

**Sylabus předmětu Organická chemie  
pro bakalářské studijní programy  
Chemie a technická chemie, Farmakochemie a medicínální materiály, Zdravotní laborant**

Druhý semestr, přednášky 52 hodin, semináře 26 hodin,  
ukončení zkouškou.

Akademický rok 2012/2013

**Literatura:**

Základní – povinná:

1. Pytela O.: Organická chemie, Názvosloví a obecné principy (Bakalářský studijní program, 1. sešit), 3. vydání. Univerzita Pardubice, FChT, 2010.
2. Hanusek J.: Organická chemie, Vlastnosti a reaktivita organických sloučenin (Bakalářský studijní program, 2. sešit), 3. vydání. Univerzita Pardubice, FChT, 2010.
3. Hanusek J., Macháček V., Sedlák M.: Sbíрка řešených příkladů z organické chemie, Univerzita Pardubice, FChT, 2011.

Doplňková – doporučená:

4. Macháček V., Panchartek J., Večeřa M.: Organická chemie, 1. část, 3. přepracované vydání. Univerzita Pardubice, FChT, 2004.
5. Macháček V., Panchartek J., Pytela O.: Organická chemie, 2. část, 3. upravené vydání. Univerzita Pardubice, FChT, 2005.

**Sylabus přednášek předmětu podle výukových týdnů, semináře tématicky navazují na přednášky**

**1. týden (4 hod)**

**Předmět organické chemie. Izolovaná molekula a její popis.** Strukturní teorie organických sloučenin, historické aspekty. Trojrozměrný popis organické molekuly, fyzické modely a 3D-projekce. **Chemická vazba v organické molekule a její typy**, kovalentní vazba, hybridizace, vazba jednoduchá, dvojná a trojná. Vaznost atomů. **Chemický vzorec a chemická struktura**, vzorec empirický, sumární, strukturní. Izomerie, konstituční izomery, polohové izomery, tautomery. Primární, sekundární, terciární a kvartérní atom uhlíku. **Chemický název**, názvoslovné systémy. Triviální názvy, semisystematické názvy, systematické názvy. Názvoslovné principy, substituční princip, záměnný princip, funkční skupinový princip, aditivní princip, subtraktivní princip, konjunktivní princip. Pojmy základní struktura, základní hydrid, funkční základ, substituent, charakteristická skupina, hlavní skupina. **Jazyková struktura názvu**, přípona, typy předpon, neodlučitelné předpony, odlučitelné předpony, násobící předpony, numerické předpony (lokanty). **Obecné zásady tvoření názvů**, ukázky aplikace na konkrétních příkladech. **Elektronová struktura izolované molekuly. Elektronové okolí atomu v molekule.** Vazebné elektrony a souvislost s vazností, nevazebné elektrony, nespárovaný elektron a radikály, volný elektronový pár. Počet elektronů v „širokém“ a „blízkém“ okolí atomu, oktetové pravidlo, formální náboj na atomu a celkový náboj. Kationty, anionty, radikály, molekulární částice. Vyznačení volných elektronových párů a nábojů v chemickém vzorci.

**2. týden (4 hod)**

**Chemická vazba.** Jednoduchá kovalentní vazba a procesy jejího vzniku a zániku. Energetický popis vzniku a zániku chemické vazby. Disociační energie vazby, průměrná energie vazby, vztah k pevnosti vazby. Délka vazby, průměrná délka vazby, vztah k pevnosti vazby. Dvojná vazba. Systémy s více dvojnými vazbami, kumulované dvojně vazby, konjugované dvojně vazby, delokalizace, delokalizační (rezonanční) energie, izolované dvojně vazby. Trojná vazba. Vazby v aromatických a heteroaromatických systémech (1*H*-pyrrol, pyridin), Hückelovo pravidlo. **Rozložení elektronů v molekulárních částicích.** Elektronegativita, parciální náboj, polarita vazby. Popis rozložení elektronů v systémech s  $\pi$ -elektrony, volnými elektronovými páry a neobsazenými orbitaly, rezonanční struktury a zásady pro jejich psaní. **Interakce substruktur v molekulárních částicích.** Vymezení substruktur a triáda reakční centrum – základní skelet – substituent, substituční efekt. Induktivní efekt, mezomerní efekt, interakce induktivního a mezomerního efektu. Vztah elektronové struktury a stability molekulárních částic. Formální oxidační stav atomů v molekule.

