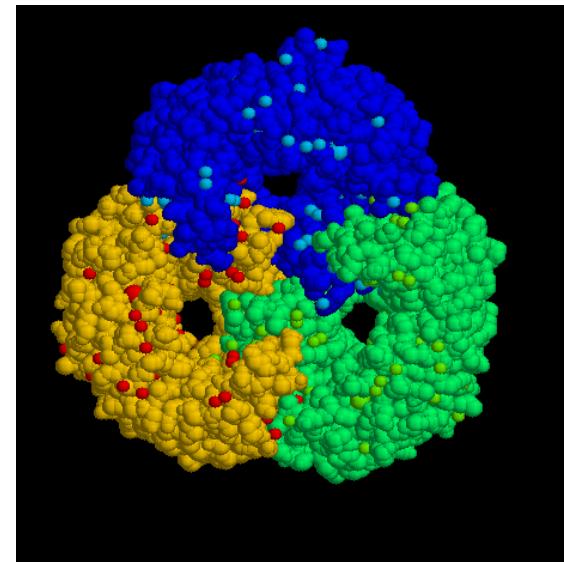


NBCM-010



Bioorganická chemie 2



Marek Procházka, FÚ UK

s použitím materiálů z:

D.L.Nelson, M.M.Cox: Lehninger Principles of Biochemistry, W. H. Freeman & Co.

Bioorganická chemie



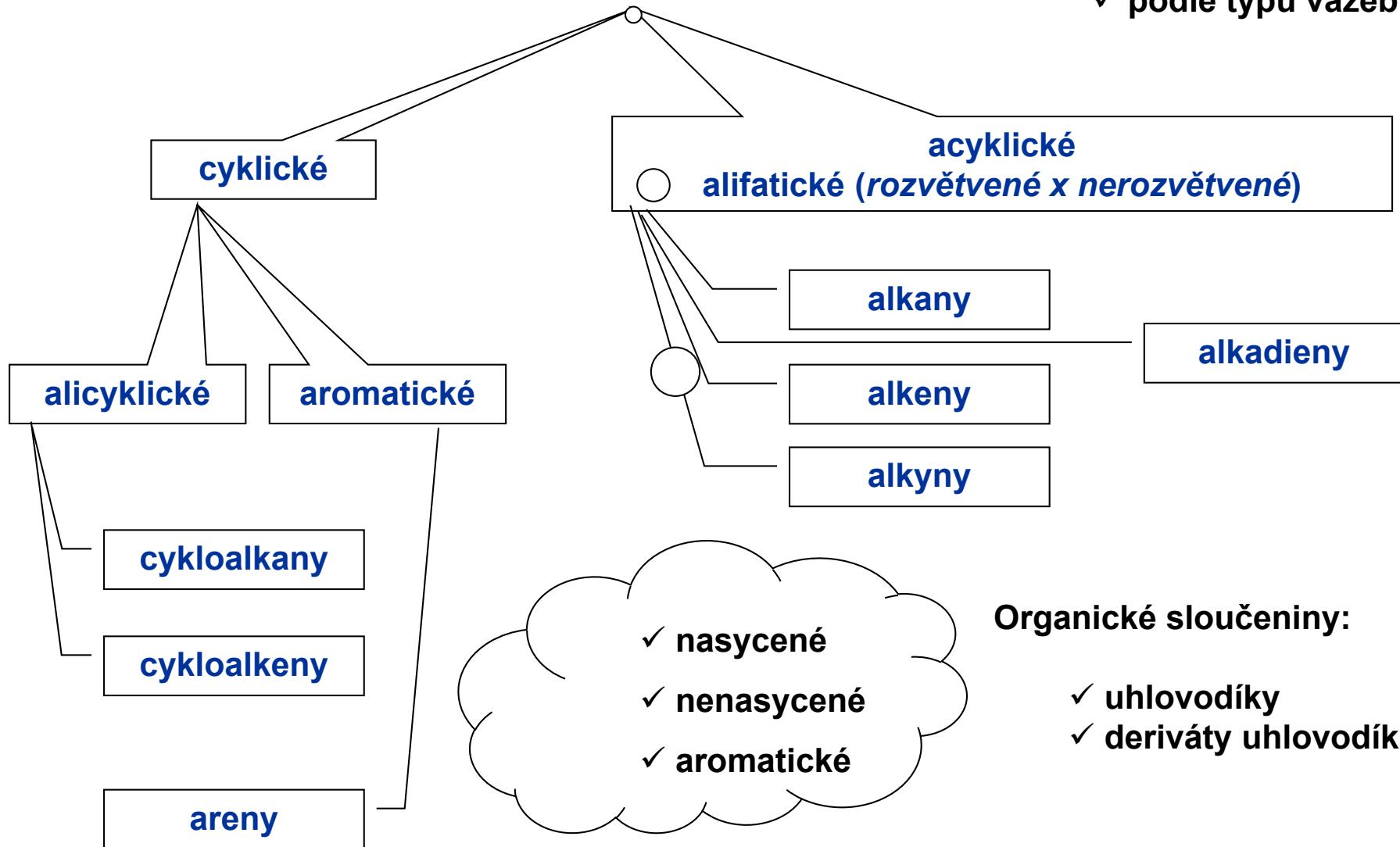
Plán přednášky:

- I. Uhlovodíky
- II. Deriváty uhlovodíků

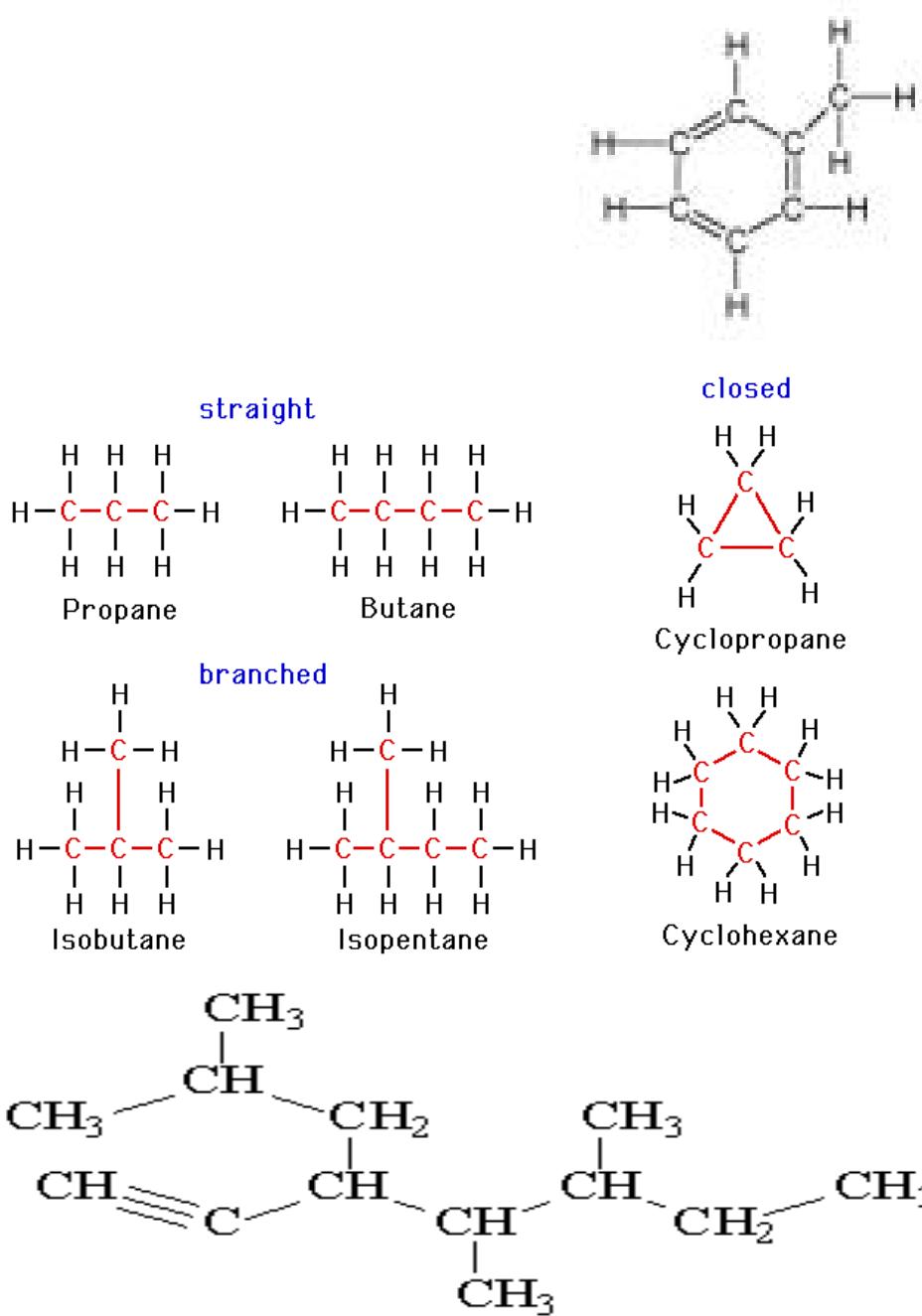
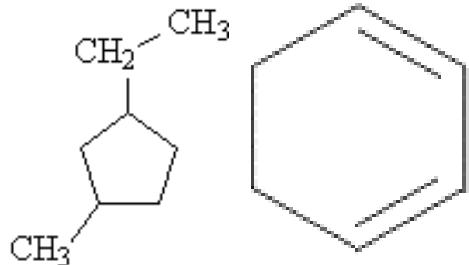
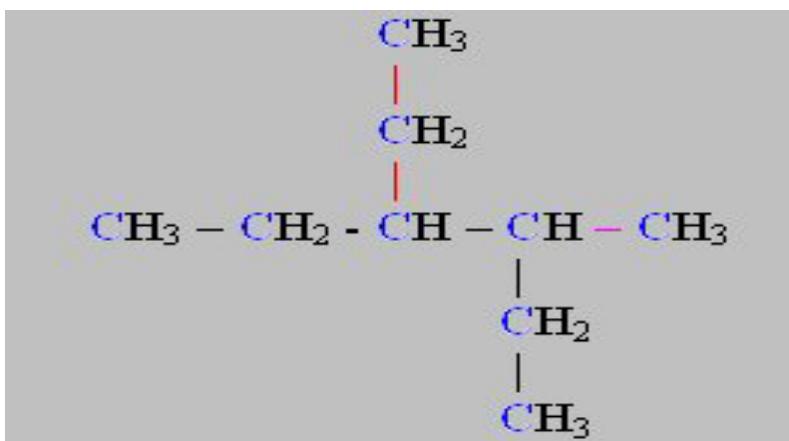
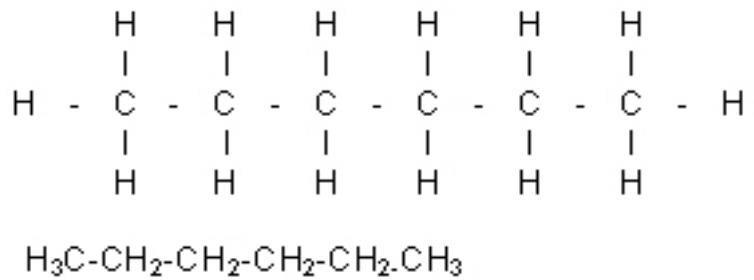
s použitím materiálů z:

D.L.Nelson, M.M.Cox: Lehninger Principles of Biochemistry, W. H. Freeman & Co.

Uhlíkové sloučeniny



Uhlovodíky – rozdělení



Alkany (C_nH_{2n+2} / -an / -yl)

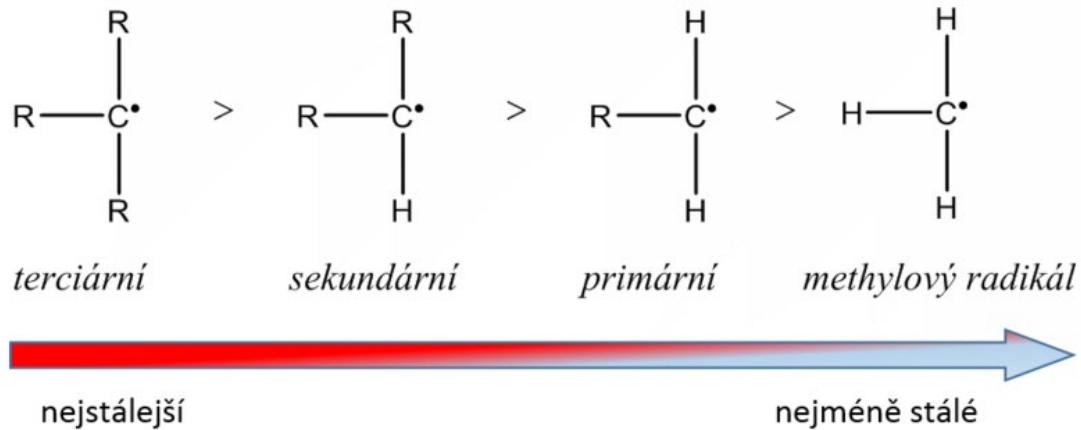
Univerzita

➤ parafiny

➤ názvosloví – homologická řada

➤ názvosloví (iso-, neo-, prim., sek., terc., kvart.)

