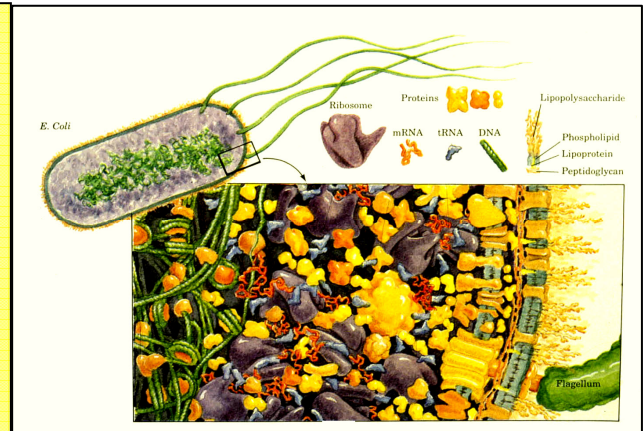


Preambulum

*Komplexitás-
információtartam*

Szövet, organizmus

biológia



Sejt

*Szupramolekuláris
komplexek és
nanorendszerek*

Biomolekulák

Biológiai
kémia;
a természetes
vegyületek
kémiája

kémia

*sokaság-sokszínűség
(kDa)*

egy példa

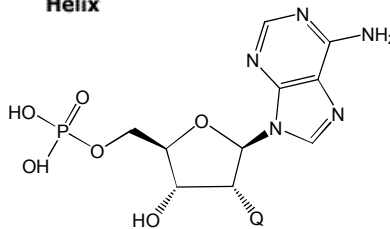
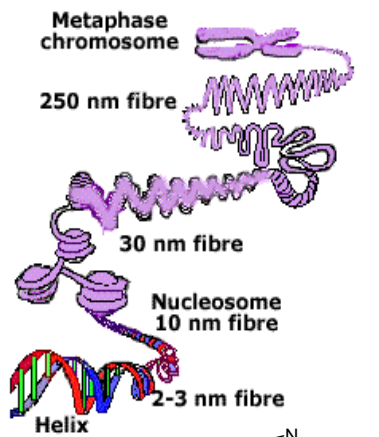
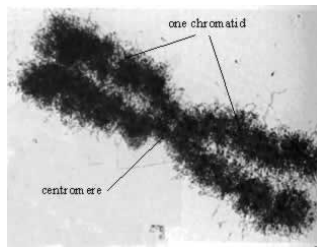
Komplexitás-
információtartam

Szövet, organizmus

Sejt

Szupramolekuláris
komplexek és
nanorendszerek

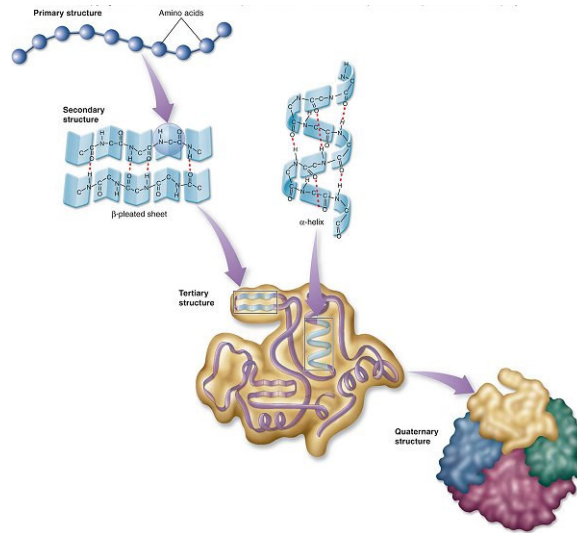
Biomolekulák



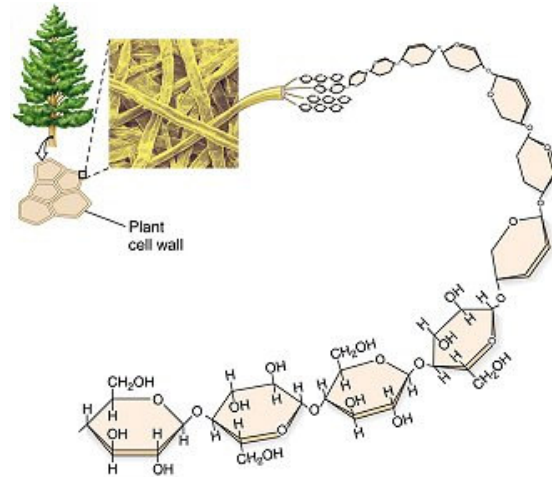
Q=OH adenzin-5'-monofoszfát
Q=H dezoiazenzin-5'-monofoszfát

sokaság-sokszínűség
(kDa)

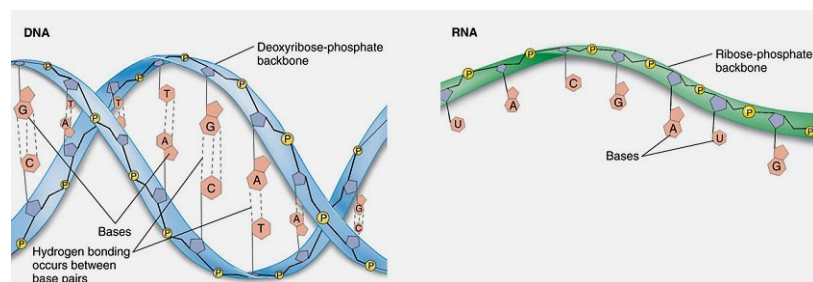
A biopolimerek három legfontosabb képviselője:



-a peptidek és fehérjék



- az oligo- és poliszacharidok



- a nukleinsavak

Mit találhatunk a segédanyagban?

A leírt fejezetek hagyományos értelemben vett ábra gyűjteményként szolgálnak a szerves kémia tanításához.

Az első fejezetek az alapvegyület-típusok **statikus vonásait** hangsúlyozzák (funkciós csoportok, nevezéktan, sztereokémiai, konformációs tulajdonságok stb.).

A középső részben bevezető gondolatok találhatóak a **szerves kémia elméleti** jellegű részeinek megértéséhez.

A későbbi fejezetek a szerves kémia **dinamikus voltát** emelik ki (alapreakciók és azok sajátosságai).

A felépítés formai jellemzője a címszavas szerkesztés (kérdés, válasz, memo, példa stb.).

A **kérdés** az átgondolandó problémát vezeti be.

A **válasz** a kérdésre adható tömör állítás, amelynek részleteit a **magyarázat** fejti ki.

A megértés szempontjából fontosabb utalásokat a **memo** címszó után olvashatjuk.

A **példa** olyan érdekes vegyületeket vagy problémákat ismertet, amelyek szoros kapcsolatban vannak az éppen tárgyalt anyagrésszel.

A **nevezéktan gyakorlása** (rövidítésben **nev.gyak.**) érdekes példákon keresztül szemlélteti a tanultakat.

A leírtakkal kapcsolatos megjegyzéseiket szívesen várom a Perczel@chem.elte.hu címen.

Dr. Perczel András
egy. tanár

ELTE Szerves Kémiai Tanszék - Windows Internet Explorer

http://szerves.chem.elte.hu/

Szerves Kémiai Tanszék
EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

English

Munkatársak Címünk: 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A Telefon: (1) 372-2606
Postacím: 1518 Budapest 112, Postafiók 32. Telefax: (1) 372-2620

Oktatás

Kutatás Új választható kurzusok:

Diákoknak Csámpai Antal: Szerves kémiai problémák megoldása NMR-
spektroszkópiával

Alapítványok Pintér István: Szénhidrátkémia

Egyebek

ELTE-MTA Fehérjemoделlező Kutatócsoport

ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Synthesis közlemény tanszéki kutatásainkból:
József Rábai, Csongor Szijjártó, Peter Ivanko, Dénes Szabó:
3-(Perfluoroalkyl)propanols: Valuable Building Blocks for Fluorous Chemistry.
Synthesis 2007: 2581-2584.

Tanszékünk 70 éve

A Tanszék történetét bemutató könyv 2004-ben jelent meg Kucsman Árpád professor emeritus tollából, az ELTE Eötvös Kiadó és a PolgArt Kiadó gondozásában.

ELTE Szerves Kémiai Tanszék - Windows Internet Explorer

http://szerves.chem.elte.hu/oktatas/index.htm

Szerves Kémiai Tanszék
EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

English

Nyitólap

Munkatársak

Kutatás

Diákoknak

Alapítványok

Egyebek

ELTE-MTA Fehérjemoделlező Kutatócsoport

ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Oktatási információk

Tematikák, segédanyagok

- [A Gyógyszerkutatás szakirányú képzés programja](#)
- [Előadásokhoz kapcsolódó segédanyagok](#)
- [Szerves kémiai laboratóriumi gyakorlatok](#)

A Tanszéken készült könyvek, könyvfejezetek

- Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Asbóth Bence: *Biomolekuláris kémia I.* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005, ISBN 963 19 5698 9
- Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: *A sztereokémia és kóroptikai spektroszkópia alapjai* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2004, ISBN 963 19 4959 1
- Ruff Ferenc - Csizmadia G. Imre: *Szerves reakciómechanizmusok vizsgálata* Nemzeti Tankönyvkiadó Rt, Budapest, 2000, ISBN 963 19 0350 8
- Csámpai Antal, Jalsovszky István, Majer Zsuzsa, Orosz György, Rábai József, Ruff Ferenc, Sebestyén Ferenc: *Szerves Kémiai Praktikum* Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1998, ISBN 963 18 8408 02
- Perczel András és Hollósi Miklós: *Turns.* In: Gerald D. Fasman (szerk.): *Circular Dichroism and the Conformational Analysis of Biomolecules.* Plenum Press, 1996, ISBN 0-306-45142-5
- Darvas Andor, Laczkó Ilona, Hollósi Miklós: *Darvas Andor emlékeztető szövege. A kémia története.*

Perczel András kurzusai - Windows Internet Explorer

http://szerves.chem.elte.hu/oktatas/ea/perczel/index.htm#biolszerves

Perczel András kurzusai

A kurzusok az [ELTE Szerves Kémiai Tanszékén](#) hallgathatóak. Az oldalon lévő anyagok Adobe PDF formátumban érhetők el.

- [Szerves kémia biológusoknak](#)
- [Elméleti szerves kémia \(Csizmadia G. Imrével közös kurzus\)](#)
- [Pulzuszekevekiek az NMR szerkezetvizsgálatban](#)
- [Szerkezeti kémiai kurzusok](#)

Szerves kémia biológusoknak: előadásvázlatok

[Bevezetés \(kedvcsináló\)](#) (frissítve: 2007.02.19.)

[1. sorozat](#) (frissítve: 2007.03.08.) [2. sorozat](#) (frissítve: 2007.03.20.) [3. sorozat](#) (frissítve: 2007.04.25.) [4. sorozat](#) (frissítve: 2007.04.25.)

[5. sorozat](#) (frissítve: 2007.04.26.) [6. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.) [7. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.) [8. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.)

[9. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.) [10. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.) [11. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.) [12. sorozat](#) (frissítve: 2008.01.28.)

Elméleti szerves kémia (az anyagok angol nyelven olvashatók)

Az első előadássorozat anyagai:

[Fundamentals of Theoretical Organic Chemistry 1.1](#) [Fundamentals of Theoretical Organic Chemistry 1.2](#)

Tények

Az elkészített anyag az alábbi könyvekre támaszkodik:

1. Szerves kémia (nomenklatura) I.

Dr. Kucsman Árpád és Dr. Kajtár Márton (1980 Tankönyvkiadó Bp.)

2. Szerves kémia (nomenklatura) II.

Dr. Hollósi Miklós (1976 Tankönyvkiadó Bp.)

3. Szerves kémia I., II., III., IV., V.

Dr. Kucsman Árpád (1976, ELTE, Tankönyvpótló kiadvány és az azt kiegészítő előadási ábragyűjtemény)

4. Organic Chemistry (7th edition)

Graham Solomons and Craig Fryhle

(2000 John Wiley and Sons, Inc. New York)

5. A Prime to Mechanism in Organic Chemistry

Peter Sykes (1995 Longman Scientific and Technical)

A számításokat a **Gaussian** programcsomag felhasználásával végeztem el.

Köszönetnyilvánítás

Hudáky Ilonának, Czajlik Andrásnak, Gáspári Zoltánnak és Kiss Róbertnek a képletek előkészítéséért

Kucsman Árpád professzornak kritikai megjegyzéseit valamint a szakmai és módszertani javaslatait

Képírás? Képletírás?

火山 → 火 山
kazan (tűzhányó) ka (tűz) yama (hegy)

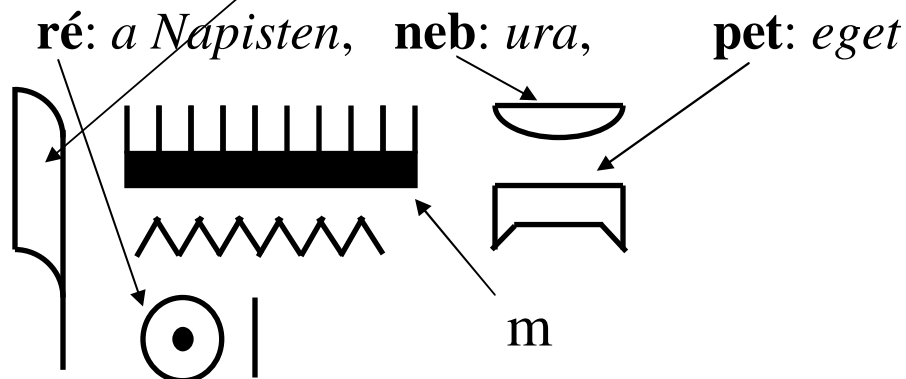
話 → 言 舌
hanaszu (beszélni) iu (mondani) sita (nyelv)

memo: - a szimbólum „független” a tényleges nyelvtől
- akár több ezer is szükséges lehet a közléshez

Hieroglifák: (nincsenek magánhangzók)

pl. Rosette-i kő (1822-ben Jean Francois Champollion)

Ámon Ré, az ég ura ⇒ I mem ré neb pet

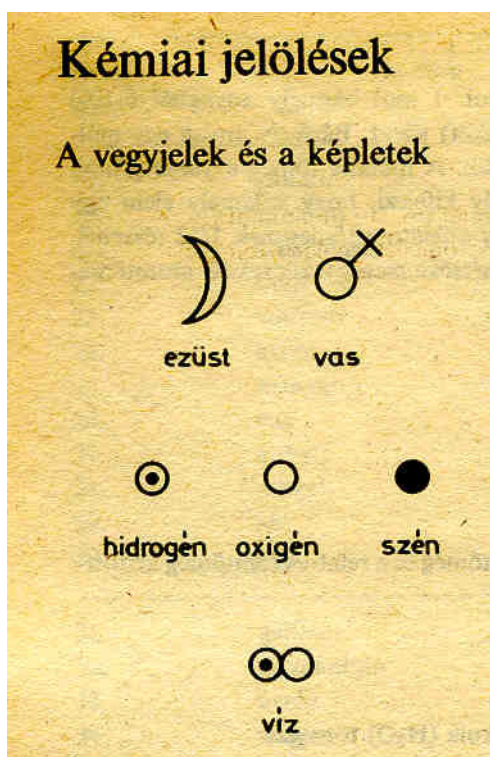


memo: - hieroglifák kódolhatnak szavakat vagy hangokat.

szerves kémia: szimbólumaink és kódjaink gondolata hasonló:

- nyelvtől független: $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$
- „kevert” írásmód: Tos-Cl

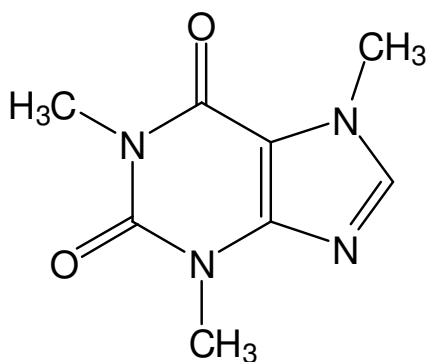
A kémiai szimbólumok fejlődéstörténete



Friedrich August
Kekulé von Stradonitz
(1829-1896)



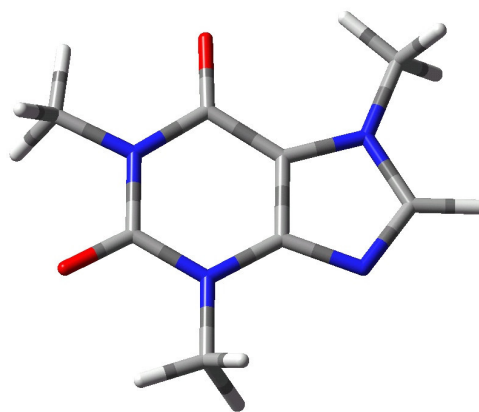
Kekulé álma (1865)
1890-ben a benzol
ünnepségeken



1,3,7-trimetilxantin (**koffein**)

1,3,7-Trimethyl-3,4,5,7-tetrahydro-
purine-2,6-dione

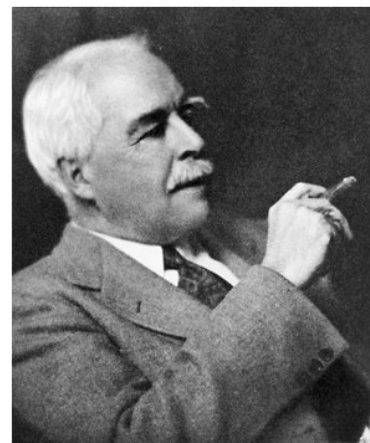
Bruckner III-2 1007




kérdés: mit akarunk kódolni:
konstitúciót, konfigurációt, konformációt?

„A képletírás”

Gilbert N. Lewis

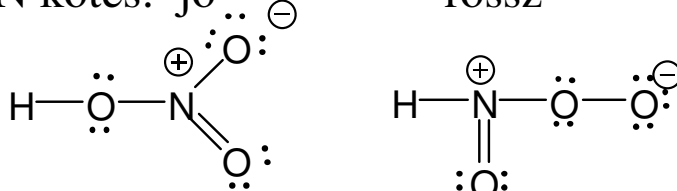


feladat: leírni  az **atommagok elrendeződését,**
az **elektronszerkezetet.**

Mielőtt leírjuk a salétromsav Lewis képletét, azelőtt **tudnunk kell** az atommagok elrendeződését (**konnektivitását**)

pl. HNO_3 -ban nincs H,N kötés: jó 

rossz



G.N. Lewis és W. Kössel (1916 azaz a kvantummechanika születése előtt)

A „Lewis-féle” szerkezet:

építőelemek:

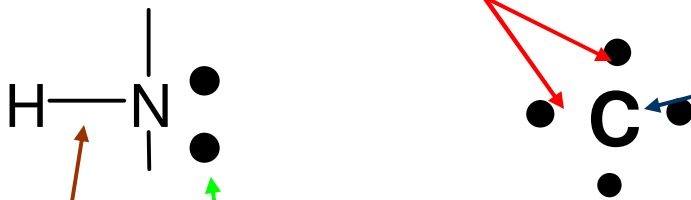
-az elem **vegyjele** az atomtörzset jelöli

(azaz vegyértékelektronok számának megfelelő pozitív töltést is a vegyjel szimbolizálja.)

pl. a „C” szimbólum négyszeresen pozitív.

-a **vegyértékelektronokat** egy-egy pont jelöli

A semleges atom tehát a **vegyértékelektronjaival** körülvevett **atomtörzs**.



kovalens kötés :

egy elektronpár megosztását jelenti két atom között (egyetlen vonallal jelölünk)

nemkötő elektronpár :

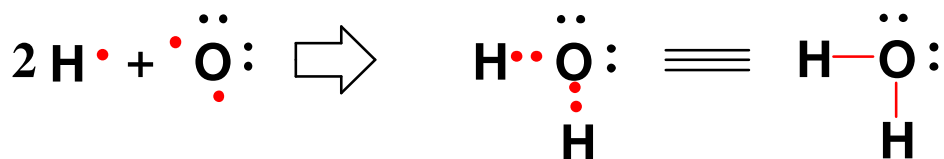
csak egyetlen atomtörzshöz kapcsolódó két elektron (pontpárként tüntetjük fel).

	2.1							-
K-héj	H							He
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	

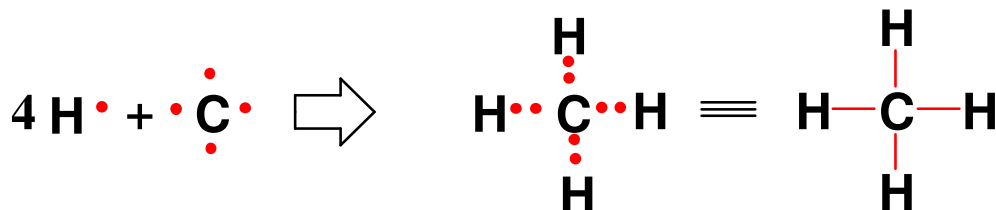
Oktettszabály: amikor Lewis-féle szerkezeteket írunk, akkor csak a **vegyértékelektronokat** tüntetjük fel. A második periódus elemeire a Ne **elektronkonfiguráció** eléréséhez maximum 8 vegyértékelektron szükséges. Ezt az állapotot a molekulát vagy iont felépítő atomok egyes vegyértékelektronjaik **közreadásával** érnék el.

