

# Organická chemie

- věda, který se zabývá studiem struktury, vlastností, přípravou a použitím organických sloučenin
- je to chemie sloučenin uhlíku s biogenními prvky - vodíkem, kyslíkem, dusíkem, sírou, fosforem, hořčíkem, vápníkem
- základní vlastnost uhlíku v organických sloučeninách = čtyřvaznost, důvodem je hybridizace - sjednocení energeticky různých orbitalů daného atomu, přičemž vznikají nové orbitály, tzv. orbitály hybridní
- prvně středověk - **Paracelsus** - doktoři jsou na to, aby míchali léky - iatrochemie (16. st.)
- pak novověk - **Berzelius** - živočišné a rostlinné sloučeniny vznikají jenom díky „životní síle“ (vis vitalis) - tzv. *vitalistická teorie* (18. st.), tato brzo vyvrácena r. 1828 **F. Wöhlerem**, který v laboratoři z anorg. látky vytvořil org. látku močovinu
- na konci 19. st. průkopník **F. A. Kekulé** - definoval, že chemické vlastnosti organických sloučenin souvisí s jejich vnitřní stavbou, pak definoval několik základních postulátů, které platí dodnes
  - uhlík je vždy čtyřvazný - z uhlíku vždycky vychází čtyři vazby
  - všechny čtyři vazby atomu uhlíku jsou rovnocenné - důvodem je *hybridizace* - viz dále AAAAAA-AAAA OBRÁZEK ZÁKLADNÍ STAV, EXCITOVANÝ STAV
  - uhlíkové atomy mají schopnost vytvářet řetězce otevřené i uzavřené (tedy i cyklické)
  - atomy jsou v nich vázány jednoduchými, dvojnými, nebo trojnými vazbami (vždy tedy tak, aby z jednoho uhlíku vycházely dohromady čtyři vazby)
- hybridizace
  - proces sjednocení energeticky různých orbitalů daného atomu, přičemž vznikají nové orbitály, tzv. *hybridní orbitály*
  - typy hybridizace:
    - \* úplná -  $sp^3$  - čtyři stejné vazby, každá sigma - do tetraedru
    - \* částečná trigonální -  $sp^2$  trojúhelníková 120 stupňů - jedna dvojná (sigma, pi), dvě jednoduché
    - \* částečná lineární -  $sp$  lineární 180 stupňů, jedna trojná (sigma, dva pi), jedna jednoduchá
- klasifikace uhlovodíků
  - acyklické
    - \* nasycené - všechny vazby jednoduché
    - \* nenasycené - ne všechny vazby jednoduché
  - cyklické nedávám AAAAAAAAAAAAAA DODĚLAT stereochemie - zabývá se strukturou látek, nauka o prostorovém uspořádání atomů v molekule konstituce a konfigurace konstituce - řazení atomů za sebou konfigurace - umístění atomů v prostoru názvosloví - NAPROSTO DEBILNÍ
- reakce organických látek
  - bývají pomalejší než anorganické, mají složitější průběh
  - nevyrovnáváme, protože bysme se nedopočítali
  - základní typy
    - \* podle způsobu štěpení vazby
      - homolýza - rovnoměrné, symetrické štěpení, vznikají radikály - částice s jedním volným nepárovým elektronem