[butyl, sek.butyl x isobutyl, terc.butyl]



1 – methan

2 – ethan

3 – propan

4 – butan

5 – pentan

6 – hexan

7 – heptan

8 – oktan

9 – nonan

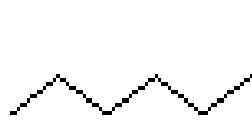
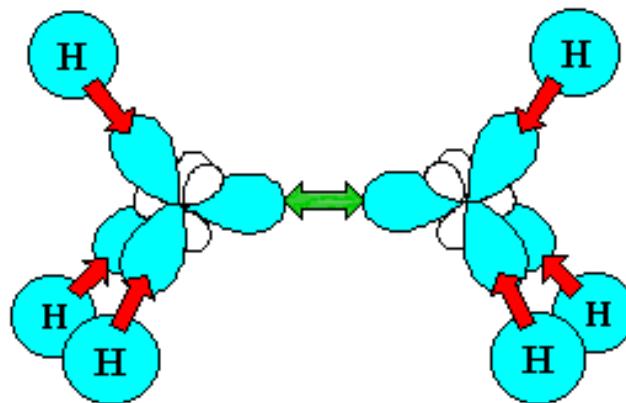
10 – dekan

Zbytky - methyl
- ethyl
- propyl
- isopropyl

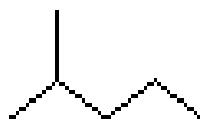
Unbox

Alkany

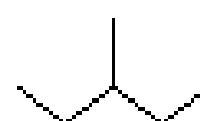
- vazby – hybridizace sp^3
- izomerie
- konformace



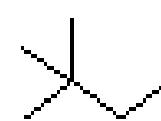
A



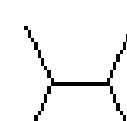
B



C



D

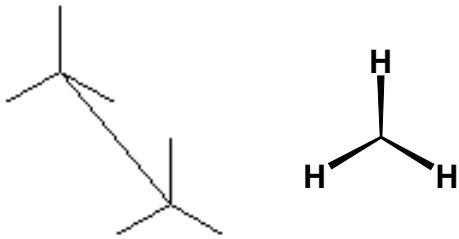


E

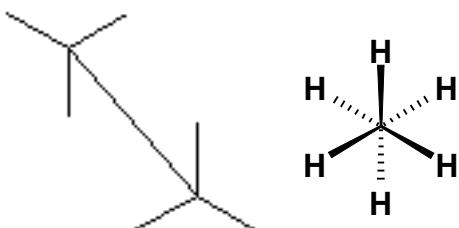
Izomery hexanu:

- B** 2-methylpentan
- C** 3-methylpentan
- D** 2,2-dimethylbutan
- E** 2,3-dimethylbutan

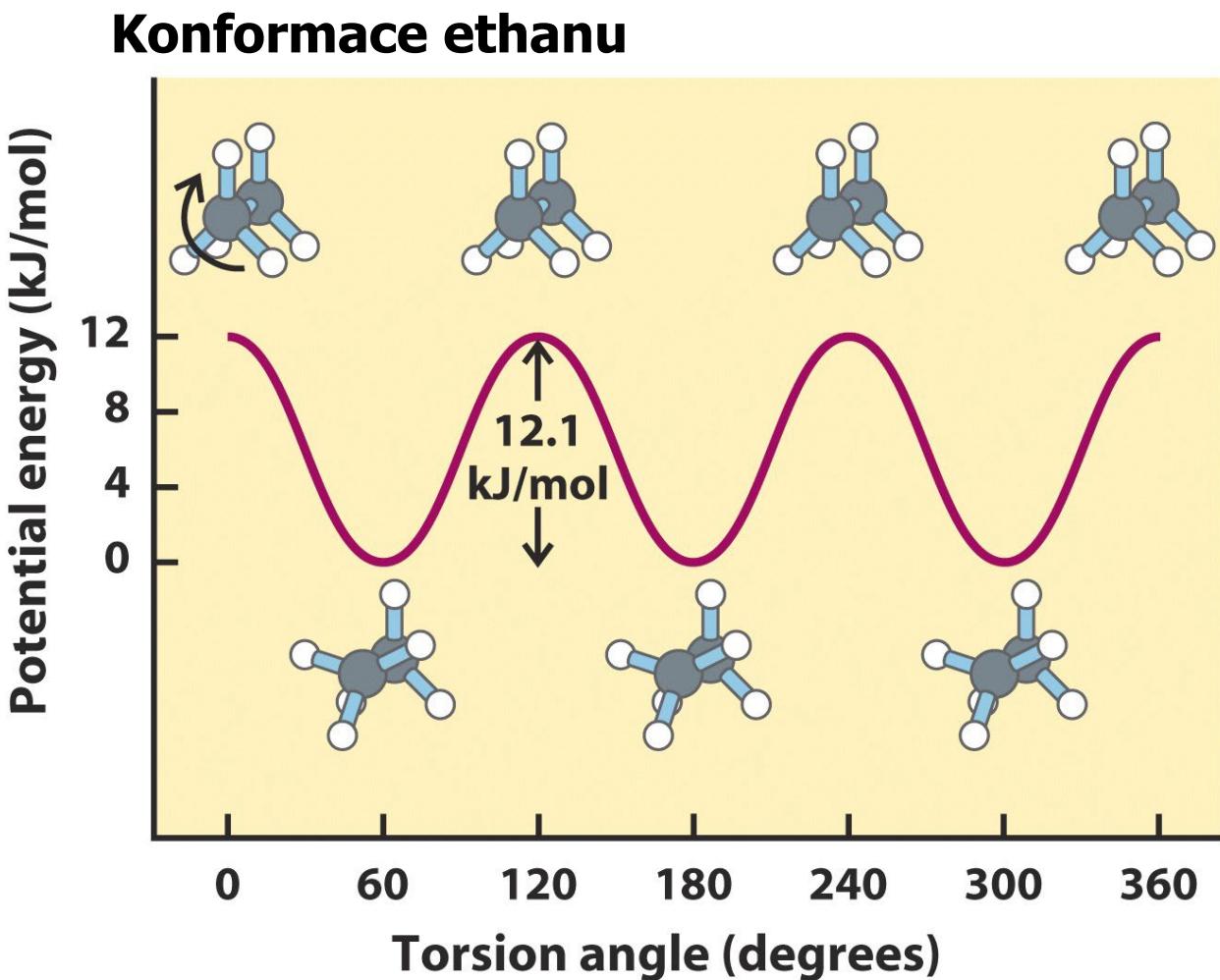
Alkany



Zákrytová
Syn-periplanární

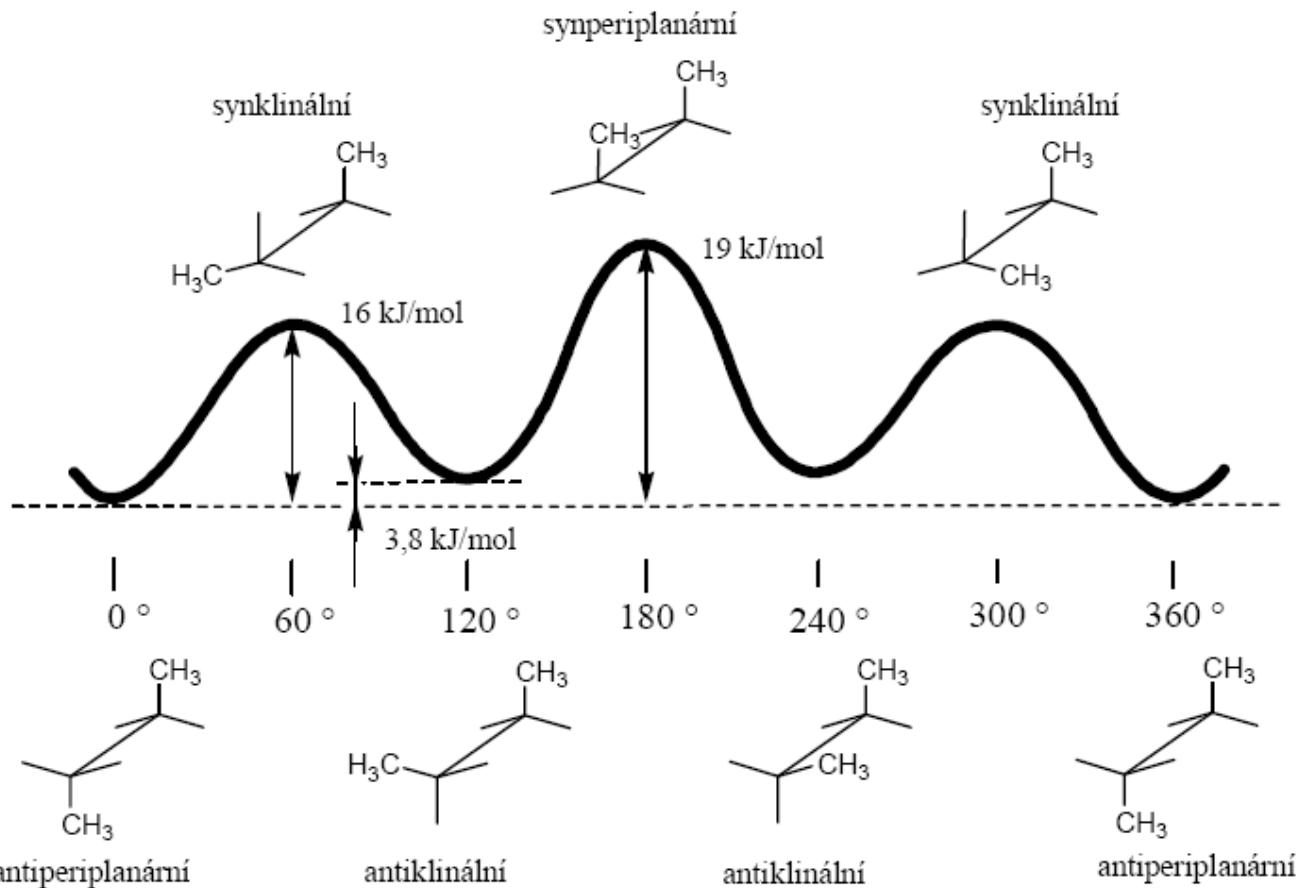


Nezákrytová
Anti-periplanární

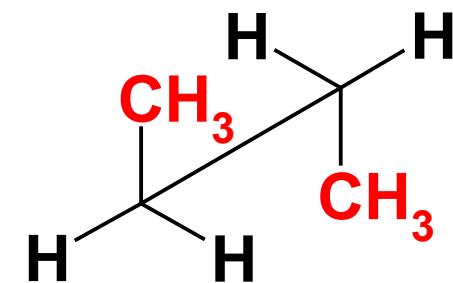


Alkany

Konformace butanu

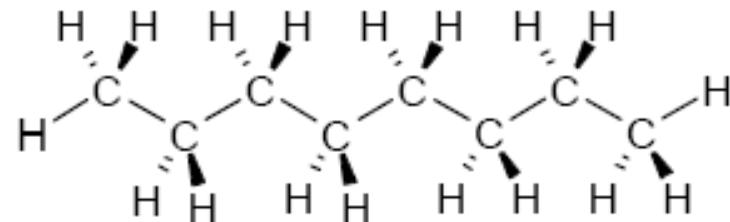


Nejstálejší
konformace
butanu

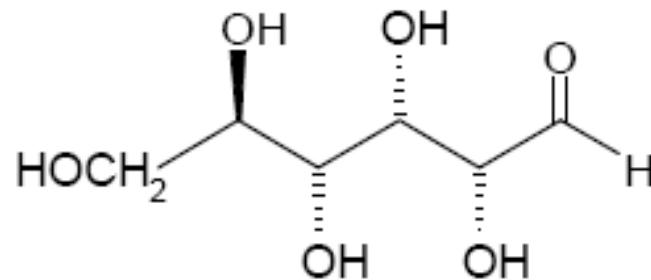


Alkany

Nejstálejší konformace dlouhých řetězců



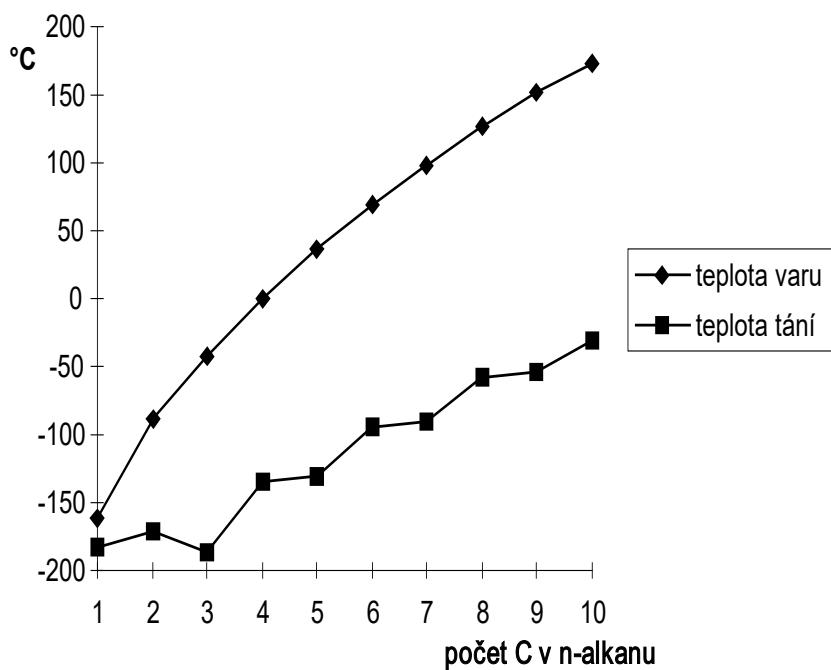
oktan, všechny vazby C-C jsou v *anti*-periplanárním uspořádání