Semleges molekulák:

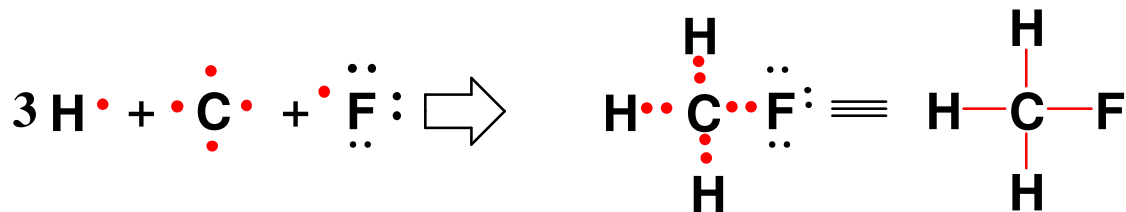
2(1) 6 = 8 vegyértékelektronok száma:



4(1) 4 = 8

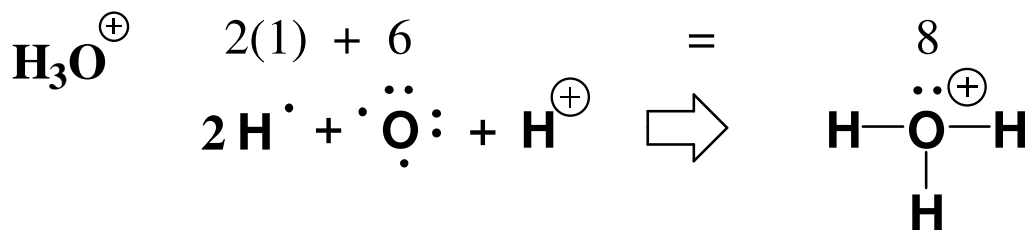
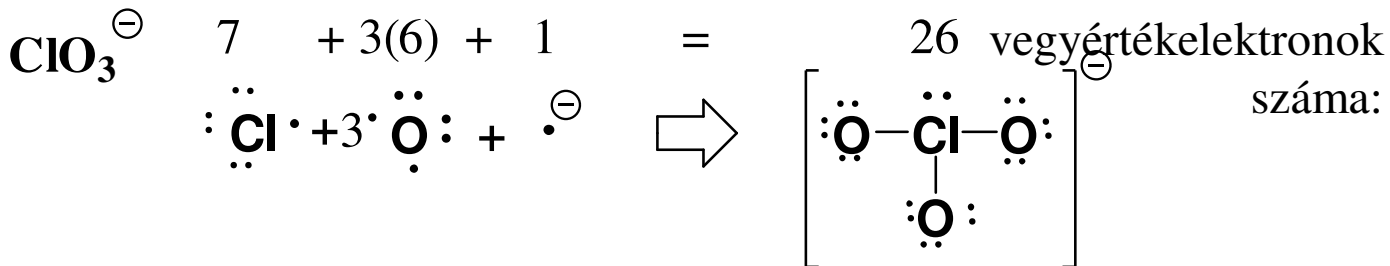


4(1) 4 7 = 14



Példák: C₂H₆, C₃H₆O₁, C₂H₂, C₂H₄

Töltéssel rendelkező molekulák:



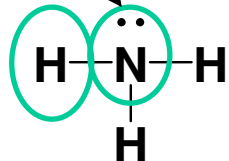
Töltés = (vegyértékelektronok száma) - (asszignált elektronok száma)

$1-1=0$

H töltése

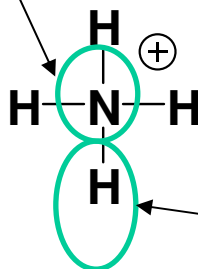
$5-5=0$

N töltése



$5-4=+1$

N töltése



memo: míg az ammóniá-ban 5, addig az ammónium kation-ban a nitrogénatomhoz csak 4 „e” rendelhető!

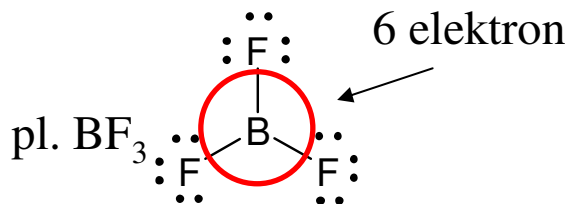
$1-1=0$

H töltése

Példák: CO_3^{2-} , NO_2^- , CN^- , HCO_3^- , NH_2^- , HSO_4^- , HC_2^-

Kivételek az oktettszabály alól:

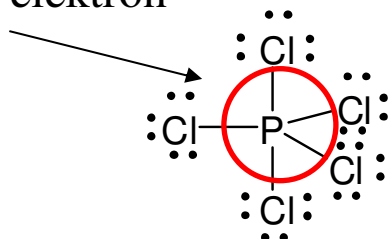
- az elektronhiányos atomok esete:



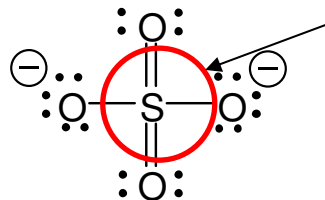
- a nem második periódusbeli atomok esete:

pl. SO_4^{2-} vagy PCl_5

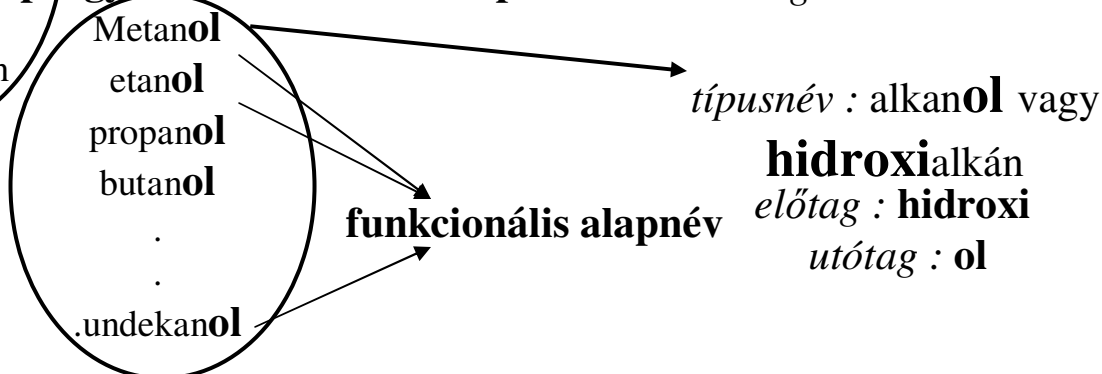
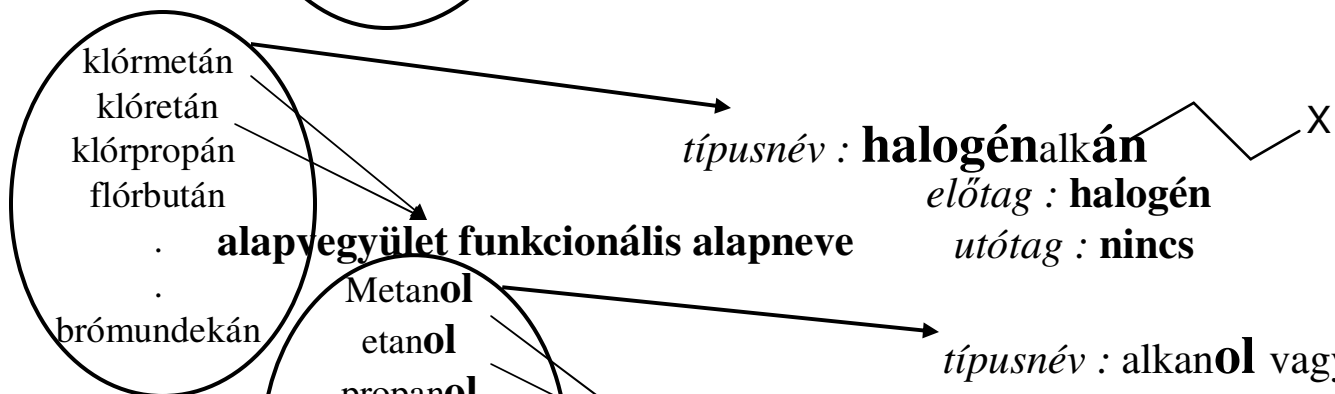
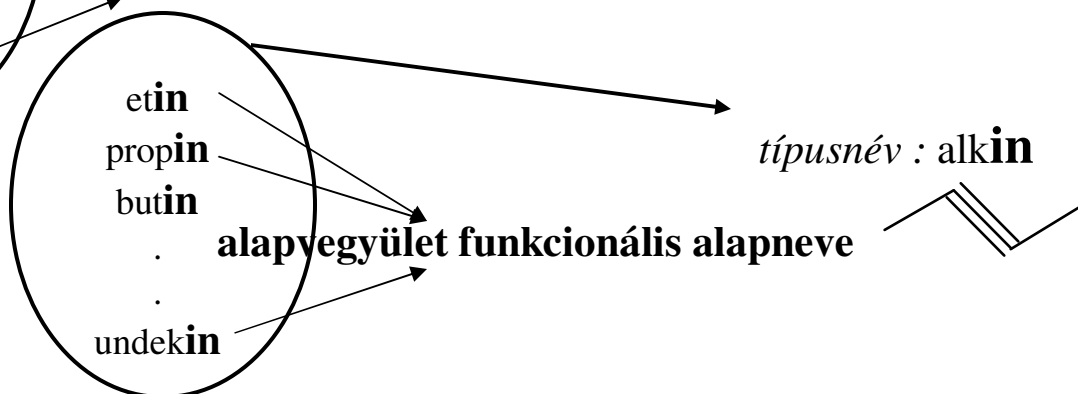
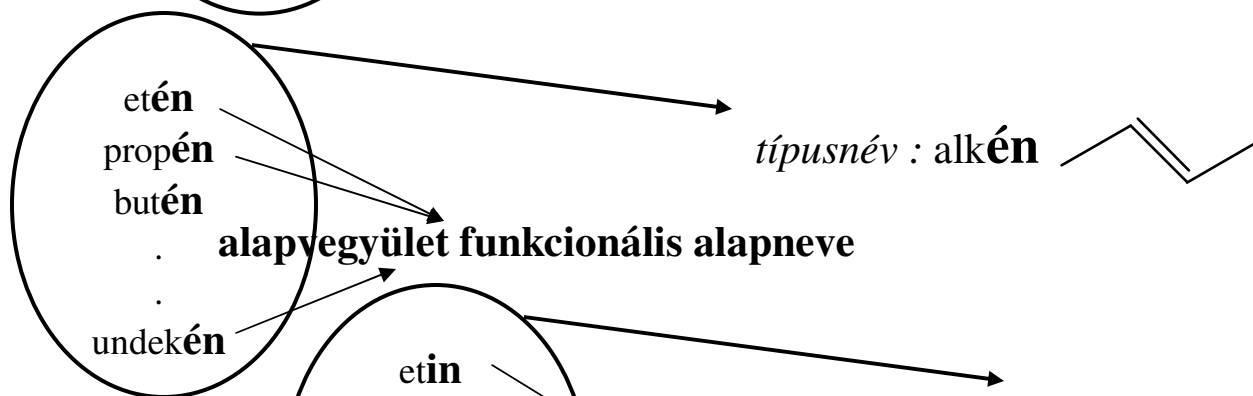
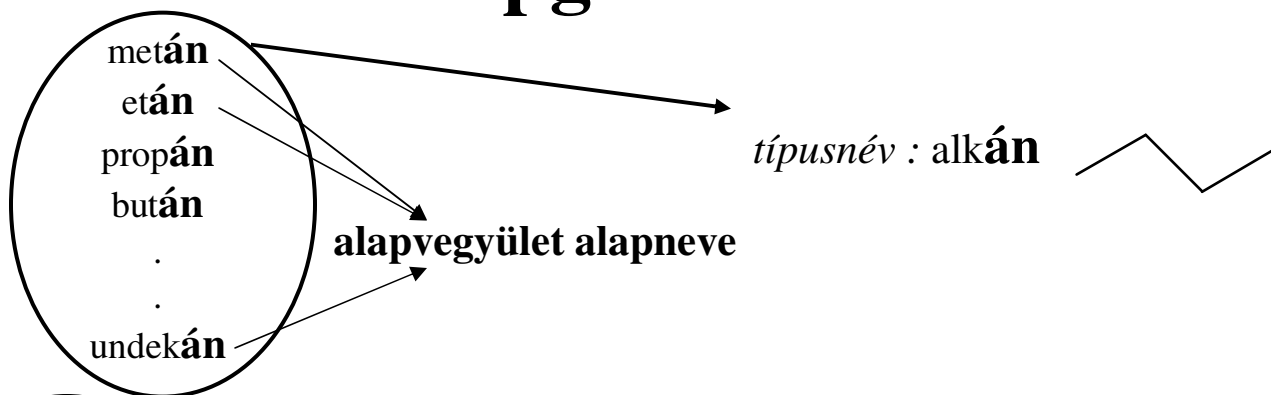
10 elektron



12 elektron



A szubsztitúciós nevezéktan (*Szn*) alapgondolata



A szubsztitúciós nevezéktan alapszabályai

Utótagok száma **maximum egy** lehet, de az -én, -in nem számít mert az módosítás és nem utótag.

pl. helyes az okt-2-én vagy az okt-2-én-1-ol
helytelen az okt-3-ol-1-al \Rightarrow 3-hidroxibutanal

előtag

„hidroxi”

„oxo”

„oxo”

utótag

„ol”

„on”

„al”

alkohol

keton

aldehid

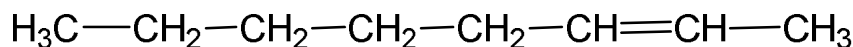
helyes a 3-oxobutánsav

Előtagok száma **korlátlan** lehet, melyeket az **angol ABC** szerint rakunk sorba

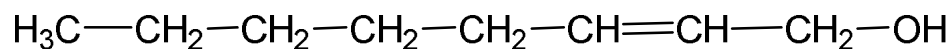
pl. helyes az 4-etil-2-metilheptán-1,6-diol

Az **utolsó előtagot** az alapnévvel mindig **egybeírjuk**

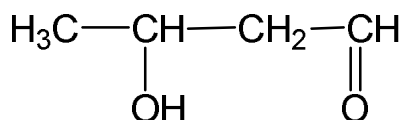
pl. helyes az 1-klór-2-fluorpropán



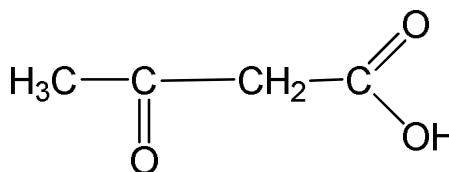
Oct-2-ene



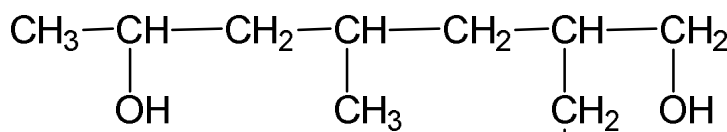
Oct-2-en-1-ol



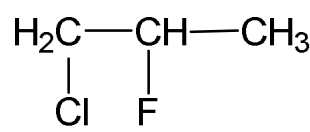
3-Hydroxybutanale



3-Oxo-butyric acid



2-Ethyl-4-methylheptane-1,6-diol

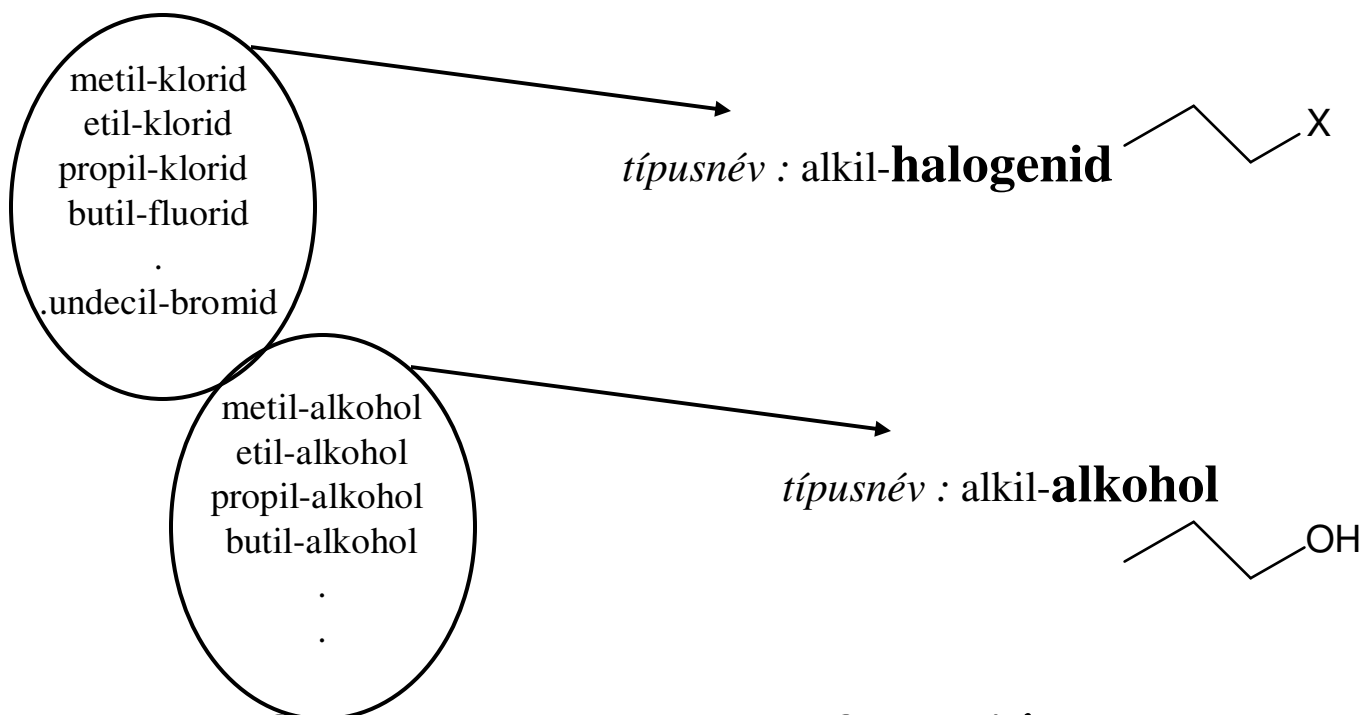


1-Chloro-2-fluoropropane

A csoportfunkciós nevezéktan (*Csn*) alapgondolata

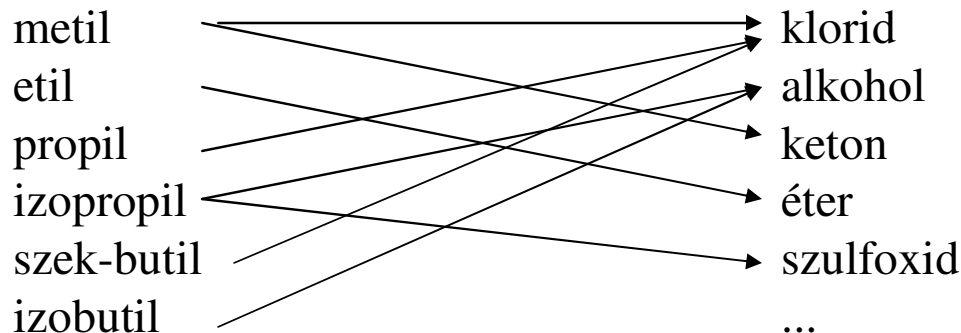
A molekulát gondolatban két részre osztjuk: **csoportra** és **funkcióra**,
melyeknek megadjuk a nevét és ezeket kötőjellel kötjük össze.

E nevezéktan jelentősége főleg a homológ sorok egyszerűbb tagjainál fontos:
metil, etil, propil, izopropil, butil, szek-butil, izobutil,
terc-butil, pentil, izopentil, neopentil, hexil.



Csoportnevek

funkciós nevek



A csoportfunkciós neveket **mindig kötőjelezzük**:
izopropil-alkohol, szek-butil-klorid, etil-alkohol, stb.

I.

Szénhidrogének

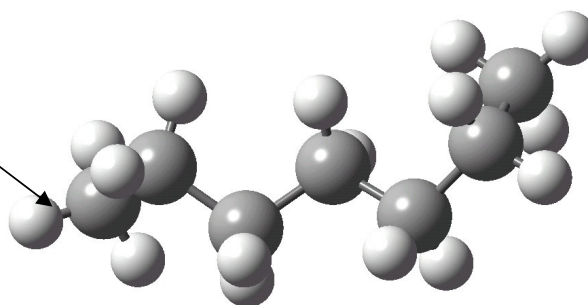
1. Alkánok (paraffinok) (C_nH_{2n+2}) típusnév: alkán

1/A Normális szénláncú alkánok

(elágazást nem tartalmazó vegyületek)

homológ sor („-án” végződés)

metán	n=1	C_1H_4	undekán	n=11
etán	n=2	C_2H_6	dodekán	n=12
propán	n=3	C_3H_8	tridekán	n=13
bután	n=4	C_4H_{10}	tetradekán	n=14
pentán	n=5	C_5H_{12}	...	
hexán	n=6	C_6H_{14}	eikozán	n=20
heptán	n=7	C_7H_{16}		
oktán	n=8	C_8H_{18}		
nonán	n=9	C_9H_{20}		
dekán	n=10	$C_{10}H_{22}$		



C_1 -től C_4 -ig (normál körülmények között) gáz, C_5 -től C_{17} -ig illékony vagy nem illékony folyadék C_{18} -tól szilárd anyag.

nyersolaj: szerves vegyületek összetett keveréke

metán: ős-atmoszféra fő komponense (ma a Jupiter, Szaturnusz, Uránusz és Neptunusz atmosz. fő komp.), földön: földgázban (anaerob metanogén bakt. termelik CO_2 és H_2 -ből, egyes bakt. szénforrása)

Az alkánok (parafinok) kötésrendszere

kötésmód: σ típusú C-C és C-H

kötési adatok: $r(\text{C-C}) = 1.54 \text{ \AA}$
 $r(\text{C-H}) = 1.09 \text{ \AA}$
 $\alpha (\text{H-C-H}) = 109^\circ$
 $\alpha (\text{C-C-C}) = 109^\circ$

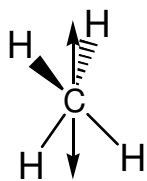
Dipólusmomentum (μ) = $r \cdot \Delta e$

Pauling féle elektronegativitás

$e (\text{H}) = 2,1$
$e (\text{C}) = 2,5$
$e (\text{N}) = 3,0$
$e (\text{O}) = 3,5$
$e (\text{F}) = 4,0$

$$\mu(\text{C-H}) = 1.09 \cdot (0.4) = 0.44 \text{ Debye}$$

(ez viszonylag kicsi, ezért is **apoláris** már a kötés is, nem csak a molekula)



Methane

$$\mu(\text{CH}_4) = 0 \text{ D}$$

$$\mu(\text{C}_2\text{H}_6) = 0 \text{ D}$$

$$\mu(\text{C}_3\text{H}_8) = 0.1 \text{ D}$$

$$\mu(\text{Bu } \text{C}^1\text{-C}^2\text{-C}^3\text{-C}^4=180^\circ) = 0 \text{ D}$$

$$\mu(\text{Bu } \text{C}^1\text{-C}^2\text{-C}^3\text{-C}^4=60^\circ) = 0,1 \text{ D}$$

$$\mu(\text{iBu}) = 0,13 \text{ D}$$

$$\mu(\text{C}_5\text{H}_{12} \text{ all-transz}) = 0,1 \text{ D}$$

A normál és elágazó szénláncú alkánok μ -je nulla, de csak ha a geometria ideálisan tetraéderes. Ha ettől eltér (lásd itt) akkor kis μ megjelenhet.

