

Obsah

	Předmluva	3
	Obsah	4
1.	Úvod	12
1.1.	Nejdůležitější historické mezníky	12
1.1.1.	Stanovení sumárního vzorce	12
1.1.2.	Strukturní teorie	13
1.1.3.	První organická syntéza	13
1.2.	Předmět organické chemie a její postavení mezi ostatními obory	14
1.2.1.	Předmět organická chemie	14
1.2.2.	Postavení mezi ostatními obory	14
1.3.	Prezentace výsledků a nových poznatků základního výzkumu a literatura organické chemie	15
1.3.1.	Chemická periodika	15
1.3.2.	Referátové časopisy	15
1.3.3.	Kompendia organické chemie	15
1.3.4.	Učebnice organické chemie	16
2.	Struktura organických sloučenin a její zobrazení	17
2.1.	Prostorové modely	17
2.2.	Strukturní vzorce	18
2.3.	Projekční vzorce	21
2.3.1.	Newmanova projekce	21
2.3.2.	Fischerova projekce	22
2.3.3.	Projekce dle Cahna, Ingolda a Preloga	24
3.	Názvosloví organických sloučenin	26
3.1.	Obečné principy	26
3.1.1.	Základní skelety organické molekuly	26
3.1.2.	Substituenty odvozené od uhlovodíků a heterocyklů	26
3.1.3.	Vyjádření počtu stejných substituentů	27
3.2.	Názvosloví základního skeletu molekuly	28
3.2.1.	Alkany C_nH_{2n+2}	28
3.2.2.	Jiné homogenní hydridy	29
3.2.3.	Heterogenní hydridy	30

3.2.4.	Cykloalkany	30
3.2.4.1.	Monocyklické C_nH_{2n}	30
3.2.4.2.	Vícecyklické	30
3.2.4.2.1.	Můstkové	30
3.2.4.2.2.	Spirocykly	32
3.2.5.	Aromatické uhlovodíky	32
3.2.5.1.	Nekondenzované areny	32
3.2.5.2.	Kondenzované aromatické uhlovodíky	33
3.2.5.2.1.	Ortho-kondenzované systémy	34
3.2.5.2.1.1.	Čistě benzoidní	34
3.2.5.2.1.2.	Obsahující i nebenzoidní cykly	36
3.2.5.2.1.3.	Obsahující jen nebenzoidní cykly	37
3.2.5.2.2.	Peri-kondenzované systémy	37
3.2.5.2.2.1.	Plně benzoidní	37
3.2.5.2.2.2.	Obsahující i jiné cykly	38
3.2.6.	Heterocykly	38
3.2.6.1.	Racionální názvosloví	38
3.2.6.1.1.	Tabulka předpon, které jsou seřazeny v sestupném pořadí nadřazenosti	39
3.2.6.1.2.	Tabulka přípon	39
3.2.6.1.3.	Příklady použití údajů v tabulkách	39
3.2.6.2.	Triviální názvosloví	40
3.2.6.2.1.	Pětičlenné heterocykly	40
3.2.6.2.2.	Šestičlenné heterocykly	41
3.2.6.2.3.	Vzájemně kondenzované heterocykly	42
3.3.	Modifikace základního skeletu molekuly	43
3.3.1.	Názvosloví nenasyčených sloučenin	43
3.3.1.1.	Zavedení násobných vazeb	43
3.3.1.2.	Parciální hydrogenace	44
3.3.2.	Kondenzované uhlovodíky a heterocykly	45
3.3.3.	Větvený skelet	49
3.3.3.1.	Větvený alifatický uhlovodík	49
3.3.3.1.1.	Racionální názvosloví	49
3.3.3.1.2.	Triviální názvy	50