D - glukosa

Alkany

- bod varu $T_B = a + bn$ (butan $T_B = 0^\circ\text{C}$, heptan $T_B = 100^\circ\text{C}$), na CH_2 $33,3^\circ\text{C}$, na $=\text{CH}$ odečíst 10°C
- bod tání T_M ($n \uparrow$ symetrie $\uparrow \Rightarrow T_M \uparrow$ rozvětvené nižší)
- homolog. řada – plyn (C4), kapalina (C15), více - pevná látka **BEZBARVÉ**
- rozpustnost – nepolární charakter, plavou na vodě



Methan

- ✓ 60-99% zemní plyn, 25-30% svítiplyn
- ✓ důležitá surovina pro přípravu chem. sloučenin

Ethan, propan, butan, isobutan (zemní plyn)

- ✓ ropa, zemní plyn

Pentany a hexany

- ✓ petrolether – laboratorní rozpouštědlo

Benzin

- ✓ směs uhlovodíků – C₆ až C₉

Alkany

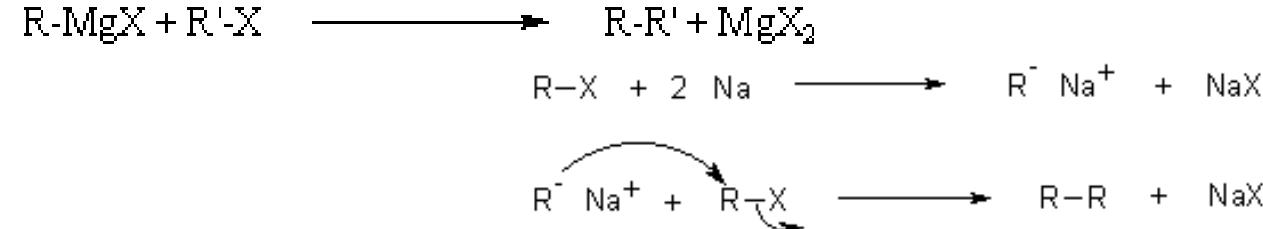
Příprava:

➤ katalytická hydrogenace alkenů (A_R)

➤ redukce kyslíkatých látek (S_N)

➤ Grignardova reakce $R\text{-MgX} + R'\text{-X} \longrightarrow R\text{-R}' + MgX_2$

➤ Wurtzova reakce



Chemické reakce (typicky radikálově, O_2 , Cl_2)

➤ chlorace, sulfochlorace (S_R)



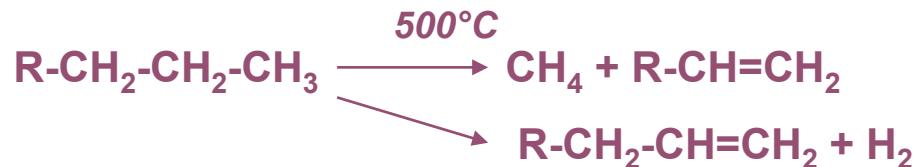
➤ oxidace



➤ katalytická oxidace



➤ krakování (E_R , výroba benzinu)



Cykloalkany (C_nH_{2n})

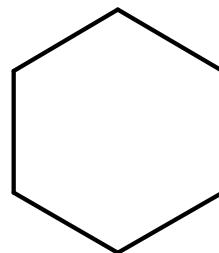
➤ cyklopropan (rovinný)

- plyn částečně rozpustný ve vodě
- výbušný
- narkotické účinky



➤ cyklohexan

- zdroj: ropa, hydrogenace benzenu
- hořlavá kapalina $T_B=181^\circ C$



- rozpouštědlo, surovina pro výrobu cyklohexanolu, cyklohexanonu a cyklohexylaminu

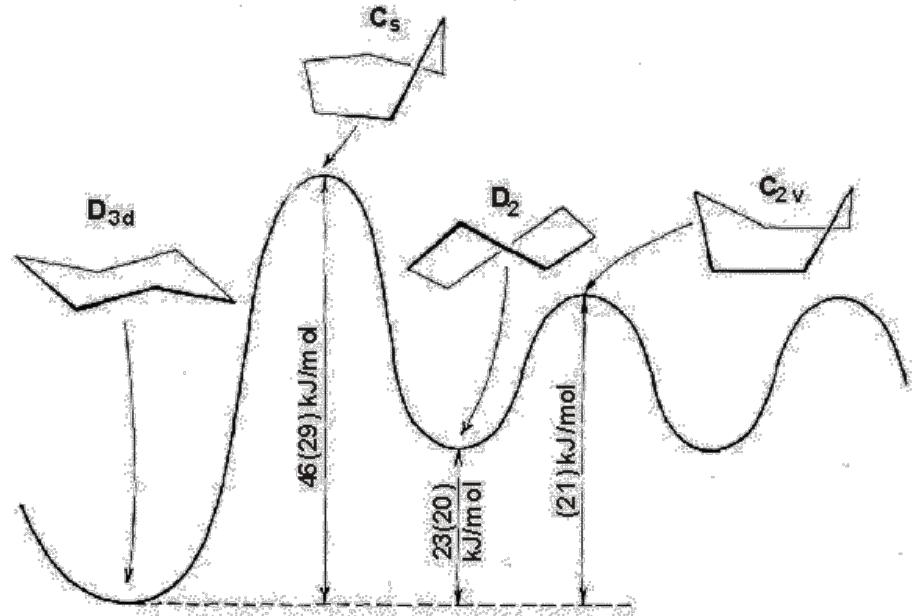
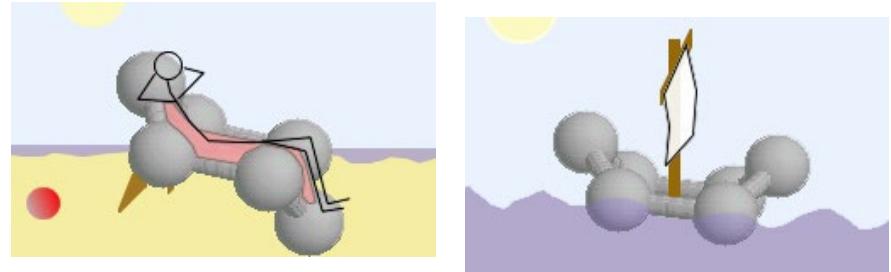
Cykloalkany

CYKLOHEXAN

konformace –

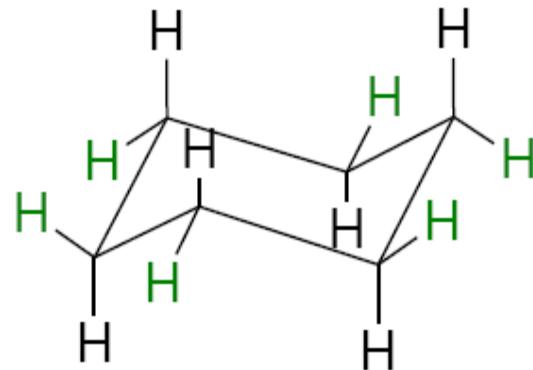
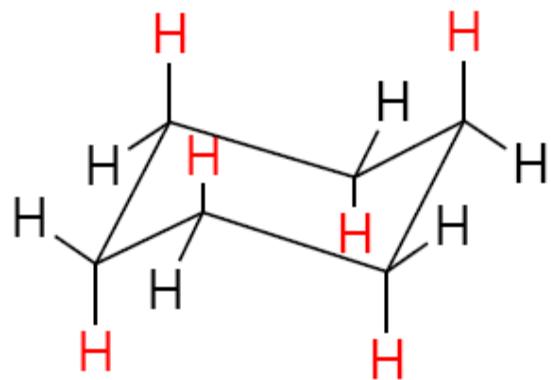
Židličková

Vaničková



Cykloalkany

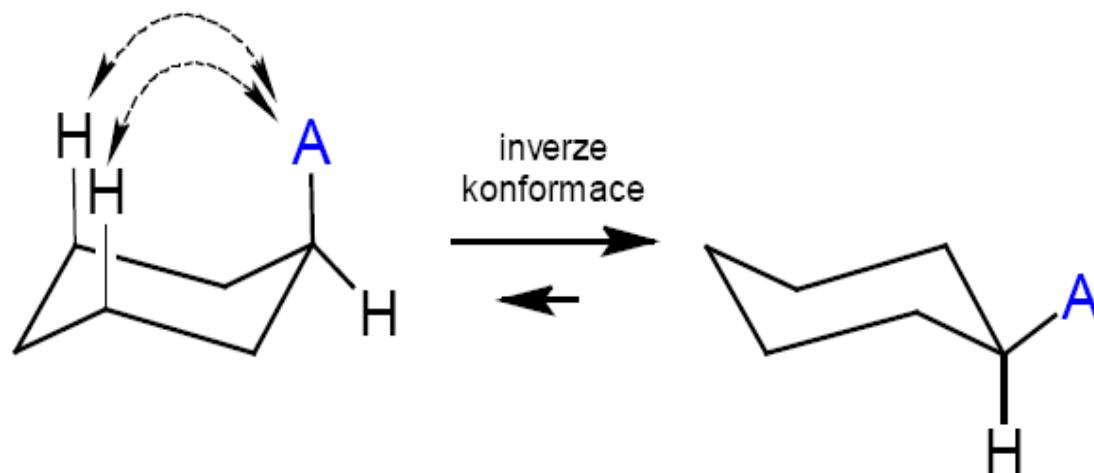
- Axiální vazby jsou kolmé k rovinám tvořeným uhlíky
- Ekvatoriální vazby jsou ca 20% nad/pod rovinou tvořenou uhlíky



Cykloalkany

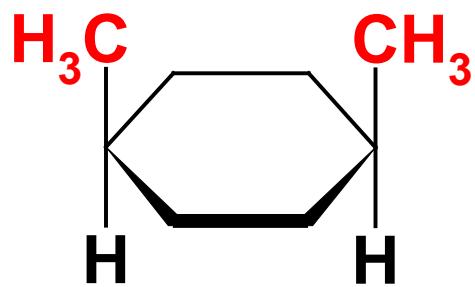
konformace – židličková, 1 substituent (methyl), vždy v ekvatoriální poloze

Ve většině případů je **nejstabilnější konformace** ta, ve které se substituent vyskytuje v **ekvatoriální poloze** (protože nevytváří 1,3-diaxiální interakce s vodíky).

