

KAPITOLA

1

Struktura a vazba

1

1.1	Struktura atomů: jádro	3
1.2	Struktura atomů: orbitaly	3
1.3	Struktura atomů: elektronové konfigurace	5
1.4	Vývoj teorie chemické vazby	5
1.5	Popis chemické vazby: teorie kovalentních vazeb	8
1.6	Hybridní orbitaly sp^3 a struktura methanu	9
1.7	Hybridní orbitaly sp^3 a struktura ethanu	10
1.8	Hybridní orbitaly sp^2 a struktura ethenu	11
1.9	Hybridní orbitaly sp a struktura ethynu	13
1.10	Hybridizace atomů dusíku, kyslíku, fosforu a síry	15
1.11	Popis chemické vazby: teorie molekulových orbitalů	16
1.12	Kreslení chemických struktur	17
	Chemie a život: Organické potraviny – riziko vs. prospěch	20
	Souhrn	21
	Řešení úloh	21
	Úlohy	22

KAPITOLA

2

Polární kovalentní vazby; kyseliny a báze

29

2.1	Polární kovalentní vazby: elektronegativita	29
2.2	Polární kovalentní vazby: elektrický dipólový moment	31
2.3	Formální náboje	33
2.4	Rezonance	35
2.5	Pravidla pro psaní rezonančních struktur	37
2.6	Kreslení rezonančních struktur	38
2.7	Kyseliny a báze: Brønstedova definice	41
2.8	Síla kyselin a bází	42
2.9	Použití hodnot pK_a k předpovídání acidobazických reakcí	44
2.10	Organické kyseliny a organické báze	45
2.11	Kyseliny a báze: Lewisova definice	47
2.12	Nekovalentní interakce mezi molekulami	51
	Chemie a život: Alkaloidy – od kokainu k dentálním anestetikům	53
	Souhrn	54
	Úlohy	55

KAPITOLA

3

Organické sloučeniny:
alkany a stereochemie alkanů

61

3.1	Funkční skupiny	61
3.2	Alkany a isomery alkanů	67
3.3	Alkylové skupiny	70
3.4	Názvosloví alkanů	72
3.5	Vlastnosti alkanů	77
3.6	Konformace ethanu	78
3.7	Konformace dalších alkanů	80
	Chemie a život: Benzín	84
	Souhrn	85
	Úlohy	85

KAPITOLA

4

Organické sloučeniny: cykloalkany
a stereochemie cykloalkanů

91

4.1	Názvosloví cykloalkanů	92
4.2	Isomerie <i>cis/trans</i> cykloalkanů	94
4.3	Stabilita cykloalkanů: úhlové pnutí	96
4.4	Konformace cykloalkanů	98
4.5	Konformace cyklohexanu	99
4.6	Axiální a ekvatoriální vazby v cyklohexanu	101
4.7	Konformace monosubstituovaných cyklohexanů	104
4.8	Konformační analýza disubstituovaných cyklohexanů	106
4.9	Konformace polycyklických molekul	109
	Chemie a život: Molekulová mechanika	111
	Souhrn	112
	Úlohy	113

KAPITOLA

5

Stereochemie

119

5.1	Enantiomery a tetraedrický atom uhlíku	119
5.2	Chiralita	121
5.3	Optická aktivita	123
5.4	Pasteurův objev enantiomerů	125
5.5	Pravidla posloupnosti a označování konfigurace	126
5.6	Diastereoisomery	131
5.7	<i>meso</i> -Sloučeniny	133
5.8	Racemáty a jejich dělení	135
5.9	Stručný přehled isomerie	137

5.10	Chiralita sloučenin dusíku, fosforu a síry	139
5.11	Prochiralita	140
5.12	Chiralita v přírodě a v chirálním prostředí	142
	Chemie a život: Chirální léčiva	144
	Souhrn	145
	Úlohy	146

