

ŠTRUKTÚRA ORGANICKÝCH LÁTOK

Štruktúrna teória A. M. Butlerova (rus, 2. polovica 19. st.) = vlastnosti organických zlúčenín sú odrazom ich štruktúry, t.j. závisia nielen od počtu a druhu atómov, z ktorých sú zložené, ale aj od ich priestorového usporiadania

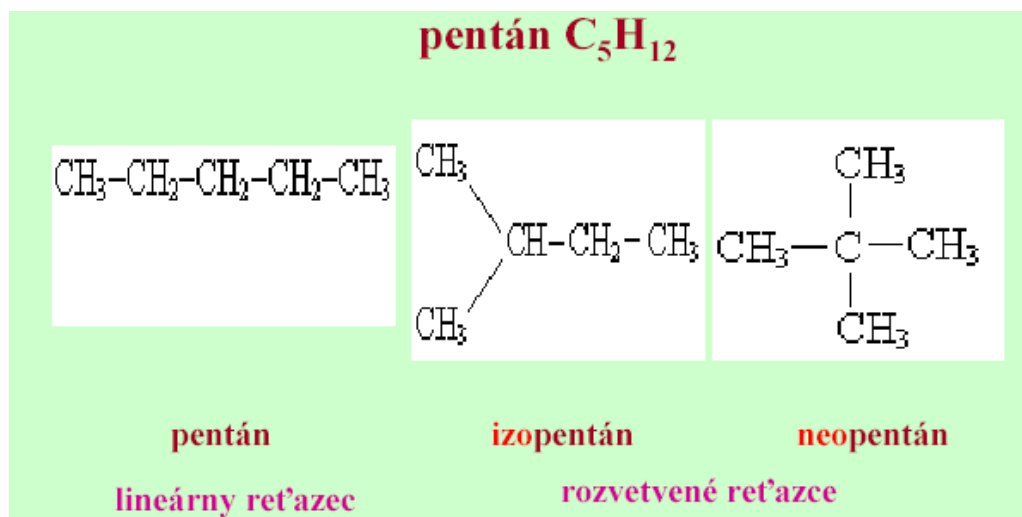
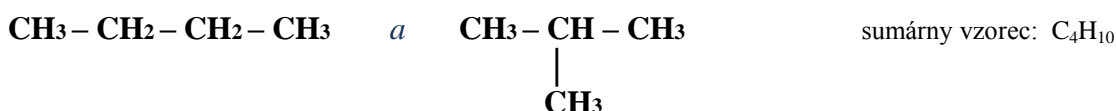
= štruktúra organických zlúčenín je daná nielen poradím a polohou atómov a väzieb, ale aj ich priestorovým usporiadaním.

IZOMÉRIA ORGANICKÝCH ZLÚČENÍN

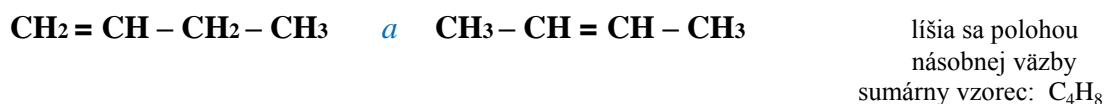
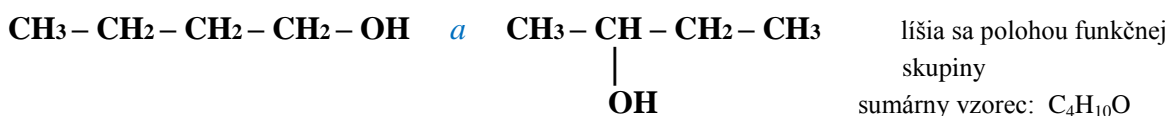
IZOMÉRIA – je jav, pri ktorom sa zlúčeniny s rovnakým sumárnym vzorcom líšia priestorovým usporiadaním atómov, typom väzieb alebo ich poradím - tieto zlúčeniny nazývame **izoméry** = zlúčeniny, ktoré majú rovnaké sumárne vzorce, ale líšia sa štruktúrou

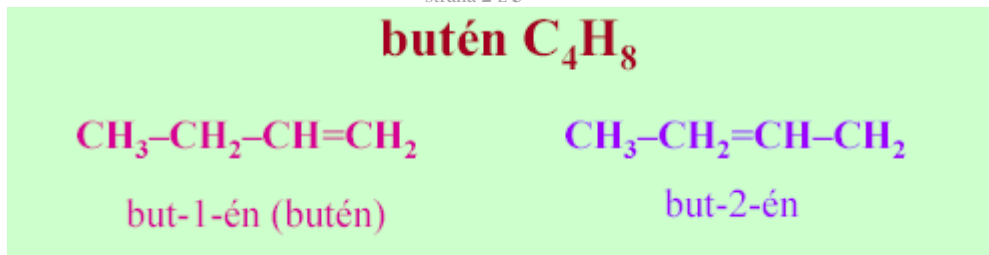
Konštitučné (štruktúrne) izoméry majú rovnaký sumárny vzorec, ale líšia sa **konštitúciou** = spôsobom a poradím, ako sa atómy vzájomne spájajú

a.) **reťazová izoméria** – izoméry sa líšia typom uhlíkového reťazca

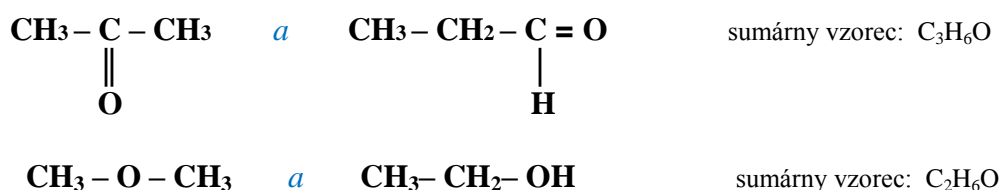


b.) **polohová izoméria** - izoméry sa líšia polohou substituenta či násobnej väzby na C - reťazci