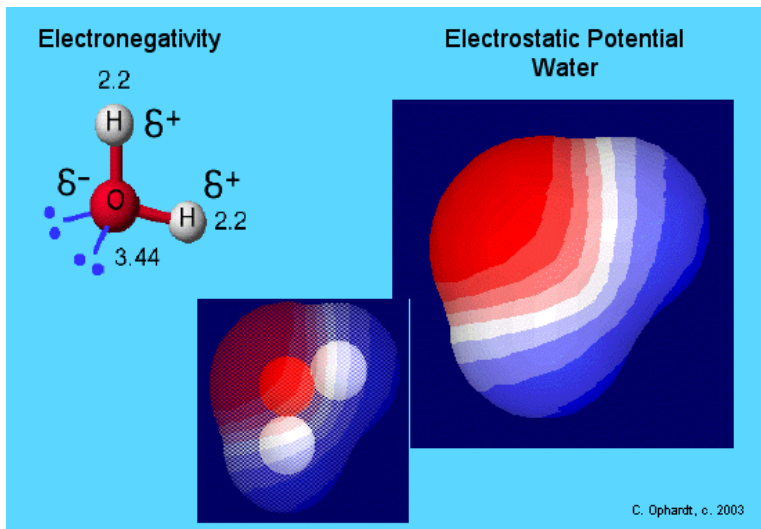
K-héj
L-héj

2.1

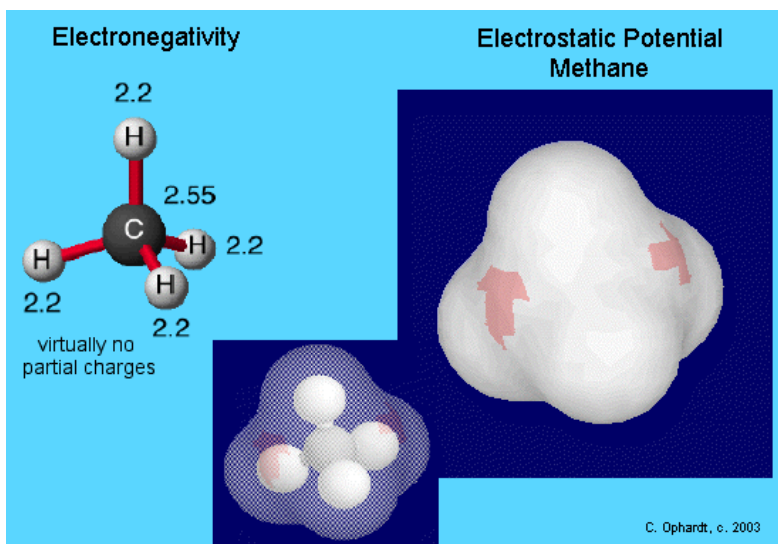
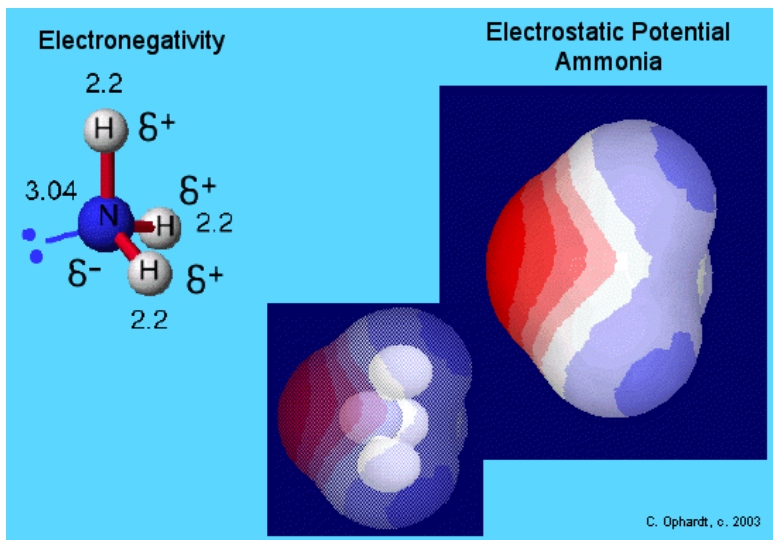
H								-	He
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne		
1	1.5	2	2.5	3	3.5	4			

Pauling féle elektronegativitás alapján:

erősen poláris



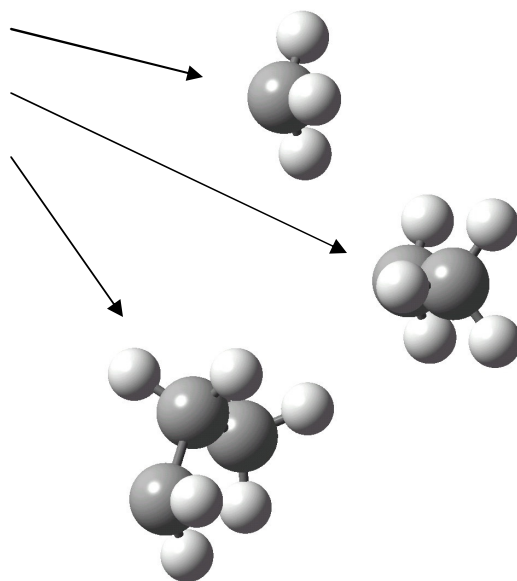
poláris



apoláris

Csoportnevek („-il” végződés) (C_nH_{2n+1})

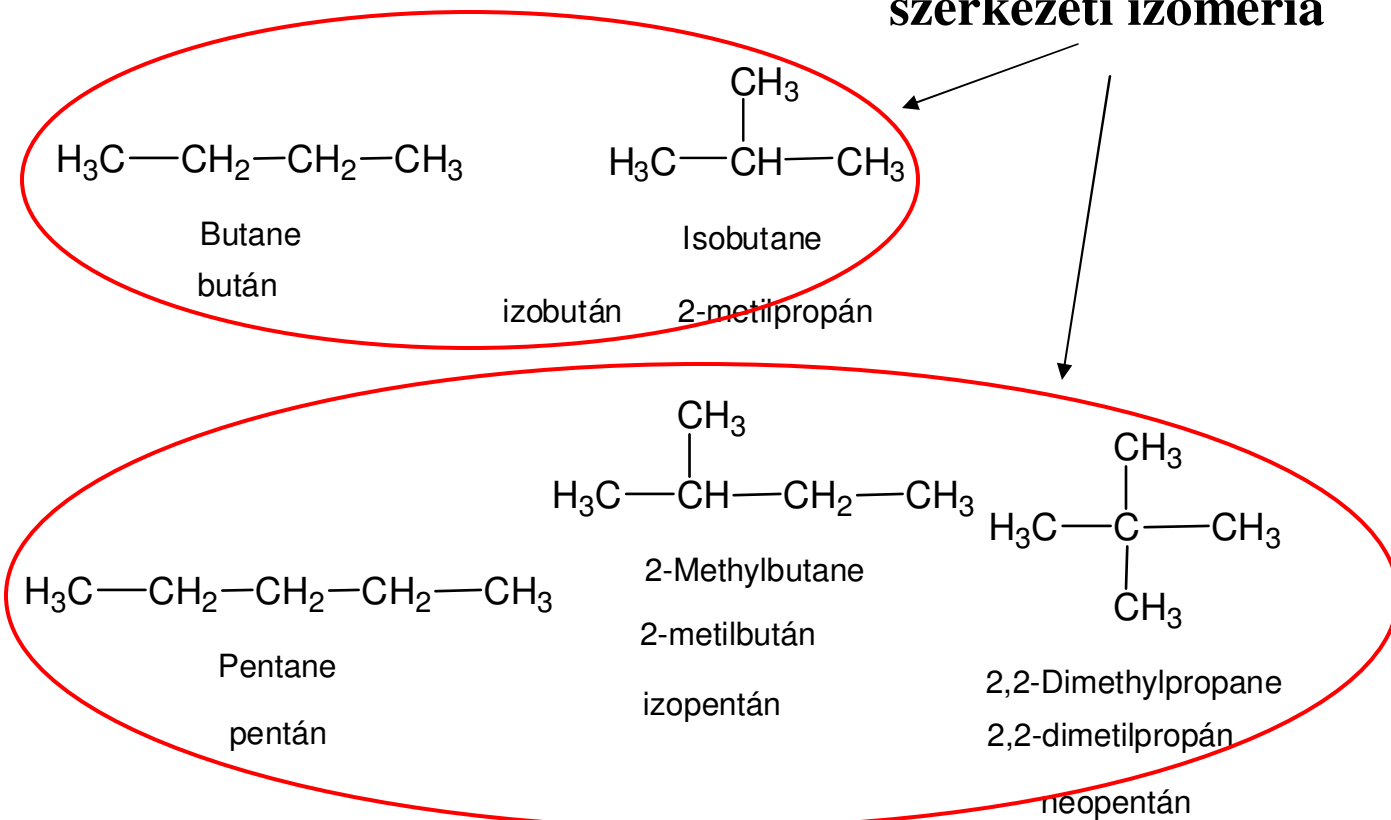
metil	n=1	$-C_1H_3$	Me
etil	n=2	$-C_2H_5$	Et
propil	n=3	$-C_3H_7$	Pr
butil	n=4	$-C_4H_9$	Bu
pentil	n=5	$-C_5H_{11}$	
hexil	n=6	$-C_6H_{13}$	
undecil	n=11	$C_{11}H_{23}$	



1/B Elágazó szénláncú alkánok

keressük a leghosszabb összefüggő „egyenes” (normális) szénláncot és azt számozzuk

szerkezeti izoméria



Megjegyzések az izomériáról:

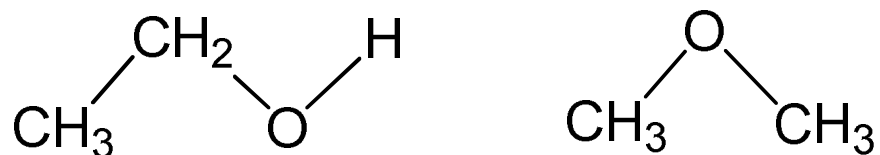
gör. iszosz „egyenlő” + merosz „rész”

Molekulák (kettő vagy több) amelyek azonos számú és minőségű atomokból épülnek fel, azaz **összegképletük azonos**, de fizikai és kémiai tulajdonságai különböznek. (J.J.Berzelius, 1830)

Konstitúciós izoméria (szerkezeti izoméria):

az izomer vegyületek molekuláiban az **atomok eltérő sorrendben** kapcsolódnak egymáshoz

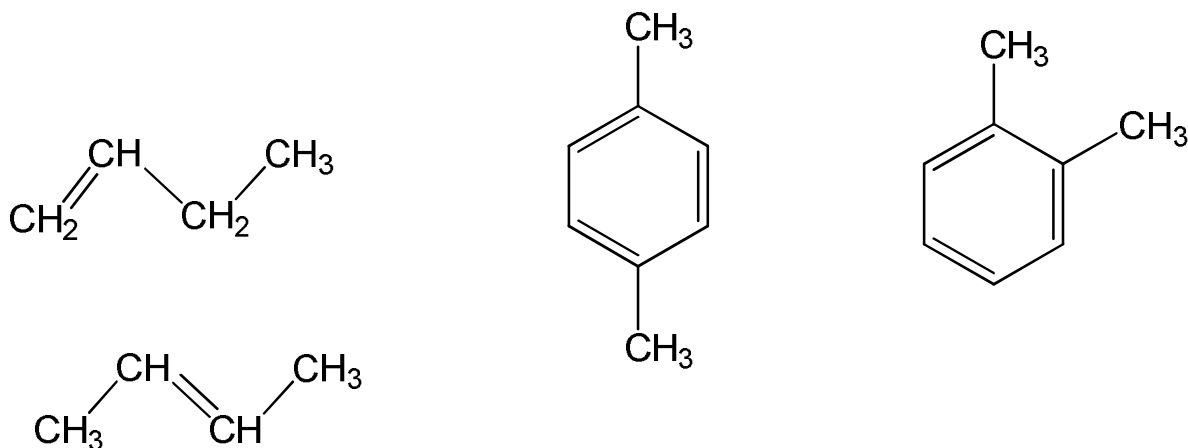
(pl. etil-alkohol és dimetil-éter)



- Helyzetizoméria (a konstitúciós izoméria alesete):

az izomer vegyületek molekuláiban az atomlánc azonos, de a **funkciós csoportok helyzete eltérő**

(pl. but-1-én és but-2-én, vagy orto- és para-xilol)

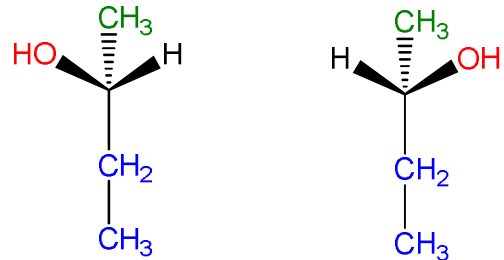


Sztereoizoméria:

a sztereoizomer vegyületek molekuláinak csak a térbeli felépítése eltérő

-Optikai (konfigurációs) izoméria:

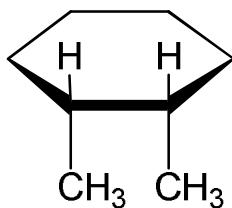
a sztereoizomer vegyületek molekuláiban az aszimmetriás atom(ok) konfigurációja eltérő (pl. (*R*)-bután-2-ol és (*S*)-bután-2-ol)



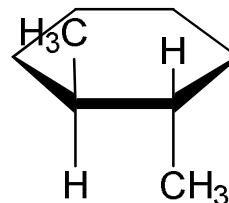
- Cisz-transz (geometriai) izoméria: (*R*)-(-)-bután-2-ol (*S*)-(+)-bután-2-ol

a sztereoizomer vegyületek molekuláiban a kettőskötés menti elhelyezkedése eltérő

(pl. cisz-1,2-dimetilciklohexán és transz-1,2-dimetilciklohexán)



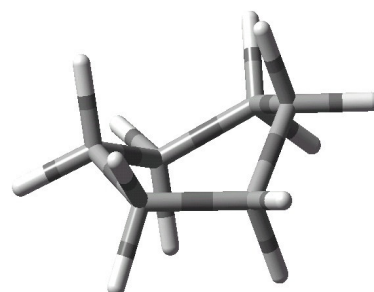
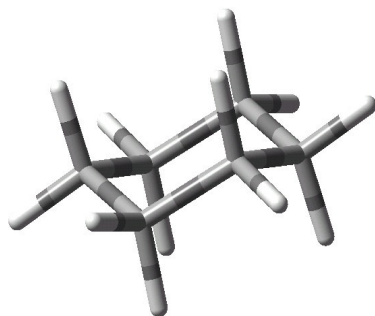
cisz-1,2-dimetilciklohexán
(op -50.1°C, fp 130°C)



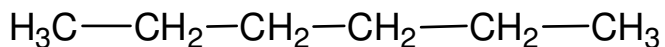
transz-1,2-dimetilciklohexán
(op -89.4°C, fp 123.7°C)

-Konformációs izoméria:

a sztereoizomer vegyületek molekuláiban a lehetséges téralkatok eltérőek (pl. ciklohexán szék és csavartkád téralkata)

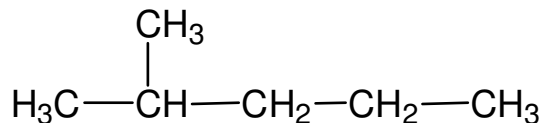
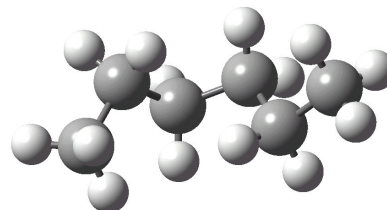


hexánizomerek (5 különböző molekula)



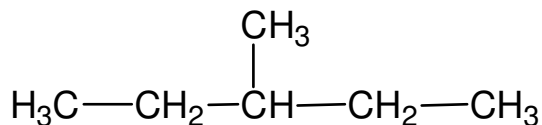
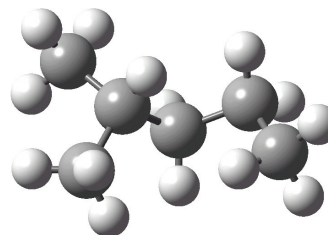
Hexane

hexán



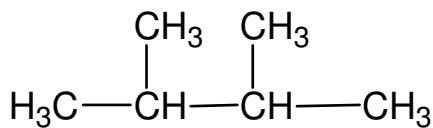
2-Methylpentane

2-metilpentán



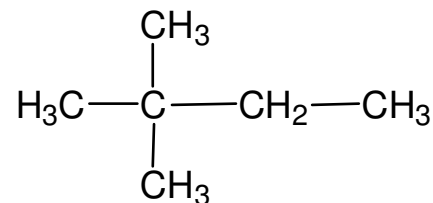
3-Methylpentane

3-metilpentán



2,3-Dimethylbutane

2,3-dimetilbután



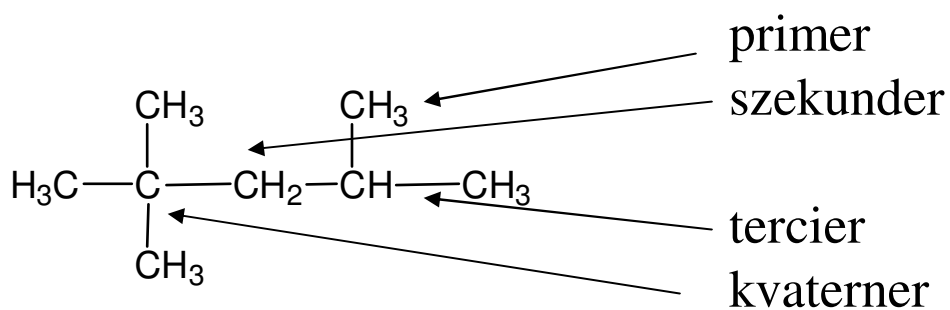
2,2-Dimethylbutane

2,2-dimetilbután

Szénatomok rendűsége

hány szomszédos **szénhez** kapcsolódik a vizsgált szén:

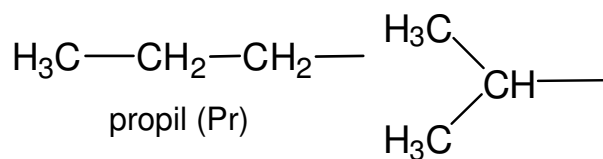
0 ⇒ metán, 1, 2, 3, maximum 4



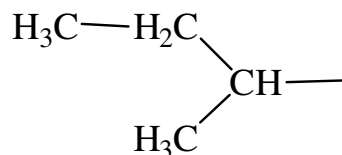
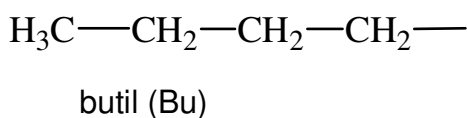
2,2,4-Trimethylpentane

2,2,4-trimetilpentán

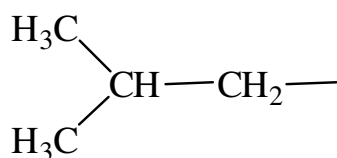
Egyértékű és többértékű csoportnevek



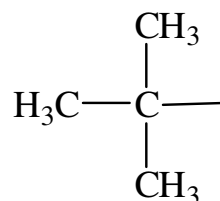
izopropil (i-Pr vagy iso-Pr)



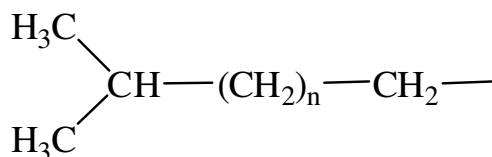
szek-butil (s-Bu vagy sec-Bu)



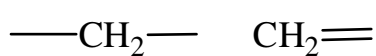
izobutil (i-Bu vagy iso-Bu)



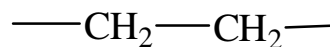
terc-butil (t-Bu vagy terc-Bu)



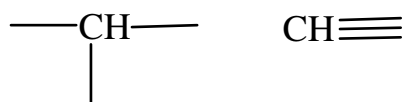
az izoalkil a C5 vagy annál rövidebb esetekben szabályos



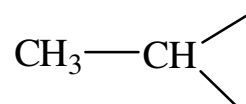
metilén



etilén



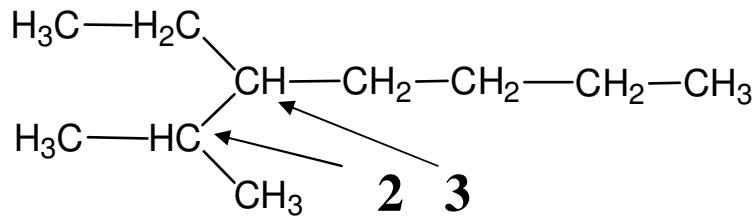
metin



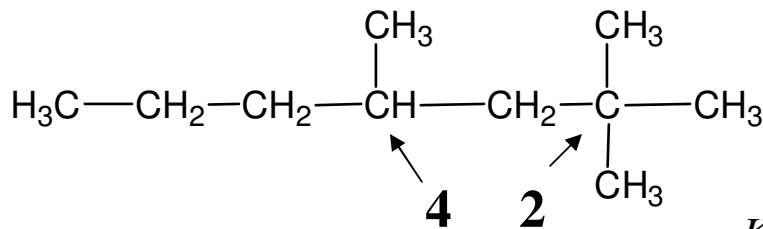
etilidén

Példák az alkánok elnevezésére:

nev.gyak.