KAPITOLA

6

Přehled reakcí organických reakcí

155

6.1	Typy reakcí organických sloučenin	155
6.2	Jak probíhají organické reakce: mechanismy reakcí	156
6.3	Radikálové reakce	157
6.4	Iontové reakce	160
6.5	Příklad iontové reakce: adice HBr na ethen	163
6.6	Používání zahnutých šipek v mechanismech polárních reakcí	166
6.7	Popisujeme reakci: rovnováhy, rychlosti a energetické změny	168
6.8	Popisujeme reakci: disociační energie vazeb	171
6.9	Popisujeme reakci: energetické diagramy a přechodové stavy	173
6.10	Popisujeme reakci: meziprodukty	175
6.11	Porovnání biologických reakcí a reakcí v laboratoři	177
	Chemie a život: Odkud se berou léčiva?	179
	Souhrn	181
	Úlohy	182

KAPITOLA

7

Alkeny: struktura a reaktivita

189

7.1	Průmyslová výroba a využití alkenů	189
7.2	Výpočet stupně nenasycenosti	191
7.3	Názvosloví alkenů	193
7.4	Isomerie <i>cis/trans</i> v alkenech	195
7.5	Stereochemie alkenů a konfigurace <i>E/Z</i>	197
7.6	Stabilita alkenů	199
7.7	Elektrofilní adiční reakce alkenů	201
7.8	Orientace při elektrofilních adicích: Markovnikovovo pravidlo	204
7.9	Struktura a stabilita karbokationtů	207
7.10	Hammondův postulát	209
7.11	Potvrzení mechanismu elektrofilní adice: přesmyky karbokationtů	212
	Chemie a život: Biologický průzkum: hledání přírodních látek	214
	Souhrn	215
	Úlohy	216

KAPITOLA

8

Alkeny: reakce a syntéza

223

8.1	Příprava alkenů: ukázka eliminačních reakcí	223
8.2	Halogenace alkenů: adice X_2	225
8.3	Halogenhydriny z alkenů: adice HOX	227
8.4	Hydratace alkenů: adice H_2O pomocí hydroxymerkurace	229
8.5	Hydratace alkenů: adice H_2O pomocí hydroborace	231
8.6	Redukce alkenů: hydrogenace	235
8.7	Oxidace alkenů: epoxidace a hydroxylace	238
8.8	Oxidace alkenů: štěpení na karbonylové sloučeniny	241
8.9	Adice karbenů na alkeny: syntéza cyklopropanů	243
8.10	Radikálové adice na alkeny: polymery s řetězovým růstem	245
8.11	Biochemické adice radikálů na alkeny	248
8.12	Stereochemický průběh reakce: adice vody na achirální alken	250
8.13	Stereochemický průběh reakce: adice vody na chirální alken	251
	Chemie a život: Terpeny: přírodní alkeny	252
	Souhrn	254
	Přehled reakcí	255
	Úlohy	257

KAPITOLA

9

Alkyny: úvod do organické syntézy

267

9.1	Názvosloví alkynů	267
9.2	Příprava alkynů. Eliminační reakce dihalogenderivátů	268
9.3	Reakce alkynů. Adice HX a X_2	269
9.4	Hydratace alkynů	271
9.5	Redukce alkynů	274
9.6	Oxidační štěpení alkynů	276
9.7	Acidita alkynů. Vznik acetylidových aniontů	277
9.8	Alkylace acetylidových aniontů	278
9.9	Úvod do organické syntézy	280
	Chemie a život: Umění organické syntézy	283
	Souhrn	284
	Přehled reakcí	285
	Úlohy	286

KAPITOLA

10

Halogenalkany

293

10.1	Názvosloví a vlastnosti halogenalkanů	294
10.2	Příprava halogenalkanů z alkanů: radikálová halogenace	295
10.3	Příprava halogenalkanů z alkenů: allylová bromace	298
10.4	Stabilita allylového radikálu: znovu rezonance	299

10.5	Příprava halogenalkanů z alkoholů	302
10.6	Reakce halogenalkanů. Grignardova činidla	303
10.7	Reakce organokovových sloučenin s organickými halogenderiváty	304
10.8	Oxidace a redukce v organické chemii	307
	Chemie a život: Přírodní organické halogenderiváty	309
	Souhrn	310
	Přehled reakcí	311
	Úlohy	312