3.3.3.2.	Substituované alicyklické uhlovodíky	51
3.3.3.2.1.	Racionální názvosloví	51
3.3.3.2.2.	Triviální názvy	51
3.3.3.3.	Substituované aromatické uhlovodíky	52
3.3.3.3.1.	Racionální názvosloví	52
3.3.3.3.2.	Triviální názvy	54
3.3.3.4.	Substituované a nasycené heterocykly a radikály od nich odvozené	55
3.4.	Funkční deriváty uhlovodíků, heterocyklů a dalších základních skeletů molekuly	56
3.4.1.	Seřazení nejdůležitějších skupin podle klesající priority	57
3.4.2.	Přehled nejdůležitějších funkčních skupin mimo karboxylové kyseliny a jejich derivátů	57
3.4.3.	Názvosloví karboxylových kyselin	59
3.4.3.1.	Racionální názvosloví	59
3.4.3.2.	Triviální názvosloví	60
3.4.4.	Některé funkční deriváty	65
3.4.4.1.	Halogenidy kyselin	65
3.4.4.2.	Estery	65
3.4.4.3.	Anhydridy	66
3.4.4.4.	Amidy	67
3.4.4.5.	Hydrazidy a azidy	67
3.4.4.6.	Nitrily	68
3.5.	Instruktivní příklady vytvoření názvu	69
4.	Isomerie	72
4.1.	Isomerie rovinná	72
4.1.1.	Isomerie polohová	72
4.1.2.	Isomerie násobných vazeb	73
4.1.3.	Isomerie řetězová	74
4.1.4.	Isomerie cyklo-řetězová	74
4.1.4.1.	Cyklořetězová isomerie s nenasycenou alifatickou a cyklickou strukturou	74
4.1.4.2.	Struktury lišící se velikostí cyklu	75
4.1.4.3.	Cyklické struktury lišící se počtem a velikostí cyklů	75

4.1.5.	Isomerie radikálová (skupinová, metamerie)	76
4.2.	Isomerie prostorová	76
4.2.1.	Isomerie geometrická	76
4.2.1.1.	Substituované alkeny	77
4.2.1.2.	Kumulované systémy s lichým počtem kumulovaných násobných vazeb	77
4.2.1.3.	Dusíkaté nenasyčené sloučeniny	78
4.2.1.4.	Substituované trojčlenné a čtyřčlenné cykly	78
4.2.1.5.	Vícečlenné cykly	78
4.2.2.	Isomerie optická	79
4.2.2.1.	Základní pojmy	79
4.2.2.2.	Typy asymetrických molekul	80
4.2.2.2.1.	Asymetrický atom	80
4.2.2.2.2.	Asymetrie u derivátů systémů se sudým počtem kumulovaných násobných vazeb	80
4.2.2.2.3.	Asymetrie způsobená znemožněním volné otáčivosti	80
4.2.2.2.4.	Jiné asymetrické útvary	81
4.2.2.3.	Sloučeniny obsahující jedno asymetrické centrum	81
4.2.2.4.	Diastereomerie	82
4.2.2.5.	Metody štěpení racemátů na antipody nebo získání jednoho antipodu z racemické směsi	86
4.2.2.5.1.	Dělení na základě enantiomorfie	86
4.2.2.5.2.	Dělení na základě převedení racemické směsi na směs dvou diastereomerů	86
4.2.2.5.3.	Získání jen jednoho antipodu z racemické směsi	89
4.2.3.	Význam dělení racemických směsí	90
5.	Obecný přístup k posouzení vlastností a reaktivity organických sloučenin	91
5.1.	Vazebné faktory	91
5.1.1.	Základní typy vazeb	91
5.1.1.1.	Vazby jednoduché	91
5.1.1.2.	Dvojná vazba	92
5.1.1.3.	Trojná vazba	93