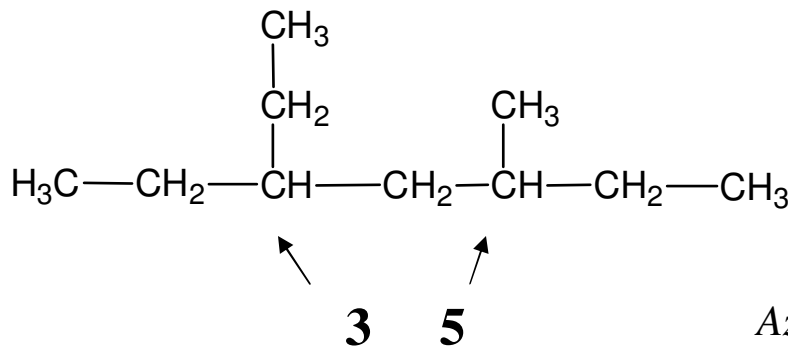


3-Ethyl-2-methylheptane
3-etil-2-metilheptán



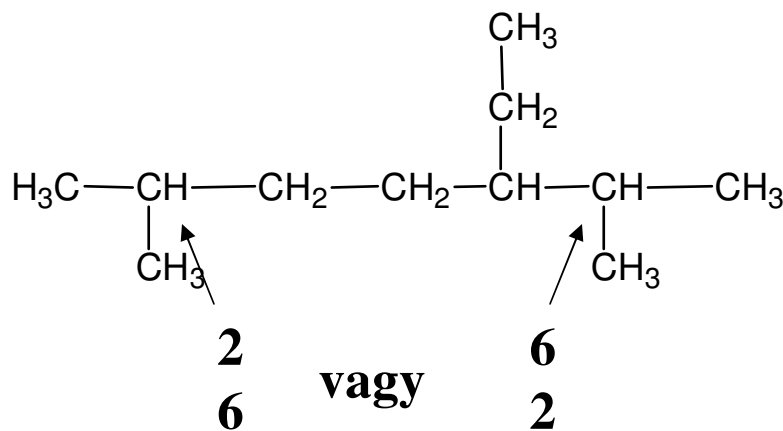
2,2,4-Trimethylheptane
2,2,4-trimetilheptán

Közelebb legyen a láncvéghez az elágazás (kisebb szám) nem 6,6,4 vagy 4,6,6



3-Ethyl-5-methylheptane
3-etil-5-metilheptán
helytelen a (3-metil-5-etilheptán)

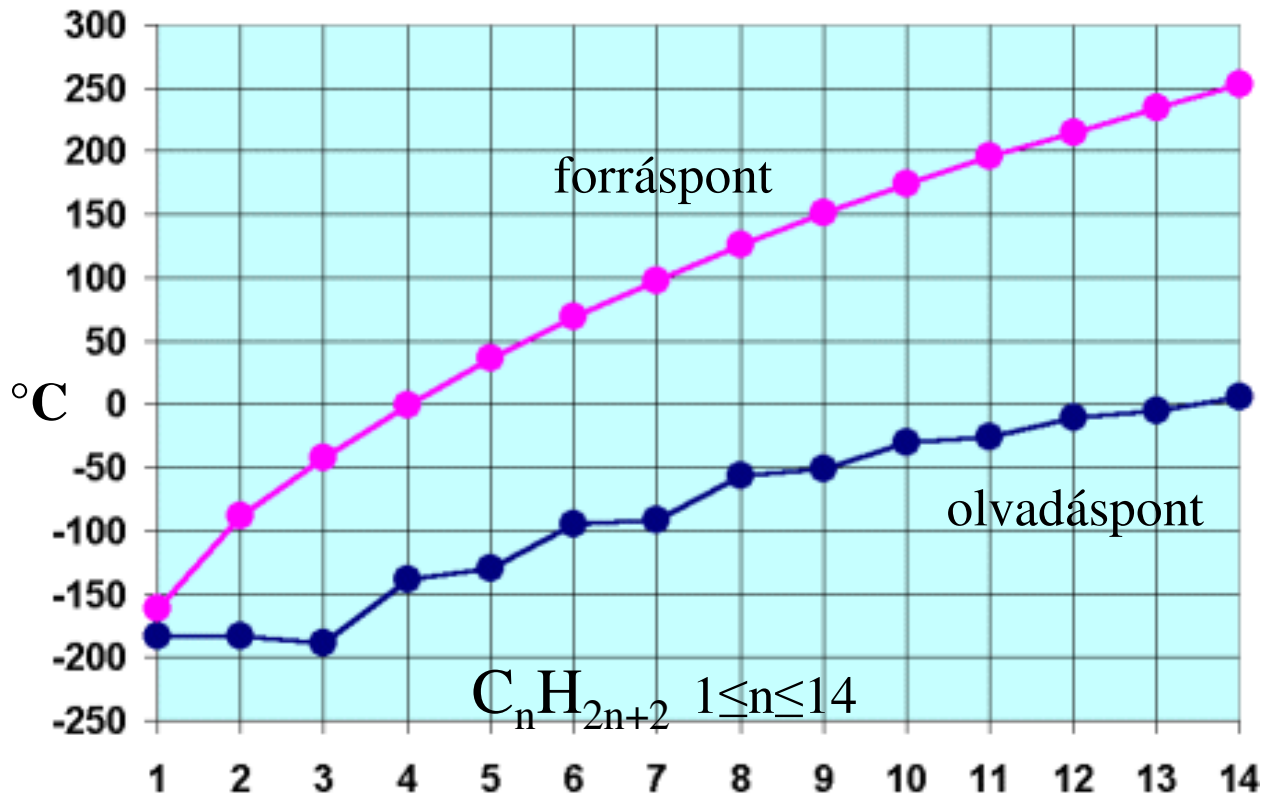
Azonos helyzetszám esetén a névsorban előbbálló csoport (angol ABC)



3-Ethyl-2,6-dimethylheptane
3-etil-2,6-dimetilheptán

Azonos elágazások azonos helyen akkor a következő csoport számít (3-etil és nem pedig 5- etil)

Alkánok és cikloalkánok olvadás és forráspontja



-Az alkánok **felületének nagysága** határozza meg azok **forráspontját**: minél kisebb a felületük annál alacsonyabb a forráspontjuk, mivel ilyenkor a *van der Waals* erők a molekulák között gyengébbek.

-A forráspont **CH₂**- csoportonként 20-30 °C-al **emelkedik**.

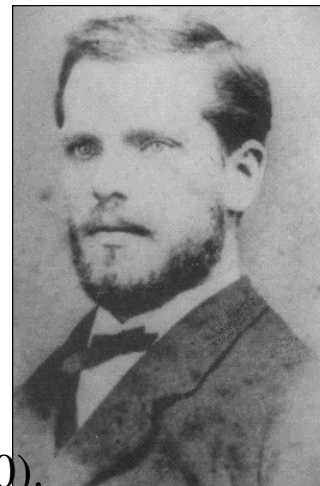
-A felület elágazó szénláncú- vagy cikloalkánok esetében kisebb lehet, ami forráspontcsökkenéshez vezet:

		op (°C)	fp (°C)
C ₆ H ₁₄	<i>n</i> -hexán	-95	68,7
C ₆ H ₁₄	2-metilpentán	-153,7	60,3
C ₆ H ₁₄	3-metilpentán	-118	63,3
C ₆ H ₁₄	2,3-dimetilbután	-128,8	58
C ₆ H ₁₄	2,2-dimetilbután	-98	49,7

-Az alkánok **olvadáspontja** a **szénatom számmal nő**, kivéve a propán.

-A páratlan szénatom számú alkánok pakoltsága a **kristályban** nagyobb, ezért olvadáspontjuk a „vártnál” alacsonyabb.

Van der Waals-, London-, diszperziós- vagy intermolekuláris-erők



tény: az apoláris alkánok pl. metán olvadási ($-182,6^{\circ}\text{C}$) és forráspontja (-162°C) alacsony.

kérdés: miért?

megjegyzés: egyáltalán miért fagy meg egy nem-ionos és nem-poláris molekula?

magyarázat: alkánok esetén a töltéseloszlás időátlagban zéró, ezért **nincs permanens dipólus** ($\mu = 0$).

Az elektronok mozgása miatt,

egy adott pillanatban viszont van töltésszeparáció: tehát létezik ekkor is **átmeneti dipólusmomentum**.


*Johannes Diderik
van der Waals*

(holland, 1837-1923)

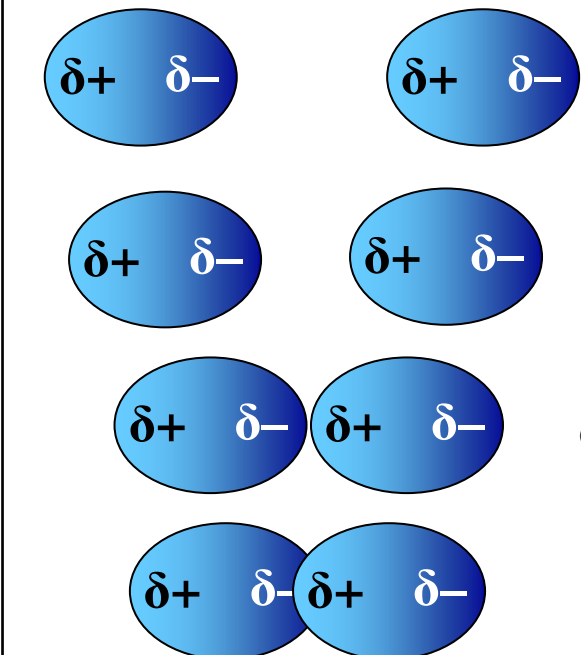
Fizikai Nobel-díj: 1910

A tranziens polarizáció eredménye:

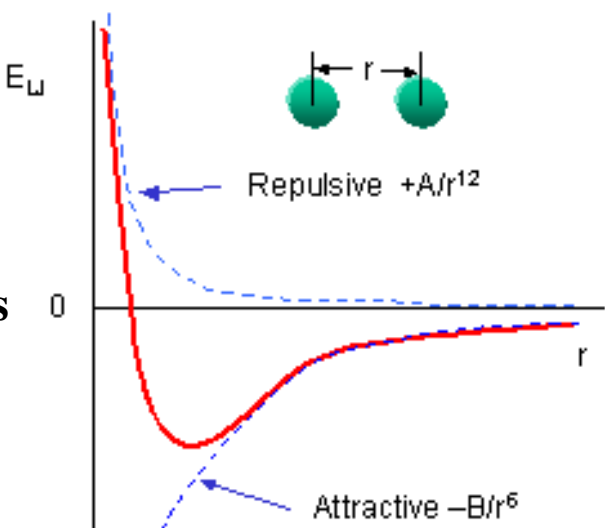
- a szomszéd molekulák polaritásának indukálása,
- rendező elv (intermolekuláris kölcsönhatás) megjelenése



Ha nem volna átmeneti dipólusmomentum, akkor nem lenne kölcsönhatás!



Mindig van átmeneti dipólusmomentum, ezért mindig van kölcsönhatás!



memo: He; fp= 4K, Kr; fp= 120K, N₂; fp= 77K, Cl₂; fp= 239K

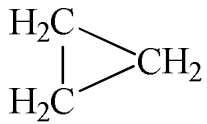
2. Cikloalkánok cikloparafinok (C_nH_{2n})

típusnév: cikloalkán

2/A Elágazásmentes egygyűrűs cikloalkánok

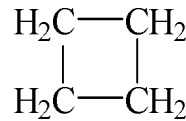
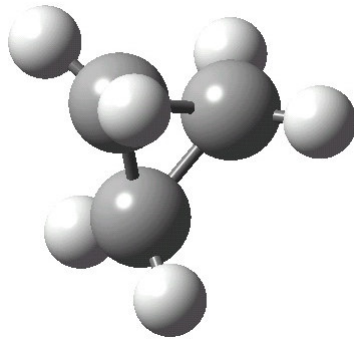
homológ sor („-án” végződés)

*konformációs feszülés
a gyűrű tagszám függvényében*

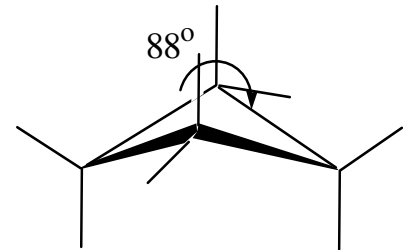


$$\alpha_{CCC} = 60^\circ$$

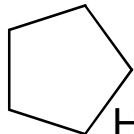
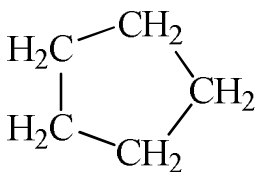
Cyclopropane
ciklopropán



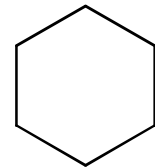
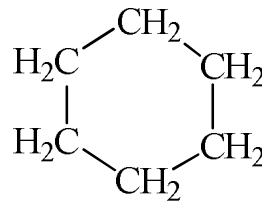
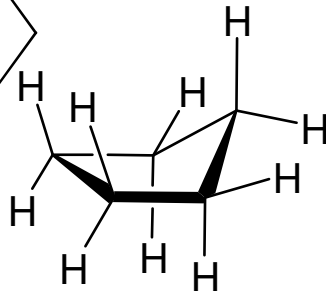
Cyclobutane
ciklobután



$$\alpha_{CCC} = 108^\circ$$

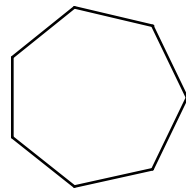
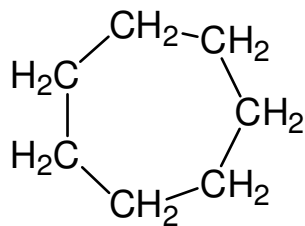


Cyclopentane
ciklopentán



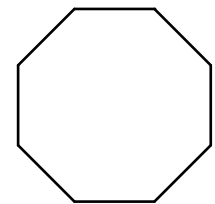
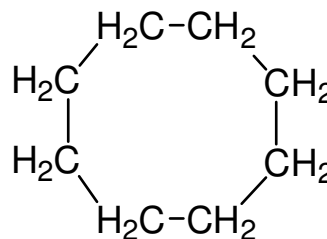
Cyclohexane
ciklohexán

$$\alpha_{CCC} = 110.8^\circ$$



Cycloheptane
cikloheptán

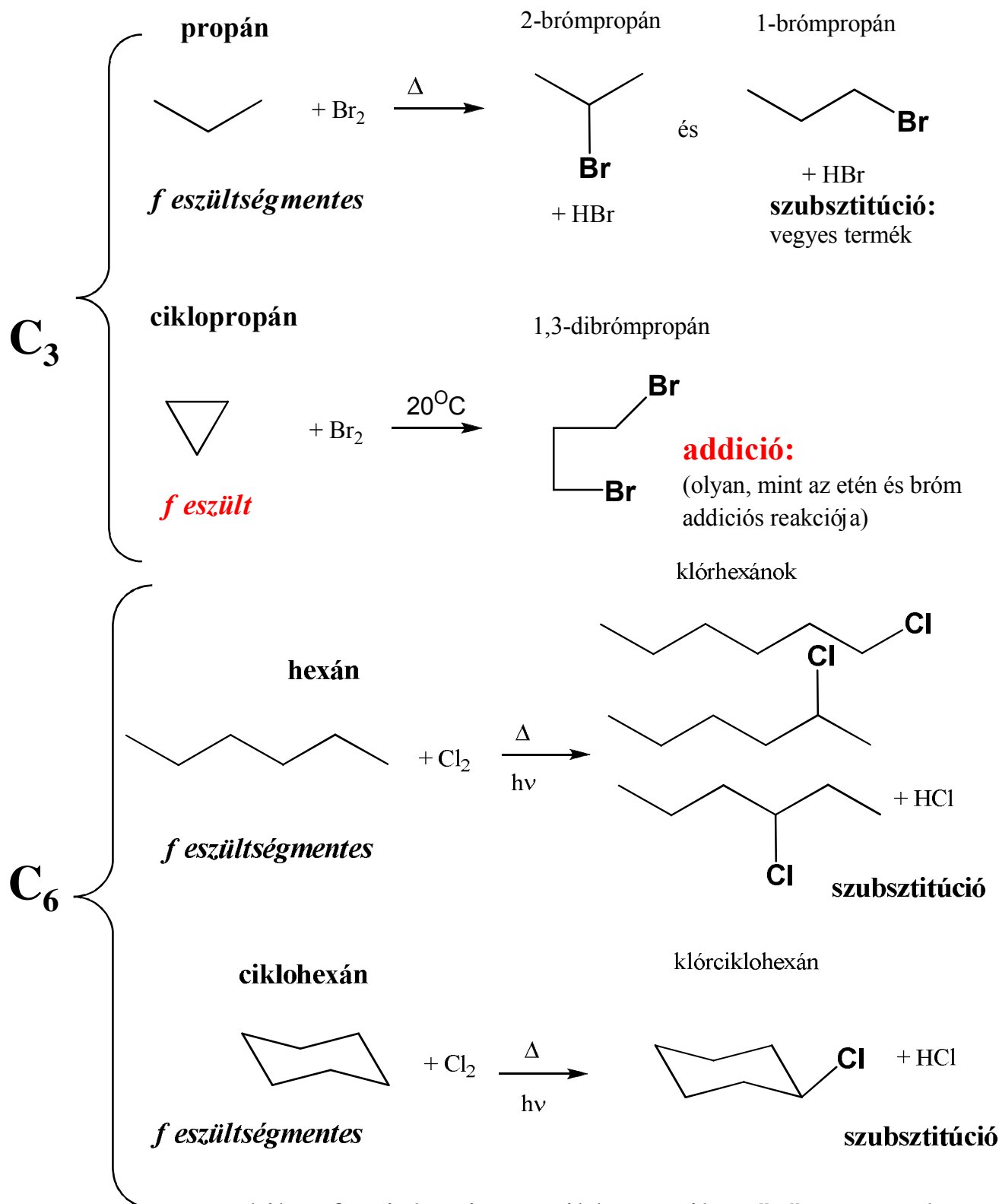
$$\alpha_{CCC} \sim 114^\circ$$



Cyclooctane
ciklooktán

$$\alpha_{CCC} \sim 116^\circ$$

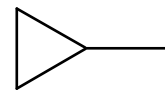
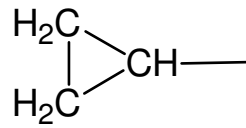
Alkánok és cikloalkánok reaktivitása



memo: van akik a fentiek miatt a ciklopropil gyűrűt pseudo-kettőskötésként emlegeti.

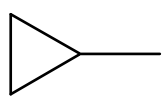
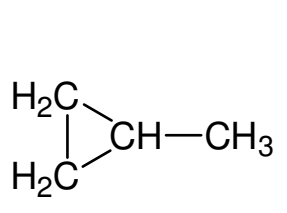
memo: egy feszültebb cikloalkil gyűrű (pl ciklopropil), akár már funkciós csoportként is felfogható!