KAPITOLA

11

Reakce halogenalkanů. Nukleofilní substituce a eliminace 317

11.1	Objev nukleofilních substitučních reakcí	317
11.2	Reakce S_N2	320
11.3	Význačné rysy reakcí S_N2	322
11.4	Reakce S_N1	328
11.5	Význačné rysy reakcí S_N1	332
11.6	Biochemické substituční reakce	336
11.7	Eliminační reakce. Zajcevovo pravidlo	338
11.8	Reakce E2 a deuteriový izotopový efekt	341
11.9	Eliminační reakce a konformace cyklohexanu	344
11.10	Reakce E1 a E1cB	345
11.11	Biochemické eliminační reakce	347
11.12	Souhrn reaktivity: reakce S_N1 , S_N2 , E1, E1cB a E2	347
	Chemie a život: Zelená chemie	349
	Souhrn	350
	Přehled reakcí	351
	Úlohy	352

KAPITOLA

12

Určování struktury: hmotnostní spektrometrie a infračervená spektroskopie 361

12.1	Hmotnostní spektrometrie malých molekul: přístroje s magnetickým sektorem	361
12.2	Interpretace hmotnostních spekter	363
12.3	Hmotnostní spektrometrie některých běžných funkčních skupin	367
12.4	Hmotnostní spektrometrie v biochemii: přístroje <i>time-of-flight</i> (TOF)	369
12.5	Spektroskopie a elektromagnetické spektrum	370
12.6	Infračervená spektroskopie	372
12.7	Interpretace infračervených spekter	373
12.8	Infračervená spektra některých běžných funkčních skupin	376

Chemie a život: Rentgenová difrakční spektrometrie	380
Souhrn	380
Úlohy	381

KAPITOLA 13

Určování struktury: nukleární magnetická rezonanční spektroskopie 387

13.1 Nukleární magnetická rezonanční spektroskopie	387
13.2 Podstata spektroskopie NMR	389
13.3 Chemický posun	391
13.4 Spektroskopie ^{13}C NMR: akumulace spekter a FT-NMR	393
13.5 Charakteristické rysy spektroskopie ^{13}C NMR	394
13.6 Technika DEPT ve spektroskopii ^{13}C NMR	396
13.7 Využití spektroskopie ^{13}C NMR	398
13.8 Spektroskopie ^1H NMR a ekvivalence protonů	399
13.9 Chemické posuny ve spektrech ^1H NMR	401
13.10 Integrace spektra ^1H NMR: počet atomů vodíku	403
13.11 Spin-spinové štěpení ve spektrech ^1H NMR	404
13.12 Složitější spin-spinové štěpení signálů	408
13.13 Použití spektroskopie ^1H NMR	410

Chemie a život: NMR-zobrazování	411
Souhrn	412
Úlohy	412

KAPITOLA 14

Konjugované dieny a ultrafialová spektroskopie 423

14.1 Stabilita konjugovaných dienů: teorie molekulových orbitalů	424
14.2 Elektrofilní adice na konjugované dieny: allylové karbokationty	427
14.3 Kinetické a termodynamické řízení reakcí	430
14.4 Dielsova–Alderova cykloadiční reakce	432
14.5 Charakteristické rysy Dielsovy–Alderovy reakce	433
14.6 Polymery dienů: přírodní a syntetické kaučuky	437
14.7 Stanovení struktury konjugovaných systémů: ultrafialová spektroskopie	438
14.8 Interpretace ultrafialových spekter. Vliv konjugace	441
14.9 Konjugace, barevnost a chemie vidění	442

Chemie a život: Fotolitografie	444
Souhrn	445
Přehled reakcí	445
Úlohy	446

KAPITOLA

15

Benzen a aromaticita 453

15.1	Zdroje a názvosloví aromatických sloučenin	454
15.2	Struktura a stabilita benzenu	456
15.3	Aromaticita a Hückelovo pravidlo $4n + 2$	459
15.6	Aromatické ionty	461
15.5	Aromatické heterocykly: pyridin a pyrrol	463
15.6	Polycyklické aromatické sloučeniny	465
15.7	Spektroskopie aromatických sloučenin	467
	Chemie a život: Aspirin, nesteroidní protizánětlivá léčiva a inhibitory COX-2	470
	Souhrn	472
	Úlohy	472