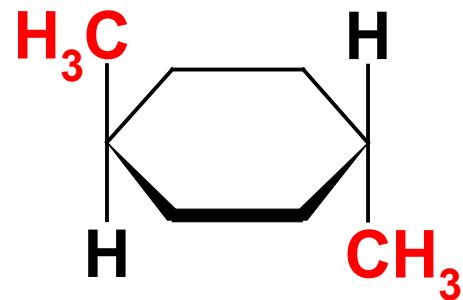


Cykloalkany

cis-trans izomerie na kruhu



cis-1,4-dimethylcyklohexan

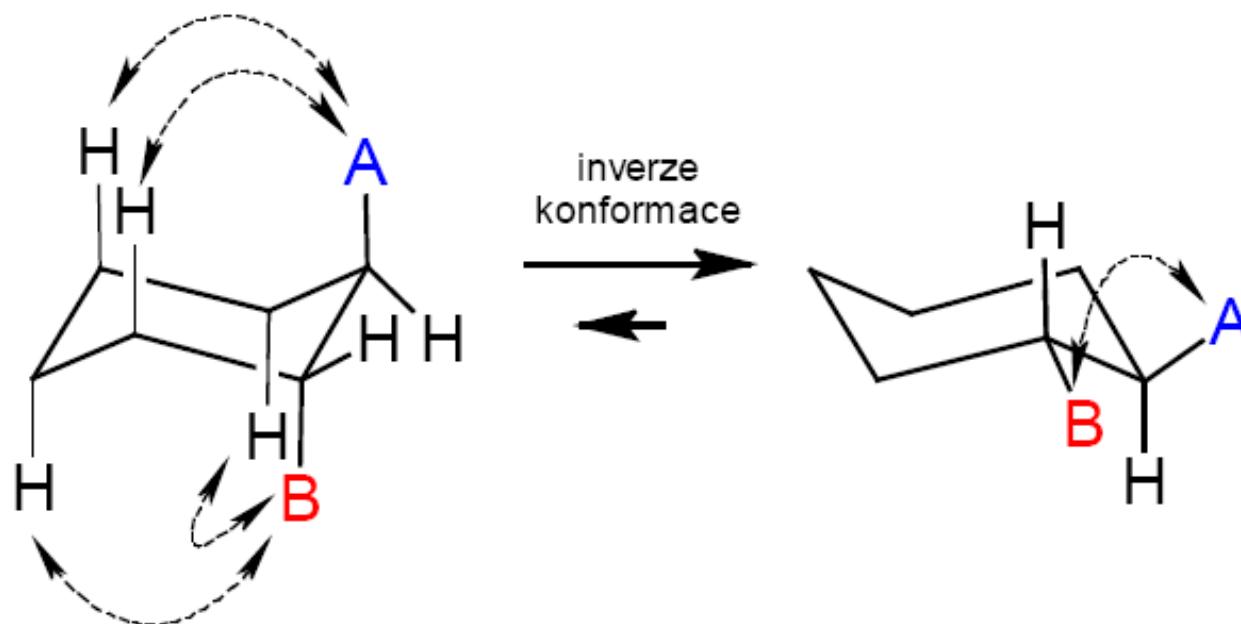


trans-1,4-dimethylcyklohexan

Cykloalkany

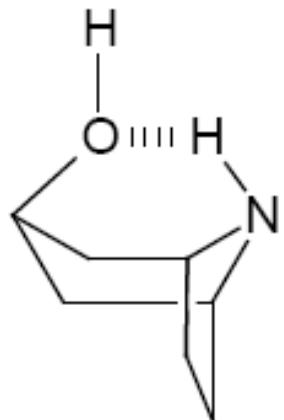
Nejstálejší konformace – židličková, izomerie *trans*
2 substituenty vždy v ekvatoriální poloze

dva rozdílné substituenty v poloze 1,2-*trans*

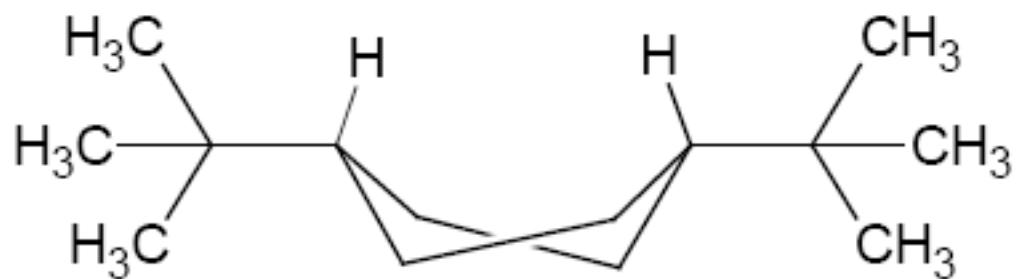


Cykloalkany

Nejstálejší konformace – nežidličkové



pseudonortropin



cis-1,4-di-*tert*-butylcyclohexane

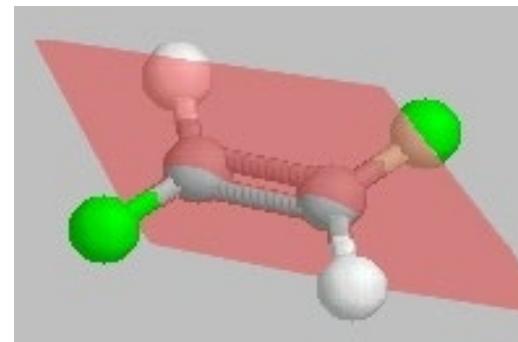
Alkeny (C_nH_{2n} / -en / -enyl, yliden)

utváry

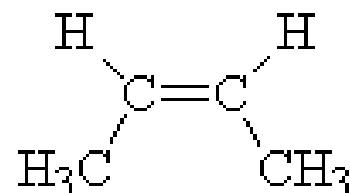
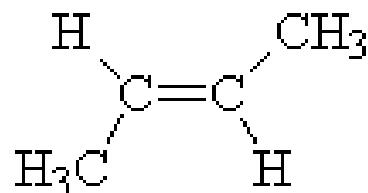
- olefiny
- názvosloví – homologická řada
- názvosloví

- ✓ vinyl (ethenyl) $CH_2=CH-$
- ✓ allyl (2-propenyl) $CH_2=CH-CH_2-$
- ✓ ethenyliden $CH_2=C=$
- ✓ ethyliden $CH_3-CH=$
- ✓ ethylen – CH_2-CH_2- vinylen – $CH=CH-$

- vazby – hybridizace sp^2
- dvojná vazba = 1x σ -vazba + 1x π -vazba
- izomerie



trans-buten

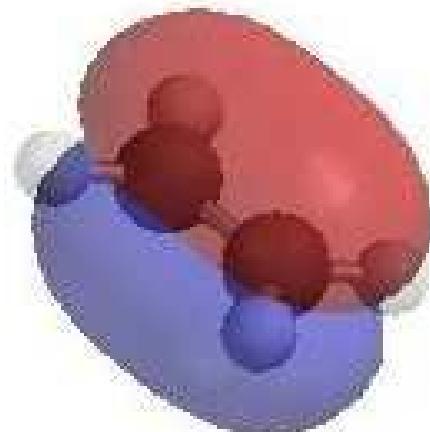


cis-buten

Alkeny

- bod varu $T_B < T_B$ (alkanů) (na = odečíst asi 10°C)
- z hlediska fyzikálních vlastností velmi podobné alkanům
- homolog. řada – plyn, kapalina, pevná látka
- rozpustnost podobná jako u alkanů

Ethen (ethylen)



✓ bezbarvý plyn

✓ vznik – krakování (pyrolýza) ropy

✓ levná chemická surovina k výrobě plastů, ethanolu, atd.

✓ polyethylen

Propen (propylen)

✓ podobně jako ethylen

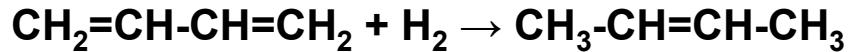
✓ polypropylen

Polyeny

univerzita

dvojné vazby:

- kumulované (1,2-...) $\text{C}=\text{C}=\text{C}-\text{C}-\text{C}$, $T_B=45^\circ\text{C}$
 - konjugované (1,3-...) $\text{C}=\text{C}-\text{C}=\text{C}-\text{C}$, $T_B=43^\circ\text{C}$
 - izolované (1,4-...) $\text{C}=\text{C}-\text{C}-\text{C}=\text{C}$, $T_B=26^\circ\text{C}$
- 1-4 adice (delokalizace π elektronů – rezonanční struktury)



- delokalizací obecně rozumíme souvislé rozložení pohyblivých elektronů π (nikoli elektronů σ) a nevazebných elektronových párů. Tyto elektrony se mohou po řetězci volně pohybovat. Vysoká stabilita.
- rezonanční struktury: popis struktury dvěma nebo více vzorci, ale žádný nevystihuje skutečnou strukturu.

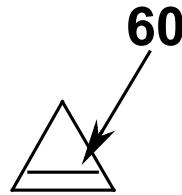
➤ důležité sloučeniny:

- ✓ 1,3-butadien (\rightarrow polymeruje se na syntetický kaučuk)
- ✓ 2-methyl-1,3-butadien (isopren \rightarrow polyisopren – přírodní kaučuk)
- ✓ terpenoidy – vitamin A

Cykloalkeny (C_nH_{2n-2})

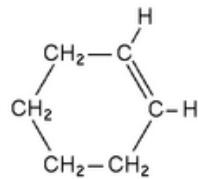
➤ cyklopropen

- nestálý plyn („=“ & „cyklus“)
- výbušný za pokojové teploty
- narkotické účinky



➤ cyklohexen

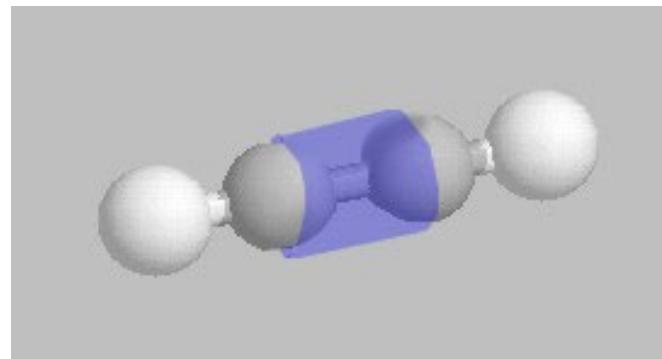
- nejběžnější cykloalken



alkyny

Alkyny alias alkiny (C_nH_{2n-2} / -yn / -ynyl)

- acetyleny
- názvosloví – homologická řada
- názvosloví
 - ✓ acetylen (ethyn)
 - ✓ ethynyl
- vazby – hybridizace sp
- trojná vazba = 1x σ -vazba + 2x π -vazba
- izomerie ne



Alkyny

- bod varu: $T_B(-yn) \geq T_B(-an) > T_B(-en)$
- kyselost: $\text{CH}\equiv\text{CH} > \text{CH}_2=\text{CH}_2 > \text{CH}_3-\text{CH}_3$
- homolog. řada – plyn, kapalina, pevná látka
- rozpustnost větší jako u alkanů a alkenů

- důkaz přítomnosti nenasycené vazby:
 - ✓ reakce s HBr (odbarvování červenohnědého roztoku během reakce)
 - ✓ KMnO_4 (odbarvování hnědofialového roztoku – redukce na bezbarvé Mn^{2+} , vznik R-OH, R-CHO, R-COOH ...)

Ethyn (acetylen)

- ✓ bezbarvý plyn, explozivní směs se vzduchem či stlačením za norm.teploty
- ✓ tvoří výbušné acetylidy- **Acetylid měďný** v roznětkách
- ✓ výroba – tavení koksu – karbid (acetylid vápenatý) – rozklad vodou
- ✓ výroba – pyrolýza methanu
- ✓ surovina pro výrobu: chlorovaných uhlovodíků, vinylchloridu, vinylacetátu, 1,3-butadienu, kyseliny akrylové a jejích derivátů

Alkyny

Příprava (eliminace):

- z karbidu vápníku $\text{CaC}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$
- z acetylidů kovů $\text{NaCCH} + \text{RBr}$
- dehalogenace $\text{RCHBr}-\text{CHBrR} + 2\text{KOH}$

Chemické reakce (A_R , A_E , A_N – obnažení C-jádra díky přítomnosti „ \equiv “):

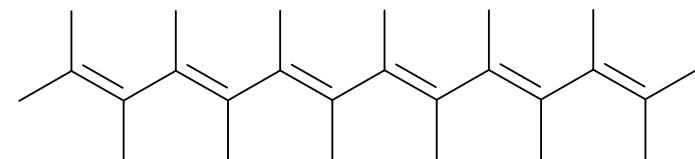
- hydrohalogenace (A_E)
- hydrogenace (Pt, A_R)
- hydratace (A_N)
- polymerace:
$$\text{HC}\equiv\text{CH} + \text{HC}\equiv\text{CH} \xrightarrow{\text{CuCl}} \text{HC}\equiv\text{C}-\text{CH}=\text{CH}_2$$

vinylacetylen

$+ \text{HC}\equiv\text{CH} \rightarrow$ benzen

$+ \text{HCl} \rightarrow$ chloropren $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{CCl}=\text{CH}_2 \rightarrow$ chloroprenový kaučuk

$\text{HC}\equiv\text{CH} + \text{HCl} \rightarrow$ vinylchlorid $\text{CH}_2=\text{CH}-\text{Cl} \rightarrow -[\text{CH}_2-\text{CH}-\text{Cl}]-$ (PVC)

