



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

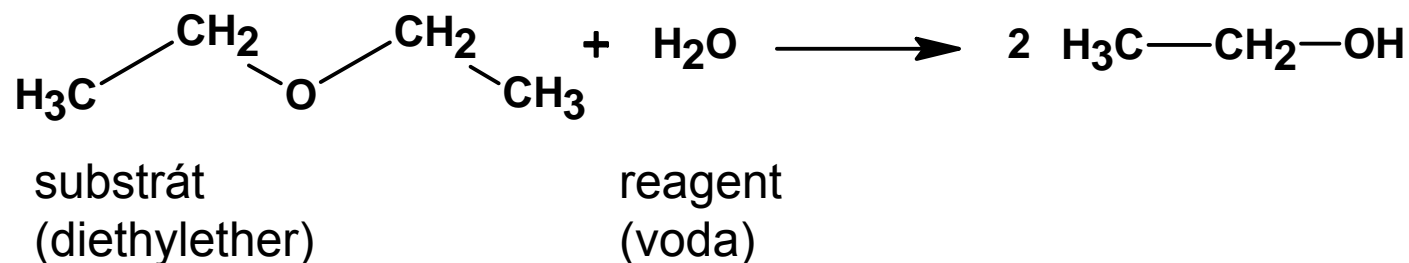
CHEMIE OBECNÁ

MECHANISMUS ORGANICKÉ REAKCE

Průběh organické reakce

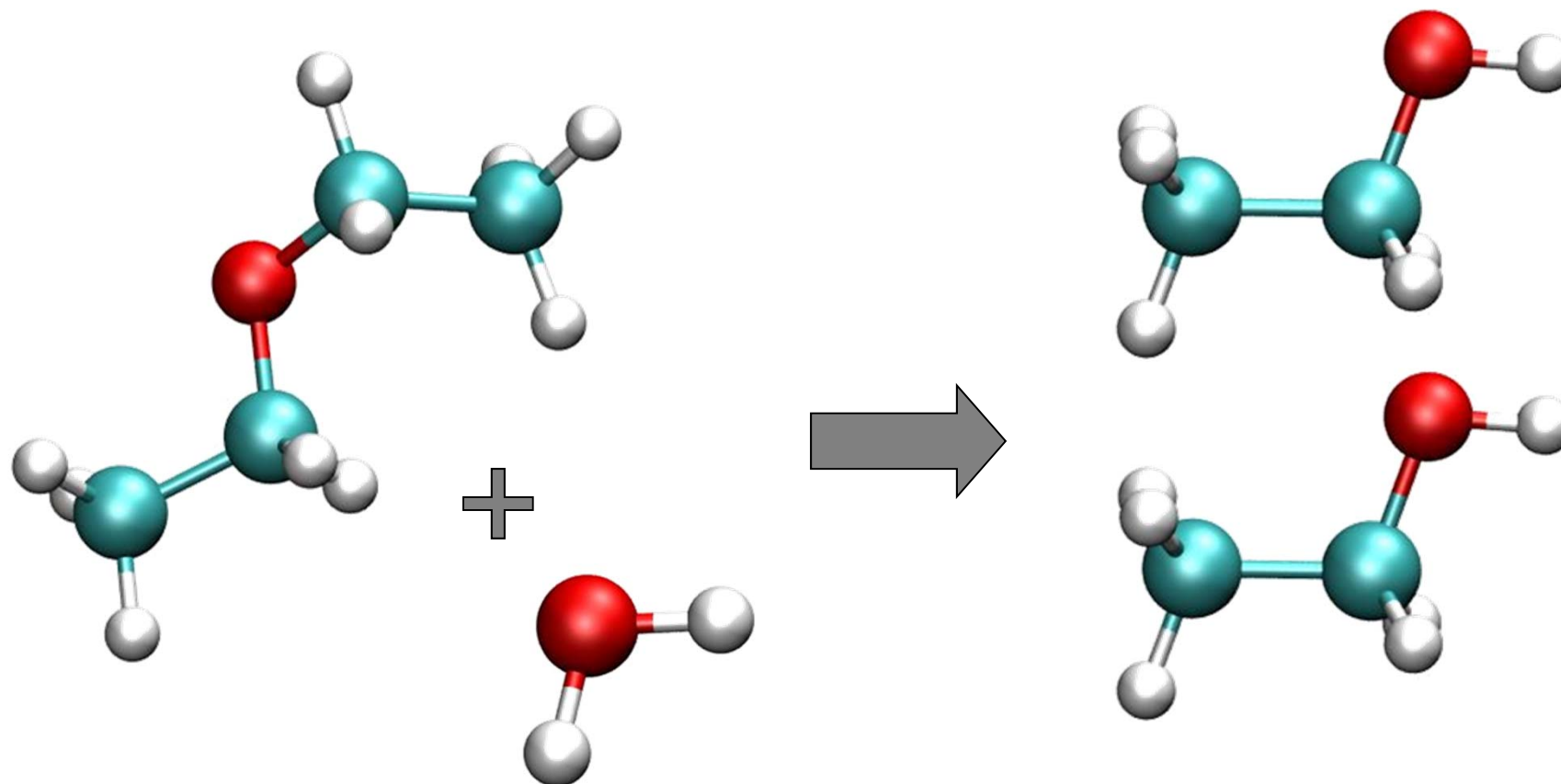
Průběh organických reakcí ovlivňuje celá řada faktorů. Fyzikální (teplota, tlak), chemické (povaha reagujících látek), specifické (přítomnost katalyzátorů, ap.). I přes značnou rozmanitost lze organické reakce relativně jednoduše klasifikovat. Při klasifikaci se zaměřujeme na výchozí látky a na změny na nich probíhající. Výchozí látky dělíme na:

- substrát: je to látka, která svůj uhlíkatý skelet během reakce nemění nebo mění jen málo; je reagentem napadána
- reagent (činidlo): atakuje substrát, při reakci se výrazně mění, může i zcela zaniknout



Poznámka: výše uvedené definice jsou dohodnuté, odpovídají zvyklostem; substrát a reagent můžeme volit dle vlastní úvahy, ovšem popis průběhu reakce musí odpovídat naší volbě.

Průběh organické reakce



Homolytická štěpení a reakce

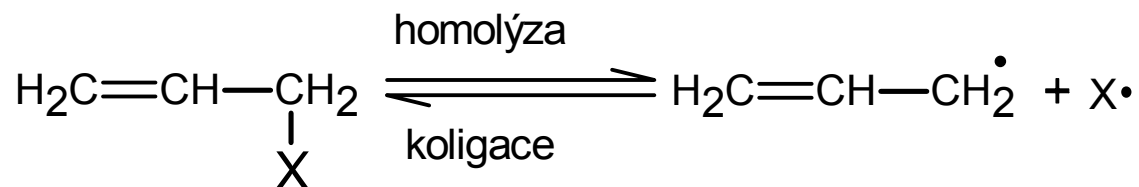
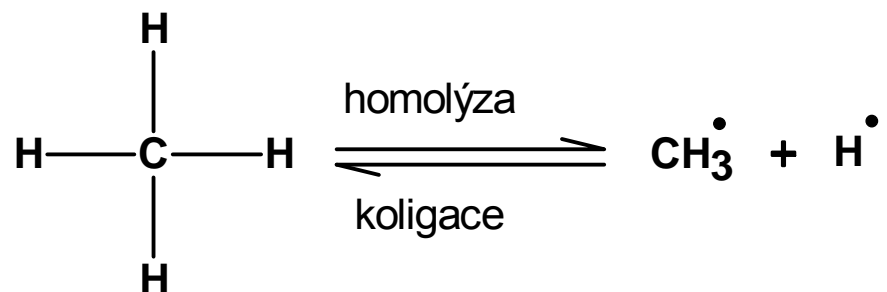
Průběh reakce souvisí se způsobem štěpení starých, resp. tvorby nových vazeb. Rozlišujeme:

□ homolytická reakce: každý vazebný partner si ponechá jeden elektron vazby

➤ obecně:



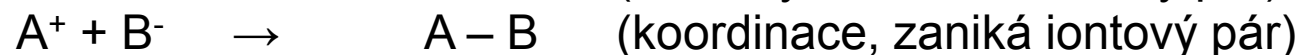
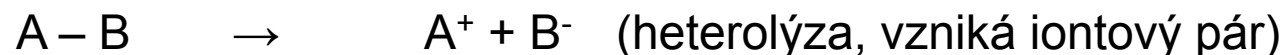
➤ např.:



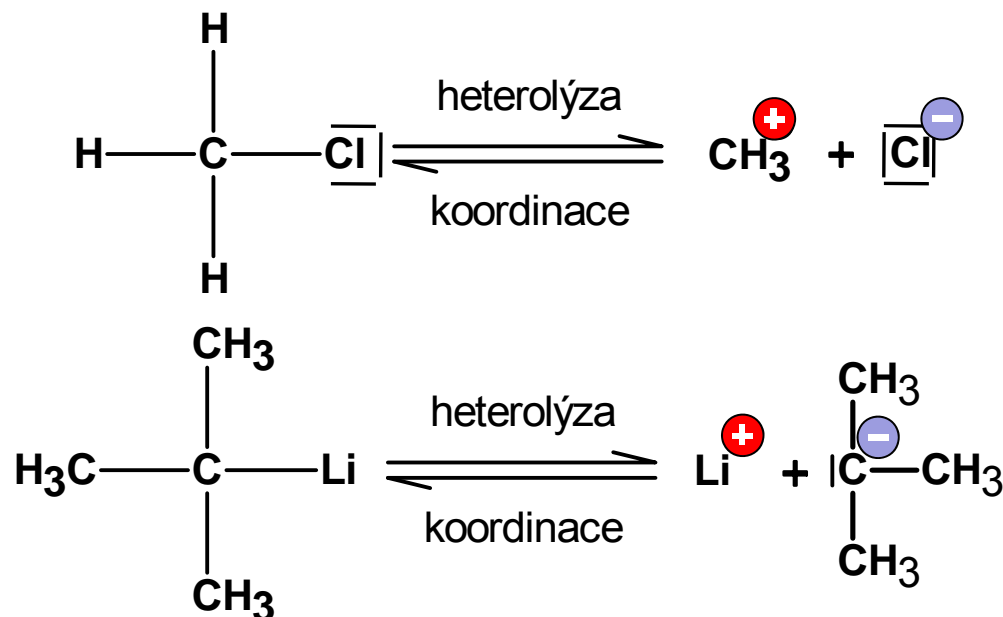
Heterolytická štěpení a reakce

- heterolytická reakce: jeden z vazebných partnerů si ponechá oba elektrony vazby, druhý žádný.

➤ obecně:



➤ např.:



Dělení reakcí

Reagenty (činidla) dělíme na:

- ☐ radikálové ($R\bullet$)
- ☐ nukleofilní (N , N^-)
- ☐ elektrofilní (E , E^+)

Dle změny substrátu rozlišujeme:

- ☐ substituci neboli náhradu (značíme S)
- ☐ adici neboli připojení (A)
- ☐ eliminaci neboli odštěpení (E)
- ☐ reversi neboli přesmyk (R)

Poznámka: Adice je opakem eliminace

Vlastní průběh (mechanismus) reakce je dán kombinací obou pohledů, tj. změn substrátu a reagujícího činidla. Probíhá tedy např. substituce elektrofilní (S_E), substituce nukleofilní (S_N), adice nukleofilní (A_N), ap.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Mechanismus organické reakce

Radikálové reagenty

- ❑ Vznikají homolytickým štěpením vazby, každý z partnerů si ponechá jeden vazebný elektron.
- ❑ Vznikají částice s nepárovým elektronem, radikály.
- ❑ Jejich reaktivita závisí na možnosti celého radikálu nepárový elektron stabilizovat.
- ❑ Reaktivní radikály označujeme jako “horké”, reagují rychle a nespecificky, s jakýmkoliv možným partnerem v reakční směsi.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



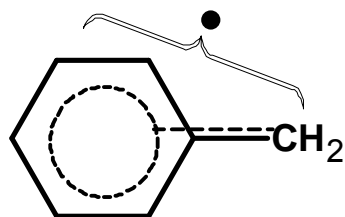
OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