KAPITOLA

16

Chemie benzenu:
elektrofilní aromatická substituce 481

16.1	Elektrofilní aromatické substituční reakce: bromace	482
16.2	Další aromatické substituční reakce	484
16.3	Alkylace a acylace aromatických sloučenin: Friedelova–Craftsova reakce	488
16.4	Substituční efekty v substituovaných aromatických sloučeninách	493
16.5	Vysvětlení vlivu substituentů	495
16.6	Trisubstitované benzeny: aditivita efektů	502
16.7	Nukleofilní aromatická substituce	503
16.8	Benzyn	506
16.9	Oxidace aromatických sloučenin	507
16.10	Redukce aromatických sloučenin	509
16.11	Syntéza polysubstituovaných benzenů	511
	Chemie a život: Kombinatoriální chemie	515
	Souhrn	516
	Přehled reakcí	517
	Úlohy	519

KAPITOLA

17

Alkoholy a fenoly 527

17.1	Názvosloví alkoholů a fenolů	528
17.2	Vlastnosti alkoholů a fenolů	529
17.3	Přehled příprav alkoholů	533
17.4	Příprava alkoholů redukcí karbonylových sloučenin	533
17.5	Příprava alkoholů reakcí karbonylových sloučenin s Grignardovými činidly	538
17.6	Reakce alkoholů	542
17.7	Oxidace alkoholů	547
17.8	Chránění alkoholů	549

17.9	Příprava a využití fenolů	551
17.10	Reakce fenolů	553
17.11	Spektroskopie alkoholů a fenolů	555
	Chemie a život: Ethanol: chemikálie, léčivo a jed	558
	Souhrn	559
	Přehled reakcí	560
	Úlohy	562

KAPITOLA

18

Ethery a epoxidy, thioly a sulfidy 573

18.1	Názvosloví a vlastnosti etherů	574
18.2	Syntéza etherů	575
18.3	Reakce etherů: kyselá katalyzované štěpení	577
18.4	Reakce etherů: Claisenův přesmyk	579
18.5	Cyklické ethery: epoxidy	580
18.6	Reaktivita epoxidů: otevírání kruhu	582
18.7	Crownethery	585
18.8	Thioly a sulfidy	586
18.9	Spektroskopie etherů	589

	Chemie a život: Epoxidové pryskyřice a epoxidová lepidla	591
	Souhrn	592
	Přehled reakcí	593
	Úlohy	594

Přehledný úvod ke karbonylovým sloučeninám 605

I.	Typy karbonylových sloučenin	605
II.	Charakter karbonylové skupiny	606
III.	Obecné reakce karbonylových sloučenin	607

	Souhrn	612
	Úlohy	612

KAPITOLA

19

Aldehydy a ketony: nukleofilní adiční reakce 615

19.1	Názvosloví aldehydů a ketonů	616
19.2	Příprava aldehydů a ketonů	618
19.3	Oxidace aldehydů a ketonů	619
19.4	Nukleofilní adiční reakce na aldehydy a ketony	620

19.5	Nukleofilní adice H_2O : vznik hydrátů	623
19.6	Nukleofilní adice HCN : vznik kyanhydrinů	625
19.7	Nukleofilní adice hydridů a Grignardových činidel: vznik alkoholů	626
19.8	Nukleofilní adice aminů: vznik iminů a enaminů	627
19.9	Nukleofilní adice hydrazinu: Wolffova–Kjžněrova reakce	631
19.10	Nukleofilní adice alkoholů: tvorba acetalů a ketalů	633
19.11	Nukleofilní adice fosfonium-ylidů: Wittigova reakce	636
19.12	Biochemické redukce	639
19.13	Konjugovaná nukleofilní adice na α,β -nenasycené aldehydy a ketony	640
19.14	Spektroskopie aldehydů a ketonů	644
	Chemie a život: Enantioselektivní syntéza	648
	Souhrn	649
	Přehled reakcí	650
	Úlohy	652

KAPITOLA

20

Karboxylové kyseliny a nitrily 663

20.1	Názvosloví karboxylových kyselin a nitrilů	664
20.2	Struktura a vlastnosti karboxylových kyselin	666
20.3	Organické kyseliny v živých systémech a Hendersonova–Hasselbalchova rovnice	669
20.4	Vliv substituentů na kyselost	670
20.5	Příprava karboxylových kyselin	672
20.6	Přehled reakcí karboxylových kyselin	675
20.7	Chemie nitrilů	675
20.8	Spektroskopie karboxylových kyselin a nitrilů	680
	Chemie a život: Vitamin C	681
	Souhrn	683
	Přehled reakcí	684
	Úlohy	684