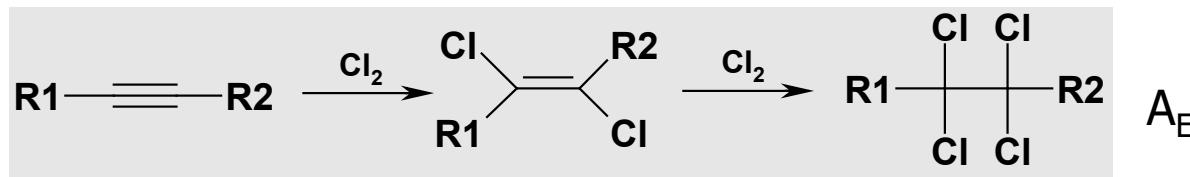
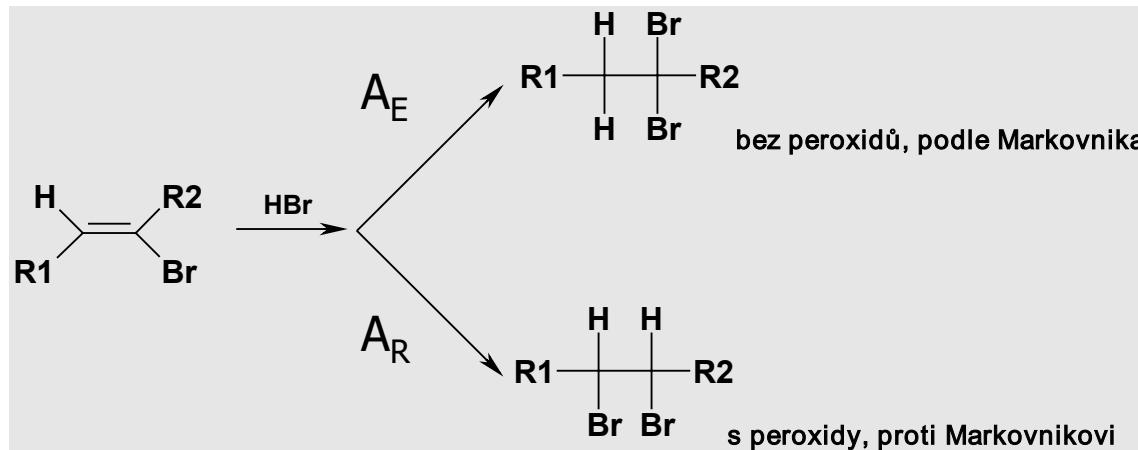
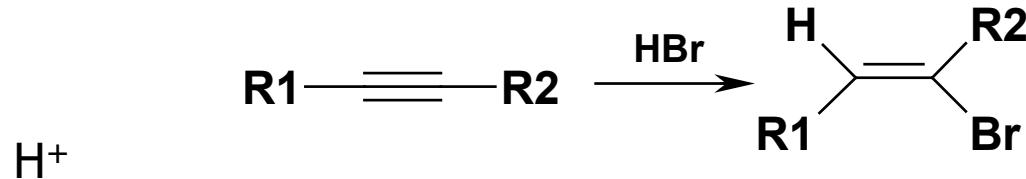


Elektricky vodivé polymery

- kyselost (+vznik acetylidů) reakcí se silnými zásadami (NaOH)

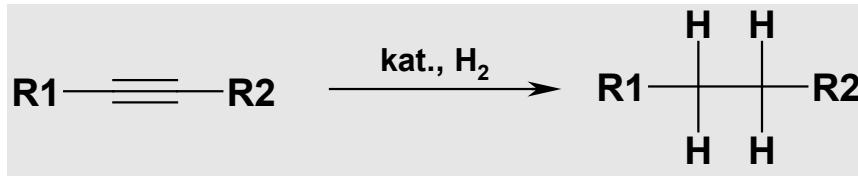


Hydrohalogenace (A_E)



Hydrogenace (A_R)

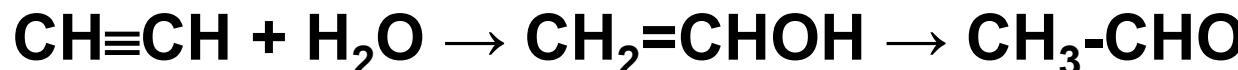
$\text{H}\cdot$



použitím vhodného katalyzátoru lze reakci zastavit ve fázi alkenu
lze tak připravit cis-alkeny (cis-adice)

Hydratace (A_N)

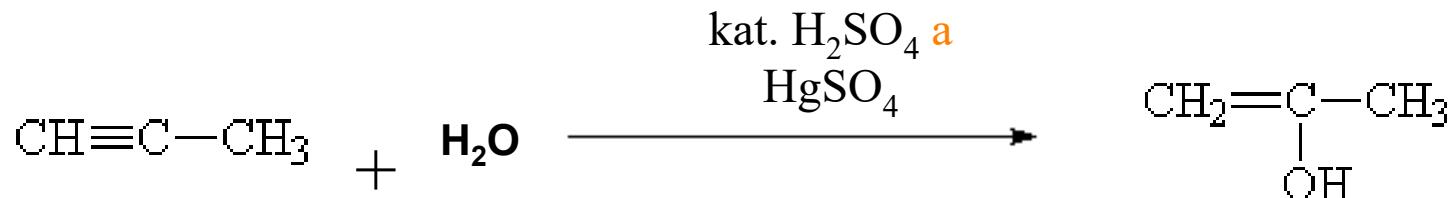
přesmyk



(průmyslová výroba)

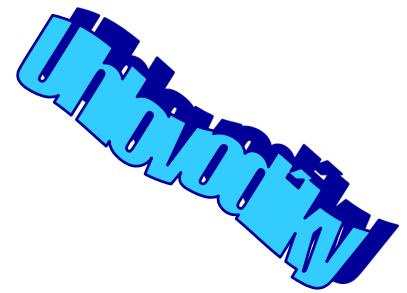


u nesymetrických platí Markovníkovo pravidlo



stálejší keto sloučenina (aceton)

Názvosloví



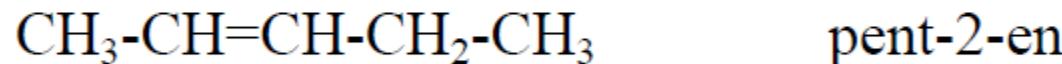
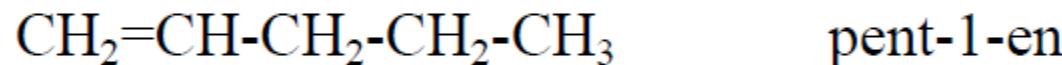
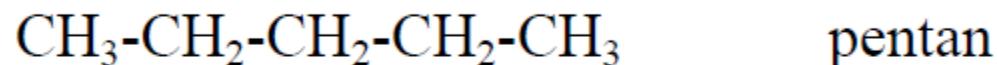
<https://och.vscht.cz/>

<http://organika.gfxs.cz>

1. Určí se hlavní řetězec, u nasycených uhlovodíků je nejdelší a u nenasycených obsahuje maximum násobných vazeb
2. Očíslují se uhlíkové atomy tak, aby 1/násobné vazby a 2/rozvětvení měly co nejmenší čísla
3. Určí se názvy uhlovodíkových zbytků, přiřadí násobící předpony a seřadí se podle abecedy před název hlavního řetězce
4. Mezi číslo a slovo se dává pomlčka, mezi čísla čárka, poslední zbytek se neodděluje pomlčkou

Číslování řetězců

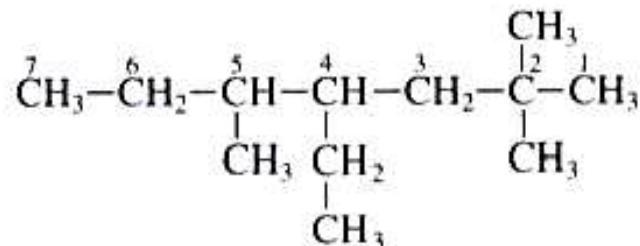
násobné vazby mají co nejmenší číslo
poloha násobné vazby před koncovkou



dvojná menší číslo než trojná

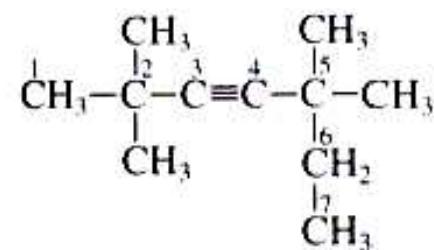


a)

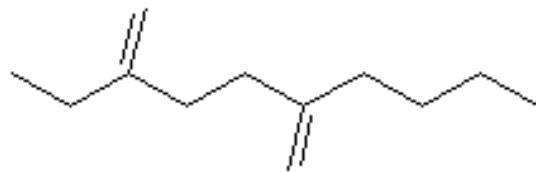


1. V hlavním řetězci je 7 atomů uhlíku a pouze jednoduché vazby → heptan.
 2. $-\text{CH}_3$, methyl (celkem tři, dva na druhém a jeden na pátém atomu uhlíku).
 $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$, ethyl (jeden na čtvrtém atomu uhlíku).
 3. **4-ethyl-2,2,5-trimethylheptan**

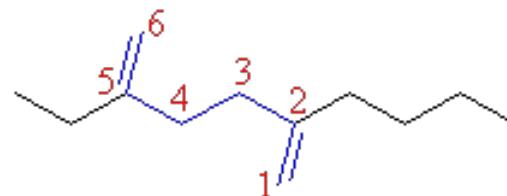
b)



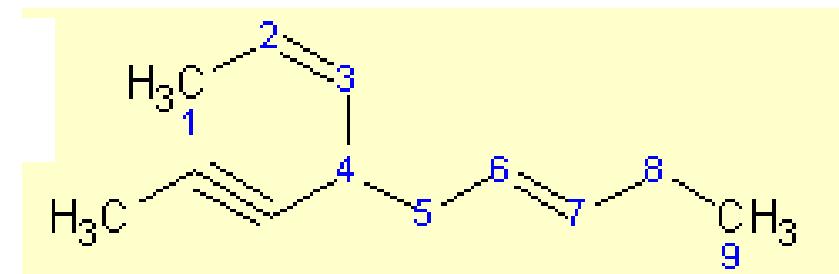
1. V hlavním řetězci je 7 atomů uhlíku a jedna trojná vazba vycházející z třetího atomu uhlíku, ostatní vazby jsou jednoduché → hepta-3-yn.
 2. $-\text{CH}_3$, methyl (celkem čtyři, dva na druhém a dva na pátém atomu uhlíku).
 3. **2,2,5,5-tetramethylhepta-3-yn**



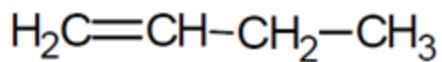
2-butyl-5-ethylhexa-1,5-dien



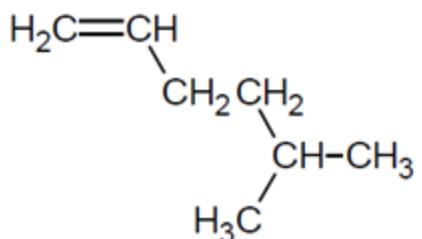
V případě, že se dvojná nebo trojná vazba vyskytuje v postranním řetězci, uvádíme samozřejmě tuto skutečnost do názvu substituentu, který vhodným způsobem uzavřeme do závorky. Jedničku má uhlík spojený s hlavním řetězcem, název substituentu ukončujeme příponou -yl).



