

Popis předmětu

Zkratka předmětu:	UOCHT/C550	Strana:	1 / 3
Název předmětu:	Mechanismy organických reakcí		
Akademický rok:	2023/2024	Tisknuto:	24.05.2024 07:28

Pracoviště / Zkratka	UOCHT / C550			Akademický rok	2023/2024
Název	Mechanismy organických reakcí			Způsob zakončení	Zkouška
Akreditováno/Kredity	Ano, 5 Kred.			Forma zakončení	Kombinovaná
Rozsah hodin	Přednáška 4 [HOD/TYD]			Zápočet před zkouškou	NE
Obs/max	Statut A	Statut B	Statut C	Počítán do průměru	ANO
Letní semestr	6 / -	0 / -	0 / -	Min. (B+C) studentů	nestanoveno
Zimní semestr	0 / -	0 / -	0 / -	Opakovaný zápis	NE
Rozvrh	Ano			Vyučovaný semestr	Letní semestr
Vyučovací jazyk	Čeština			Počet dnů praxe	0
Volně zapisovatelný předmět	Ano				
Hodnotící stupnice	A B C D E F				
Počet hodin kontaktní	Ne				
Automat. uzn. záp. před zk.					
Periodicita	K				
Nahrazovaný předmět	Žádný				
Vyloučené předměty	Nejsou definovány				
Podmiňující předměty	Nejsou definovány				
Předměty informativně doporučené	Nejsou definovány				
Předměty, které předmět podmiňuje	Nejsou definovány				

Cíle předmětu (anotace):

Cílem předmětu je seznámit studenta s detailními mechanismy reakcí organických sloučenin a uvést je do souvislosti s fyzikálně-chemickými experimenty, které slouží pro jejich navrhování. Student bude po absolvování předmětu umět teoreticky zhodnotit vlivy struktury a prostředí na reaktivitu organických sloučenin a navrhnout a namodelovat mechanismus reakce.

Požadavky na studenta

Vlastní zkouška je písemná a ústní. Písemná zkouška zahrnuje průřezové otázky z probírané látky a pro postup k ústní části je nutné ji splnit nejméně na 50% možného bodového zisku. Předmětem ústní zkoušky bude rozprava nad vybranými reakčními mechanismy, možnostmi jejich potvrzení, či vyvrácení.

Obsah

- Chemická vazba a struktura. Hybridizace a její přechodné stupně. Aromaticita: Klasické a neklasické aromáty a heteroaromáty, nabitě aromáty. Homoaromaticita a antiaromaticita. Polární efekty.
- Teorie molekulových orbitalů. Pericyklické a elektrocyklické reakce. Woodwardova-Hoffmannova pravidla. Cykloadice a sigmatropní přesmyky.
- Fotochemie a fotokatalýza. Jablonského diagram. Luminiscence. Chráncí skupiny. DFT metody. Výpočty energetických profilů reakcí, zahrnutí vlivů rozpouštědel.
- Základní principy stereochemie. Typy chiralit organických molekul - chiralita na atomu, helicit, axiální chiralita, atropoisomerie. Chiralita a prochiralita v molekulových spektrech, Racemáty, racemizace, štěpení racemátů, příprava opticky čistých sloučenin. Konformace.
- Základní mechanistické principy: kinetická a termodynamická kontrola, Hammondův postulát, Hammettův-Curtinův princip, Bellův-Evansův-Polanyiho princip. Stabilita a reaktivita.
- Nukleofilní substituce na sp^3 uhlíku. Limitní mechanismy. Faktory ovlivňující SN (substituce prostředí, struktura substrátu a nukleofilu, katalýza, stereochemie). Mechanistická kritéria.
- Nukleofilní substituce na vinylovém sp^2 uhlíku. Limitní mechanismy. Faktory ovlivňující SN (substituce prostředí, struktura substrátu a nukleofilu, katalýza, stereochemie). Mechanistická kritéria.
- Nukleofilní substituce na karbonylovém sp^2 uhlíku. Limitní mechanismy. Faktory ovlivňující SN (substituce prostředí,

struktura substrátu a nukleofilu, katalýza, stereochemie). Mechanistická kritéria.