Csoportnevek („-il” végződés) (C_nH_{2n-1})



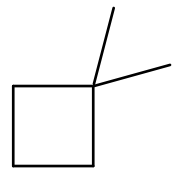
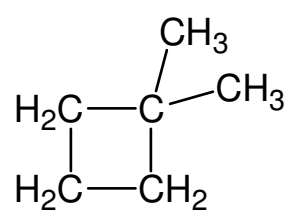
ciklopropil

2/B Oldalláncot tartalmazó egygyűrűs cikloalkánok



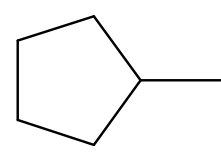
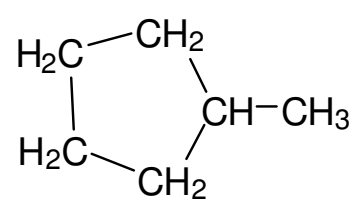
Methylcyclopropane

metilciklopropán



1,1-Dimethylcyclobutane

1,1-dimetilciklobután

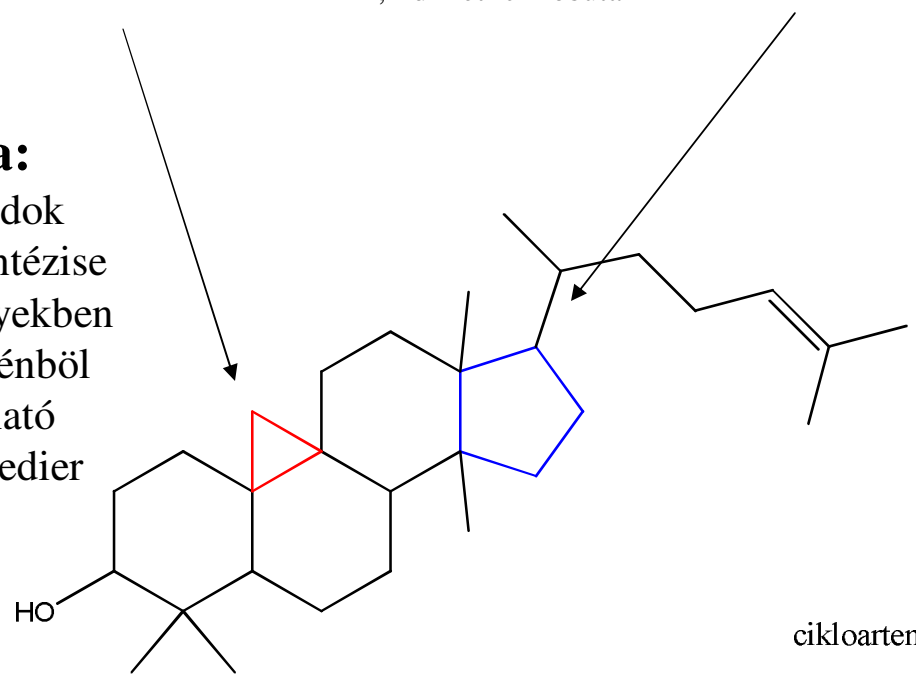


Methylcyclopentane

metilciklopentán

Példa:

szteroidok bioszintézise növényekben szkvalénből izolálható intermedier



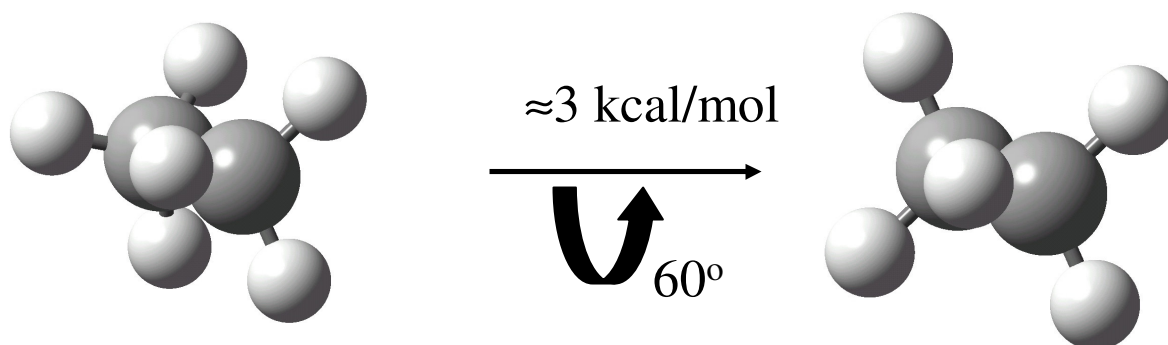
cikloartenol

Konstitúció: szerkezeti izoméria

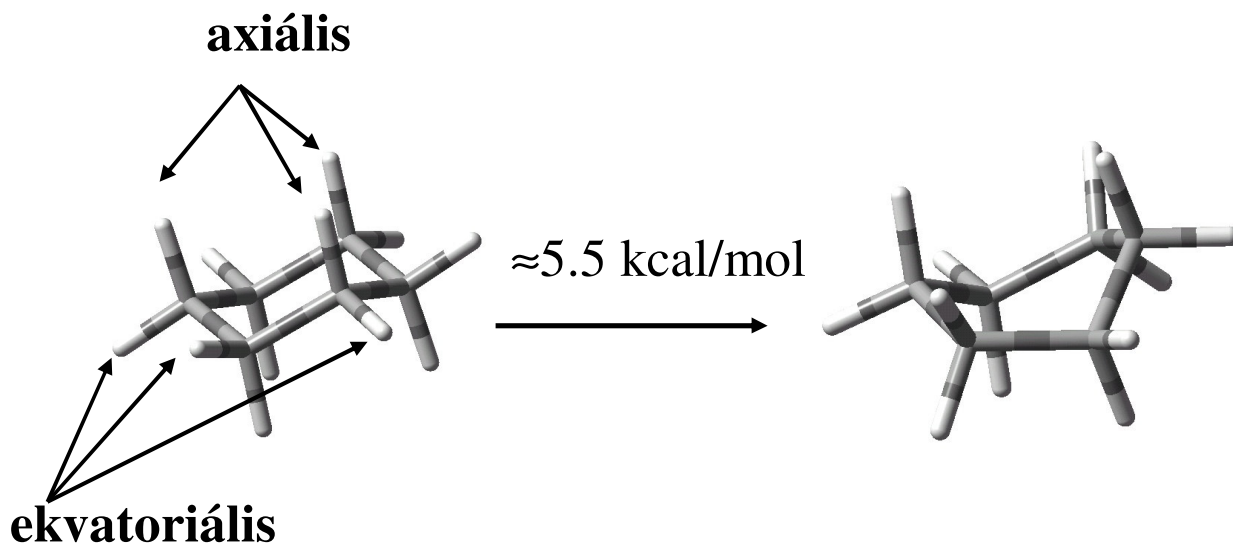
(bután, izobután esete)

Konformáció: lehetséges térszerkezetek

(etán fedő térállás, etán nyitott térállás)



(ciklohexán szék térállás, ciklohexán csavart kád térállás)



energia minimum: szék és a csavart kád térállás

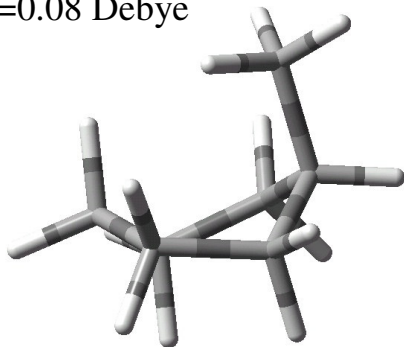
átmeneti állapot: félsík (5 atom egy síkban) és a kád téralkat

memo: 3 axiális H- estén a vdW. felületeik nem érnek össze, de ha Me-, -OH, stb. szubsztituensek kerülnek axiális helyzetbe, akkor a vdW felületek átfednek és ezért megjelenik a taszítás (instabilitás), *szin*-diaxiális kcs.

Térszerkezet (konformáció): *a metilciklohexán konformációja*

**axiális metilcsoport
csavart kád**

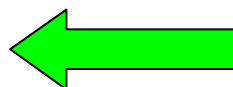
$E_{\text{RHF/3-21G}} = -271.724362$ Hartree
 $\mu = 0.08$ Debye



1.9 kcal/mol

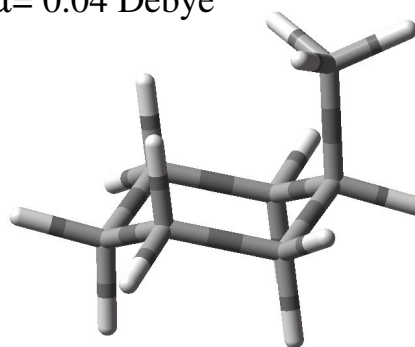


6.71 kcal/mol



**axiális metilcsoport
szék**

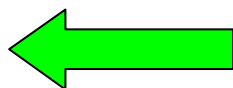
$E_{\text{RHF/3-21G}} = -271.735061$ Hartree
 $\mu = 0.04$ Debye



1.92 kcal/mol

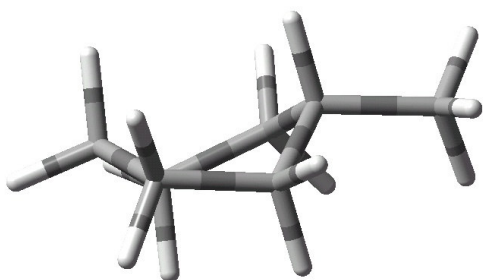


6.73 kcal/mol



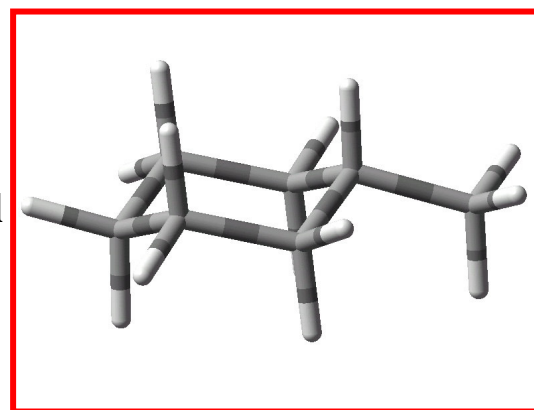
**ekvatoriális metilcsoport
csavart kád**

$E_{\text{RHF/3-21G}} = -271.727385$ Hartree
 $\mu = 0.05$ Debye



**ekvatoriális metilcsoport
szék**

$E_{\text{RHF/3-21G}} = -271.738115$ Hartree
 $\mu = 0.05$ Debye



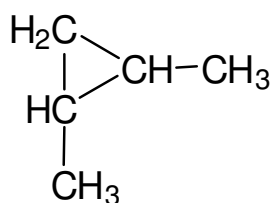
memo: a nagy térigényű szubsztituensek leggyakrabban az ekvatoriális pozícióban stabilabbak mint ha axiális helyzetben volnának.

Diszubsztituált cikloalkánok: (bővebben lásd a konformációs fejezetet)

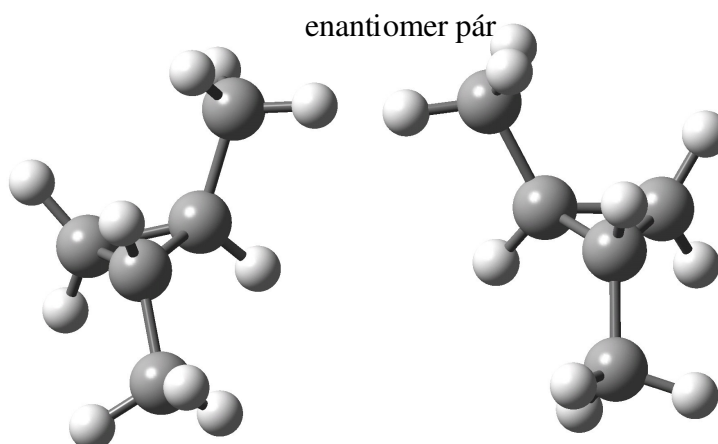
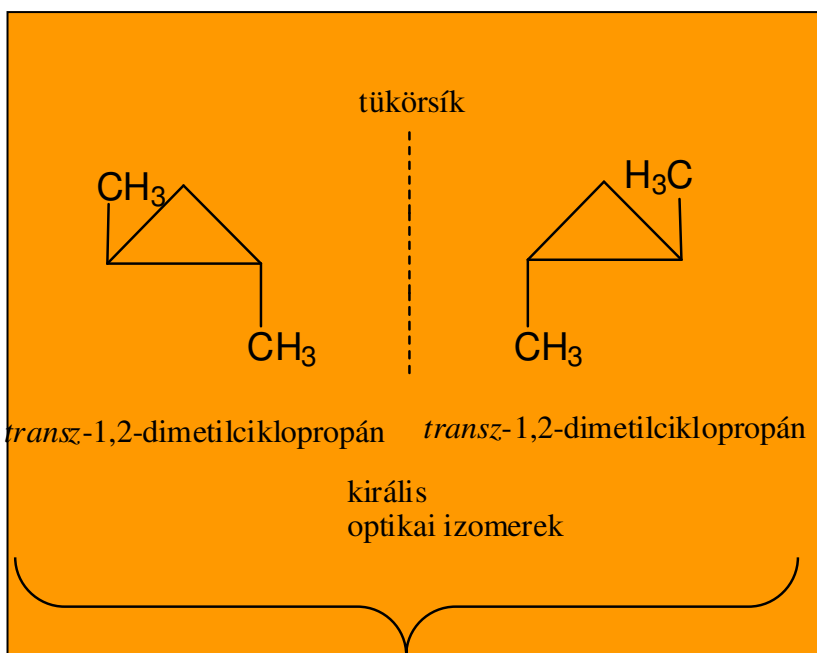
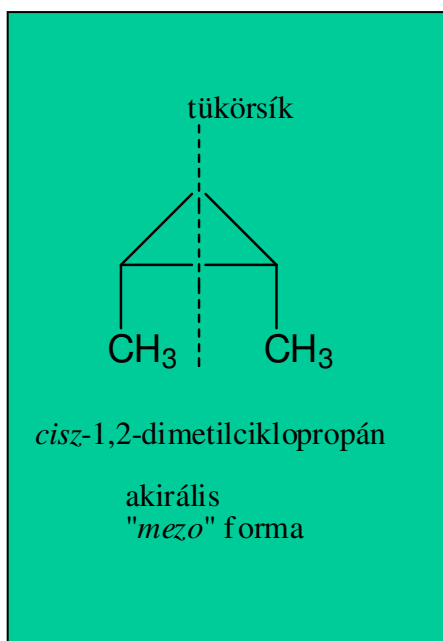
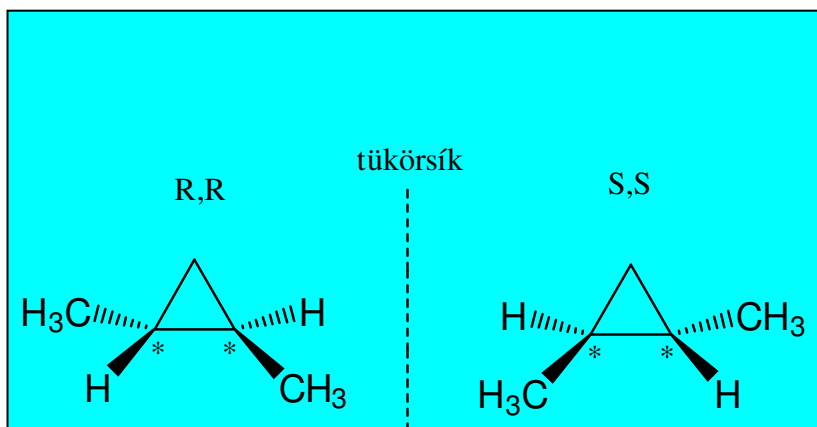
Kérdés: hány 1,2-dimetilciklopropán létezik?

Válasz: 3 sztereoizomer különíthető el

Eliel 405

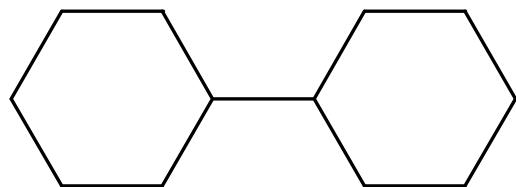


1,2-Dimethylcyclopropane
1,2-dimetilciklopropán



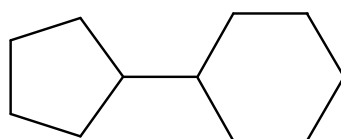
3. Többgyűrűs telített szénhidrogének

3/A Izolált gyűrűket tartalmazó szénhidrogének



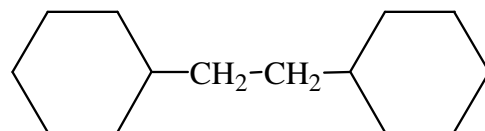
Bicyclohexyl

biciklohexil

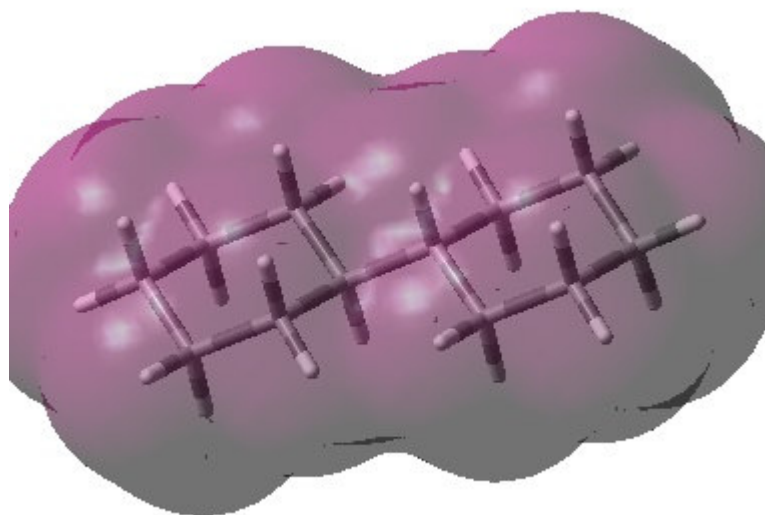
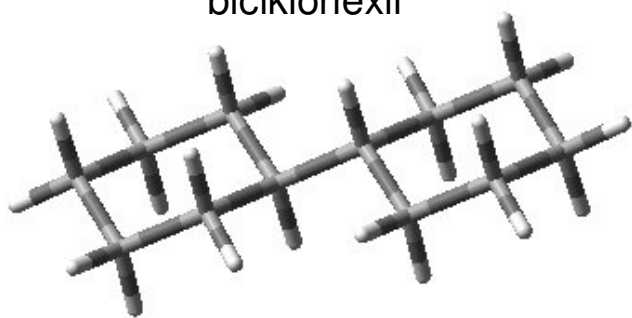


Cyclopentylcyclohexane

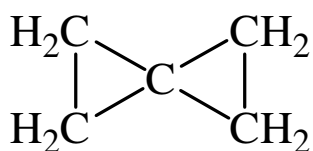
ciklopentilciklohexán



1,2-diciklohexiletán

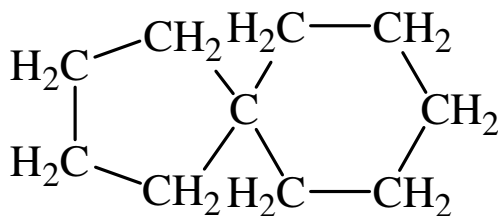
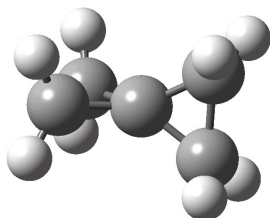


3/B Kétgyűrűs rendszerek egy közös szénatommal (spiránok)



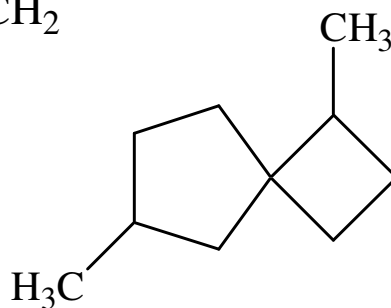
Spiro[2.2]pentane

spiro[2.2]bentán



Spiro[4.5]decane

spiro[4.5]dekán

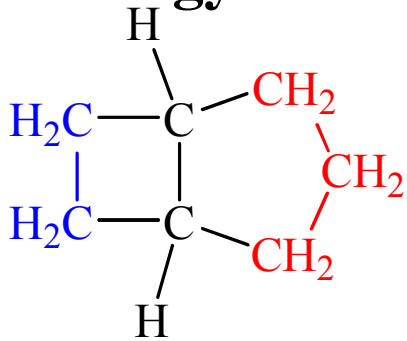


1,6-Dimethylspiro[3.4]octane

1,6-dimetilspiro[3.4]oktán

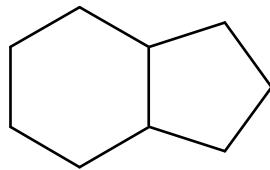
Biciklo vegyületek:

3/C Kétgyűrűs rendszerek két közös szénatommal



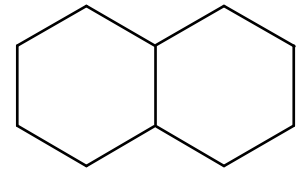
Bicyclo[3.2.0]heptane

biciklo[3.2.0]heptán



Octahydro-indene
biciklo[4.3.0]nonán

hidrindán

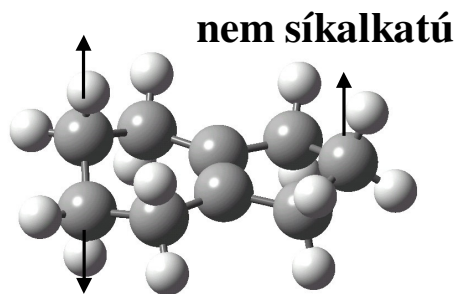


Decahydro-naphthalene

biciklo[4.4.0]dekán

dekalin

gyűrű anelláció

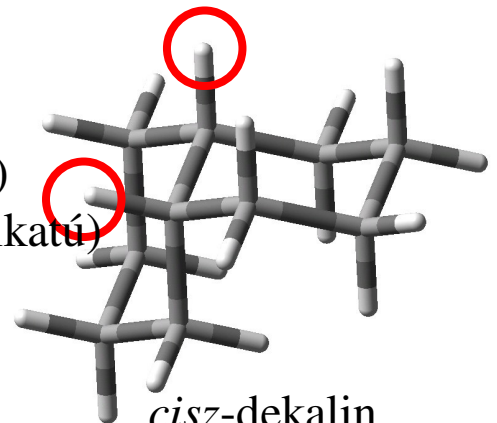


előzmény: Baeyer (1885) (ciklohexán síkalkatú)

Mohr (1918) (ciklohexán szék-kád alakú)

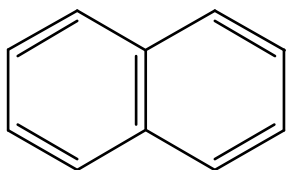
kérdés: a dekalinnak hány stereoizomerje van?

válasz: kettő



cis-dekalin

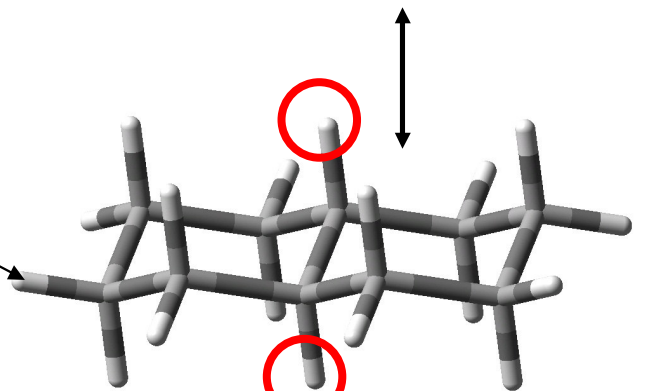
op: -43° , fp: 194°



Naphthalene
naftalin
Hückel (1925)

H₂/Pt (CH₃COOH)

H₂/Pt (gáz)

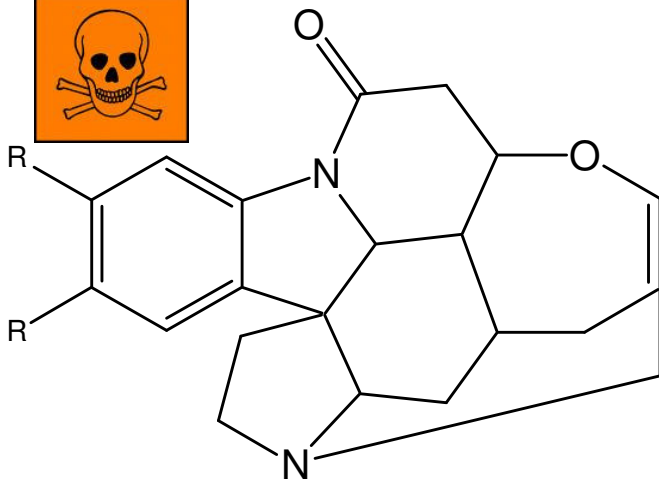


trans-dekalin

op: -31° , fp: 185°

Érdekes kondenzáltgyűrűs rendszerek:

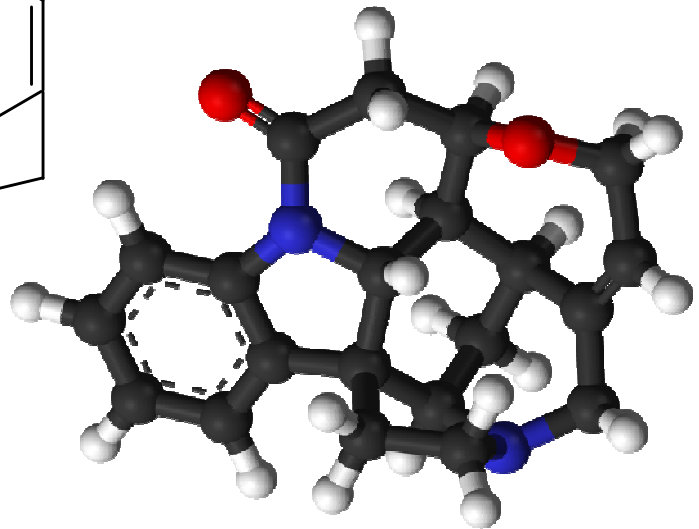
a sztrichnin és a brucin



R=H sztrichnin

R=OCH₃ brucin

Bruckner : III-2/1002



- hétgyűrűs molekula,
- bázisos kémhatás,
- tercier amin,
- reszolválás (savakat)

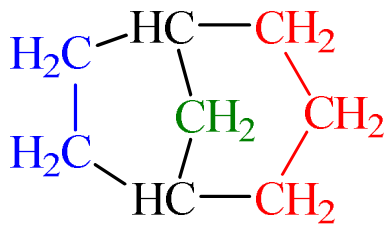
eredet: növényi cserje (*Strychnos* faj)
Pelletier és Caventou (1819)

Strychnos nux-vomica)
dél-kelet Ázsiában honos,
örökzöld fafélé

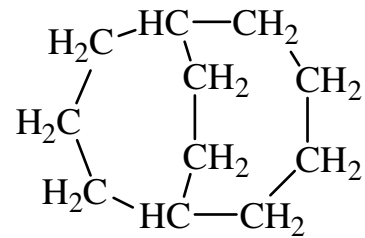


- fiziológiás hatás:**
- erős mérge (LD₅₀ = 10 mg/kg)
(merevgörcs és fulladás)
 - igen keserű

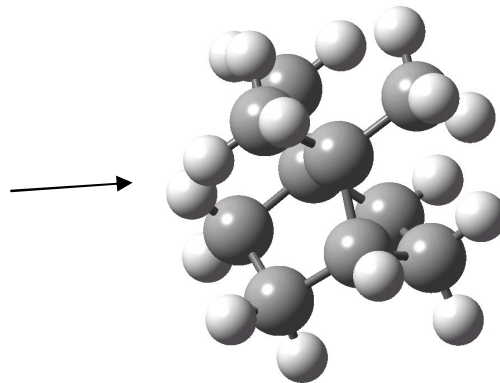
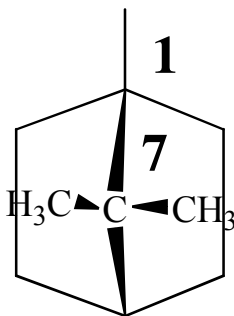
3/D Áthidalt gyűrűs rendszerek



Bicyclo[3.2.1]octane
biciklo[3.2.1]oktán

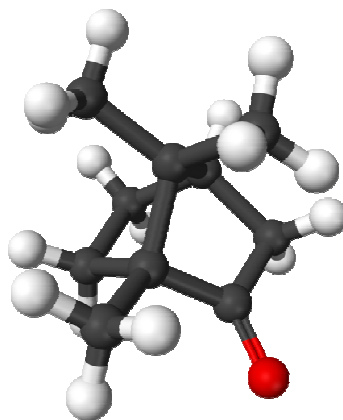
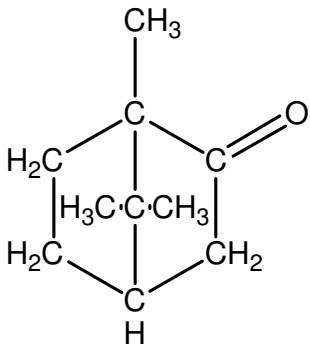


Bicyclo[4.3.2]undecane
biciklo[4.3.2]undekán



1,7,7-Trimethyl-bicyclo[2.2.1]heptane
1,7,7-trimetil-biciklo[2.2.1]heptán

Példa: a kámfor



Cinnamomum camphora

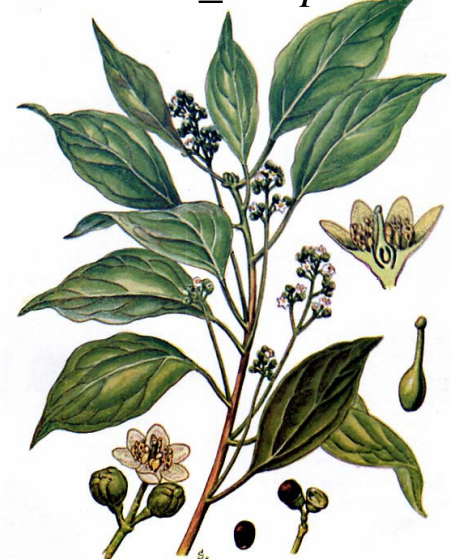
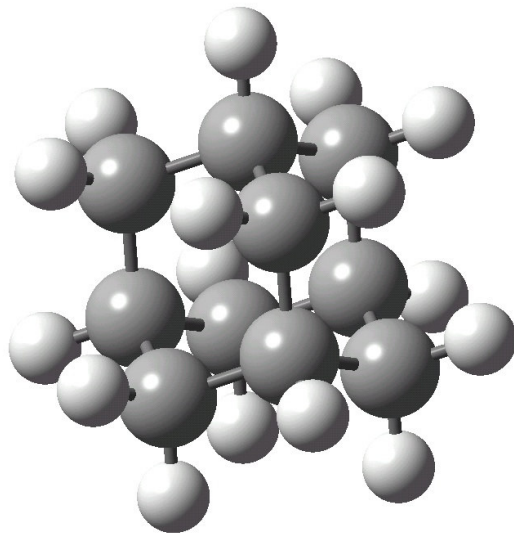


PLATE XXX.—*Cinnamomum camphora*. This laurel is the source of camphor, which is prepared from the chipped wood—distilled with steam. It is also prepared synthetically. (From Jackson: *Experimental Pharmacology and Materia Medica*.)



áttetsző, viaszos, szilárd kristályos anyag, erős és átható aromás illattal, helyi keringéscsökkentőként reumás kenőcsökben

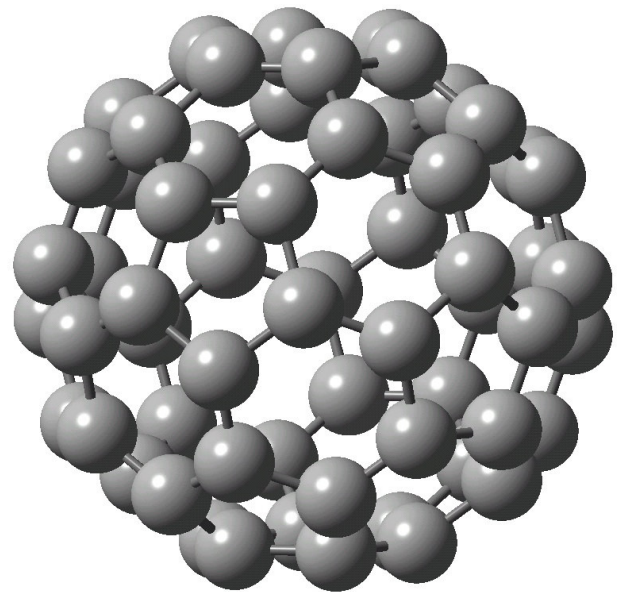
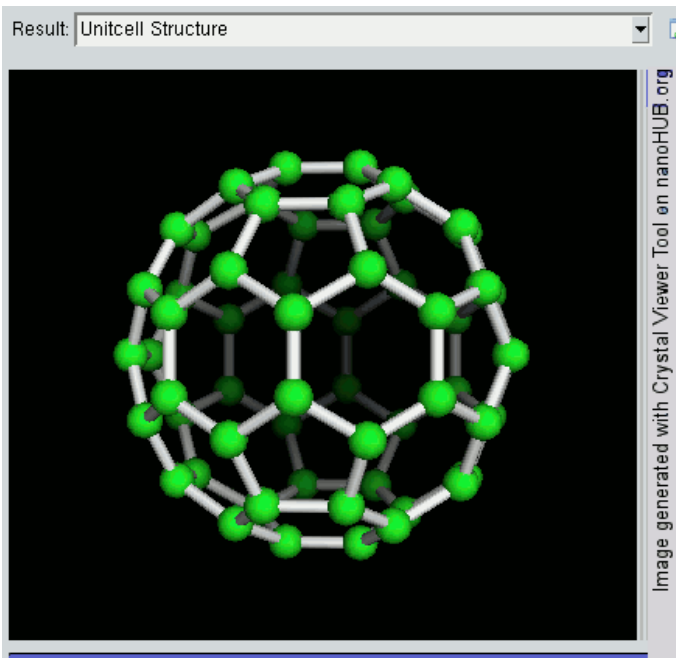
Példa:



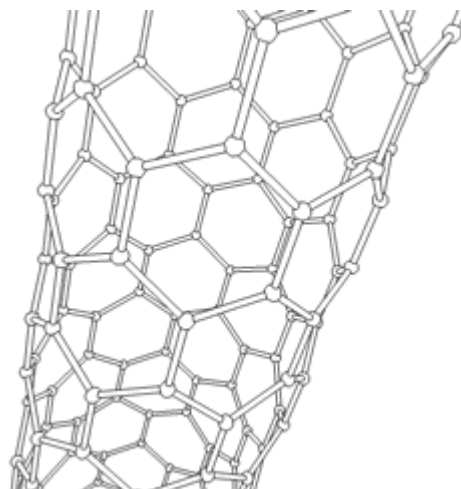
gyémántrács
része

adamantán

fullerének

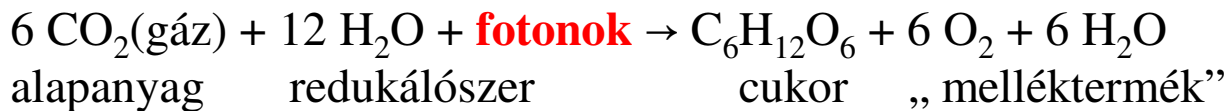


C_{60}



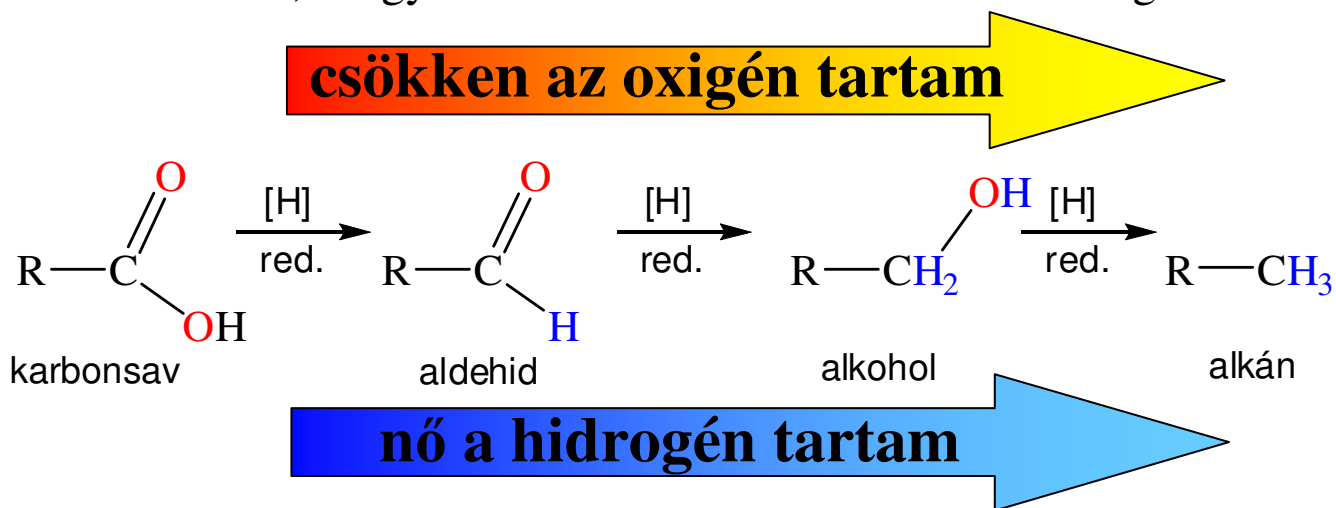
Oxidáció és redukció a szerves kémiában:

Példa: a fotoszintézis



kérdés: mit jelent az hogy a víz redukálószer?

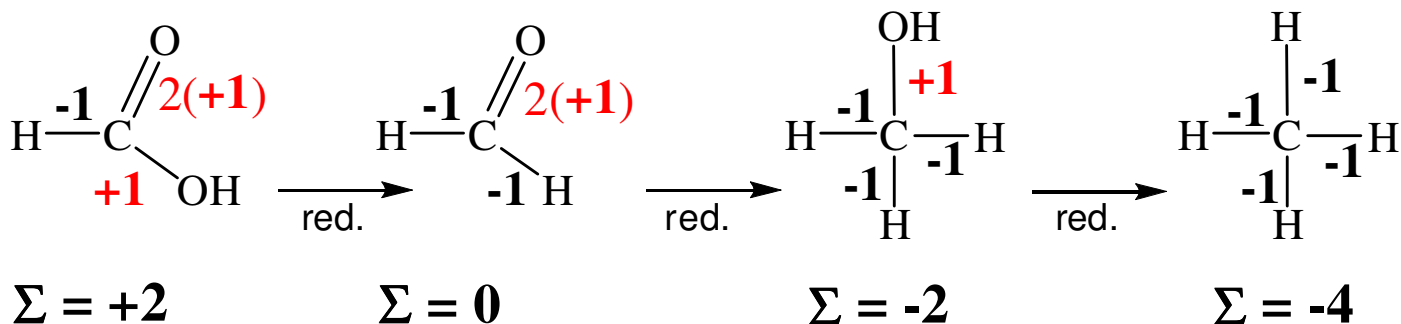
válasz: a széndioxid szénatomja olyan C-vé redukálódik, mint amilyen a cukorban van, avagy a molekulának csökken a relatív oxigén tartalma.



kérdés: hogyan tegyük kvantitatívvá?

- válasz:**
1. keressük meg azt a C-t amelyik (amelyek) oxidációs-száma a reakcióhoz köthetően változik.
 2. C-X kötés (-1) ha X e.-negativitása < C; pl. C-H = -1
 3. C-Y kötés (+1) ha Y e.-negativitása > C; pl. C-F = +1
 4. C-C kötés (0)

Egy példa redukcióra: az oxidációs állapot egyre csökken



memo:	2.1	-						
K-héj	H	He						
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	

példa: 1) rendezze oxidációs állapot szerint sorba a következő vegyületeket: CH₄, CO₂, metanol, hangyasav, formaldehid!
 CH₄ (-4) < CH₃OH (-2) < HCOH (0) < HCOOH (+2) < CO₂ (+4)

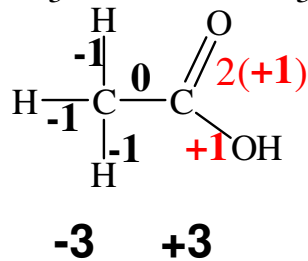
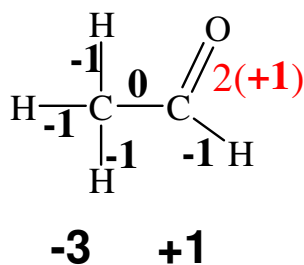
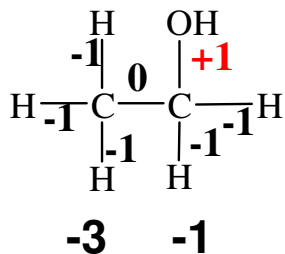
2) milyen oxidációs-szám változás kíséri a metanol formaldehiddé oxidálását?



ami oxidációt jelent hiszen az oxidációs állapot nő

memo: az előbbi oxidációt végezhetjük H₂CrO₄-el amiből Cr³⁺ lesz
 [kromátanion CrO₄²⁻ (Cr⁶⁺) → kromit (Cr³⁺)]
 tehát a Cr redukálódik +6 → +3.

példa: 3) Mi a szének ox.-állap. az EtOH, CH₃CHO és CH₃-COOH-ban?

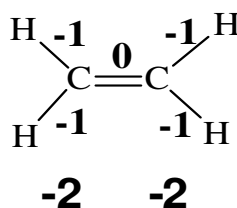
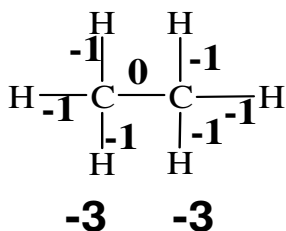


4) Mi is történik a fotoszintézis során?



Ami redukciót jelent, mert a C-k oxid.állapota csökken: +4 → 0

5) Mi a szének ox.-állapota az etánban és az eténben?



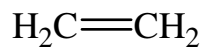
memo: ox.-szám nő → oxidáció, pedig nem jelenik meg O-atom.

4. Alkének (olefinek) (C_nH_{2n})

típusnév: alkén

4/A Láncelágazástól mentes

homológ sor
(„-én” végződés)



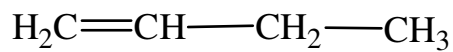
Ethene
etén
(etilén)



Propene
propén

(propilén)

régi nevek

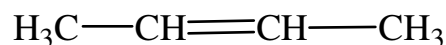


1

But-1-ene

but-1-én

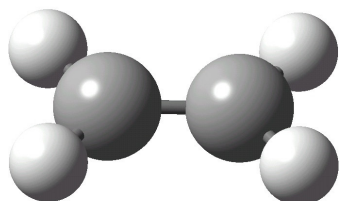
2



But-2-ene

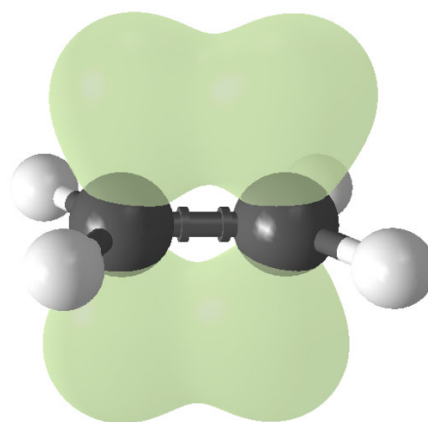
but-2-én

(2-butén)



Az etén „szigma-váza”:

5 lokalizálható kötés



Az etén „pi-pályája”:

1 delokalizált kötés

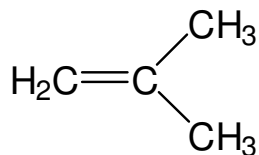


Pent-1-ene pent-1-én

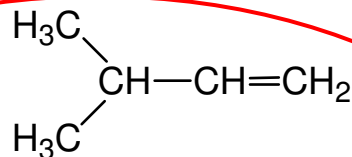


Pent-2-ene pent-2-én

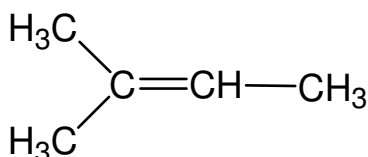
4/B Elágazó szénláncú



Isobutylene
2-metilpropén
izobutilén

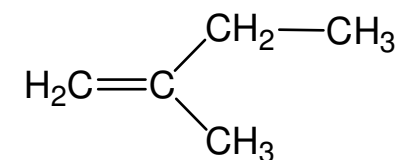


3-Methyl-but-1-ene
3-metilbut-1-én



2-Methyl-but-2-ene

2-metilbut-2-én

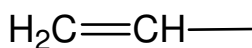


2-Methyl-but-1-ene

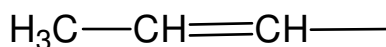
2-metilbut-1-én

szerkezeti izomerek

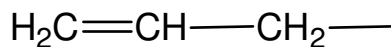
Csoportnevek („-il” végződés) ($\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$)



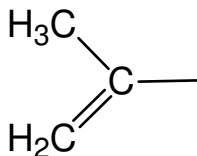
vinil



propenil



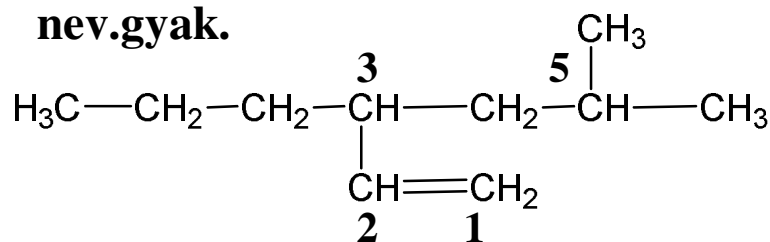
allil



izopropenil

← szerkezeti izoméria

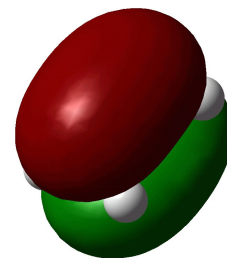
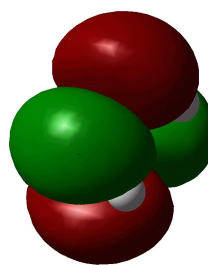
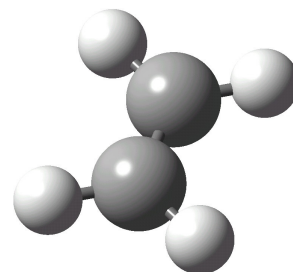
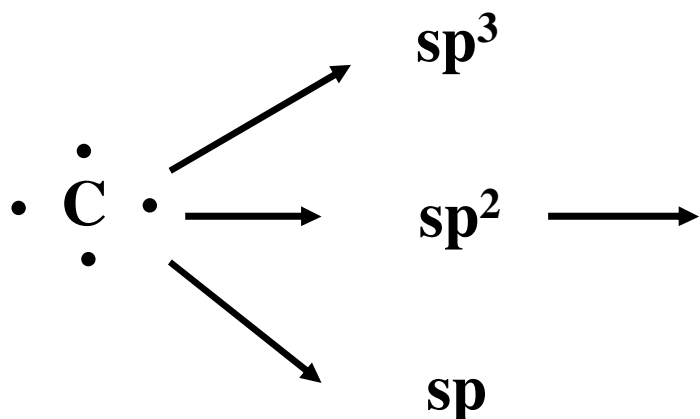
nev.gyak.