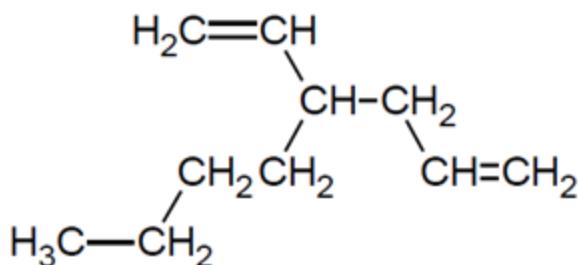
4-(prop-2-ynyl)nona-2,6-dien



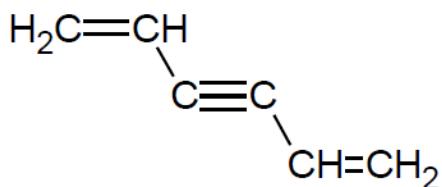
but-1-en



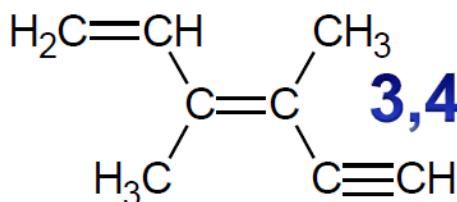
5-methylhex-1-en



3-butylhexa-1,5-dien



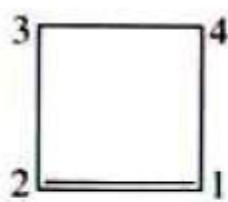
hexa-1,5-dien-3-yn



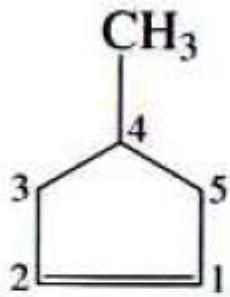
3,4-dimethylhexa-1,3-dien-5-yn

hlavní řetězec je řetězec cyklu
předpona cyklo-
násobné vazby co nejnižší čísla
rozvětvení co nejnižší čísla

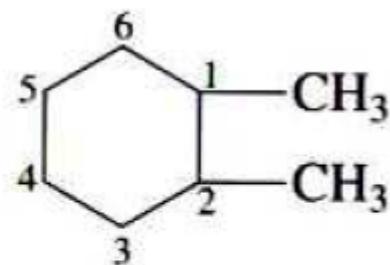
Příklady:



cyklobuten



4-methylcyklopenten

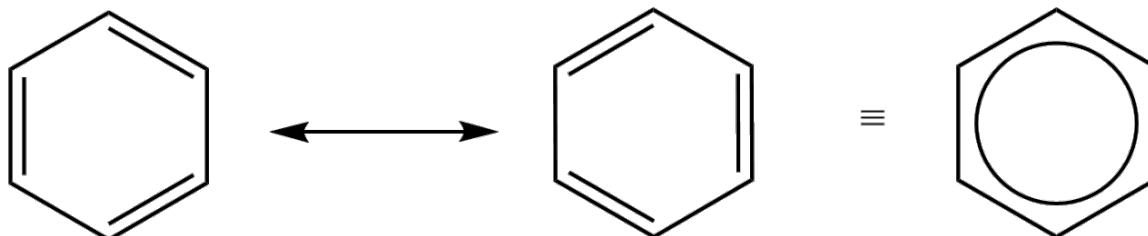


1,2- dimethylcyklohexan

Univerzita

Areny (aryly)

- cyklické sloučeniny s konjugovaným systémem dvojních vazeb
- benzenoidy (benzen x 1,3,5-cyklohexatrien)
- aromatický charakter (Hückelova podmínka)
 - ✓ planární kruh (všechny atomy sp²),
 - ✓ $4n+2 \pi$ -elektronů ($n=0, 1, 2, 3 \dots$)
 - ✓ konjugovaný systém π -elektronů

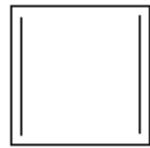


rezonanční struktury
benzenu

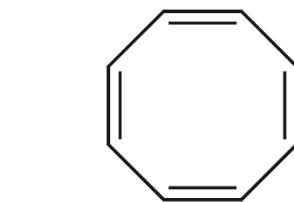
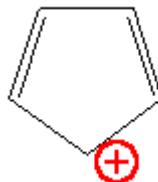
skutečný stav

BENZEN
6 π elektronů,
je planární
je aromatický

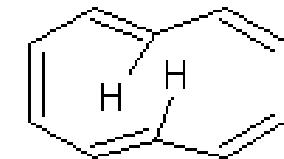
Areny



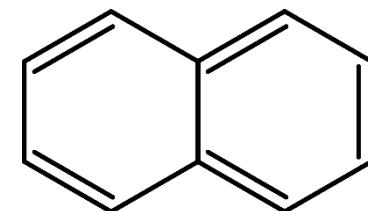
4π elektronů
není aromatický



8π elektronů
není aromatický



10π elektronů,
není planární
není aromatický

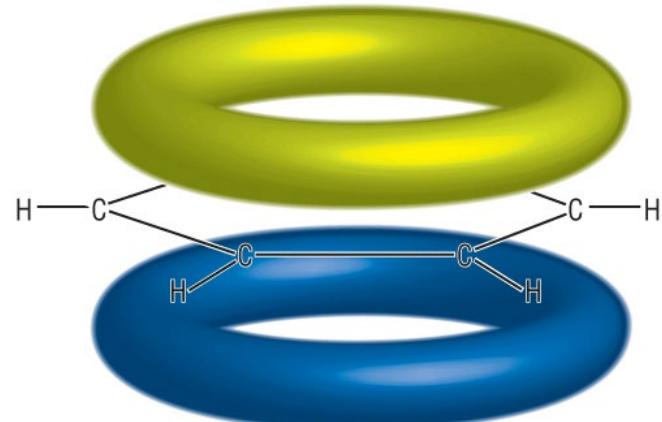
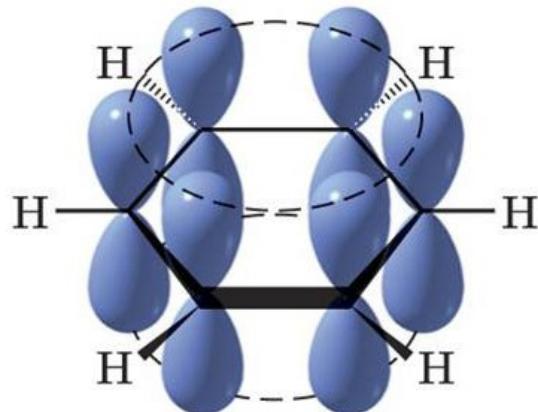


10π elektronů,
je planární
je aromatický

unibond

Benzen

- ✓ Izoloval Faraday (1825)
- ✓ popsal (Loschmidt 1861, Kekulé 1865)
- ✓ všechny vazby C–C a C–H (12 σ -vazeb) leží v rovině a svírají úhel 120°. Jeden elektron je umístěn v nehybridizovaném 2p orbitalu kolmém na rovinu kruhu. Překryvem těchto 6 nehybridizovaných orbitalů p vzniká π -vazba, která je rovnoměrně sdílena s oběma sousedními rovnocennými 2p orbitaly: π -elektrony jsou delokalizovány nad a pod rovinou kruhu (σ -vazeb) po celé molekule.
- ✓ Delokalizační energie benzenu je 151 kJ/mol.



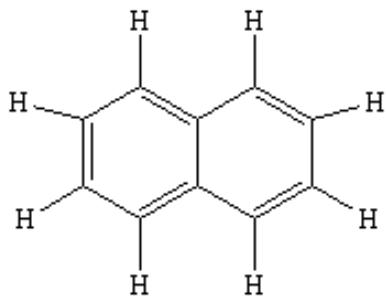
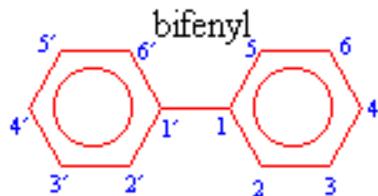
➤ názvosloví – triviální:

Areny

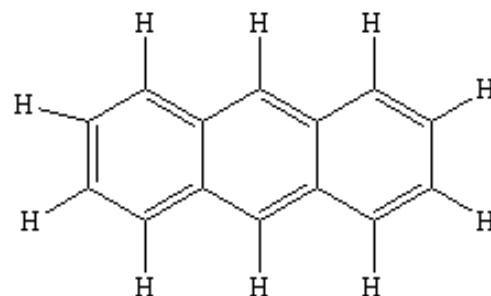
✓ benzen

✓ naftalen

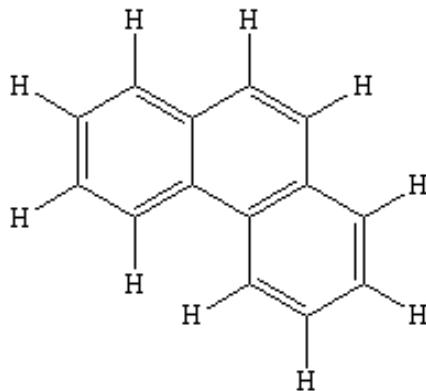
✓ fenanthren & anthracen



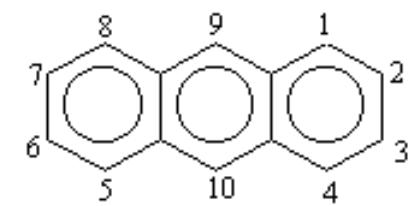
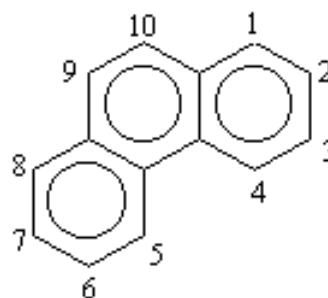
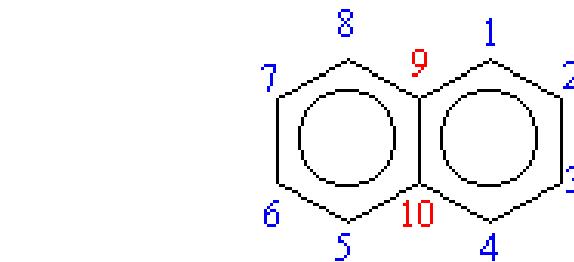
Naphthalene ($C_{10}H_8$)



Anthracene ($C_{14}H_{10}$)



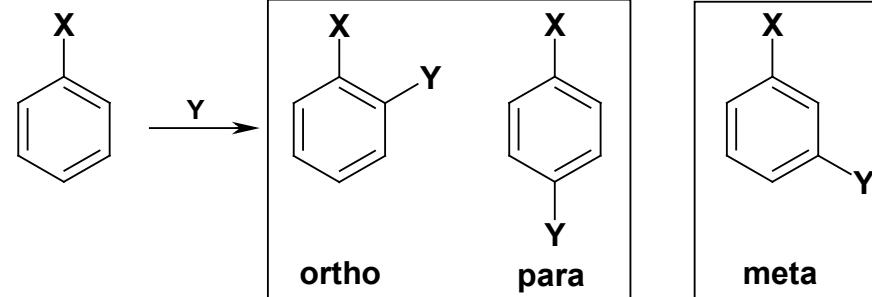
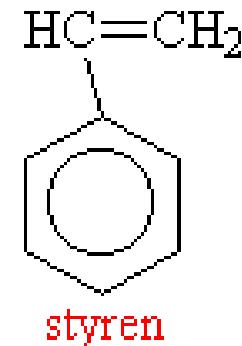
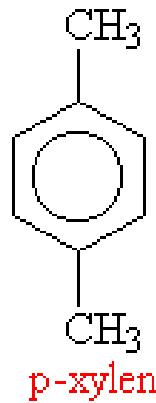
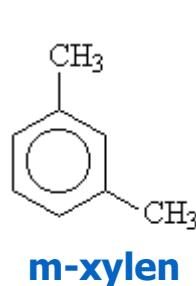
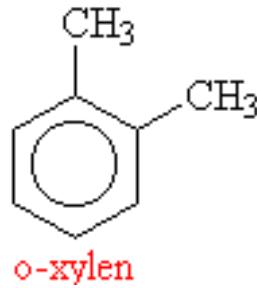
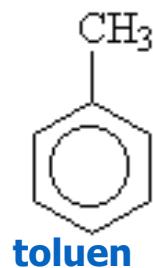
Phenanthrene ($C_{14}H_{10}$)



➤ názvosloví – triviální:

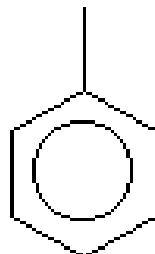
Areny

- ✓ toluen
- ✓ o-, m-, p-xylen
- ✓ styren (vinylbenzen)
- ✓ naftalen

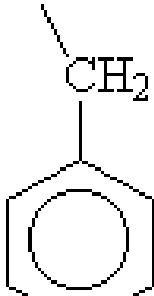


Areny

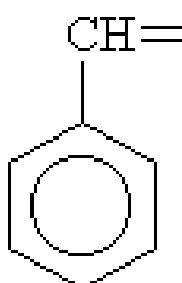
➤ názvosloví – triviální



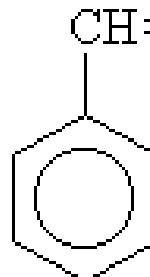
fenyl



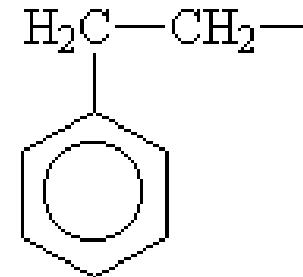
benzyl



benzyliden

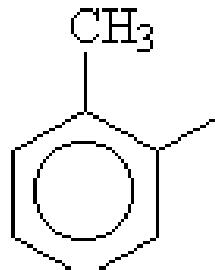


styryl

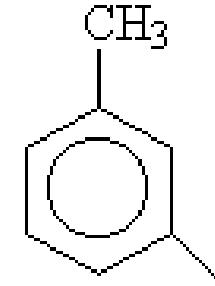


fenethyl

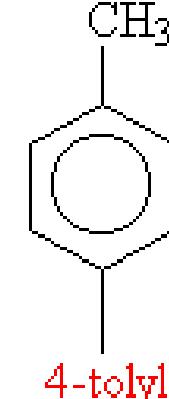
2-fenylethyl



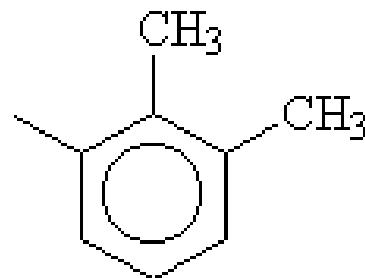
2-tolyl



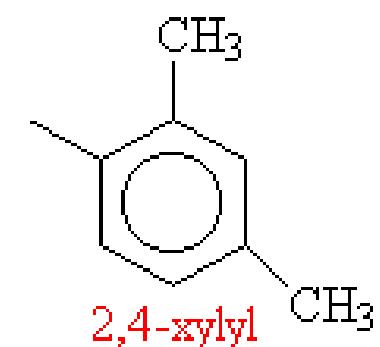
3-tolyl



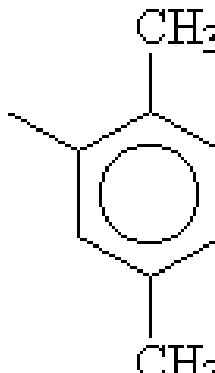
4-tolyl



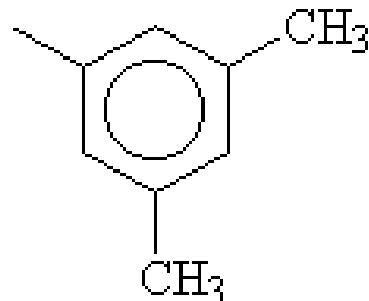
2,3-xylyl



2,4-xylyl



2,5-xylyl



3,5-xylyl

Areny

- ropa, uhlí
- kapalné, tuhé
- nerozpustné ve vodě, jen v org.rozpouštědlech
- užívají se jako běžná lab. rozpouštědla
- karcinogenní, mutagenní účinky !