**3. týden (4 hod)**

**Prostorová struktura izolované molekuly**, stereochemie. **Chiralita**, její typy. Enantiomer, racemát, enantiomerní čistota. Fyzikální, chemické a biologické vlastnosti chirálních sloučenin. **Prostorové uspořádání na jednom atomu.** Molekula methanu. Stereochemické vzorce, vzorec klínkový a Fischerův, operace s Fischerovými vzorci. Bodová chiralita, konfigurace, absolutní konfigurace, její určení a vyznačení v chemickém názvu (konvence *R/S*). Molekuly s více chirálními centry, mesoforma. **Prostorové uspořádání na jednoduché vazbě.** Konformace, konformační izomery. Popis konformace

stereochemickými vzorci, perspektivní projekce, Newmanův vzorec. Atropoizomerie a osová chiralita. Sterická zábrana rezonance. **Prostorové uspořádání na násobných vazbách.** Dvojná vazba, *cis-trans* izomerie a její vyznačení v chemickém názvu (konvence *Z/E*). Trojná vazba. **Prostorová struktura alicyklických sloučenin.** Popis stereochemickými vzorci, Haworthův vzorec. Porovnání konformace cyklopropanového, cyklobutanového, cyklopentanového a cyklohexanového kruhu, sterické napětí. Typické konformace cyklohexanového kruhu, konformace židličková, zkřížená židličková, vaničková, axiální a ekvatoriální polohy. Monosubstituce a disubstituce cyklohexanového kruhu, konfigurační izomery. **Prostorová struktura aromatických a heteroaromatických sloučenin. Interakce mezi molekulami. Fyzikální interakce a jejich projevy.** Vznik van der Waalsových sil (coulombické, indukční a disperzní). Vodíková vazba, intermolekulární a intramolekulární vodíková vazba. Solvatace, solut, solvent, specifická a nespecifická solvatace, solvatační energie. Fyzikální vlastnosti molekul. **Kyselost a bazicita.** Lewisova teorie, elektrofil a nukleofil. Brønstedova teorie, kyselina a báze, určení relativní kyselosti a bazicity.

#### 4. týden (4 hod)

**Chemická reakce.** Elementární chemická reakce, edukty, produkty, substrát, činidlo. Termodynamický popis elementární reakce. Energetická hyperplocha, reakční koordináta, energetický diagram, tranzitní stav (aktivovaný komplex). Princip mikroskopické reverzibility. Aktivační energie. Tepelné zabarvení reakce, reakce exotermické a endotermické. Kinetický popis elementární reakce. Rychlost chemické reakce, kinetická rovnice, rychlostní konstanta a její vztah k aktivační energii. Sled elementárních reakcí, následné reakce, intermediát, pomalý a rychlý krok. Vztah mezi termodynamikou, kinetikou a složením produktů reakce, regioselektivita, kinetická a termodynamická kontrola reakce. Vnitřní a vnější faktory ovlivňující průběh chemických reakcí. Klasifikace chemických reakcí. Molekularita reakce a řád reakce. Adice, eliminace, substituce, přesmyk. Elektrofilní, nukleofilní a radikálové reakce. Oxidace, redukce, disproportionace. **Katalýza.** Podstata, katalyzátor, rozdělení katalýzy podle fáze. Homogenní katalýza, katalýza kyselá a zásaditá, elektrofilní a nukleofilní. Heterogenní katalýza. **Chemická rovnováha.** Obecná chemická rovnováha, dynamický charakter, rovnovážná konstanta a její vztah k energii složek v rovnováze. Tautomerní rovnováhy. Acidobazické rovnováhy, disociační konstanta,  $pK_a$ . **Mechanismy organických reakcí.** Strukturní motivy a předpověď reaktivity, centrum nestability/reaktivity v molekule, princip podobnosti a předpověď reaktivity.