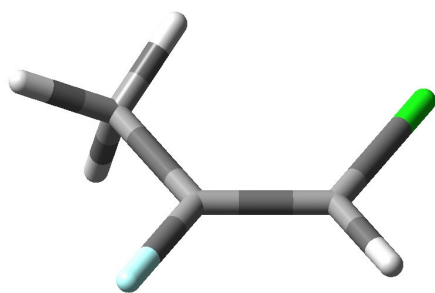
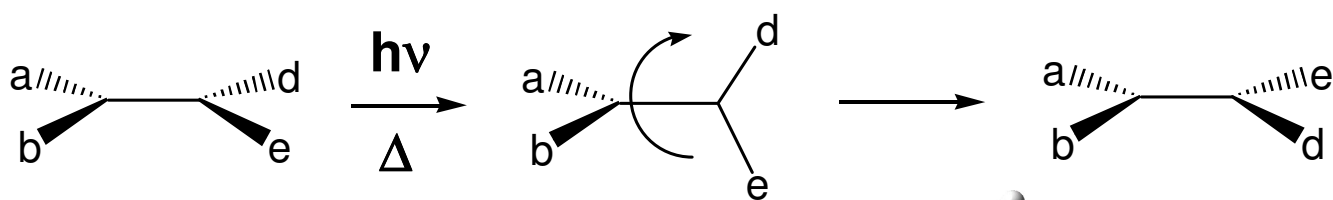
5-Methyl-3-propylhex-1-ene
5-metil-3-propilhex-1-én

Az alkének (olefinek) elektronszerkezete

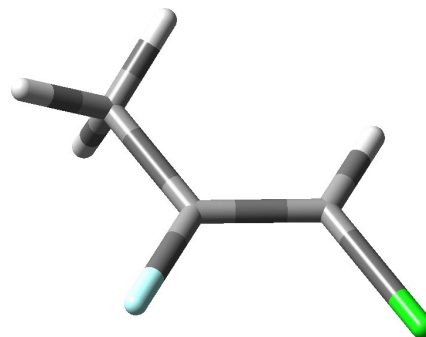
Kucsman I 6/8



Az olefinek térszerkezete: *cisz-transz* izoméria



cisz (Z)-forma



transz (E)-forma

memo: Z; zusammen (együtt), E; entgegen (ellentétes) [német]

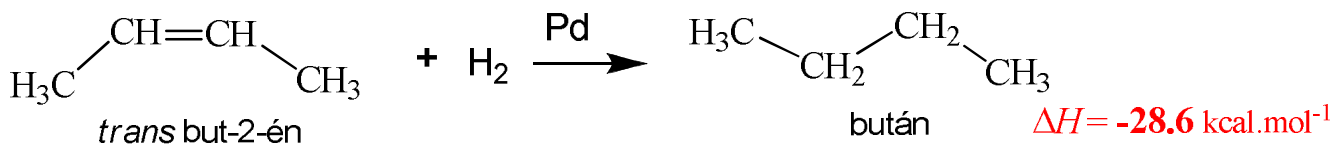
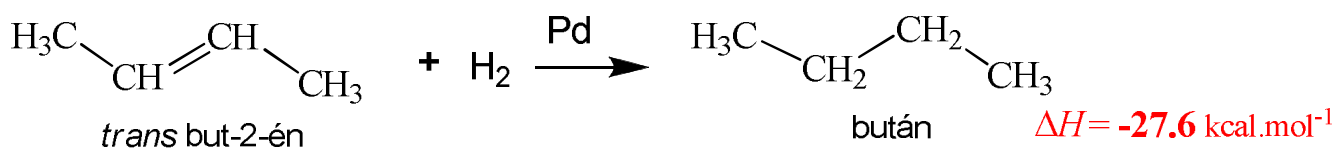
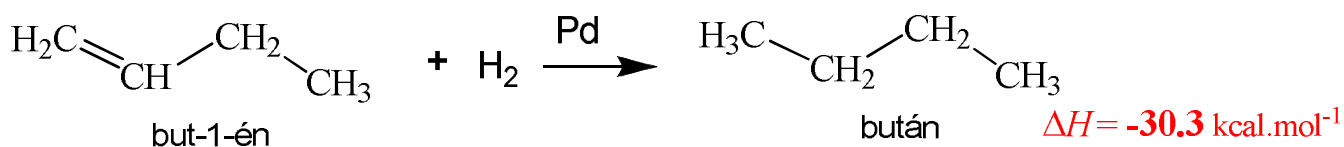
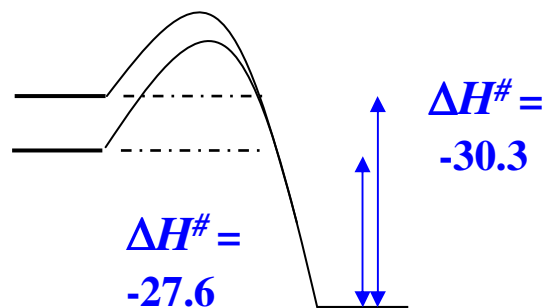
Alkének stabilitása:

megfigyelés:

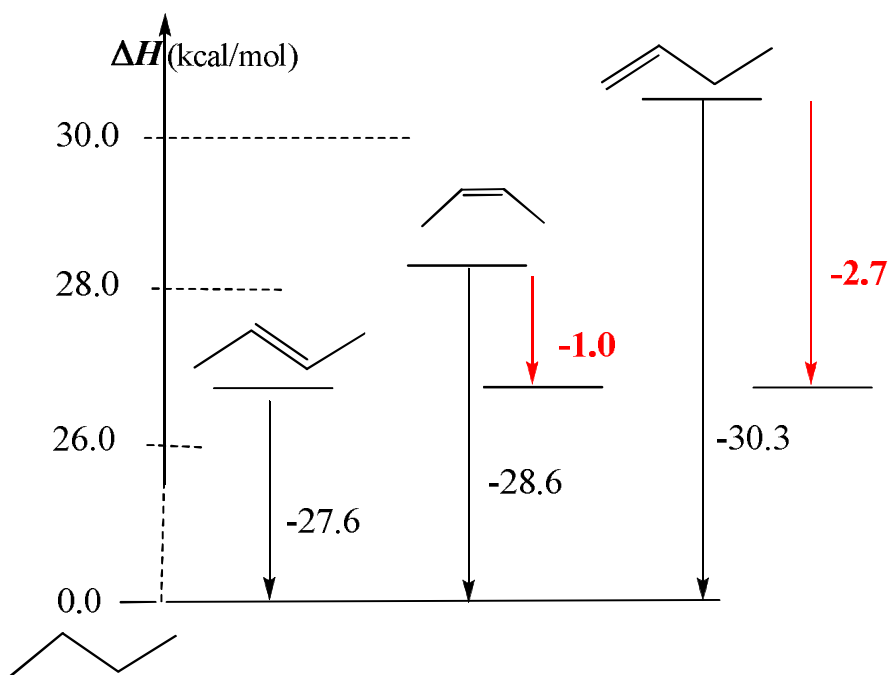
1) az alkének Pt katal. jelenlétében hidrogénezhetők.

2) ez a reakció exoterm, kb. 20-30 kcal.mol⁻¹ „hő” képződik.

3) ez a reakció a különböző alkének stabilitásának összehasonlítására is felhasználható:

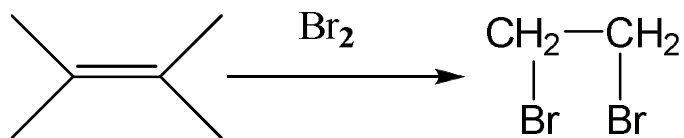


memo: minél **nagyobb** a hidrogénezés hő (a képződési entalpia), annál instabilabb volt a kiindulási alkén. Ebben az esetben tehát a $\Delta\Delta H$ értékek alapján a *transz* but-2-én a legstabilabb, a *cisz* forma labilisabb (~1 kcal.mol⁻¹) és a but-1-én a leginstabilabb (~2.7 kcal.mol⁻¹) alkén.



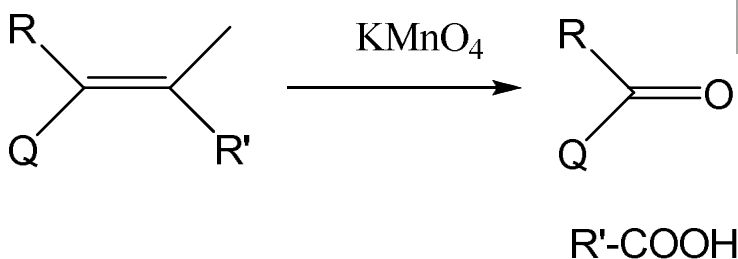
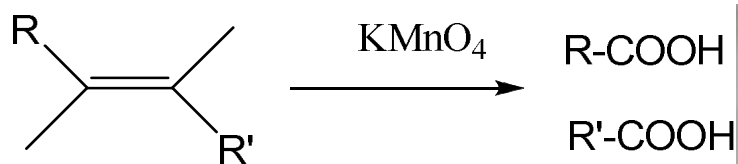
Alkének kimutatása

brómaddíció:



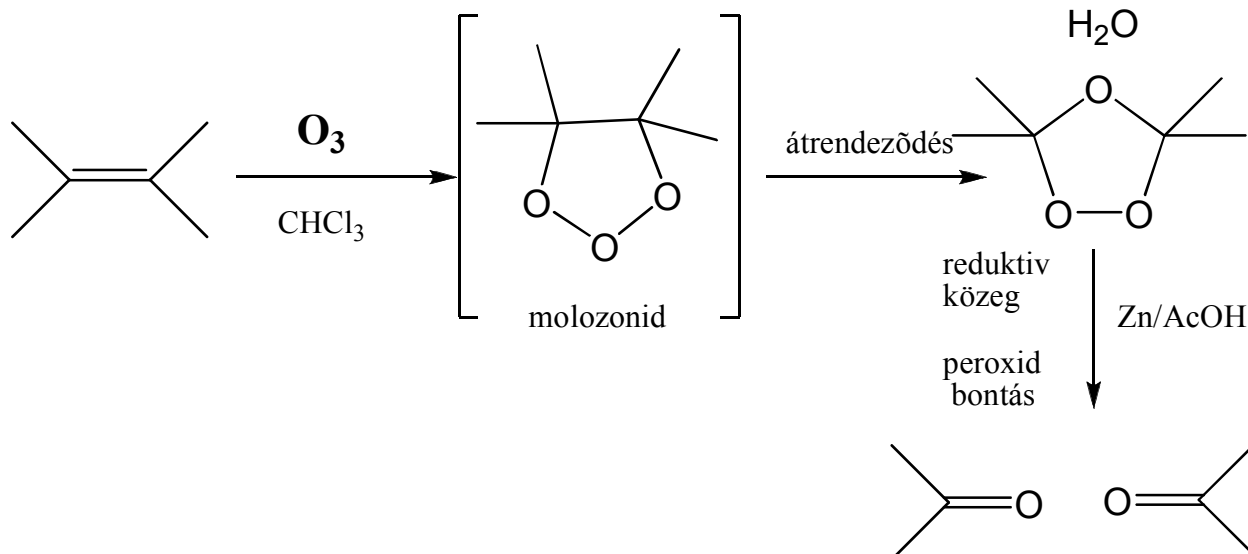
a brómos víz
elszíntelenedik

permanganátos oxidáció:



az ibolya szín
barnára vált

ozonolízis:



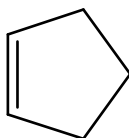
5. Cikloalkének (cikloolefinek) (C_nH_{2n-2}) típusnév: cikloalkén



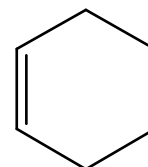
Cyclopropene
ciklopropén



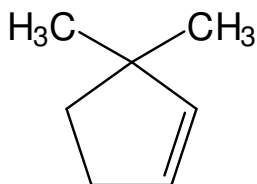
Cyclobutene
ciklobutén



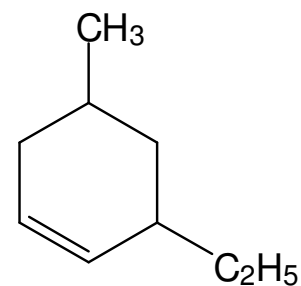
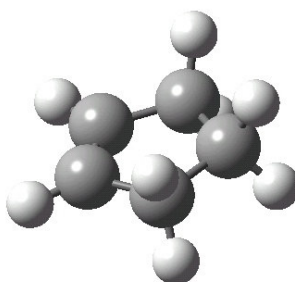
Cyclopentene
ciklopentén



Cyclohexene
ciklohexén

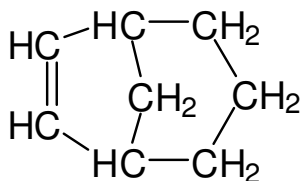


3,3-Dimethylcyclopent-1-en
3,3-dimetilciklopent-1-én

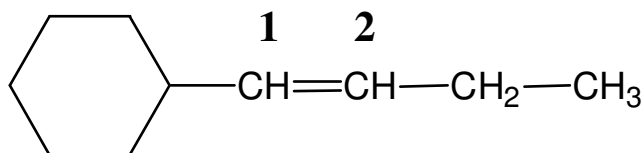


3-Ethyl-5-methylcyclohex-1-en
3-etil-5-metilciklohex-1-én

Bonyolultabb cikloalkánok (cikloparafinok)



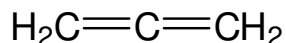
Bicyclo[3.2.1]oct-6-ene
biciklo[3.2.1]oct-6-én



But-1-enyl-cyclohexane
1-ciklohexilbut-1-én

6. Két vagy több kettőskötést tartalmazó szénhidrogének (C_nH_{2n-2}) típusnév: alkadién, alkapolién

6/A1 kumulált diének

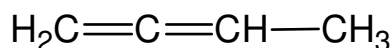


allene

allén

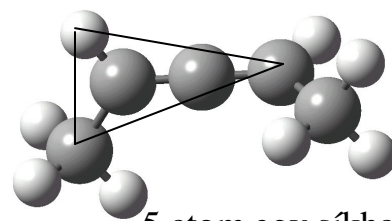
Propa-1,2-diene

propa-1,2-dién

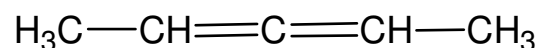


Buta-1,2-diene

buta-1,2-dién



5 atom egy síkban

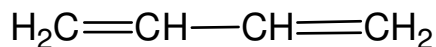


Penta-2,3-diene

penta-2,3-dién

6/A2 konjugált diének

A **butadién** a legegyszerűbb nyílt szénláncú konjugált dién. Színtelen gáz, ami könnyen cseppfolyó-sítható. Egy szerkezeti izomerje az 1,2-butadién létezik.



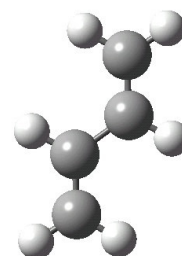
Buta-1,3-diene

buta-1,3-dién

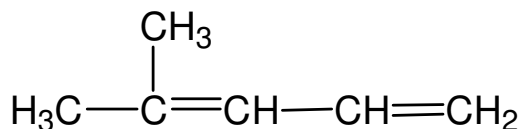
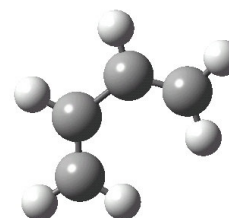
butadiene

butadién

konformáció

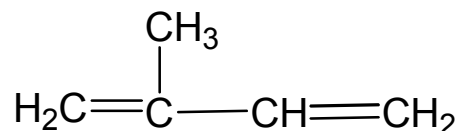


10 atom egy síkban



4-Methyl-penta-1,3-diene

4-metilpenta-1,3-dién



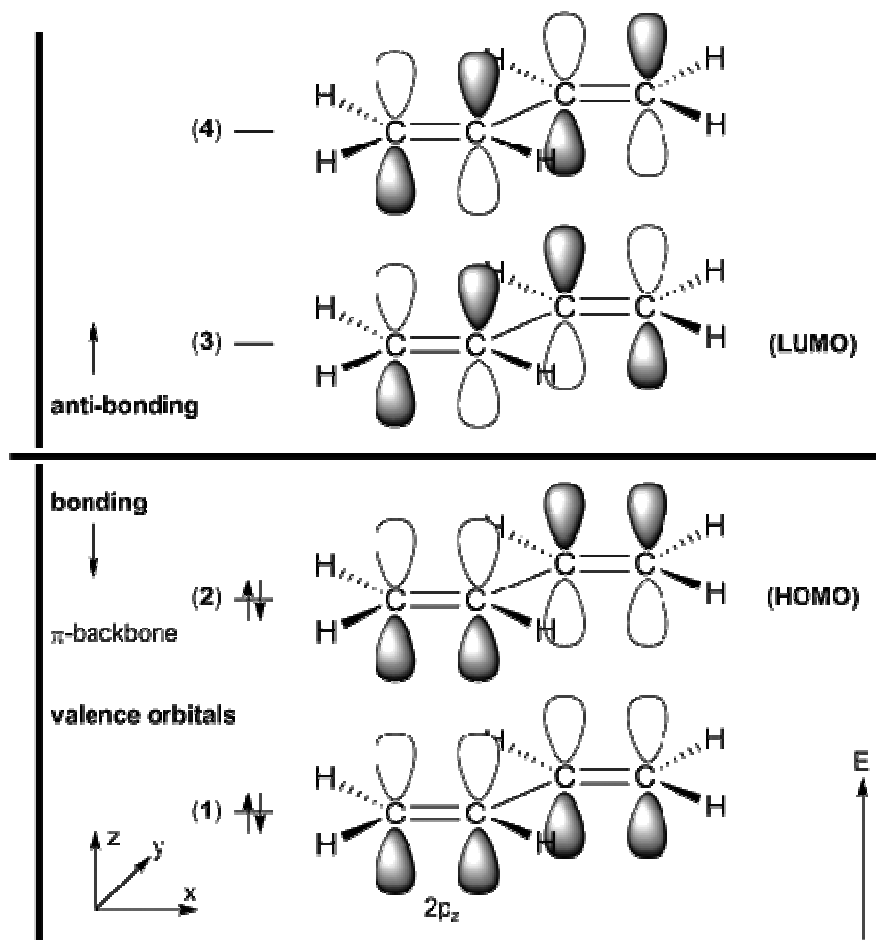
2-Methyl-buta-1,3-diene

2-metilbuta-1,3-dién

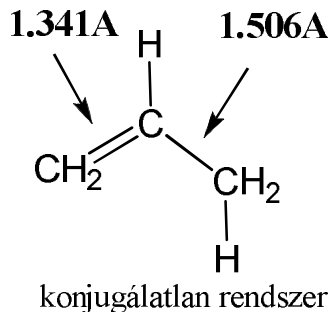
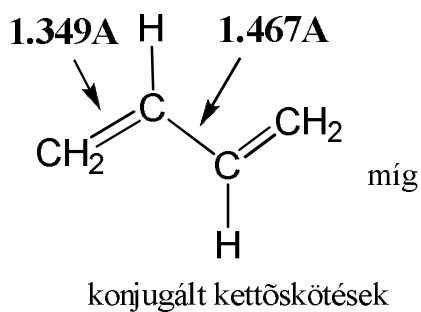
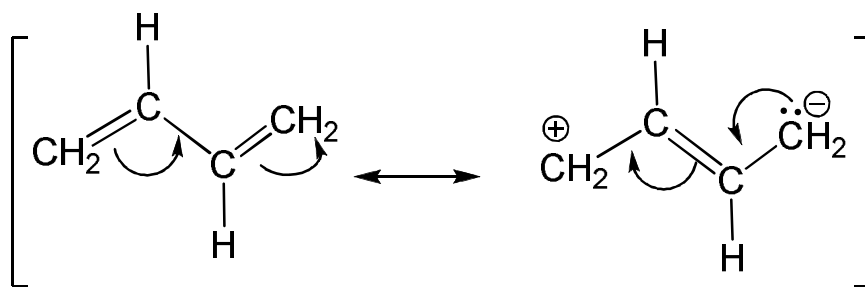
isoprene **izoprén**

A buta-1,3-dén elektronszerkezete: $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{CH}_2$
buta-1,3-dién