Benzen

- ✓ jedovatá kapalina ($T_B=80^\circ\text{C}$)
- ✓ rozpouštědlo, surovina pro výrobu léčiv, barviv atd.
- ✓ karcinogen
- ✓ získává se karbonizací uhlí či dehydrogenací cyklohexanu

Toluen

- ✓ podobné vlastnosti jako benzen
- ✓ výrazně méně karcinogenní
- ✓ rozpouštědlo, významná surovina pro výrobu kys. benzoové, benzaldehydu a TNT atd.
- ✓ získává se karbonizací uhlí

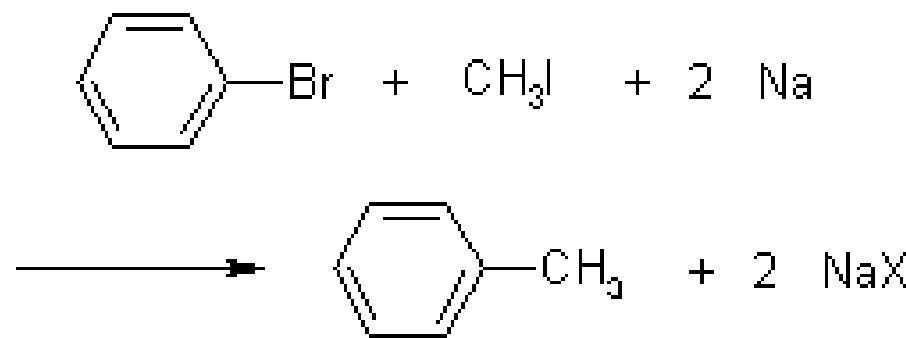
Xyleny

- ✓ výroba plastů

Areny

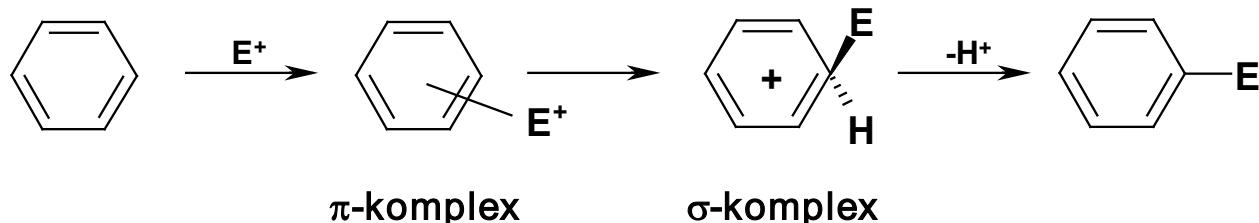
Příprava:

- dehydrogenace cyklohexanu
- Wurtz-Fittig (alkylace)



- Friedel-Crafts (S_{E} – alkylace, reakce s ClCH_3)

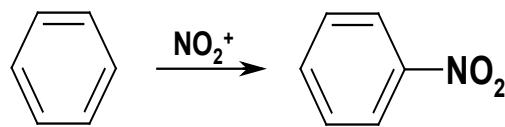
Areny



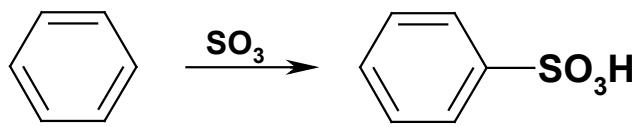
Chemické reakce (S_E):

- nitrace
- sulfonace
- halogenace

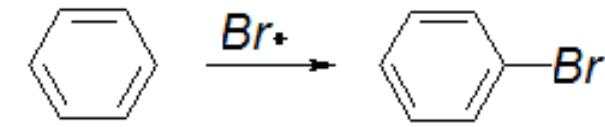
- vznik elektrofilního činidla heterolyticky štěpením
- napojení činidla na aren přes tzv. π -komplex
- vznik σ -komplexe – arom. jádro přestává existovat
- obnovení aromatického jádra
- odštěpený H^+ se napojuje na elektrofilní činidlo



nitrobenzen



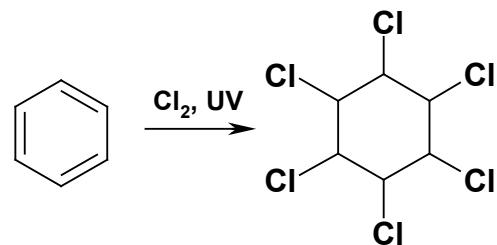
benzensufonová kys.



brombenzen

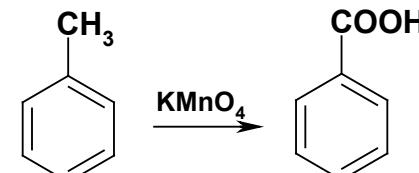
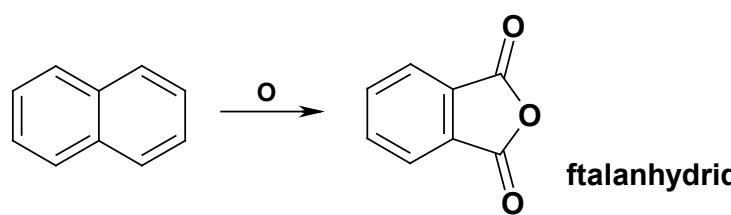
A_R :

- benzen na cyklohexan (H_2 , Pd)



Oxidace (E):

- naftalen na anhydrid kys. ftalove
- toluen na kyselinu benzoovou

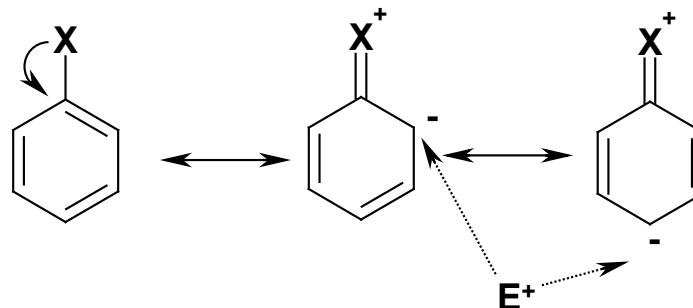


Substituenty I. třídy odpuzují od sebe elektrony do jádra a zvyšují tak elektronovou hustotu jádra jako celku - tím usnadňují další substituci celkově - a zvyšují elektronovou hustotu v poloze ortho a para, kam orientují další substituci (i když ne zpravidla ze 100 %).
Substituenty I. třídy - podmíněno $+I$ nebo $+M$ efektem.

Síla působení substituentů I. třídy dle velikosti:
 $\text{NR}_2 >$, $\text{NHR} >$ $\text{NH}_2 > \text{OH} > \text{alkyl}$ (z nich nejméně methyl) $>$ halogeny (fluor $>$ chlor $>$ brom $>$ jod) $> \text{NO}$

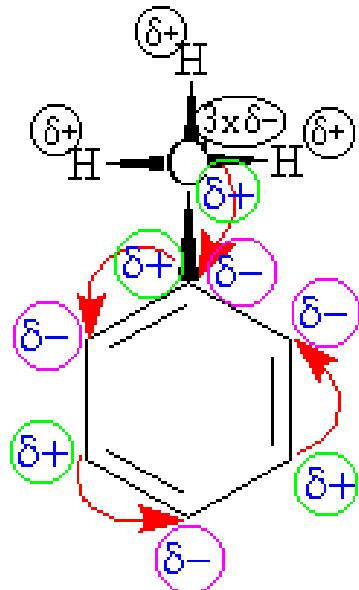
$+I$ efekt - substituent přenáší elektronovou hustotu do jádra za pomocí σ vazby
Příklady: obecně, alkylbenzen, toluen

$+M$ efekt - substituent obsahuje *volné elektronové páry* a ty se zapojují částečně do konjugace v jádře a tak zvyšují jeho elektronovou hustotu Příklady: N,N -dialkyylanilin, N -alkylanilin, anilin, fenol, thiofenol, chlorbenzen, brombenzen



zhuštění elektronů v polohách o- a p-, tyto polohy přitahují elektrofilní činidlo, další substituce probíhá snadněji než u benzenu (více záporných nábojů)

Substituenty I. třídy - toluen

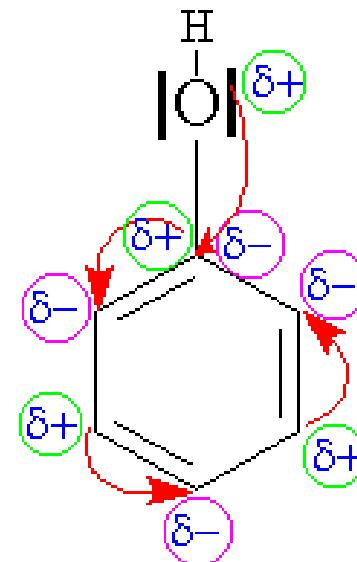


+ I efekt př.: toluen

+I efekt

Substituent odpuzuje elektrony od sebe do jádra a **zvyšuje tak elektronovou hustotu jádra jako celku**

Substituenty I. třídy - fenol



+M efekt

Substituent odpuzuje volné elektronové páry od sebe do jádra a **zvyšuje tak elektronovou hustotu jádra jako celku.**

Vzhledem k tomu, že má kyslík větší elektronegativitu než uhlík, působí zde proti + M efektu -I efekt. Je však slabší a pouze zeslabuje účinek + M efektu

Substituenty II. třídy přitahují k sobě elektrony z jádra a snižují tak elektronovou hustotu jádra jako celku - tím znesnadňují další substituci celkově - ale přitom zvyšují elektronovou hustotu v poloze meta, kam orientují další substituci (i když ne zpravidla ze 100 %).

Substituenty II. třídy způsobují buďto **-I efekt**.

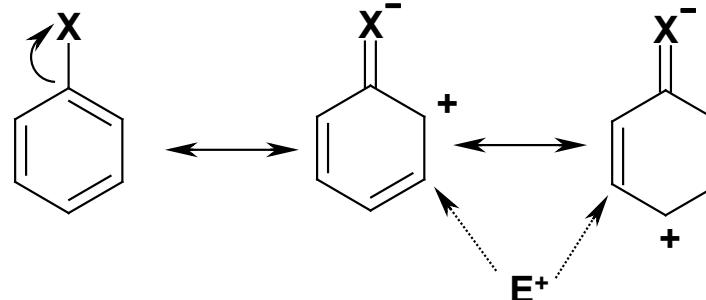
Síla působení substituentů II. třídy dle velikosti:

R_3H + (NH_3 +) >, R_2H + > NO_2 > CN > COH > COR > SO_2CH_3 > SO_3R > SO_3H > $COOH$ > $COOR$ > $CONH_2$

-I efekt - substituent vytahuje elektronovou hustotu z jádra.

