Organická chemie

Organické sloučeniny- sloučeniny uhlíku s výjimkou těch nejjednodušších (tj. mimo CO/CO_2, kyseliny uhličité a jejich sloučenin, sirouhlíku, karbidů, kyanovodíku a jeho sloučeniny) → asi 20 milionů známých organik

Friedrich Wöhler- původně se věřilo, že organika se tvoří pouze v živých organismech- 1828 uměle připravil močovinu → dnes se syntetizují dokonce v přírodě neexistující organika (např. plasty)

Organika obsahují většinou i vodík, méně často pak kyslík, dusík, halogeny, fosfor a síru (další prvky jen výjimečně)

Organika slouží jako léčiva, barviva, pesticidy, saponáty, polymery (plasty, textilní vlákna)

Uhlík je v organikách vždy **čtyřvazný** a má schopnost se řetězit

Proč uhlík?

Následující platí pro podmínky na Zemi (kde je hlavním rozpouštědlem tekutá voda)- vylučovací metoda:

1) Homoatomické řetězce ← jelikož základní struktura musí být stabilní, homoatomické řetězce eliminují nepolární vazby i parciální náboje
    a. *Řetězí se pouze S, Si, C, Ge, Se, B, N, P, Ge, As, I*
2) Vysoká vaznost- pro komplexní řetězce, které jsou nutné k přenosu informací, je potřeba alespoň 3-vaznost
    a. *Obecně pouze skupiny III.A-V.A- nejefektivnější je 4-vaznost (C+Si)*
3) Četný výskyt- obecně lehčí prvky
    a. *Omezeno na 1.-3. periodu + vylučuje B*
4) Stabilita řetězců- vazba X—X musí mít vysokou vazebnou energii, aby zajistila vysokou stabilitu řetězce- nejsilnější vazbu (o 50%) z nabízejících se prvků má C—C → „neměnný“ řetězec + reakce probíhají na funkčních skupinách
    a. *Vylučuje Si a N*
5) Elektronegativita- elektronegativní prvky jsou náchylné k redukci a elektropozitivní k oxidaci- řetězce se pak v prostředí redoxních činidel (celá Země) rozpadají → uhlík se nachází „uprostřed“ elektronegativit prvků (2,5)
6) Orbitaly- uhlík má v p-orbitalu prostor pro 4 uhlíky, poté dosáhne oktetu a všechny orbitaly jsou zaplněny
    a. *Křemík- již existuje 3d-orbital → nestabilita*

*Křemík tvoří ekvivalentní sloučeniny „organické chemie“, ale jsou výrazně méně stabilní

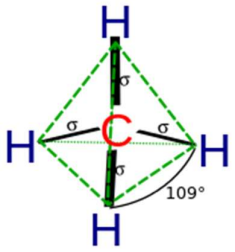
Excitace uhlíku

C (základní stav)	**C*** (excitovaný stav)
$1s^2 2s^2 \mathbf{2p^2}$	$1s^2 2s^1 \mathbf{2p^3}$ (elektron ve vyšším orbitalu)
2 nepárové elektrony=2 kovalentní vazby	Vždy čtyřvazný

Excitací dojde k hybridizaci (smíšení orbitalů) *s* a *p* ← energeticky jsou zhruba na stejné úrovni → dva orbitaly se chovají jako jeden (dohromady mají pravidelný tvar)

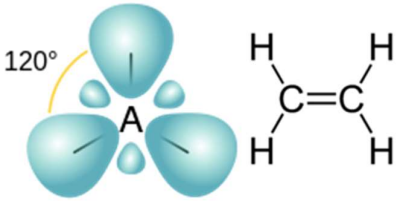
Všechna organika tedy potřebují excitovaný uhlík, ten energii získává právě při chemických reakcích

Typy hybridizace

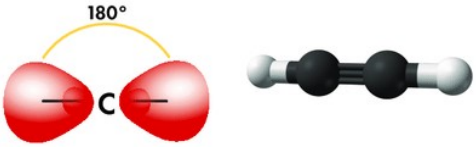


Typ energetického sjednocení orbitalu umožňuje předpovědět tvar a strukturu organika

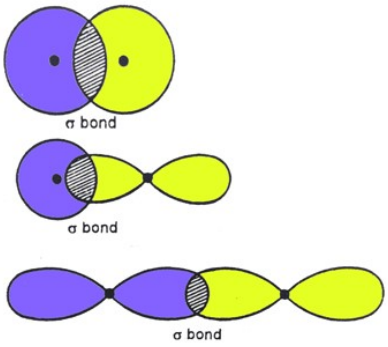
1) **Hybridizace sp^3**
    a. 4x jednoduché σ-vazby
    b. Tetraedr (prostorový čtyřstěn)
    c. Vazebný úhel 109,5°
2) **Hybridizace sp^2**
    a. 3x σ-vazba (1 elektron pro π-vazbu → 1x dvojná vazba
        i. π-vazba má oboustranné překrytí spojnici jader → neovlivňuje hybridizaci
    b. Rovnostranný trojúhelník
    c. Vazebný úhel 120°