#### 5. týden (4 hod)

**Metodika návrhu reakčního mechanismu.**

#### 6. týden (4 hod), písemný test

**Alkany:** Názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Mechanismus radikálové substituce, regioselektivita. Radikálové substituce na alkanech (halogenace, sulfochlorace, sulfoxidace, oxidace). Radikálové dehydrogenace, tepelné krakování. **Cykloalkany:** Názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Radikálové substituce, porovnání s alkany. Reakce cyklopropanu (otevření kruhu při reakci s vodíkem, halogeny, kyselinou sírovou, manganistanem draselným). **Alkeny a dieny:** Názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Mechanismus elektrofilní adice na nepolarizované násobné vazbě, regioselektivita, stereochemický průběh. Elektrofilní adice na dvojnou vazbu (adice halogenvodíků, HOX, halogenů, vody a alkoholů za kyselých katalýz, diboranu). Mechanismus radikálové adice na nepolarizované dvojnou vazbu, regioselektivita. Radikálové adice na dvojnou vazbu (adice bromovodíku za přítomnosti peroxidů). Polymerace. **Alkeny a dieny:** Redukce (hydrogenace). Oxidace (oxidace ethenu kyslíkem na stříbře, oxidace peroxykyselinami, hydroxylace manganistanem draselným a oxidem osmičelým). Oxoprocес (hydroformylace). Cykloadice (adice karbenů, [4+2] cykloadice). Radikálová substituce na  $\alpha$ -uhlíku (halogenace, oxidace). **Alkyny:** Názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Elektrofilní adice na trojnou vazbu, srovnání s alkeny (adice halogenvodíků, halogenů, vody a alkoholů). Redukce (hydrogenace). Reakce terminálních alkinů.

#### 7. týden (4 hod)

**Aromatické uhlovodíky (aromáty, areny):** Názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Mechanismus elektrofilní aromatické substituce. Elektrofilní aromatické substituce na arenech (nitrace, halogenace, sulfonace, chlorsulfonace, Friedelova-Craftsova alkylace a acylace). Radikálové adice (fotochemická adice chloru). Redukce (adice vodíku). Oxidace (oxidace aromatického jádra za vzniku anhydridů). Reakce v postranním řetězci aromatického jádra (radikálové substituce, oxidace). **Heterocyklické sloučeniny:** Klasifikace, názvosloví. **Heteroaromáty:** Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Struktura, vztah struktury pětičlenných a šestičlenných heterocyklů k reaktivitě s elektrofilny a nukleofily. **Pětičlenné heteroaromáty s jedním heteroatomem:** Porovnání reaktivity pětičlenných heteroaromátů při reakci s elektrofilny. Elektrofilní substituce na jádře furanu (reakce s protonem, nitrace, halogenace, sulfonace, acylace, azokopulace), hydrogenace, cykloadice. Reakce 1H-pyrrolu na dusíku, elektrofilní substituce na jádře 1H-pyrrolu (reakce s protonem, nitrace, halogenace, sulfonace, acylace, azokopulace). Elektrofilní substituce na jádře thiofenu (nitrace, halogenace, sulfonace, acylace), hydrogenace. **Šestičlenné heteroaromáty s jedním heteroatomem:** Reakce pyridinu na dusíku

(protonace, oxidace). Reakce pyridinu s elektrofilny (nitrace, halogenace, sulfonace) a s nukleofily. Reakce alkyipyridinů v postranním řetězci.