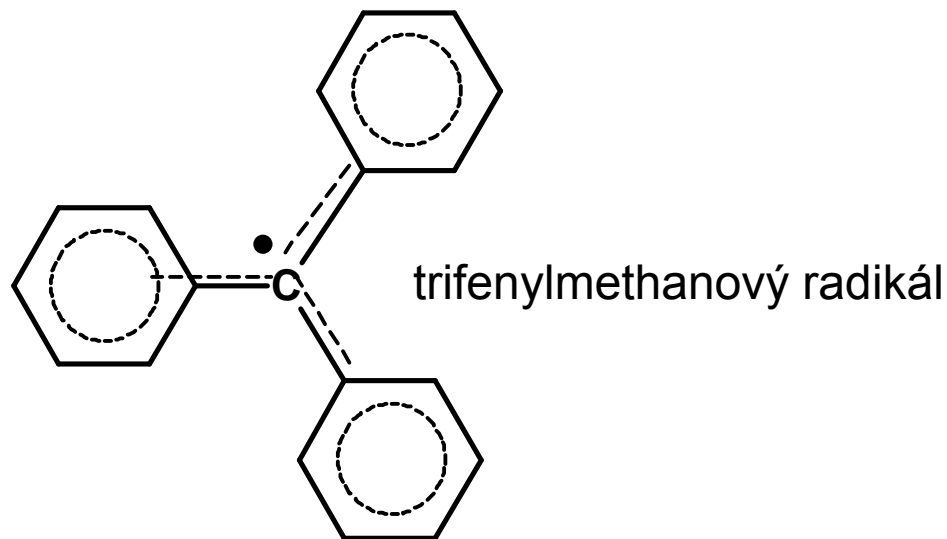
Mechanismus organické reakce

Radikálové reagenty

- ❑ Příklady reaktivních radikálů: $\cdot\text{CH}_3$, $\cdot\text{CH}_2\text{CH}_3$, $\cdot\text{C}_6\text{H}_5$ (fenylový), $\text{X}\cdot$ (X je halogen), $\text{HO}\cdot$, $\cdot\text{O}$
- ❑ Příklady stabilních radikálů:



benzylový radikál



Elektrofilní reagenty

- ❑ Jsou to reagenty s elektronovým deficitem.
- ❑ Mohou vznikat heterolytickým štěpením vazby, pak nesou kladný náboj, kationty.
- ❑ Mohou to být ale i Lewisovy kyseliny nebo polární molekuly s nerovnoměrně rozloženou elektronovou hustotou.
- ❑ Jejich reaktivita opět závisí na možnosti celého reagentu stabilizovat elektronový deficit, příp. kladný náboj.

Lewisova kyselina: Látka schopná akceptovat elektronový pár



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

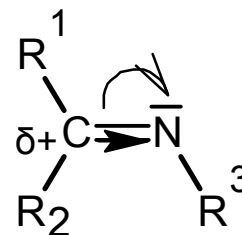
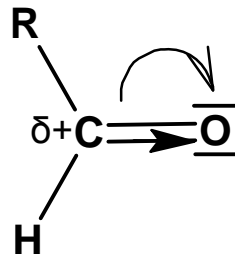
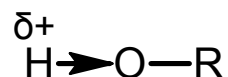
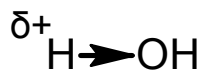
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Mechanismus organické reakce

Elektrofilní reagenty

Mezi elektrofilní reagenty patří např.:

- karboniové ionty: R_3C^+ , R_2CH^+ , CH_3^+
- karboxoniové ionty: $\text{-----} \rightarrow R-\overset{\overset{+}{\text{O}}}{\text{C}}\equiv\text{O}$
- kationty: H^+ , NO_2^+ , Cl^+
- Lewisovy kyseliny: BF_3 , $AlCl_3$, $FeBr_3$, $ZnCl_2$
- a také:



Nukleofilní reagenty

- ❑ Jsou to reagenty s elektronovým nadbytkem.
- ❑ Mohou vznikat heterolytickým štěpením vazby, pak nesou záporný náboj, anionty.
- ❑ Mohou to být ale i Lewisovy base nebo polární molekuly s nerovnoměrně rozloženou elektronovou hustotou.
- ❑ Jejich reaktivita opět závisí na možnosti celého reagentu stabilizovat elektronový deficit, příp. záporný náboj.
- ❑ U těchto reagentů rozlišujeme basicitu (vztah k protonu = iontu H^+) a nukleofilitu (vztah k ostatním reagentům).