- heterolýza - nerovnoměrné, nesymetrické štěpení, vznik nových, el. nabitých částic - jedna část si odtáhne elektrony, jedna ne
- \* podle charakteru částic v reakci
  - elektrofilní - vzniklé částice vyhledávají záporný náboj (vyhledávají přebytek elektronů), tedy jsou kladně nabitě, např.  $H^+$
  - nukleofilní - částice vyhledávají kladný náboj (mají přebytek elektronů), tedy jsou záporně nabitě, např.  $OH^-$
  - radikálové - částice nesoucí nepárový elektron, velice reaktivní
- \* podle celkové změny na substrátu - na tom, co vchází do reakce
  - substituce = nahrazování = zaměňování - dochází k náhradě jednoho nebo více atomů (jedné nebo více atom. skupin) substrátu jiným atomem nebo skupinou atomů ite
    1. radikálová - dochází k homolytickému štěpení pomocí radikálů, má tři fáze
      - (a) iniciace - jde nám o vznik radikálů
      - (b) propagace - jde nám o samotnou reakci
      - (c) terminace - jde nám o zánik radikálů a o izolaci produktů
    2. elektrofilní - reakce s elektrofilním činidlem, které vzniká v průběhu reakce, např. nitrace benzenu
    3. nukleofilní - nukleofilní činidlo reaguje s uhlíkovým atomem s částečně kladným nábojem
  - eliminace = odštěpení = odejmutí - děj, při kterém se uvolňuje molekula jednoduché, většinou anorganické látky, kvůli čemuž vzniká v molekule substrátu násobná vazba, nebo se zvyšuje její násobnost
    1. dehydratace - odštěpují se molekuly vody
    2. dehydrogenace - odštěpují se atomy vodíku
    3. dehydrohalogenace - odštěpují se molekuly halogenovodíků
  - adice = připojení = opak eliminace - vepeme tam molekulu, snížíme násobnost vazby
    1. elektrofilní - elektrofilní činidlo reaguje s pi-elektrony násobných vazeb uhlíku
    2. nukleofilní - nukleofilní činidlo se aduje na uhlík ve vazbě nesoucí částečný kladný náboj, probíhají na dvoujnou vazbu  $C=O$
  - molekulový přesmyk = isomerace, reakce v jejímž průběhu dochází k přesunu (přeskupení) určitých atomů z jednoho místa v molekule na místo jiné, aniž se mění chemické složení (souhrnný vzorec) v dané sloučenině
- v organice najdeme i běžné redoxní a acidobazické reakce
- zápis reakce
  - reakční schéma - zjednodušený zápis reakce: suroviny  $\rightarrow$  produkty OBRAZEKOBRAZEK
  - reakční mechanismus - podrobný popis přeměny výchozích látek na produkty včetně popisu všech meziproductů OBRAZEKOBRAZEK
- pravidla pojmenovávání org. sloučenin
  - viz obrázek OBRAZEKOBRAZEK na discordu
  - začínáme nasycenými uhlovodíky - alkany
    - \* musíme najít tzv. základní hybrid - nejdelší řetězec, nejvíce násobných vazeb a nejvíce vedlejších řetězců - substituentů a pojmenuju ho podle počtu uhlíků (níže) s příponou -an
    - \* tento pak očíslovu ze směru, kde mám dříve substituent (když jsou substituenty stejně, tak porovnávám druhé substituenty, třetí substituenty, ...) a substituenty taky pojmenuju podle počtu uhlíků, ale přípona je -yl, před ně ještě přidám číslovku uhlíku základního hydridu - lokantu, na který je připojený, když je jich více stejných tak čísla dávám za sebe, odděluju čárkou a píšu di-,tri-,...

- \* pak to spojuju pomlčkama, substituenty seřazuju podle abecedy (příčemž ignoruju předpony di-, tri-, ..., cyklo-, takže např. 1-ethyl-1,2-dimethyl), mezi posledním substituentem a názvem základního hydridu pomlčka není, takže např. 4-ethyl-3-methylhexan
- \* když mám někde cyklickou část, tak to porovná s normálním základním hydridem, a hlavní bude ten, který je delší, před název cyklické části dám cyklo- a číslování bude zase takové, aby součet čísel lokantů se substituenty byl co nejmenší (ekvivalentní s pravidlem pro necyklické uhlovodíky), takže např. 4-ethyl-1,1,2-trimethylcyklohexan, když je to jako substituent tak zase cyklo-[]-yl
- \* můžeme mít uhlovodík s nějakou volnou vazbou, že se od něj něco odtrhlo (on se od něčeho odtrhl), pak názvosloví funguje pořád stejně, ale představím si tu volnou vazbu jako substituent beze jména, tedy jen číslo lokantu a -yl a toto napíšu až nakonec, za jméno hlavního řetězce, takže např. propan-2-yl; popř. si můžu vybrat základní řetězec tak, aby na té volné vazbě začínal, pak i hlavní řetězec nazvu jako -yl (ne jako -an) a číslo vynechám (protože tedy vždy 1), takže např. 1-methylethyl, btw vždycky dávám v číslování přednost volné vazbě před ostatními srandárnami
- \* když to všechno poskládám - když mám větvený substituent tak tu vazbu, kterou se připojuje na hlavní hydrid beru jako volnou, podle toho taky pojmenovávám, pak to poskládám dohromady, názvy substituentů ve větveném substituentu se řadí absolutně podle abecedy (včetně di-, tri-, ..., cyklo-), toto všechno dám do závorky a už se k tomu chovám jako k normálnímu názvu (před to číslo lokantu hl. hydridu, pomlčku, po něm pomlčku, popř. jestli je to jako poslední substituent tak po něm nenapíšu pomlčku)
- \* názvy podle počtu uhlíků
  - meth -
  - eth -
  - prop -
  - but -
  - pent -
  - hex
  - hept
  - okt
  - non
  - dek
  - undek
  - dodek ...
  - ikos ...
  - triakont