## 8. týden (4 hod)

**Halogenderiváty:** Struktura funkční skupiny, klasifikace, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Mechanismy nukleofilní substituce na alifatických halogenderivátech, vnitřní a vnější faktory, stereochemický průběh. Nukleofilní substituce na alifatických halogenderivátech s kyslíkatými nukleofily (s vodou, hydroxidovým iontem, alkoholáty a fenoláty, solemi karboxylových kyselin), sírnými nukleofily (s thioláty), dusíkatými (s amoniakem, aminy), uhlíkatými nukleofily (s kyanidovým aniontem, karbanionty). Mechanismy eliminačních reakcí, vnitřní a vnější faktory, regioselektivita, stereochemický průběh, vztah eliminace a nukleofilní substituce. Eliminační reakce alifatických halogenderivátů (dehydrohalogenace, dehalogenace). Reakce alifatických halogenderivátů s halogenem na  $\alpha$ -uhlíku a na uhlíku s  $sp^2$  hybridizací. Mechanismy nukleofilní substituce na aromatických systémech, závislost na substituci. Elektrofilní aromatické substituce na aromatických halogenderivátech. Reakce halogenderivátů s kovy. **Organokovové sloučeniny:** Struktura, názvosloví. Reakce organohečnatých sloučenin (Grignardových činidel) jako bází (s alkyny, sloučeninami s hydroxyskupinou) a nukleofilů (odkaz na další výklad – reakce s karbonylovými sloučeninami, karboxylovými kyselinami a jejich funkčními deriváty).

## 9. týden (4 hod)

**Alkoholy a fenoly:** Struktura funkční skupiny, klasifikace, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobázické vlastnosti alkoholů a fenolů. Nukleofilní substituce hydroxyskupiny (protonovaná hydroxyskupina alkoholů jako nukleofug při nukleofilních substitucích halogenem). Eliminace (kyselá katalyzovaná dehydratace). Alkoholy (alkoholáty) a fenoly (fenoláty) jako nukleofily a báze při nukleofilních substitucích a adicích, reakce s anorganickými kyselinami a jejich halogenidy, alifatickými halogenderiváty, karbonylovými sloučeninami, karboxylovými kyselinami a jejich funkčními deriváty, dalšími sloučeninami s polarizovanou násobnou vazbou. Reakce alkoholů na uhlíku nesoucím hydroxyskupinu (oxidace, dehydrogenace). Oxidace fenolů. Elektrofilní aromatické substituce na aromatickém jádře fenolů a fenolátů (nitrace, halogenace, sulfonace, azokopulace, Kolbeho-Schmittova reakce). **Etery:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobázické vlastnosti etherů. Štěpení etherů kyselinami (nukleofilní substituce na protonovaných etherech). Reakce oxiranu s nukleofily (s vodou, alkoholy, amoniakem, aminy, Grignardovými činidly). Reakce aromatických etherů v jádře.

## 10. týden (4 hod)

**Aldehydy a ketony:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobázické vlastnosti aldehydů a ketonů, enolizace. Reakce karbonylové skupiny s nukleofily, mechanismy nukleofilní adice a nukleofilní substituce na karbonylové skupině. Nukleofilní adice a nukleofilní substituce aldehydů a ketonů s kyslíkatými nukleofily (s vodou, alkoholy), sírnými nukleofily (s thioley, hydrogensířičitanem), dusíkatými nukleofily (s amoniakem, primární aminy, sekundární aminy, hydroxylaminem, hydraziny) a uhlíkatými nukleofily (s kyanidovým iontem, benzoinová kondenzace, Grignardovými činidly, diazomethanem, bázičky katalyzovaná aldolizace, Wittigova reakce). Redukce karbonylové skupiny na hydroxyskupinu – nukleofilní adice hydridového iontu (redukce komplexními hydridy, Cannizzarova reakce, Meerweinova-Ponndorfova-Verleyova redukce), hydrogenace. Redukce karbonylové skupiny na methylenovou skupinu – Clemmensenova redukce, Wolfova-Kižněrova redukce, Mozingova redukce. Oxidace uhlíku karbonylové skupiny aldehydů. Baeyerova-Villigerova oxidace ketonů. Reakce na  $\alpha$ -uhlíku karbonylových sloučenin (reakce konjugovaných bází s halogeny). Elektrofilní adice na dvojně vazbě enolů (adice halogenů, kyselá katalyzovaná aldolizace). Reakce aromatických aldehydů a ketonů v jádře. **Nenasycené karbonylové sloučeniny:** Keteny, struktura, reakce s nukleofily.  $\alpha,\beta$ -Nenasycené karbonylové sloučeniny, reakce s nukleofily. **Dikarbonylové sloučeniny:** Benzilový přesmyk. Kyselost vodíku v 1,3-dikarbonylových sloučeninách. **Chinony:** Struktura, reakce s nukleofily, redukce.