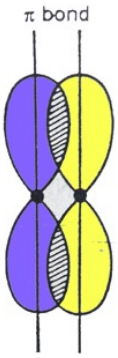


3) **Hybridizace sp**
    a. 2x σ-vazba (2 elektrony pro π-π překrytou vazbu → 1x trojná vazba)
    b. Lineární
    c. Vazebný úhel 180°



V nehybridizovaném metanu by úhel byl max. 90° → hybridizace umožňuje symetrii a vyšší vazebné úhly (109,5°) → vyšší stabilita uhlíku → hybridizace je energeticky výhodná





Organické sloučeniny

Vždy obsahují uhlík- mohou obsahovat také vodík, kyslík, dusík, síru, halogeny…

- **Uhlovodíky**- pouze uhlík a vodík
- **Deriváty uhlovodíků**- obsahují i jiné prvky- lze je odvodit spojením zbytku uhlovodíku s funkční skupinou

Vlastnosti:

- Nestabilní při vyšších teplotách (>200°C)
- Nízké teploty tání a varu
- Mnohdy hořlavé, jedovaté či karcinogenní

- Častěji snadno zápalné
- Častěji výbušné
- Většinou se vyskytují ve směsích (X anorganika)
- **Vazby**- nejčastěji kovalentní- násobné vazby jsou kratší a pevnější:
    - Nepolární- nejčastěji
        - Jednoduché (C—C; C—H)
        - Dvojné (C=C)
        - Trojné (C≡C)
    - Polární (C—X, C—O, C—N)

  →Nevodivé

  →Rozpustné v organických rozpouštědlech

Získávají se syntézou nebo z přírodních zdrojů (viz Výchozí organické suroviny)

<u>Vaznost</u>

Vychází ze základních hydridů (kovalentní vazby)

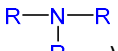
- Uhlík (C)- čtyřvazný (CH_4)
- Dusík (N)- trojvazný (NH_3)
- Kyslík (O)- dvojvazný (H_2O)
- Síra (S)- dvojvazný (H_2S)
- Halogeny (X)- jednovazné (HX)
- Vodík (H)- jednovazný

Kationt=vyšší vaznost (např. NH_4^+)

<u>Deriváty uhlovodíků</u>

- Uhlovodíkový zbytek (R)- vzniká odtržením vodíků
- Funkční skupina (značka prvku)- atomy / skupina atomů nahrazující vodík

Typy derivátů:

- Halogenderiváty (R—X)
- Nitrosloučeniny (R—NO_2)
- Aminy (R—NH_2; R—NH; )
- Hydroxysloučeniny
    - Alkoholy- R=alkyl (R—OH)
    - Fenoly- R=aryl (R—OH)
- Ethery (R—O—R)
- Karbonylové sloučeniny
    - Aldehydy (R—CHO)
    - Ketony (R—CO-R)
- Karboxylové kyseliny (R—COOH)
- Deriváty karboxylových kyselin (substituce H v karboxylové skupině)
    - Soli- M=kov (R--COOM)
    - Estery (R—COOR)

- Amidy (R—$CONH_2$)
- Halogenidy (R—COX)
- Nitrily (R—CN)
- Anhydridy (R—CO—O—CO—R)

Struktura organik

Závisí nejen na pořadí a poloze atomů, ale i orientaci vazeb a prostorovém uspořádání → stereochemie

Organika s rozdílnými vlastnostmi (určenými vazbami či prostorovým uspořádáním) mohou mít stejné stechiometrické vzorce, dokonce i sumární vzorce

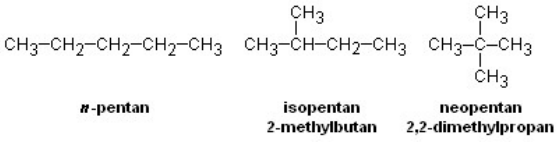
Izomerie

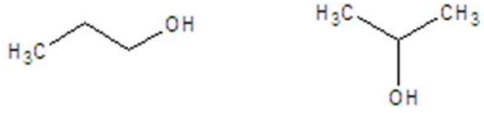
Jev, při kterém mají sloučeniny stejný sumární vzorec, ale liší se strukturou (prostorovým uspořádáním, typem vazeb…)