c.) **skupinová izoméria** (*izoméria charakteristických skupín*) - izoméry sa líšia funkčnou skupinou



d.) **tautoméria** - izoméry sa líšia druhom dvojitej väzby a polohou jedného z vodíkových atómov

reťazové izoméry	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ pentán	$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH-CH}_3 \end{array}$ 2-metylbután
polohové izoméry	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-Cl}$ 1-chlórpentán	$\begin{array}{c} \text{Cl} \\ \\ \text{CH}_3\text{-CH-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3 \end{array}$ 2-chlórpentán
skupinové izoméry	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$ 1-butanol	$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-O-CH}_2\text{-CH}_3$ etoxyetán
tautoméry	$\begin{array}{c} \text{OH} \\ \\ \text{CH}_2\text{=C-CH}_3 \end{array}$ propén-2-ol (enolforma)	$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{CH}_3\text{-C-CH}_3 \end{array}$ propanón (ketoforma)

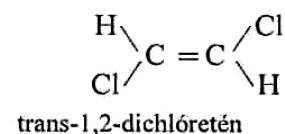
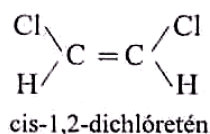
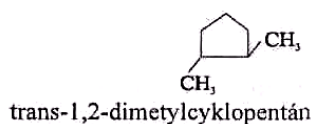
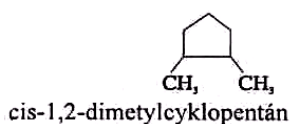
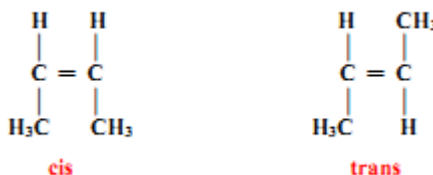
Konfiguračné izoméry (stereoizoméry) majú rovnaký sumárny vzorec a konštitúciu, ale líšia sa **konfiguráciou** = priestorovým usporiadaním atómov v molekule

a.) **Geometrická izoméria = cis-trans izoméria**

➤ izoméry sa líšia konfiguráciou (t.j. priestorovým usporiadaním) skupín buď na dvojitých väzbách alebo na cykloch

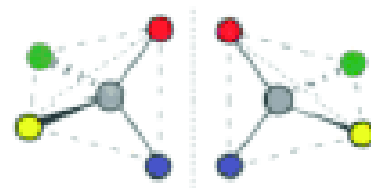
- **cis – izomér**
- **trans – izomér**

➤ cis- a trans- izoméry majú rozdielne chemické a fyzikálne vlastnosti

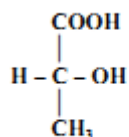


b.) **Optická izoméria** - niektoré látky majú schopnosť otáčať rovinu polarizovaného svetla, nazývame ich **opticky aktívne** (polarizované svetlo je svetlo, ktoré kmitá iba v jednej rovine)

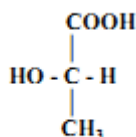
➤ **Optické izoméry = enantioméry** – sú voči sebe navzájom ako vzor a jeho obraz v zrkadle (nie sú navzájom stotožniteľné, napr. pravá a ľavá ruka)



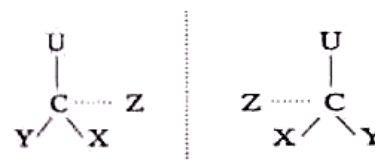
- príčinou optickej aktivity organických molekúl je prítomnosť **asymetrického (chirálného) atómu C** = nesie 4 rôzne substituenty (označenie chirálneho centra: *)



kyselina D – mliečna



kyselina L – mliečna



- majú väčšinou rovnaké fyzikálno-chemické vlastnosti, ale líšia sa smerom otáčania roviny polarizovaného svetla - o ten istý uhol, ale opačným smerom, t.j. jeden **doprava (+)** – **pravotočivý** a druhý **dol'ava (-)** - **ľavotočivý** (veľkosť uhla súvisí s koncentráciou danej látky v roztoku)
 - jeden z dvojice enantiomérov označujeme písmenom D, druhý písmenom L (nesúvisí to so smerom otáčania roviny polarizovaného svetla)
- **racemická zmes** = je zmes dvoch enantiomérov s rovnakou koncentráciou v pomere 1 : 1, neotáča rovinu polarizovaného svetla (je opticky neaktívna) - lebo účinky enantiomérov sa navzájom rušia

c.) **Konformačná izoméria** – je umožnená voľným otáčaním atómov a skupín atómov okolo jednoduchých väzieb

- **konformácia** = priestorové usporiadanie danej molekuly
 - predstavuje rozličné priestorové usporiadanie tej istej zlúčeniny, ktoré umožňuje vnútorná rotácia časti molekúl (väzbových skupín) okolo jednoduchých väzieb
- molekuly môžu mať nekonečné množstvo konformácií, vždy prevláda tá konformácia molekuly, ktorá je pri danej teplote najstálejšia (má najnižšiu vnútornú energiu)

– napr. **cyklohexán** = stoličková a vaničková konformácia

etán = zaclonená (zákrytová) a zošíkmená (nezákrytová) konformácia