## 11. týden (4 hod)

**Některé dusíkaté sloučeniny. Nitrosloučeníny:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Redukce nitrosloučenína na sloučeniny s dusíkem v nižších formálních oxidačních stavech. Acidobázické vlastnosti alifatických nitrosloučenína. Reakce konjugovaných bází alifatických nitrosloučenína jako nukleofilů. Reaktivita aromatického jádra substituovaného nitroskupinou při elektrofilní a nukleofilní aromatické substituci. **Nitrosloučeníny:** Struktura funkční skupiny. **Oximy:** Struktura funkční skupiny, tautomerie s nitrosloučeníny, hydrolyza, Beckmannův přesmyk. **Hydroxylaminy:** Struktura funkční skupiny, redukce, Bambergerův přesmyk. **Azosloučeniny:** Struktura funkční skupiny, redukce. **Hydrazosloučeniny:** Struktura funkční skupiny, redukce, oxidace, benzidinový přesmyk. **Hydraziny:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Hydraziny jako nukleofily při nukleofilních adicích a substitucích. **Aminy:** Struktura funkční skupiny, klasifikace, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobázické vlastnosti aminů. Aminy jako nukleofily, rozdíly v reaktivitě primárních, sekundárních, terciárních alkyl- a arylaminů při nukleofilních adicích a nukleofilních

substitucích (reakce s alkyhalogenidy, karbonylovými sloučeninami, funkčními deriváty karboxylových kyselin) a při reakci s kyselinou dusitou. Elektrofílní aromatické substituce na jádře aromatických aminů (nitrace, halogenace, sulfonace, azokopulace). **Diazoniové soli:** Struktura funkční skupiny. Fyzikální vlastnosti. Diazoniové soli jako elektrofil (azokopulace). Substituce diazoniové skupiny (Sandmeyerovy reakce, Griessova reakce, Schiemannova reakce). Redukce diazoniové skupiny. **Diazoalkany:** Struktura funkční skupiny, srovnání s diazoniovými solemi. Diazomethan jako báze (reakce s karboxylovými kyselinami), nukleofil (reakce s ketony a acylhalogenidy) a zdroj karbenů (adice na alkeny).

## 12. týden (4 hod)

**Karboxylové a dikarboxylové kyseliny:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobazické vlastnosti karboxylových kyselin. Dekarboxylace karboxylových kyselin. Reakce solí karboxylových kyselin jako nukleofilů (s alkyhalogenidy a acylhalogenidy), tepelná dekarboxylace, radikálové dekarboxylace (reakce s halogeny, oxidace na anodě). Reakce karboxylových kyselin na karboxylové skupině s halogenidy anorganických kyselin, alkoholy (esterifikace), aminy, hydridovým anionem. Dehydratace. Reakce alifatických karboxylových kyselin na  $\alpha$ -uhlíku (halogenace). Reakce aromatických karboxylových kyselin v jádře (elektrofílní aromatické substituce). **Funkční deriváty karboxylových kyselin:** Přehled a obecná struktura. Mechanismus nukleofilní substituce na karbonylovém uhlíku, porovnání reaktivity při reakcích s nukleofily. **Acylhalogenidy:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Reakce s nukleofily (s vodou, alkoholy, fenoly, solemi karboxylových kyselin, aminy, diazomethanem). Další reakce acylhalogenidů (redukce vodíkem, reakce s areny, dehydrohalogenace). **Anhydridy kyselin:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Reakce s nukleofily (s vodou, alkoholy, fenoly, aminy, Grignardovými činidly). Další reakce anhydridů (s účastí  $\alpha$ -uhlíku – Perkinova syntéza, s areny). **Estery karboxylových kyselin:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Reakce s nukleofily (s vodou, alkoholy, fenoly, aminy, Grignardovými činidly, hydridovým anionem). Další reakce esterů (redukce vodíkem, acyloinová kondenzace, s účastí  $\alpha$ -uhlíku – alkylace a Claisenova kondenzace).