## AAAAAAA 22.3.2023 HOMOLOGICKÁ ŘADA, ALKANY, ALKENY

- uhlovodíkový zbytek, který má dvě volné vazby má koncovku -ylen 6-methyl-3-cyklopropyldekan 1-ethyl-2-methyl-1,3-dipropylcyklopentan 1-cyklobutyl-4-(propan-2-yl)cyklohexan

### výskyt alkanů

- v atmosféře - nepatrné množství methanu - vzniká činností methanogenních bakterií (nejen) v travičích soustavách
- nejpodstatnější složka zemního plynu
- nižší kapalné alkany - v silicích vyšších rostlin

- vyšší pevné alkany - živočichové

vlastnosti

- s vyšším počtem uhlíků rostě skupenství (plyn - kap - pev) a teplota tání a varu
- jsou málo reaktivní – nasčené, slouhé sigma vazby
- reakce alkanů
  - radikálová substituce - musíme vyrobit radikály, ty pak reagují (např. s chlorem – chlorace)
    - \* iniciace – vznik radikálů
    - \* propagace – vlastní průběh reakce, radikál odtrhne jeden vodík (wow), vzniká methylový radikál, tento reaguje s dalším neradikálem ze kterého vznikne další radikál, toto dokola
    - \* terminace – zánik radikálu, většinou tak, že se všechny spotřebují a zreagují s něčím, vzniká směs různých produktů (např. u chlorace vznikají v poměru chlormethan  $CH_3Cl$ , methylchlorid  $CH_2Cl_2$ , trichloromethan (chloroform)  $CHCl_3$ , tetrachlormethan  $CCl_4$ )

nevím vole příklady 2,3,3,4-tetramethylheptan 4-ethyl-2-methylhexan 3-ethyl-3-methylpentan 4,4-diethyl-5-methyloktan

- idk co za nadpis – Nenasycené uhlovodíky
- tedy ne všechny vazby jsou jednoduché, mám dvojně, trojně vazby
- dvojná vazba – koncovka -en (-dien, -trien, ...) – alkeny (alkadieny, alkatrieny, ...)
- trojná vazba – koncovka -yn – alkyny
- taky mohou být cyklycké řetězce – předpona cyklo-
- potom tedy základ názvu (meth, eth, prop, ...), pomlčka, číslo lokantu, ze kterého vychází dvojná vazba, pomlčka a koncovka, tedy např. but-2-en, čísluju tak, aby dvojná vazba měla co nejnižší číslo lokantu
- např. 2-methyl-buta-1,3-dien (a protože čeština údajně)
- když máme vazbu dojnou i trojnou, tak u číslování upřednostňujeme dvojnou vazbu, píšeme ale prvně dvojně vazby, pak trojně, tedy např. but-1-en-3-yn, okta-1,4-dien-7-yn, 5-butyl-hepta-1,3,6-trien
- když máme volnou vazbu, má přednost před dvojnou vazbou a pak to napíšeme na konci, tedy např. but-3-en-1-yl
- můžeme mít dvojnou vazbu v cyklu, tedy např. 3-ethylcyklohex-1-en, 3-ethyl-4-methylcyklopent-1-en, 5-propylcyklohexa-1,3-dien
- tedy např. 8-methylcyklookta-1,3,6-trien, buta-1,2-dien, 2-methylbuta-1,3-dien