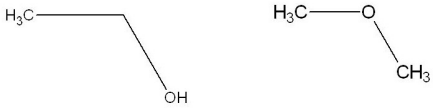
Izomery se často liší chemickými i fyzikálními vlastnostmi → izomerii musí reflektovat názvosloví

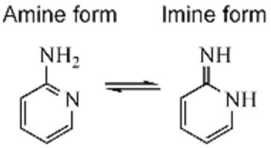
Konstituční izomery

Jiná **konstituce**- liší se pořadím či polohou atomů:

- **Řetězcové**- liší se uspořádáním řetězce
  - 

- **Polohové**- liší se umístěním funkční skupiny nebo násobné vazby
  - 

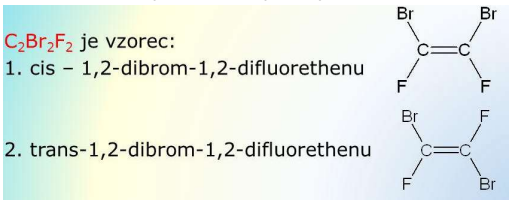
- **Skupinové**- atomy tvoří rozdílné funkční skupiny
  - 

    (Ethanol X Diethylether)
  - Tautomery- liší se polohou dvojné vazby a přesně jednoho vodíku- důležité pro DNA/RNA
    - 

Konfigurační izomery

Stejný souhrnný vzorec i konstituce- liší se prostorovou orientací (**konfigurací**)

- **Konformační** izomerie (konformery)- způsobena rotací kolem jednoduché vazby- považovány z stejnou látku
    - Zákrytová- max. energie- nejméně stabilní
    - Nezákrytová- min. energie- nejstabilnější
- **Geometrická** izomerie (cis-trans)- vyskytují se u vazeb, které nemohou rotovat (dvojné, cyklické)
    - Cis-izomery (Z)- na stejné straně roviny (stejná polovina molekuly)
    - Trans-izomery (E)- na opačných stranách roviny/molekuly



    - Enantiomery- zrcadlově otočené funkční skupiny (tzv. chiláty)- stejné fyzikálně-chemické vlastnosti- pouze polarizace světla v opačné rovině (+/- či R/S)

*Priorita- čísla v izometrických vzorcích- pro jednotlivé atomy mají nejlehčí atomy nejnižší prioritu (číslo)

Konformace

Různé prostorové uspořádání jedné sloučeniny- za pomoci rotace kolem jednoduché vazby

Převládá konformace, která je za dané teploty nejstabilnější

Organické reakce

Většinou pomalé, za vysokých teplot a tlaků → složitý průběh

Elementární typy- složitější reakce jsou jejich sekvencemi:

- **Adice**
- **Eliminace**
- **Substituce**
- **Přesmyk**

Substrát- výchozí (měněná) látka- většinou ta složitější

Činidlo- látka vyvolávající změnu / měnící strukturu substrátu…

Způsob (rychlost) reakce:

- Monomolekulární reakce- rozpouštědlo vytvoří z činidla iontový pár → iont okamžitě reaguje se substrátem → rychlost reakce závisí pouze na rychlosti disociace a stabilitě iontů rozpouštědla
- Bimolekulární reakce- činidlo a substrát vytvoří přechodný komplex, který se rozpadá na produkty → rychlost reakce je vázána na substrát i činidlo

Dle štěpení vazeb

- **Homolýza (symetrické)** – vazba atomů s podobnou elektronegativitou → vzniklé částice si ponechají polovinu elektronů → **radikály**
  - $A - B \rightarrow A\cdot + B\cdot$
- **Heterolýza (asymetrické)** – elektronegativnější částice si ponechá všechny elektrony → **ionty** – aniontem je elektronegativnější z atomů
  - $A - B \rightarrow A^+ + B^-$
  - **Elektrofil**- kation (kladný)
  - **Nukleofil**- anion (záporný)

Dle činidla

Určují podrobný typ reakce (např. elekrofilní substituce)

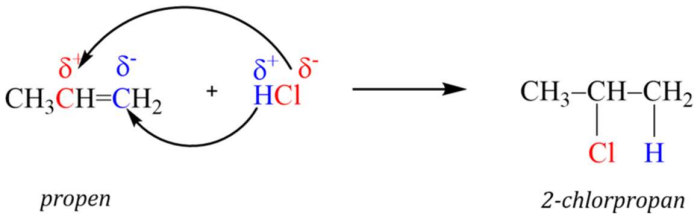
- Radikálové reakce → homolytické štěpení vazeb
- Elektrofilní činidla (např. Br^+, BF_3, $AlCl_3$)- přitahují elektrony → napadají části substrátu se záporným parciálním nábojem → heterolýza
- Nukleofilní činidla (např. OH^-, H_2O, NH_3)- nepárový elektron- poskytují elektrony → napadají atomy substrátu s parciálním kladným nábojem