## 13. týden (4 hod)

**Amidy karboxylových kyselin:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Acidobazické vlastnosti amidů. Reakce s nukleofily (s vodou, Grignardovými činidly, hydridovým anionem). Redukce amidů vodíkem. Reakce s elektrofil (s kyselinou dusitou, halogeny). Amidy jako nukleofily (reakce s halogenderiváty). Další reakce amidů (dehydratace). **Nitrily:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Reakce s nukleofily (s vodou, alkoholy, Grignardovými činidly, hydridovým anionem). Další reakce nitrilů (redukce vodíkem). **Nenasycené karboxylové kyseliny a substituční deriváty karboxylových kyselin:** Přehled a názvosloví. Elektrofílní a nukleofilní adice na nenasycené karboxylové kyseliny a jejich funkční deriváty. Reakce halogenkyselin s nukleofily. Chování hydroxy- a aminokyselin při zahřívání. Kyselost vodíku v esterech 3-oxokyselin, hydrolyza 2-alkyl-3-oxoesterů. **Organické sloučeniny síry: Thioly a thiofenoly:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální a fyziologické vlastnosti. Thioly a thiofenoly jako kyseliny (srovnání s alkoholy). Thioláty a thiofenoláty jako nukleofily (reakce s alifatickými halogenderiváty). Oxidace na atomu síry (sulfenové kyseliny, sulfinové kyseliny, sulfonové kyseliny, disulfidy). **Sulfidy a disulfidy:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Oxidace sulfidů a redukce disulfidů. **Sulfoxidy a sulfony:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Oxidace a redukce sulfoxidů. **Sulfokyseliny a jejich funkční deriváty:** Struktura funkční skupiny, názvosloví. Fyzikální vlastnosti. Acidobazické vlastnosti sulfonových kyselin a sulfonamidů. Reakce sulfonylchloridů s nukleofily (s vodou, alkoholy, aminy). Sulfonylchloridy jako elektrofil (reakce s areny). Redukce sulfonylchloridů. **Deriváty kyseliny uhličitě:** Názvosloví a přehled významných derivátů. Fosgen, jeho reakce s nukleofily a s areny. Isokyanáty a jejich reakce s nukleofily. Močovina, thiomčovina.

*Po odpřednášení obecných principů organické chemie bude v 6. týdnu psán semestrální test v rozsahu 30 min. Tento test je možné absolvovat v jednom ze dvou termínů (jeden ranní, druhý večerní), a to ve dnech:*

**26. března 2013 (19.00 – 19.30, učebna C1, C2) nebo**

**27. března 2013 (7.20 – 7.50, učebna C1, C2).**

**Další náhradní termíny nebudou vypisovány!** Pozdější varianta zadání může být poněkud obtížnější, aby se vyvážilo jisté zvýhodnění spočívající ve znalosti první varianty.

*Zkoušení předmětu je ústní. Zkoušející položí dvě otázky v rozsahu uvedeném v sylabu. U otázek ze systematické části (6. až 13. týden) bude požadována znalost obecných principů organické chemie souvisejících se zadanými otázkami. Při závěrečné klasifikaci bude přihlíženo k výsledku semestrálního testu.*

*Termíny zkoušky budou vypisovány prostřednictvím informačního systému STAG, přihlášení na zkoušku rovněž přes STAG. Ke zkoušce je možno se přihlásit bez ohledu na výsledek semestrálního testu.*