5.1.2.	Konjugace a její vliv na vlastnosti a reaktivitu	93
5.1.2.1.	Mesomerní stav	93
5.1.2.2.	Princip výpočtu mesomerní energie	94
5.1.2.3.	Typy mesomerních systémů	95
5.1.2.3.1.	Isovalentní konjugace	95
5.1.2.3.2.	Normální konjugace	98
5.1.2.4.	Aromatický stav	98
5.1.2.5.	Shrnutí pravidel pro správné znázornění mesomerního stavu a vzájemné srovnání různých typů konjugace na základě odhadu jejich delokalizační energie	103
5.1.2.6.	Některé příklady demonstrující vliv mesomerie na vznik a štěpení vazeb	107
5.1.2.6.1.	Acidobazické reakce	107
5.1.2.6.2.	Vliv mesomerie na štěpení vazby C-X (X = halogen)	112
5.1.2.6.3.	Vliv mesomerie na štěpení vazby C-C	113
5.1.3.	Hyperkonjugace	115
5.1.4.	Vodíková vazba (dříve vodíkový můstek)	117
5.1.4.1.	Intermolekulární vodíková vazba	118
5.1.4.2.	Intramolekulární vodíková vazba	119
5.1.5.	Dvouelektronová třístředová vazba	122
5.1.6.	Efekty	122
5.1.6.1.	Efekty induční	123
5.1.6.1.1.	Indukční efekt (I_s)	123
5.1.6.1.2.	Efekt induktemerní (I_d)	125
5.1.6.2.	Efekty konjugační (K)	126
5.1.6.2.1.	Efekty mesomerní (M)	126
5.1.6.2.1.	Efekt elektromerní	127
5.1.6.3.	Efekt přímý (F-efekt)	129
5.1.7.	Celkový pohled na vlastnosti a reaktivitu dané sloučeniny z hlediska vazebných faktorů	131
5.2.	Sterické faktory	132
5.2.1.	Obecné údaje o prostorové stavbě molekul	132
5.2.1.1.	Základní parametry	132

5.2.1.2.	Rozdělení molekul v závislosti na uspořádání řetězce	132
5.2.1.3.	Celkový tvar molekuly	134
5.2.1.3.1.	Molekuly obsahující alespoň jednu jednoduchou vazbu s volnou otáčivostí atomů	134
5.2.1.3.2.	Rigidní molekuly	134
5.2.2.	Sterické poměry u alifatických sloučenin	135
5.2.2.1.	Sloučeniny neobsahující násobné vazby	135
5.2.2.2.	Sloučeniny obsahující izolované a konjugované dvojné vazby	136
5.2.2.3.	Sloučeniny obsahující trojné vazby	137
5.2.2.4.	Sloučeniny obsahující kumulované násobné vazby	137
5.2.3.	Sterické poměry u cyklických systémů	137
5.2.3.1.	Pnutí v cyklech	137
5.2.3.1.1.	Pnutí u nasyčených cyklů a jeho vliv na konformaci	138
5.2.3.1.2.	Sterické poměry u nenasyčených cyklů	140
5.2.3.2.	Konformace a podoba geometrické isomerie u vyšších cyklů	142
5.2.3.3.	Stabilita a otevírání cyklů	144
5.2.3.4.	Faktory hrající roli při cyklizačních reakcích	144
5.2.3.4.1.	Pnutí tvořícího se cyklu	145
5.2.3.4.2.	Pravděpodobnostní faktor	147
5.2.3.4.3.	Cyklus jako tranzitní stav	148
5.2.4.	Sterické uspořádání podporující reaktivitu	149
5.2.4.1.	Reakce podporovaná přechodem sp^3 hybridizace na planární sp^2 hybridizaci	149
5.2.5.	Sterická zábrana	150
5.2.5.1.	Zastínění centra v nejbližším okolí	150
5.2.5.2.	Six rule	151
5.2.5.3.	Sterická zábrana v důsledku zablokování volné otáčivosti	152
5.2.5.4.	Sterická zábrana v důsledku rigidního uspořádání a v důsledku nevhodných valenčních úhlů	154
6.	Roztřídění reakcí a principy jejich zařazení do jednotlivých typů	156
6.1.	Základní kritéria roztřídění reakcí	156
6.1.1.	Formální hledisko	156
6.1.2.	Dle reakčního mechanismu	156