Lewisova base: látka schopná poskytnout elektronový pár

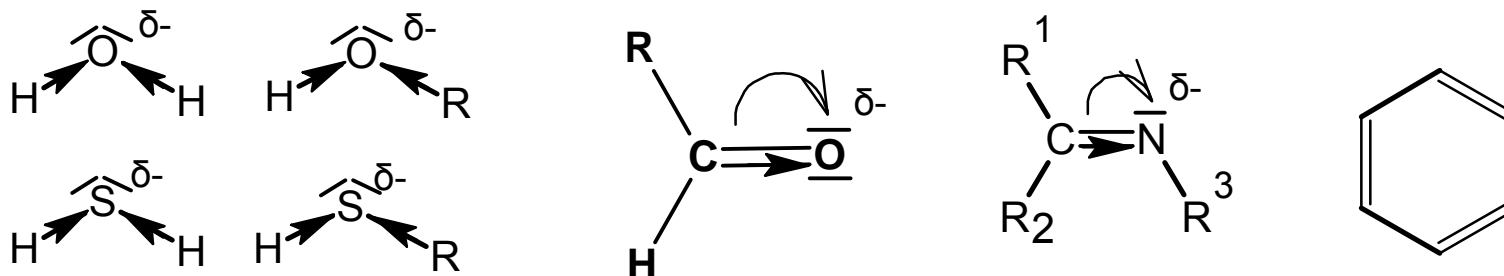
Nukleofilní reagenty

Mezi nukleofilní reagenty patří např.:

➤ anionty:

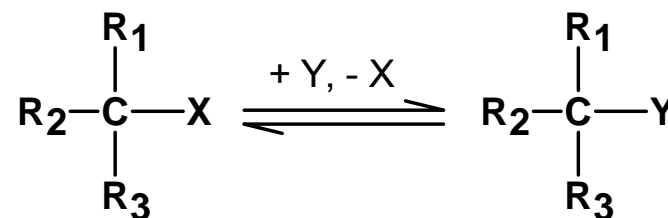
CH_3^- , H^- , H_2N^- , RO^- , HO^- , PhO^- , PhS^- (Ph je fenyl), X^- (X je halogen)

➤ elektrondonorní systémy:

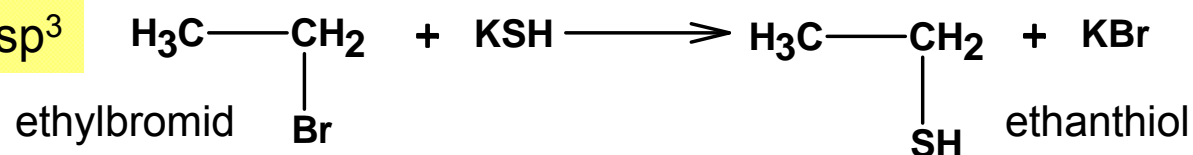


Substituce (S)

Při substituci dochází na substrátu k výměně (náhradě) atomů nebo skupin; počet hybridizovaných atomových orbitalů (HAO) reakčního centra se nemění (sp^3 - sp^3 , sp^2 - sp^2):

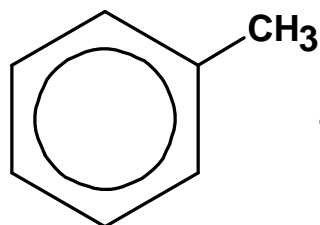


sp^3 - sp^3

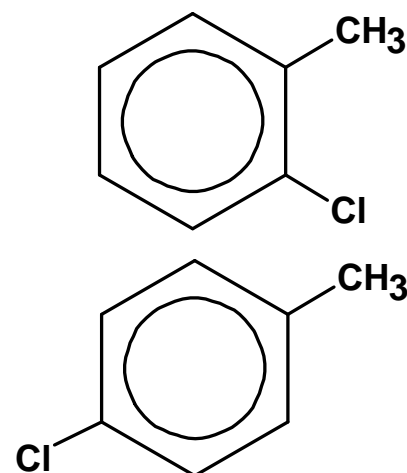


S_N

sp^2 - sp^2



toluen



2 - chlortoluen



S_E (Ar)

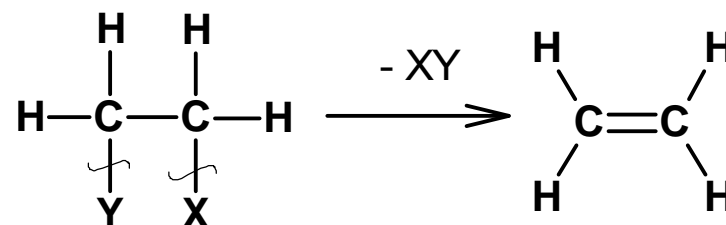
4 - chlortoluen

Eliminace (E)