## 0.1 Reakce alkenů

- MOC TOHO CHYBÍ AAAAAAAAAAAAA – adice (kys. a vody, halegonů, oxidace, hydrogenace)

### 0.1.1 Polymerace

- mer = jednotka, polymer = více jednotek
- např. ethen se teplem polymeruje – dvojná vazba se zjednotí, druhou se chytne dalšího ethenu → polymer OBRAZEKOBRAZEK

jsou tři typy alkadienů podle postavení dojných vazby – kumulované (obě vazby z jednoho uhlíku, dost nestabilní, dv. vazb. se hodně ovlivňují), konjugované (mezi dv. vazb. je jedna jednoduchá vazba, stabilnější, dv. vazb. se ovlivňují méně) a izolované (dv. vazb. dál od sebe, už se neovlivňují, nejstabilnější)

### 0.2 Zástupci alkenů

- ethylen
- popylen → polymerace
- buta-1,3-dien – výroba syntetického kaučuku

## 1 Alkyny

- trojná vazba
- jedna sigma, dvě pí vazby
- jsou mírně kyselé, protože dokážou disociovat (?)  $H^+$
- reakce obdobně jako u alkenů
  - adice halogenů – OBRAZEKOBRAZEK,  $HO_2CC- - CCO_2H + Br_2$  -> reaguje
  - adice nukleofilní – kučerovova reakce
  - oxidace – sloučeniny s dvojnou a trojnou vazbou oxidují snadno
- zástupci
  - acetylen – bezbarvý plyn, se vzduchem tvoří výbušnou směs, výroba:  $CaC_2 + 3H_2O$  ->  $C_2H_2 + Ca(OH)_2$ , využití k autogennímu svařování – tvoří plamen o teplotě až 3000 stupňů C; OBRAZEKOBRAZEK

## 2 Aromatické sloučeniny

- areny, mají vůni – aroma
- základem je benzen –  $C_6H_6$  OBRAZEKOBRAZEK, ten má atypický řád vazby 1,5 (ani jednoduchá ani dvojná), má el. hustotu nad a pod základním skeletem – el. jsou tzv. delokalizované OBRAZEKOBRAZEK
- jsou areny monocyklické i polycyklické (více spojených benzenů), v polycyklických arenech jádra izolovaná (oddělená alespoň jednou vazbou, např. bifenyl, pozor na číslování (viz obrázek) OBRAZEKOBRAZEK I S CISLOVANIM) nebo kondenzovaná (jádra napojena přímo na sebe, např. naftalen, anthracen, pozor na číslování (viz obrázek) OBRAZEKOBRAZEK I S CISLOVANIM)
- názvosloví (pomoc)