KAPITOLA

21

Funkční deriváty karboxylových kyselin: nukleofilní acylová substituce 695

21.1	Názvosloví funkčních derivátů karboxylových kyselin	696
21.2	Nukleofilní acylová substituce	699
21.3	Nukleofilní acylová substituce v karboxylových kyselinách	703
21.4	Halogenidy kyselin	709
21.5	Anhydridy kyselin	713
21.6	Estery	715
21.7	Amidy	720

21.8	Thioestery a acylfosfáty: biologické deriváty karboxylových kyselin	723
21.9	Polyamidy a polyesterly: polymery se stupňovitým růstem	725
21.10	Spektroskopie derivátů karboxylových kyselin	728
	Chemie a život: β -Laktamová antibiotika	730
	Souhrn	731
	Přehled reakcí	732
	Úlohy	734

KAPITOLA 22

Substituční reakce v α -poloze karbonylové skupiny 745

22.1	Oxo-enol tautomerie	745
22.2	Reaktivita enolů: mechanismus substitučních reakcí v α -poloze	748
22.3	Halogenace aldehydů a ketonů do α -polohy	749
22.4	Bromace karboxylových kyselin do α -polohy	751
22.5	Kyselost atomů vodíku v α -poloze: tvorba enolátového iontu	751
22.6	Reaktivita enolátů	754
22.7	Alkylace enolátů	755
	Chemie a život: Barbituráty	763
	Souhrn	764
	Přehled reakcí	765
	Úlohy	766

KAPITOLA 23

Aldolizace karbonylových sloučenin 775

23.1	Aldolizace karbonylových sloučenin	775
23.2	Aldolizace a α -substituce	777
23.3	Aldolová kondenzace: syntéza enonů	778
23.4	Využití aldolizace v syntéze	780
23.5	Smišené aldolizace	781
23.6	Intramolekulární aldolová kondenzace	782
23.7	Claisenova kondenzace	784
23.8	Smišené Claisenovy kondenzace	786
23.9	Intramolekulární Claisenova kondenzace: Dieckmannova reakce	787
23.10	Konjugované adice: Michaelova adice	789
23.11	Kondenzace karbonylových sloučenin s enaminy: Storkova reakce	791
23.12	Robinsonova anelace	793
23.13	Aldolizace karbonylových sloučenin v biologických systémech	795
23.14	Claisenova kondenzace v biologických systémech	796

Chemie a život: Úvod k metabolickým přeměnám	796
Souhrn	798
Přehled reakcí	798
Úlohy	800

KAPITOLA

24

Aminy a heterocykly 609

24.1	Názvosloví aminů	809
24.2	Struktura a vlastnosti aminů	812
24.3	Bazicitá aminů	813
24.4	Bazicitá arylaminů	813
24.5	Přírodní aminy a Hendersonova-Hasselbalchova rovnice	817
24.6	Syntéza aminů	818
24.7	Reakce aminů	825
24.8	Reakce arylaminů	828
24.9	Heterocyklické aminy	834
24.10	Spektroskopie aminů	839

Chemie a život: Zelená chemie II: iontové kapaliny	842
Souhrn	844
Přehled reakcí	845
Úlohy	847

KAPITOLA

25

Biomolekuly: sacharidy 859

25.1	Klasifikace sacharidů	860
25.2	Zobrazování prostorové stavby sacharidů pomocí Fischerovy projekce	861
25.3	Monosacharidy	864
25.4	Konfigurace aldů	866
25.5	Cyklické struktury monosacharidů: anomery	868
25.6	Reakce monosacharidů	871
25.7	Osm esenciálních monosacharidů	878
25.8	Disacharidy	880
25.9	Polysacharidy a jejich syntéza	882
25.10	Další významné sacharidy	885
25.11	Sacharidy v buněčných stěnách a chřipkové viry	886