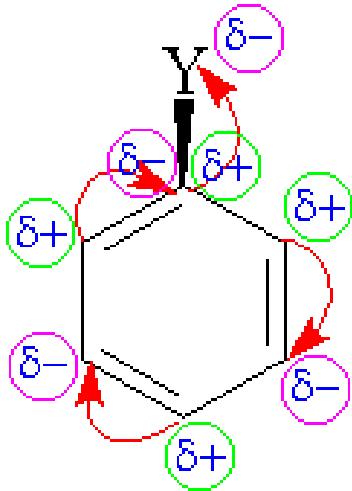
Příklady: [fenylamonium](#), [trialkylfenylamonium](#), [dialkylfenylsulfonium](#)

-M efekt - na atom substituentu vázajícího se na jádro je napojen další atom (zpravidla kyslík) s větší elektronegativitou a napojením přes násobnou vazbu. Vazba π se přenáší k sousednímu atomu a odčerpává tak elektronovou hustotu z atomu vázaného na jádro. Ten si tuto ztrátu "kompenzuje" přitahováním elektronové hustoty z jádra. Příklady: [nitrobenzen](#), [benzonitril](#), [benzaldehyd](#), [benzensulfonová kyselina](#), [kyselina benzoová](#), [kyselina benzoová](#), [benzamid](#)



zředění elektronů v polohách o- a p-, tyto polohy odpuzují elektrofilní činidlo, proto se váže do polohy m-, další substituce probíhá obtížněji než u benzenu (méně záporných nábojů)

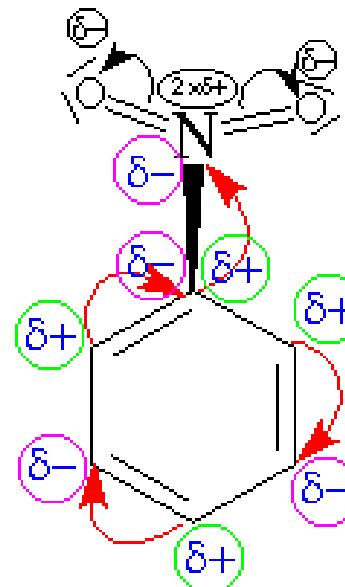
Substituenty II. třídy - obecně



-I efekt

Substituent přitahuje k sobě elektrony z jádra a *snižuje tak elektronovou hustotu jádra jako celku*

Substituenty II. třídy - nitrobenzen



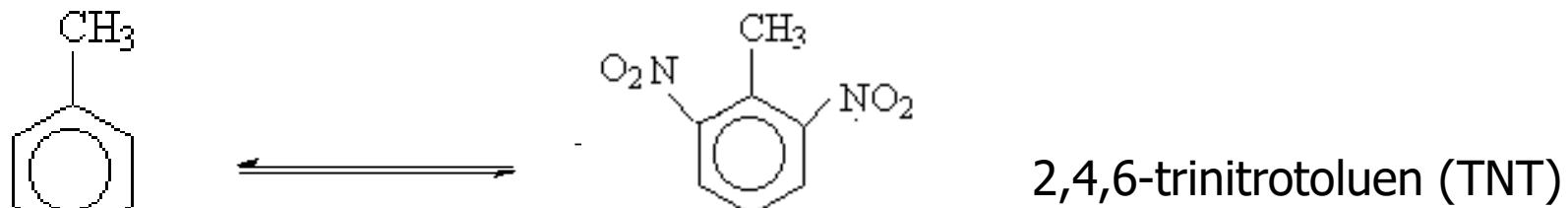
-M efekt

(záporný mezomerní neboli konjugační -K) *efekt.*

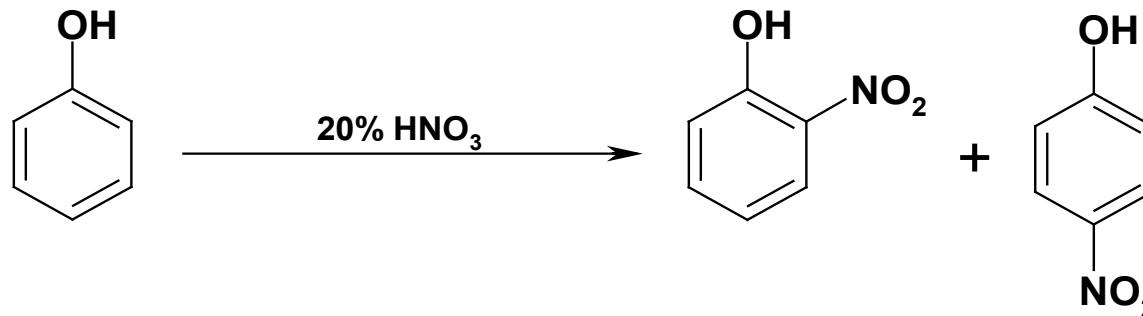
Substituent přitahuje k sobě elektrony z jádra a *snižuje tak elektronovou hustotu jádra jako celku*

Areny

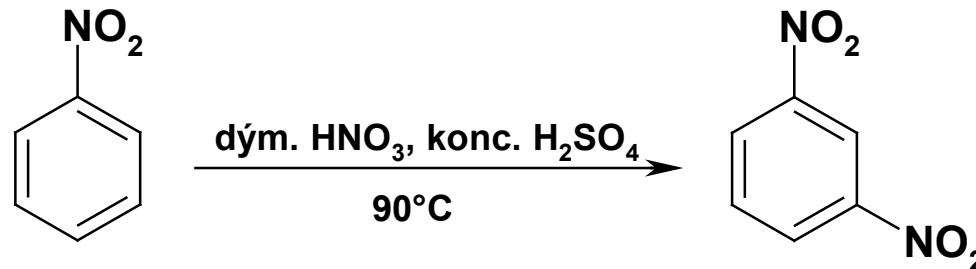
Substituenty I. třídy



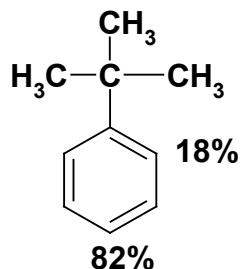
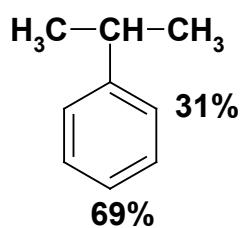
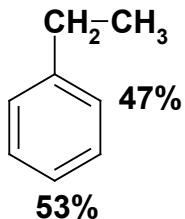
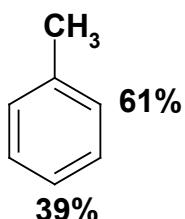
2,4,6-trinitrotoluen (TNT)



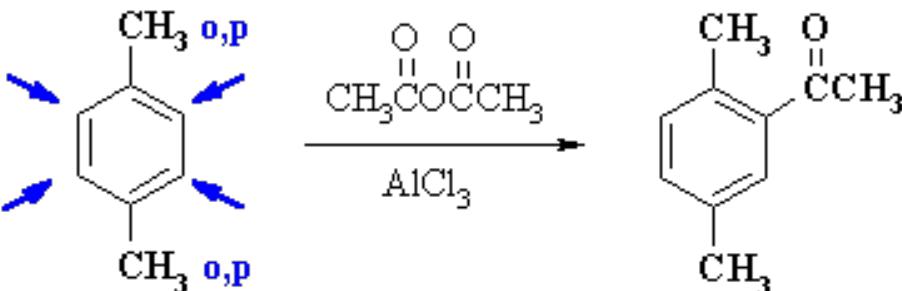
Substituenty II. třídy



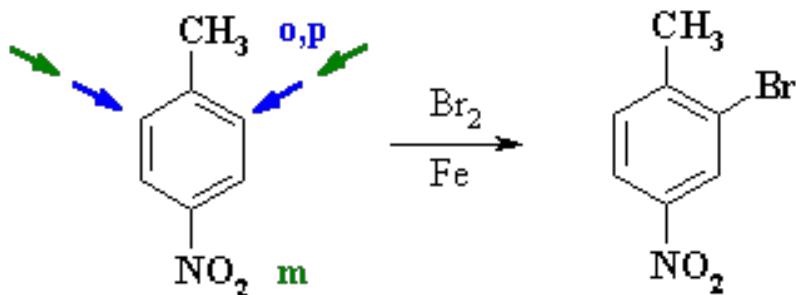
Areny



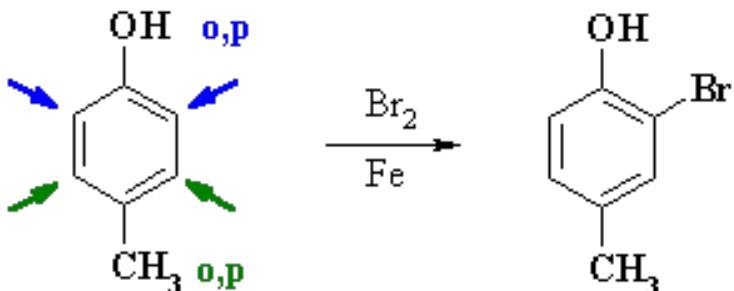
all positions equal



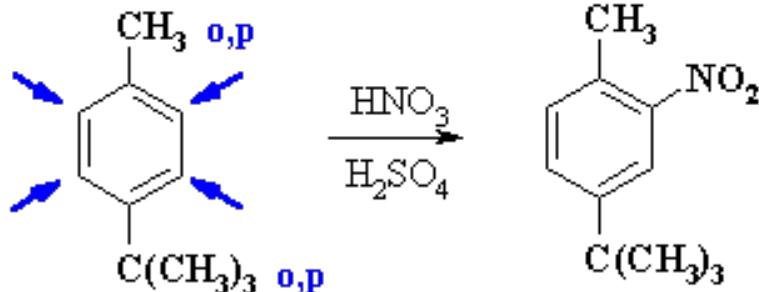
substituents reinforce each other



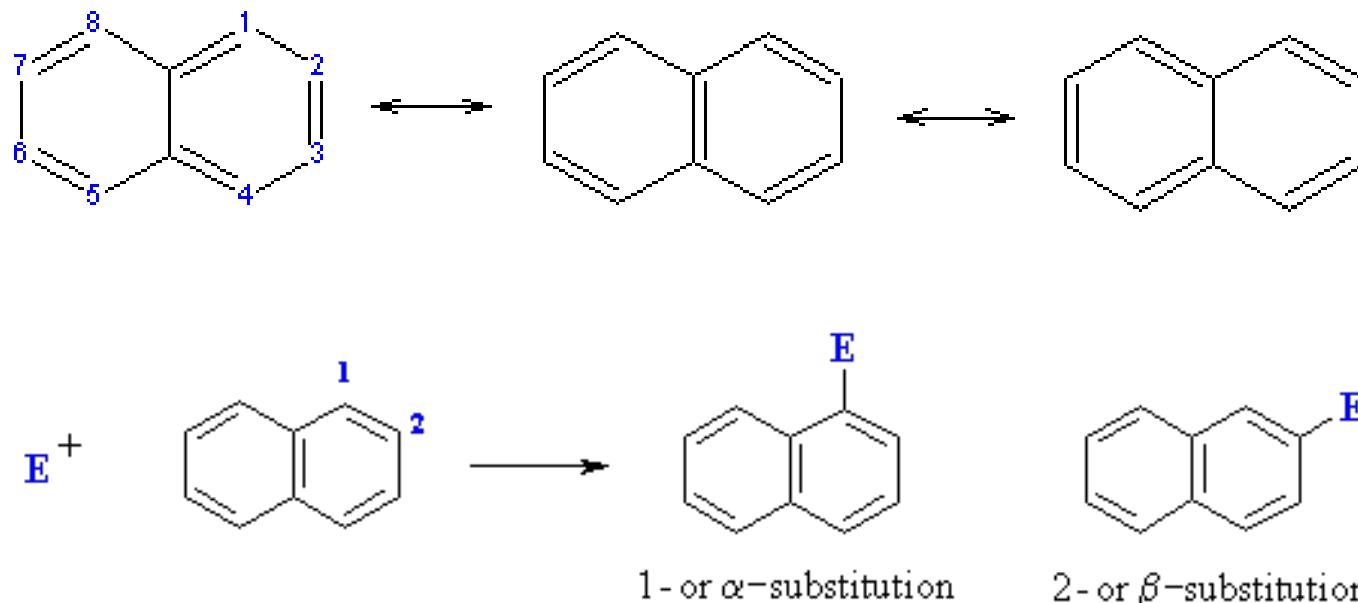
strongest activator controls



activating effects similar, but steric effects favour ortho to the smaller methyl group



Areny - naftalen



Naftalen má tři rezonanční struktury a dva druhy rovnocenných vodíků. Typ *alfa* se nachází v polohách 1, 4, 5 a 8, typ *beta* v polohách 2, 3, 6 a 7. Na rozdíl od benzenu nejsou vazby mezi jednotlivými uhlíky stejně dlouhé. Vazba mezi C1–C2, C3–C4, C5–C6 a C7–C8 měří 1,36 Å, vazby mezi ostatními uhlíky jsou dlouhé 1,42 Å.

