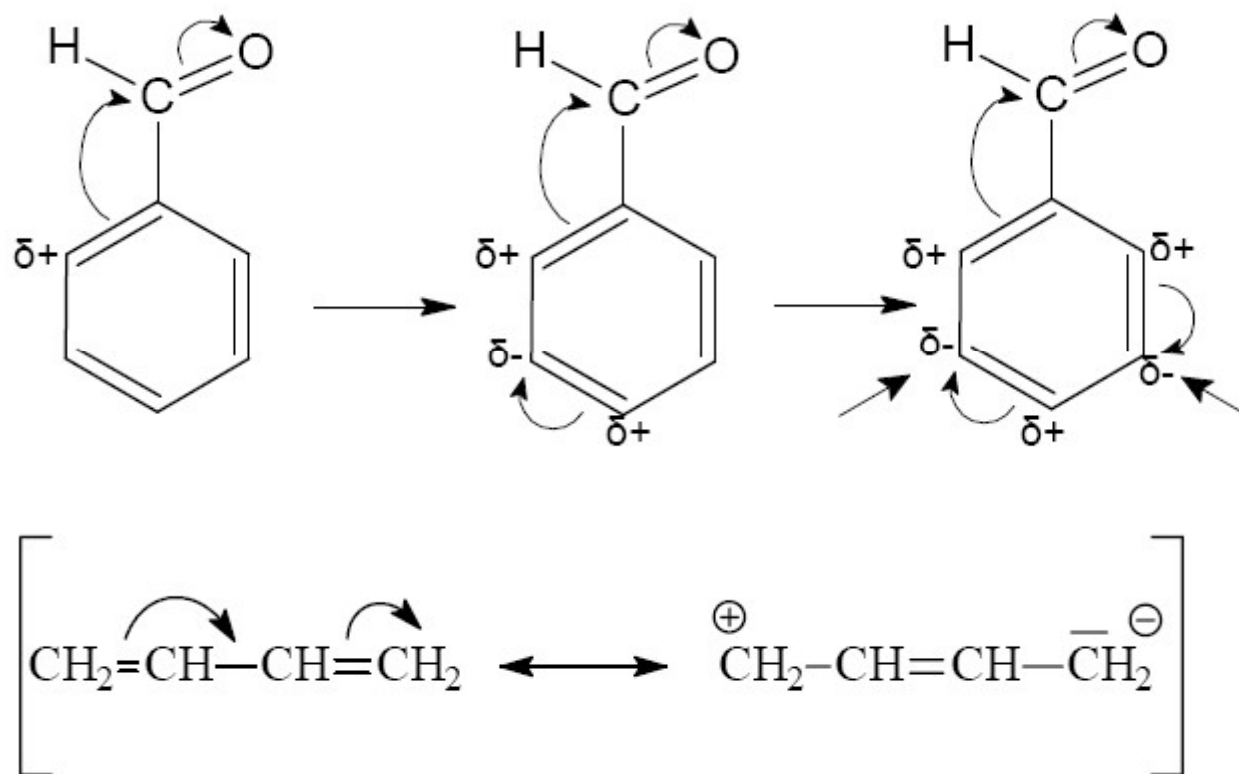
# Elektronové vlivy – mezomerní efekt

## Kladný mezomerní efekt (+M)



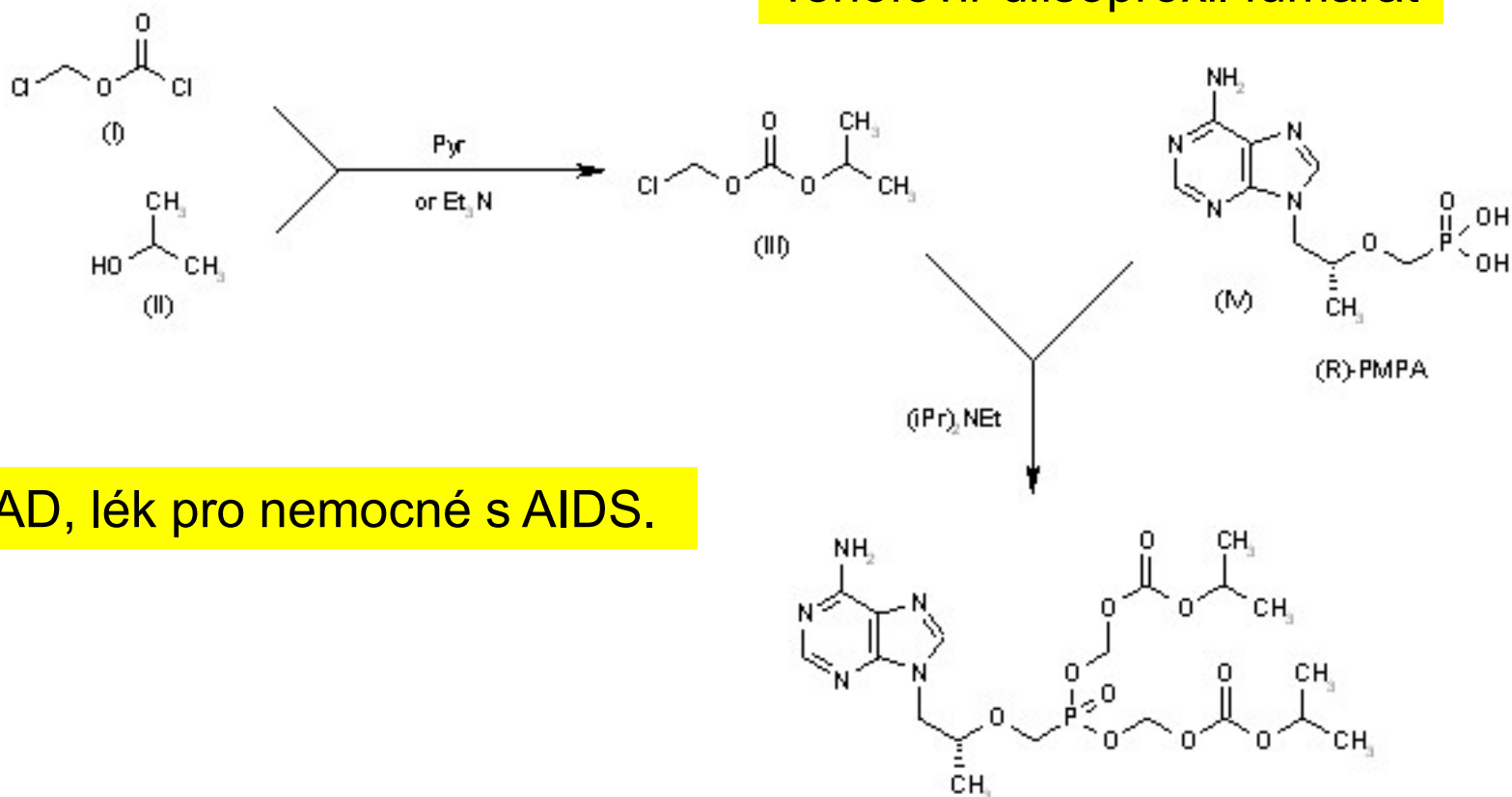
# Elektronové vlivy – mezomerní efekt

## Záporný mezomerní efekt (-M)



# Využití

## Synthesis of Bis(POC)PMPA



Tenofovir diisoproxil fumarat

VIREAD, lék pro nemocné s AIDS.