Dle strukturálních změn

Adice

Dochází k zániku π-vazeb a vzniku σ-vazeb (zanikají násobné vazby / zjednodušují se) → pouze u organik s násobnou vazbou

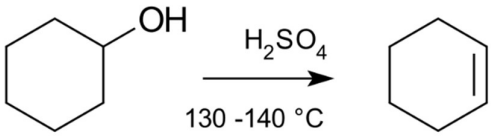
Na násobnou vazbu se váže částice



Eliminace (opak adice)

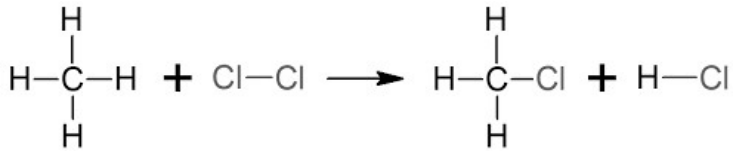
Ze substrátu se odštěpuje částice

Vznikají π-vazby → dvojné nebo dvojné přechází v trojné



Substituce

Nahrazení atomu/skupiny jiným atomem/skupinou- nejčastější reakce

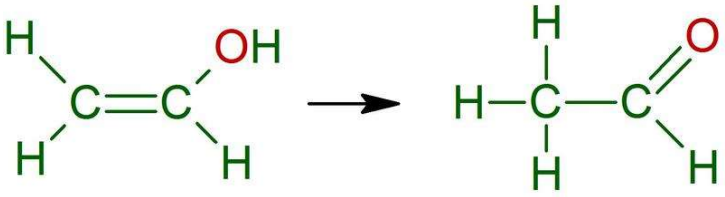


Přesmyk (intramolekulární substituce)

Přesun atomu/skupiny v rámci jedné molekuly → změna konstituce/konfigurace

Sumární vzorem neměnný → izomery

Způsob stabilizace molekuly

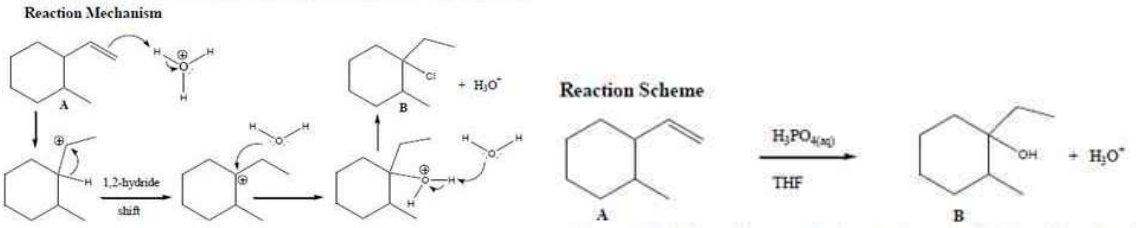


Redoxní reakce

Oxidace (dehydrogenace)	Redukce (hydrogenace)
↑O	↓O
↓H	↑H

Zápis organické reakce

Reakční mechanismus	Reakční schéma
Detailní popis	Přehledné (→ častěji)
Všechny mezi-přeměny	Pouze reaktanty a produkty + podmínky (T, p, katalyzátor)
Meziprodukty	Nemusí splňovat zákon o zachování hmotnosti ($L \neq P$)

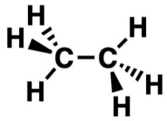


Vzorce

- **Stechiometrické (empirické)**- pouze poměr prvků (výsledek spektrometrie)
  - CH_3
- **Sumární**- skutečný počet prvků
  - C_2H_6
- **Racionální/funkční** (zjednodušený konstituční)- spojení i pořadí atomů pomocí tzv. funkčních skupin- vynechává některé vazby
  - $CH_3—CH_3$ *(ethan)*
- **Zjednodušené racionální** vzorce- nejčastěji- vynechávají mnoho spojnic- geometrické útvary, kde vrcholy jsou uhlíky (+vodíky povětšinou nekreslí)

  -
- **Strukturní** (rozvinutý konstituční)- vazby + struktura a rozmístění atomů- nezobrazují rozmístění v 3D prostoru

  -
- **Konfigurační**- prostorové uspořádání atomů i vazeb



  -

Elektronové- vyznačují volné elektronové páry