6.1.3.	Molekularita reakce	157
6.2.	Typy činidel	157
6.2.1.	Radikálová činidla (R^\cdot)	158
6.2.2.	Nukleofilní činidla	159
6.2.3.	Elektrofilní činidla	160
6.3.	Příklady některých reakcí	160
6.3.1.	Adiční reakce	160
6.3.1.1.	Elektrofilní adice (A_E)	160
6.3.1.2.	Nukleofilní adice (A_N)	162
6.3.1.2.1.	Silné nukleofily	162
6.3.1.2.2.	Slabé nukleofily	162
6.3.1.2.3.	Reakce s C-kyselinami za bazické katalýzy (aldolisace)	163
6.3.1.3.	Radikálové adice	164
6.3.1.4.	Cyklické adice	165
6.3.2.	Substituční reakce (S)	166
6.3.2.1.	Nukleofilní substituční reakce	166
6.3.2.1.1.	Na nasyceném atomu C	166
6.3.2.1.2.	V aromatické řadě	166
6.3.2.2.	Elektrofilní substituce S_E	167
6.3.2.2.1.	V aromatické řadě	167
6.3.2.2.2.	Na nasyceném atomu C	168
6.3.2.3.	Radikálová substituce S_R	168
6.3.3.	Eliminační reakce	169
6.3.3.1.	Trans-eliminace	169
6.3.3.1.1.	Dehydrohalogenace	169
6.3.3.1.2.	Dehalogenace	169
6.3.3.1.3.	Dehydratace	169
6.3.3.1.4.	Štěpení kvarterních amoniových hydroxidů	169
6.3.3.1.5.	Směr eliminace	169
6.3.3.2.	Cis-eliminace	170
6.3.4.	Přesmyky	170
6.3.4.1.	Přesmyky nasycených systémů	170
6.3.4.1.1.	Nukleofilní přesmyky	170

6.3.4.1.2.	Elektrofilní přesmyky na nasyceném atomu C	172
6.3.4.2.	Přesmyky nenasyčených systémů	172
6.3.4.3.	Cyklické přesmyky	173
6.3.4.4	Intramolekulární aromatické přesmyky	173

1.1. Nejčastější historické mezilehlé struktury

V této kapitole se zabýváme nejčastějšími historickými mezilehlými strukturami, které vznikají při reakcích organických sloučenin. Tyto struktury jsou důležitým článkem mezi výchozími reaktanty a konečnými produkty a jejich znalost umožňuje lépe porozumět mechanismu reakce.

1.1.1. Stanovení sumárního vzorce

Prvním krokem při řešení jakékoli organické úlohy je stanovení sumárního vzorce. Tento vzorec udává celkový počet atomů uhlíku, vodíku, kyslíku, dusíku a halogenů v molekule. Pro stanovení sumárního vzorce je třeba znát počet atomů každého prvku v reaktantech a produktech a porovnat je.

Sumární vzorec lze také odvodit z elementární analýzy, která poskytuje podíl hmotnosti jednotlivých prvků v sloučenině. Z těchto údajů lze vypočítat počet atomů každého prvku v molekule a tímto způsobem získat sumární vzorec.

Sumární vzorec je velmi užitečný nástroj pro ověření správnosti navrženého mechanismu reakce. Pokud se sumární vzorec reaktantů neshoduje s sumárním vzorcem produktů, znamená to, že mechanismus je chybný.

1.1.2. První organická syntéza

První organická syntéza byla provedena v roce 1828 německým chemikem Friedrichem Wöhlerem. Wöhler se pokusil připravit kyanid kyseliny z anhydridu kyanid kyseliny a oxidu železnatého. Výsledkem této reakce byla kyanid kyselina, což bylo první uměle připravené organické sloučeniny.

Tato reakce ukázala, že organické sloučeniny lze připravit z anorganických reaktantů, což vyvrátilo dlouholetou teorii vitalismu, která tvrdila, že organické sloučeniny mohou být připraveny pouze z živých organismů.

Wöhlerova reakce je známa jako první organická syntéza a je důležitým milníkem v historii chemie.

Sumární vzorec kyanid kyseliny je HCN . Sumární vzorec anhydridu kyanid kyseliny je N_2O .

Sumární vzorec oxidu železnatého je FeO .

Sumární vzorec kyanid kyseliny je HCN .

Sumární vzorec kyanid kyseliny je HCN .