Při eliminaci (odštěpení) se ze substrátu uvolňují atomy či skupiny; počet HAO reakčního centra se snižuje (sp^3-sp^2 , sp^2-sp):

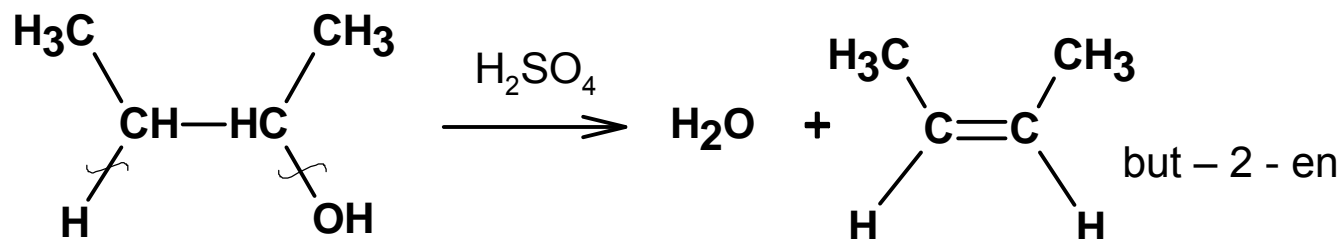
E

sp^3-sp^2



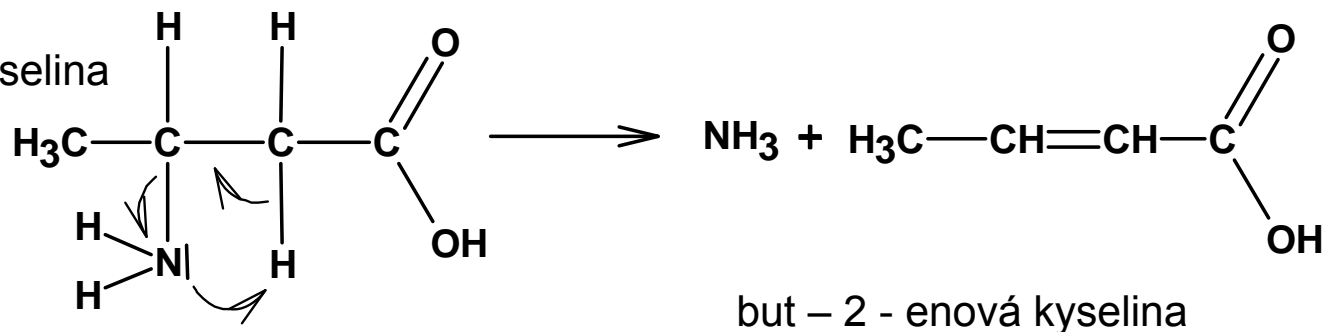
dehydratace

butan – 2 - ol



3 – aminobutanová kyselina

deaminace

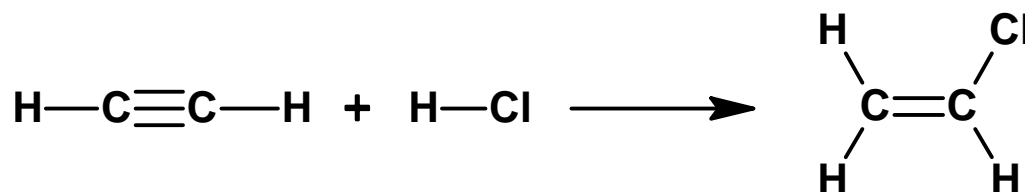
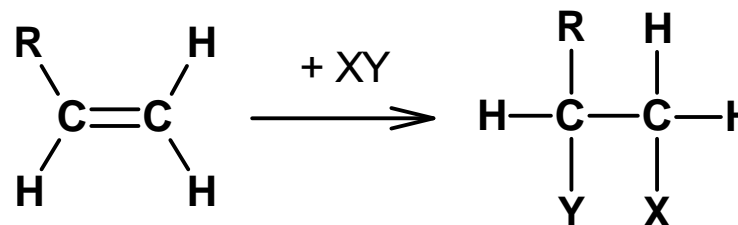