9. Elektrofilní aromatická substituce. Kinetická rovnice a její limitní případy, katalýza, kinetický izotopový efekt. Konkrétní případy SEAr.

10. Elektrofilní přesmyky na aromátech.

11. Elektrofilní adice a eliminace. Limitní mechanismy, jejich regioselektivita a stereochemie.

12. Oxidace (alkeny, alkoholy, karbonylové sloučeniny, dusíkaté a sirmé sloučeniny) a redukce hydridy, diboranem, kovy a katalytickou hydrogenací (homo- a heterogenní).

13. Radikálové adice a substituce. Struktura a stabilita radikálů, Nabité radikály. Spektrální důkaz radikálů.

Předpoklady - další informace k podmíněnosti studia předmětu

Absolvování předmětů Organická chemie, Základy organické syntézy a Fyzikální organická chemie.

Získané způsobilosti

Student bude po absolvování předmětu schopen porozumět reakčním mechanismům organických reakcí a dalším zákonitostem, které je ovlivňují. Dále bude schopen kvalifikovaně navrhnout strukturu výchozích látek a reakční podmínky tak, aby byl výsledek reakce jasně predikovatelný.

Studijní opory

Soubor prezentací k přednáškám, přístupný na portálu STAG.

Carey F. A., Sundberg R. J.: Advanced Organic Chemistry, Part A a B, Springer, 5th ed., USA 2007.

Smith M. B., March J.: March's Advanced Organic Chemistry, 6th ed., Wiley Interscience, Hoboken 2007.

Fleming I.: Hraniční orbitály v organické chemii. SNTL Praha 1983.

Garanti a vyučující

- **Garanti:** prof. Ing. Jiří Hanusek, Ph.D. (100%)
- **Přednášející:** prof. Ing. Jiří Hanusek, Ph.D. (80%), doc. Ing. Jiří Váňa, Ph.D. (20%)

Literatura

- **Základní:** Carey F.A., Sundberg R.J.: *Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms, 3rd Ed., Plenum Press, New York 1990.*
- **Doporučená:** March J.: *Advanced Organic Chemistry, Reactions, Mechanisms and Structure, 4th Ed., Wiley, New York, 1992.*
- **Doporučená:** Foresman, James B. *Exploring chemistry with electronic structure methods.* Pittsburgh: Gaussian, 1996. ISBN 0-9636769-3-8.
- **Doporučená:** Isaacs N.: *Physical Organic Chemistry, 2nd Ed., Logman Scientific Technical, Wiley, New York, 1995.*

Vyučovací metody

Monologická (výklad, přednáška, instruktáž)

Hodnotící metody

Ústní zkouška
Písemná zkouška

Předmět je zařazen do studijních programů:

Studijní program	Typ stud.	Forma stud.	Obor	Etapa	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Organická chemie a technologie	Navazující	Prezenční	Organická chemie	1	2022	2023	povinné předměty	A	1	LS

Studijní program	Typ stud.	Forma stud.	Obor	Etapa	V.st.pl.	Rok	Blok	Statut	D.roč.	D.sem.
Organická chemie a technologie	Navazující	Prezenční	Organická chemie	1	2021	2023	povinné předměty	A	1	LS
Organická chemie a technologie	Navazující	Prezenční	Organická chemie	1	2023	2023	povinné předměty	A	1	LS
Fyzikální chemie	Navazující	Prezenční	Fyzikální chemie	1	2022	2023	povinně volitelné předměty 2	B	1	LS
Fyzikální chemie	Navazující	Prezenční	Fyzikální chemie	1	2023	2023	povinně volitelné předměty 2	B	1	LS
Chemie	Navazující	Prezenční	Analytická chemie	1	2018	2023	povinně volitelné předměty 2	B	1	LS