- vychází z triviálních názvů základních aromatů a přidávají se předpony, tedy např. methylbenzen (triviálně toluen), 1,2-dimethylbenzen (pozor, protože cyklické tak nemá smysl číslovat benzen, tj. číslujeme substituenty dle pozice mezi sebou – 1,2 bude ortho, zkratka o-; triviálně o-xylen), 1,3-dimethylbenzen (1,3 – meta, m-; triviálně m-xylen), 1,4-dimethylbenzen (1,4 – para, p-; triviálně p-xylen)
- benzen s jednou volnou vazbou se triviálně nazývá fenyl, s jedním uhlíkem navíc a volnou jednoduchou vazbou benzylyl, s jedním uhlíkem navíc a volnou dvojnou vazbou benzylyden, s jedním uhlíkem navíc a volnou trojnou vazbou benzylydyl
- monocyklické areny můžu většinou pojmenovat asi na čtyřikrát, podle toho kterou část vezmu jako základní, tedy např. 2-methylbenzen-1-yl, 2-methylfenyl, 2-tolyl, o-tolyl
- typy
  - monocyklické – jeden cyklus, nepolární, kapalné a tuhé, body varu rostou se zvyšujícím se počtem uhlíků
  - vícejaderné – více uhlíků, tuhé, některé karcinogenní
- reakce
  - nejčastěji elektrofilní substituce – na každém z uhlíků benzenu je navázaný vodík, což je elektrofil, takže pozitivní substituenty se dají zaměnit za vodík
  - typy elektrofil. subs.
    - \* halogenace – elektrofil. činidlem halogen, potřebujeme katalyzátor ve formě Lewisovské kyseliny, výsledkem chlorbenzen, brombenzen
    - \* nitrace – elektrofil. částicí nitroniový kation  $NO_2^+$ , který je tvořen v reakční směsi z kys. dusičné působením kyseliny sírové (sírovka oddělí svůj  $H^+$  protože je silnější, ten oddrhně  $OH^-$  od dusičné a zbytek je  $NO_2^+$ , tzv. nitrací směs), výsledkem nitrobenzen
    - \* sulfonace – proces, kdy vystavíme aromatickou sloučeninu koncentrované sírovce nebo oxidu sírovému, který se v ní rozpustí – vzniká tzv. oleum – to znamená, že sírovka je ještě kyslejší a analogicky k nitraci (z jedné se odpojí vodík, ten z druhé odpojí  $OH^-$ ) vznikají  $HSO_3^+$  kationty, které reagují s arenem
    - \* alkylace – pomocí Lewisovské kyseliny oddrhně od alkanu substituent, zbývá nám tedy kladný alkyl, který napadá benzenové jádro OBRAZEKOBRAZEK (protože plusko je na kraji nebo uprostřed, pak vzniká propyl-nebo isopropyl-)
    - \* acylace – když od karboxylové skupiny ( $COOH$ ) utrhně  $OH$  (udělám vodu) vzniká mi acyl (?), který může mít kladný náboj, který napadá benzenové jádro OBRAZEKOBRAZEK
    - \* OBRAZEKOBRAZEK kde jsou všechny tyto typy nakresleny
  - typy adice
    - \* hydrogenace – za pomocí katalyzátoru připojujeme na uhlíky další vodíky, odstraňujeme „dvojnou vazbu“ benzenu
    - \* chlorace, bromace – homolyticky rozštěpíme chlory, bromy na radikály a ty se napojí, odstraňujeme „dvojnou vazbu“, např. bromace toluenu OBRAZEKOBRAZEK
  - také oxidace – probíhají buď na jádře nebo na bočním řetězci, řetězec se ale oxiduje první – vznikají karboxylové kyseliny, pokud oxiduje jádro vzniká nestabilní produkt, který se rozpadá na karboxylové kyseliny
- typy substituentů, když už na benzenu máme substituent a vážeme další, kvůli tzv. mezomernímu efektu OBRAZEKOBRAZEK
  - první typ – míří převážně do poloh ortho-, para-; elektrofil

- druhý typ – převážně do polohy meta-; nukleofily
- zdroje aromatů – ropa, černouhelný dehet, zpracovávání frakční destilací – čím méně uhlíků, tím menší bod varu
- laboratorně lze benzen vyrobit dehydrogenací cyklohexenu (popř. cyklohexan, ale méně) nebo dekarboxylací příslušných kyselin
- biologické účinky aromatických uhlovodíků – pro živé organismy většinou velmi nebezpečné
  - benzen – napadá organické sloučeniny v lidském těle, karcinogen, působí negativně na vývoj kostní dřeně (menší produkce červených krvinek), poškozuje jaterní buňky, narušuje srdeční rytmus a způsobuje dýchací problémy
  - lze nahradit toluenem, jehož dlouhodobé vdechování má ale za následek narkotické působení, halucinace, v krajním případě i porušení srdeční činnosti
  - nebezpečné jsou i kondenzované aromáty (několik kondenzovaných jader) – při trávení se rozpadají na menší, výsoce reaktivní
- další zástupci
  - toluen – rozpouštědlo, používá se k výrobě TNT, sacharin
  - styren – bezbarvá, příjemně vonící kapalina, při jeho polymeraci vzniká polystyren
  - naftalen – tihá, charakteristicky páchnoucí sublimující látka, výroba z černouhelného dehtu, používá se k výrobě ftalanhydridu, k syntéze barviv
- dříve aromatické sloučeniny, dnes areny – molekuly s alespoň jedním benzenem, které mají zápach, dnes se jako aromatické sloučeniny považují ty, které splňují tzv. Hückelovo pravidlo –  $4n + 2 = p$ , kde  $p$  je počet  $\pi$  elektronů,  $n$  potom musí vyjít jako kladné celé číslo, zároveň musí být její jádra konjugované (vazba 1,5) a sloučenina musí být planární