Adice (A)

Při adici (připojení) se na substrát připojují atomy nebo skupiny; počet HAO reakčního centra se zvyšuje (sp^2 - sp^3 , sp - sp^2):

A

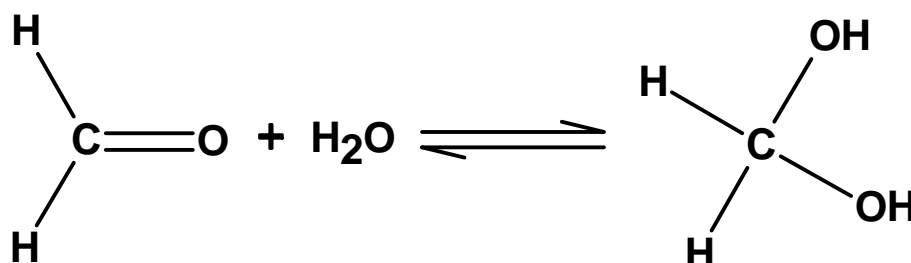
sp^2 - sp^3



vinylchlorid

A_E

A_E na nenasyceném uhlíku



A_N

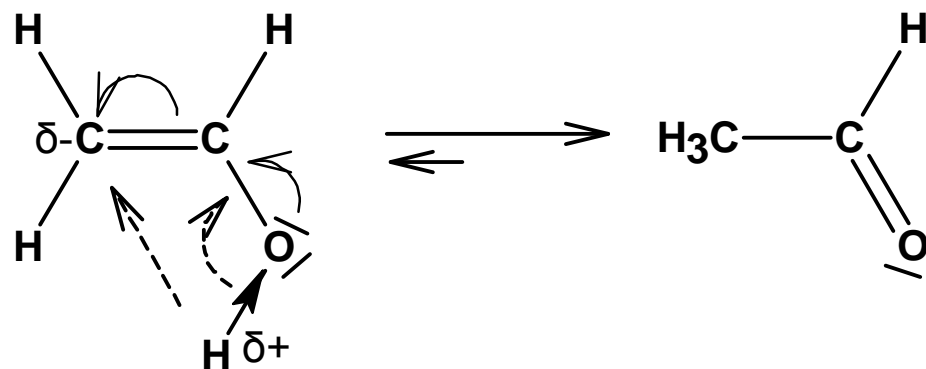
A_N na karbonylové skupině
produkt existuje jen ve vodném roztoku
(nelze jej izolovat)

Reverse (R)

Při reversi (přesmyku) dochází k migraci atomů nebo skupin z jedné části molekuly na jinou. Přitom se počet HAO reakčního centra může i nemusí měnit. Mezi přesmyky můžeme řadit i tautomerii:

oxo – enol tautomerie

R



vinylalkohol

acetaldehyd

Redoxní reakce – redukce a oxidace

- ❑ Redoxní reakce je založena na přenosu jednoho nebo více elektronů mezi substrátem a reagentem.
- ❑ U organických látek probíhá
 - aerobně – to znamená za přístupu kyslíku
 - anaerobně – tedy za nepřístupu kyslíku
- ❑ U organických látek úplnou aerobní oxidací vzniká vždy oxid uhličitý a voda

Poznámka: Redoxní reakce budou uváděny u příslušných skupin látek

Polyreakce

Polyreakcemi vznikají makromolekulární látky. Dle mechanismu rozlišujeme:

- ❑ Polymerace: výchozí látky musí obsahovat násobné vazby, reakce je velmi rychlá, vlastnosti produktu se obtížně regulují. Tyto makromolekulární látky nazýváme polymery.
- ❑ Polykondenzace: výchozí látky musí obsahovat alespoň dvě funkční skupiny (např. aminokyseliny, dikyseliny + dioly). Při reakci vzniká malá molekula, např. voda. Tyto makromolekulární látky nazýváme polykondenzáty.
- ❑ Polyadice: výchozí látky musí obsahovat alespoň dvě funkční skupiny (např. diisokyanáty + dioly). Při reakci nevzniká malá molekula, vzniká pouze produkt. Tyto makromolekulární látky nazýváme polyadukty.

Poznámka: Polyreakce budou uváděny u příslušných skupin látek

Využití



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Mechanismus organické reakce

19