Chemie a život: Sladivost	887
Souhrn	888
Přehled reakcí	889
Úlohy	890

KAPITOLA 26

Biomolekuly: aminokyseliny, peptidy a bílkoviny

897

26.1	Struktura aminokyselin	898
26.2	Aminokyseliny a Hendersonova–Hasselbalchova rovnice: izoelektrický bod	902
26.3	Syntéza aminokyselin	905
26.4	Peptidy a bílkoviny	907
26.5	Analýza aminokyselin v peptidech	909
26.6	Stanovení sekvence aminokyselin: Edmanovo odbourávání	910
26.7	Syntéza peptidů	912
26.8	Automatizovaná syntéza peptidů: Merrifieldova syntéza na pevné fázi	914
26.9	Struktura bílkovin	916
26.10	Enzymy a koenzymy	919
26.11	Jak pracují enzymy? Citrát syntáza	921
	Chemie a život: Proteinová databanka	925
	Souhrn	926
	Přehled reakcí	927
	Úlohy	928

KAPITOLA 27

Biomolekuly: lipidy

935

27.1	Vosky, tuky a oleje	935
27.2	Mýdla	938
27.3	Fosfolipidy	940
27.4	Prostaglandiny a další eikosanoidy	941
27.5	Terpenoidy	944
27.6	Steroidy	952
27.7	Biosyntéza steroidů	955
	Chemie a život: Nasycené tuky, cholesterol a choroby srdce	961
	Souhrn	962
	Úlohy	962

KAPITOLA 28

Biomolekuly: nukleové kyseliny

969

28.1	Nukleotidy a nukleové kyseliny	969
28.2	Párování bází v DNA: Watsonův–Crickův model	972
28.3	Replikace DNA	974
28.4	Transkripce RNA	975
28.5	Translace RNA: biosyntéza proteinů	976
28.6	Sekvenování DNA	979
28.7	Syntéza DNA	980
28.8	Polymerasová řetězová reakce	983

Chemie a život: Genetická daktyloskopie: DNA jako „otisky prstů“	985
Souhrn	986
Úlohy	986

KAPITOLA

29

Organická chemie metabolických procesů 991

29.1	Přehled metabolismu a biochemická energie	991
29.2	Katabolismus triacylglycerolů: metabolismus glycerolu	995
29.3	Katabolismus triacylglycerolů: β -oxidace	997
29.4	Biosyntéza mastných kyselin	1001
29.5	Katabolismus sacharidů: glykolýza	1006
29.6	Přeměna pyruvátu na acetyl-CoA	1012
29.7	Cyklus citronové kyseliny	1016
29.8	Biosyntéza sacharidů: glukoneogeneze	1020
29.9	Katabolismus bílkovin: deaminace	1024
29.10	Závěrečné poznámky k biochemickým transformacím	1028

Chemie a život: Statiny	1029
Souhrn	1030
Úlohy	1031

KAPITOLA

30

Orbitaly a organická chemie: pericyklické reakce 1037

30.1	π -Molekulové orbitaly konjugovaných systémů	1037
30.2	Elektrocyclické reakce	1039
30.3	Sterický průběh termických elektrocyclických reakcí	1041
30.4	Fotochemické elektrocyclické reakce	1043
30.5	Cykloadiční reakce	1044
30.6	Sterický průběh cykloadičních reakcí	1045
30.7	Sigmatropní přesmyky	1047
30.8	Některé příklady termických sigmatropních přesmyků	1049
30.9	Souhrn pravidel pro pericyklické reakce	1052

Chemie a život: Vitamin D	1052
Souhrn	1053
Úlohy	1054

KAPITOLA

31

Syntetické polymery

1061

31.1	Polymery s řetězovým růstem	1061
31.2	Sterický průběh polymerace: Zieglerovy–Nattovy katalyzátory	1063
31.3	Kopolymery	1065
31.4	Polymery se stupňovitým růstem	1067
31.5	Polymerace metatézou	1069
31.6	Struktura polymeru a jeho fyzikální vlastnosti	1071
	Chemie a život: Biologicky odbouratelné polymery	1074
	Souhrn	1075
	Úlohy	1076

DODATEK A	Názvosloví polyfunkčních organických sloučenin	1081
DODATEK B	Konstanty kyselosti některých organických sloučenin	1089
DODATEK C	Slovník základních pojmů	1091
DODATEK D	Odpovědi k úlohám v textu	1115
DODATEK E	Nobelovy ceny udělené za chemii	1141
REJSTŘÍK		1147