### 3 Deriváty uhlovodíků

- halogenderiváty – nějakou část nahradí halogen (Cl, Br, I, popř. F), mechanismem substituce radikálová (viz alkany), např.  $CH_4 + Cl_2 \xrightarrow{UV} CH_3Cl$  (chlormethan),  $CH_2Cl$  (dichlormethan),  $CHCl_3$  (trichlormethan),  $CCl_4$  nebo mechanismem elektrofilní substituce, např. halogenace benzenu, toluenu (heterolýza halogen molekuly, viz areny), nebo mechanismem nukleofilní substituce, např. reakce alkoholu s halogenvodíkem (odštěpí se OH z alk., H z halogenv.), nebo iontová adice; mechanismem adice, např. radikálová adice (viz něco předem), halogenace alkenů, alkynů (snižujeme řád vazby, Markovnikovo pravidlo); s vyšším počtem halogenů roste hustota, bod varu, schopnost org. kys. disoc. kys. vodík; málo rozpustné ve vodě, samy o sobě dobrá rozpouštědla, silné karcinogeny (rad. halog.), např. chloroform, DDT, freony, teflon
- nitroderiváty – nějakou část nahradí skupina  $NO_2$  ( $NO_2$  skupina má mezi N a O řád vazby 1,5 (jako benzen) (úplně jsem nepochopil proč)), názvosloví logické, obdobné jak ostatní, jen nitro- bývá až poslední před jménem hlavního řetězce (takže např. trichlornitromethan), příprava nitrací uhlovodíku – potřebujeme vytvořit nitroniový kation, ten snadno vytvoříme rozbitím dusičné kyseliny za pomoci silnější kyseliny, nitrosloučeniny snadno redukovatelné, výsledek je závislý na prostředí, v kyselém prostředí a za působení zinku (Fe, Sn) z nitrobenzenu uděláme anilin; v zásaditém prostředí a za působení zinku z nitrobenzenu uděláme azobenzen OBRAZEKOBRAZEK – použití jako barevný indikátor, zástupci nitrobenzen, kyselina pikrová (2,4,6-trinitrofenol) – hořká, žlutá kapalina, trhavina, trinitrotoluen – klasika; většina sloučenin více či méně toxická

- aminy – deriváty amoniaku, tedy mají  $NH_x$ , primární mají dva vodíky, sekundární jeden, terciární žádný (dusík jedna dvojná a jedna jednoduchá vazba), připravují se reakcí uhlovodíku s amoniakem za vzniku vedlejšího produktu - sloučeniny s amonným kationtem, mechanismem nukleofilní substituce, takhle můžeme jít několikrát za sebou až do soli (obdobně jak u halogenů) a takto nám postupně vznikají primární, sekundární, terciární aminy; aromatické aminy vznikají redukcí příslušných nitroderivátů, látky toxické, popř. karcinogenní; jsou to látky basické – ve vodném roztoku tvoří  $OH^-$

## 4 Hydroxyderiváty

- $OH^-$  hydroxylová skupina, odvozená od vody, org. hydroxysloučeniny amfoterní – v prostředí kyseliny zásada, v prostředí silné zásady jako kyselina
- alkoholy – skupina navázána na uhlíkový atom alifatického řetězce
- fenoly – skupina navázána na uhlík aromatického cyklu
- primární, sekundární, terciární – dle toho na kolik dalších uhlíků je napojeno na uhlík, na který je napojená hydrox. skupina
- jednosytné, vícesytné (dvoj-, troj-) – podle toho kolik mají sloučeniny hydrox. skupin
- názvosloví alkoholů buď spojením názvu základního uhlovodíku a přípony -ol (např. methanol, butanol), nebo z názvu uhlovodíkového zbytku s příponou -alkohol (methylalkohol, butylalkohol)
- u fenolů pouze prvním způsobem, hlavním řetězcem samozřejmě arom. cyklus, vyskytuje se zde ale hodně triviálních názvů (viz foto, idk)
- vznikají reakcemi adice vody v kyselém prostředí