Elektronszerkezet:
konjugáció



Határszerkezetek:
konjugáció



Kötéshosszak:
konjugáció

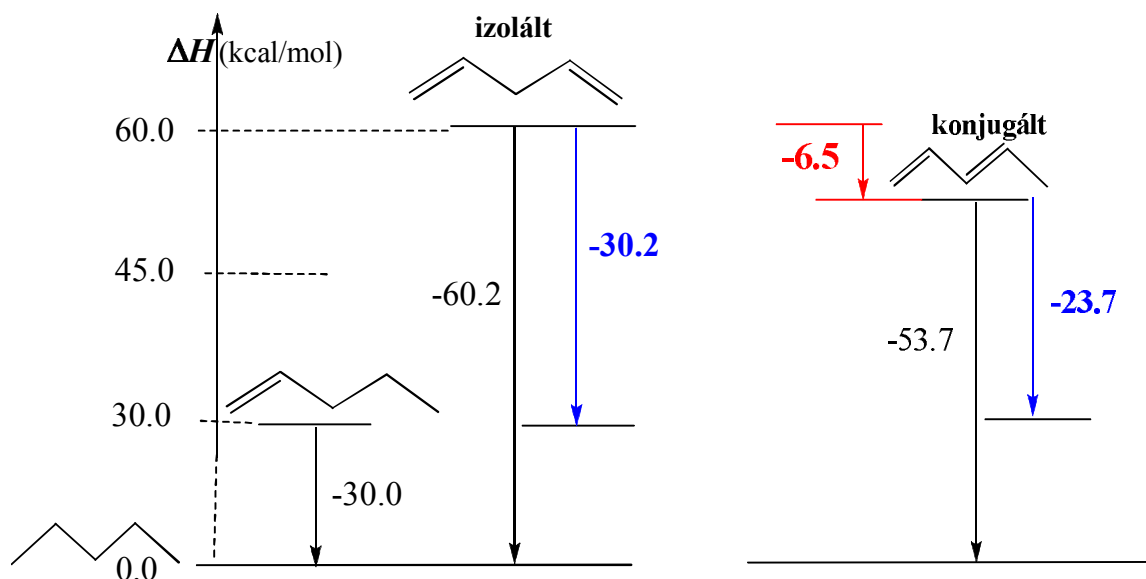
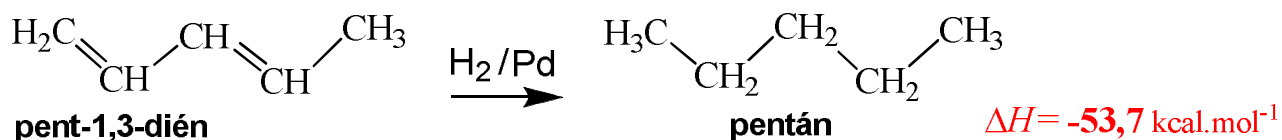
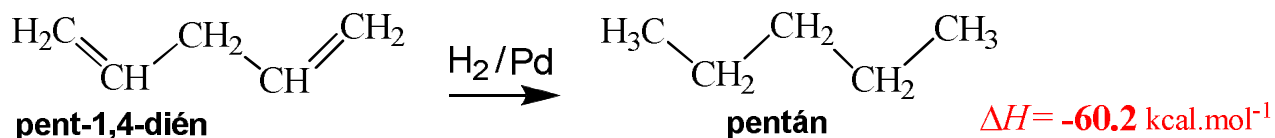
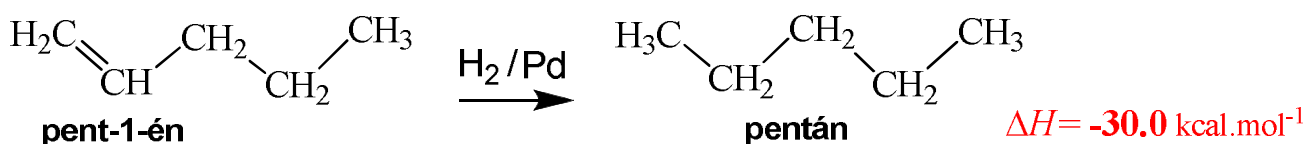
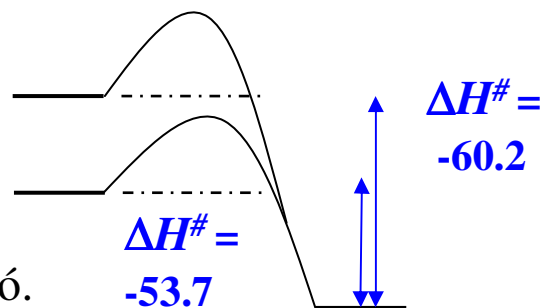
Alkadiének stabilitása:

megfigyelés:

1) az alkének és alkadiének is Pt katal. jelenlétében hidrogénezhetők.

2) ez a reakció exoterm, kb. 20-30 kcal.mol⁻¹ „hő” képződik egy-egy kettőskötés telítésekor.

3) a konjugáció mértéke (extra stabilizáció) ezen az uton kvantifikálható.

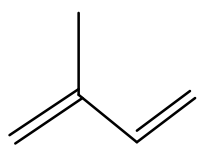


memo: minél **nagyobb** a hidrogénezés hő (a képződési entalpia), annál instabilabb volt a kiindulási alkadién. Ebben az esetben a $\Delta\Delta H$ értékek alapján az izolált 2-ös kötést tartalmazó *transz* pent-1,4-dién és a *transz* pent-1,3-dién stabilitási különbsége éppen 6.5 kcal.mol⁻¹, ami a konjugáció következménye.

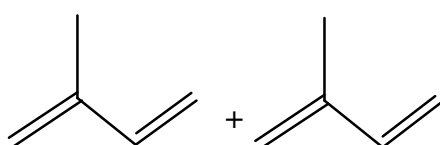
Példák természetes konjugált di- és pliénekre:

az izoprénvázas vegyületek (terpenoidok és karotinoidok)

izoprén



C_5H_8



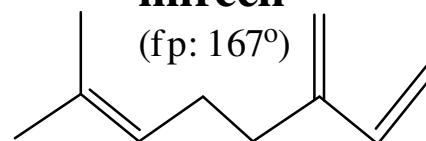
„fej-láb” illeszkedés

monoterpének

$(C_5H_8)_2$

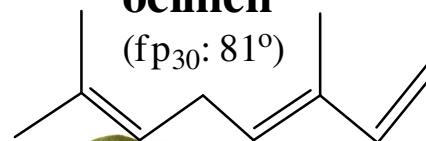
mircén

(fp: 167°)



ocimén

(fp₃₀: 81°)



memo:

a babérfa
illóolaja

Homológsor

monoterpének

$C_{10}H_{16}$

szeszkviterpének

$C_{15}H_{24}$

diterpének

$C_{20}H_{32}$

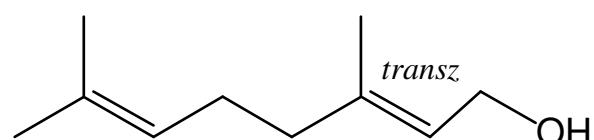
szeszterterpének

$C_{25}H_{40}$

triterpének

$C_{30}H_{48}$

Példák érdekesebb aciklusos monoterpén származékokra:

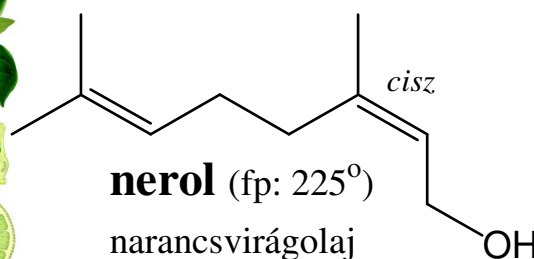


geraniol (fp: 229°)

geraniumolaj



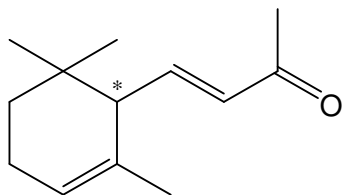
Bruckner II-1284



nerol (fp: 225°)

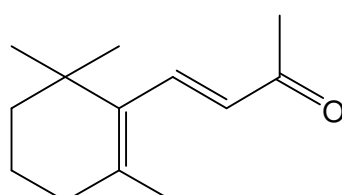
narancsvirágolaj

Példák érdekesebb ciklusos monoterpén származékokra:



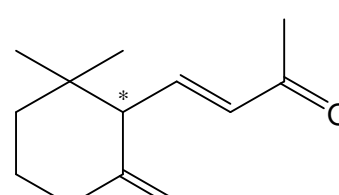
α-jonon

ibolya illatú olaj
királis



β-jonon

ibolya illatú olaj
akirális

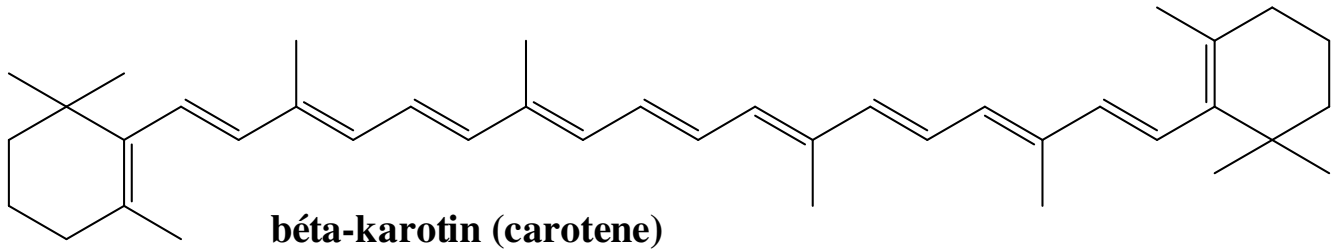


γ-jonon

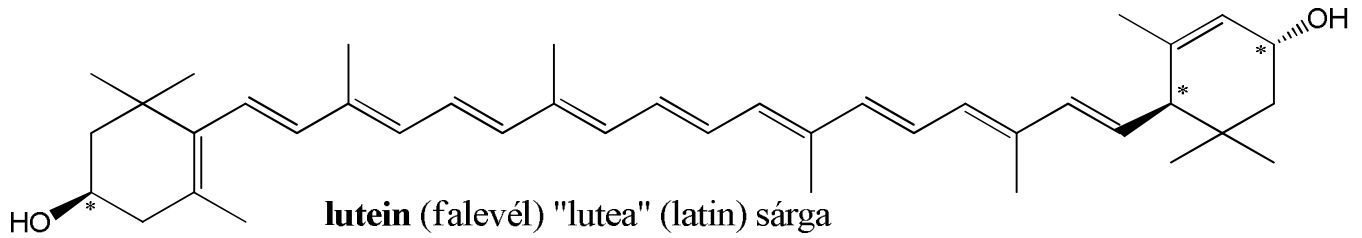
írisz virágból izolálható
királis

Néhány fontos **szeszterterpén** ($C_{25}H_{40}$)
- a karotinoidok

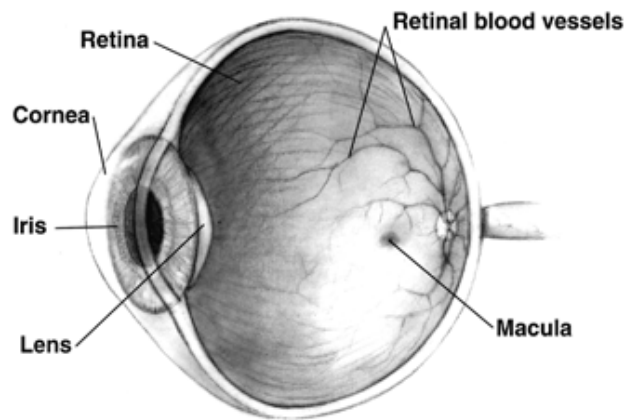
Egy igen fontos, a konjugáció miatt színes polién: a β -karotin:



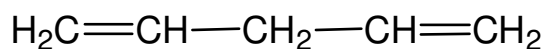
lipofil, antioxidáns



lipofil, antioxidáns
protektív hatású
magas koncentráció
a makulában (retina része)
(UV fény ellen véd)



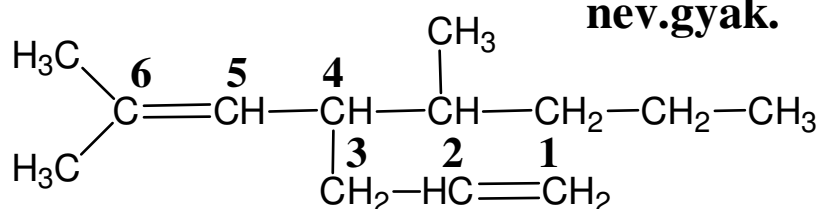
6/A3 Izolált diének



Penta-1,4-diene

penta-1,4-dién

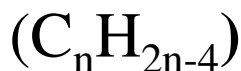
Azt a szénláncot válasszuk
amelyik a legtöbb kettős kötetést
tartalmazza



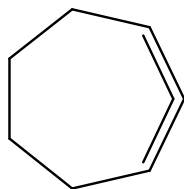
6-Methyl-4-(1-methyl-butyl)-hepta-1,5-diene

6-metil-4-(1'-metil-butil)-hepta-1,5-dién

6/B Ciklusos diének, ciklodiolefinek



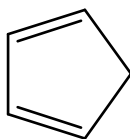
típusnév: cikoalkadién



Cyclohepta-1,2-diene

ciklohepta-1,2-dién

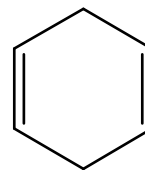
kumulált



Cyclopenta-1,3-diene

ciklopenta-1,3-dién

konjugált



Cyclohexa-1,4-diene

ciklohexa-1,4-dién

izolált

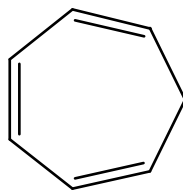
6/C Poliének



Buta-1,2,3-triene

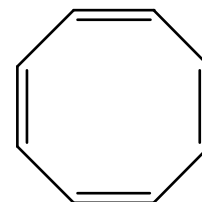
buta-1,2,3-trién

típusnév: kumulén



Cyclohepta-1,3,5-triene

ciklohepta-1,3,5-trién

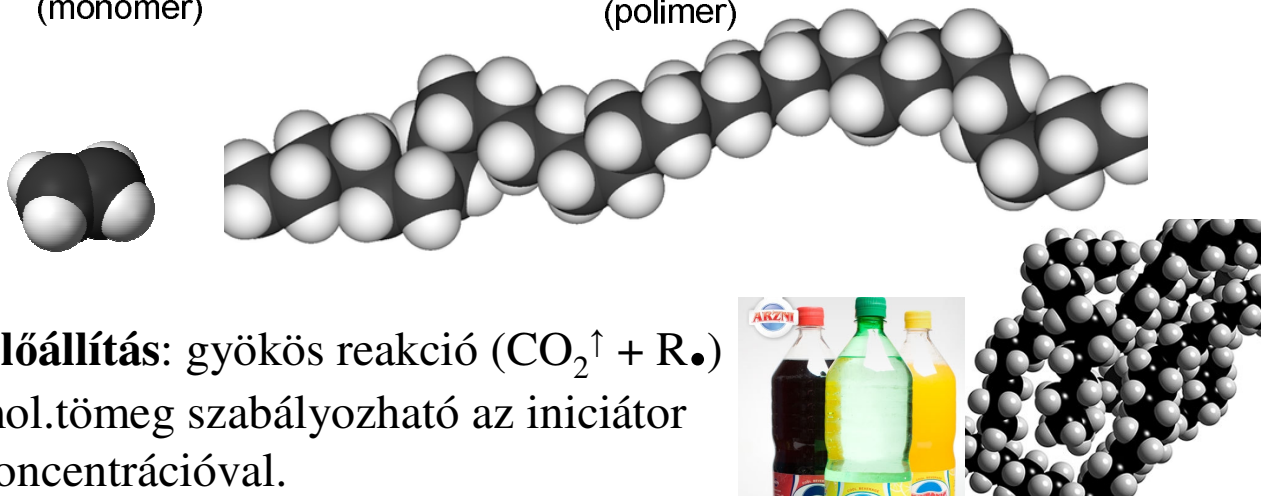
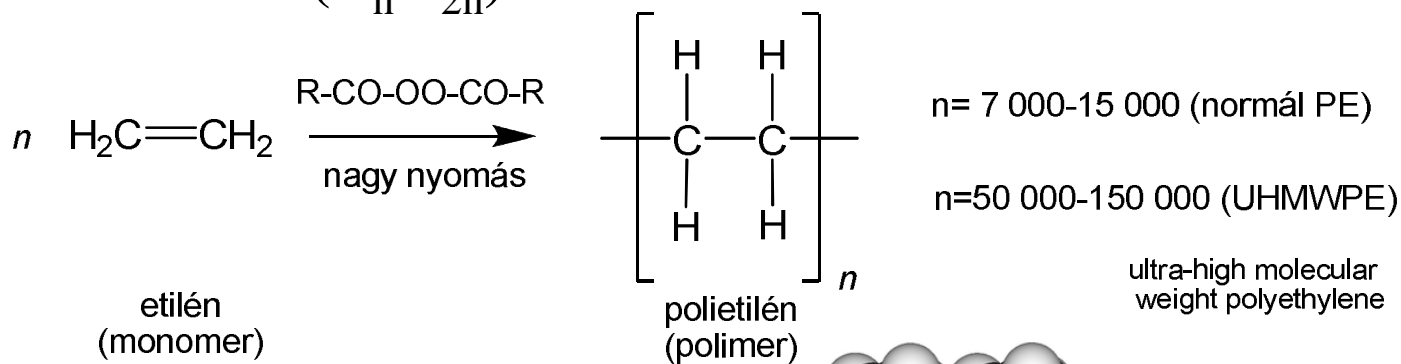


Cyclooctatetraene

ciklookta-1,3,5,7-tetraén

ciklooktatetraén

Polietilén: (C_nH_{2n})

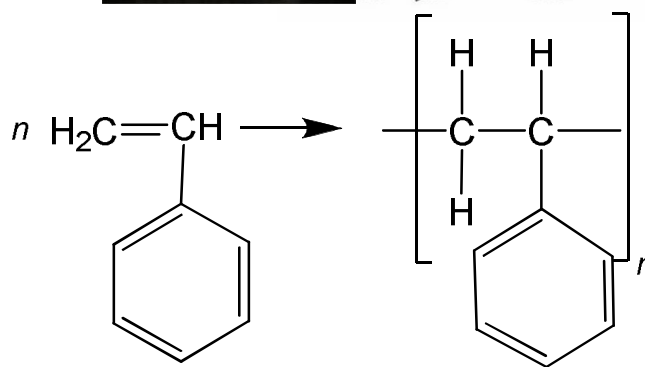
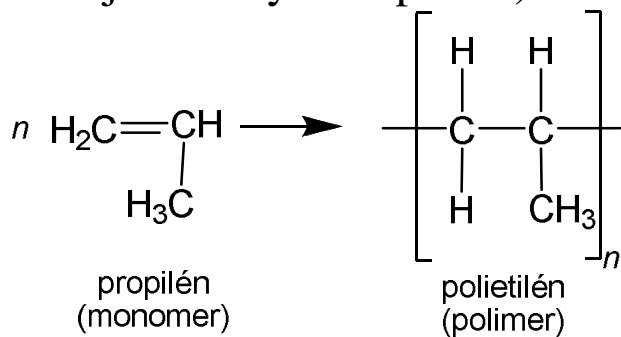


Előállítás: gyökös reakció (CO₂↑ + R•)
mol.tömeg szabályozható az iniciátor koncentrációval.

memo: Polietilén a legtöbbet használt műanyag (1943-óta gyártják, 10⁸ t/év):
zacskók, üvegek, játékok, golyóálló mellény, stb.



környezetvédelem: A PE nem biodegradál! (noha a Sphingomonas baktérium lebontja néhány hónap alatt).



vinilbenzol (monomer)

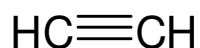
polisztirol (polimer)

7. Alkinek (acetilén-szénhidrogének: C_nH_{2n-2})

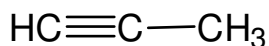
típusnév: alkin

homológ sor („-in” végződés)

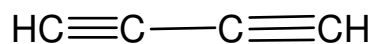
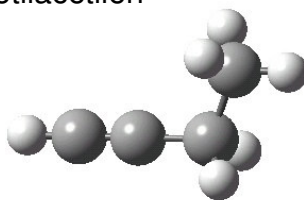
7/A Nyílt szénláncú



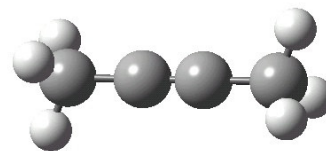
Ethyne
etin
acetylene
acetilén



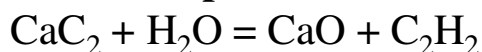
Propyne
propin
metilacetilén



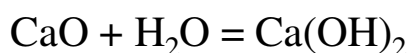
Buta-1,3-diyne
buta-1,3-diin



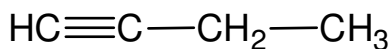
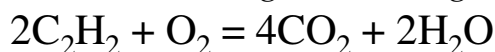
karbidlámpa működés során:



Miközben az égetett mészből oltott mész lesz:



Az acetilén elég és ez világít:



But-1-yne
but-1-in



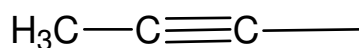
But-2-yne
but-2-in

memo: 1 kg karbidból kb. 270-300liter gáz keletkezik ami akár 10-12 órai világításra is elegendő lehet.

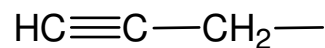
Csoportnevek („alkinil” végződés)



etinil



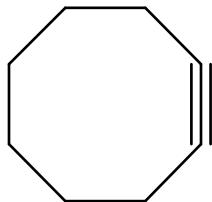
propin-1-il



propin-2-il

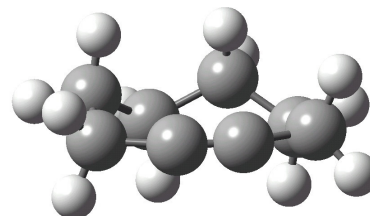
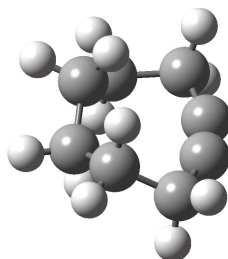
propargil

7/B Ciklusos alkinek (cikloalkin): C_nH_{2n-4} típusnév: cikloalkin

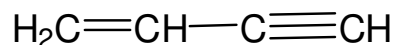


Cyclooct-1-yne

ciklooktin



7/C kettős és hármas kötések tartalmazó szénhidrogének

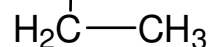
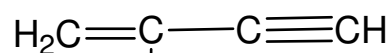


But-1-en-3-yne

but-1-én-3-in

vinylacetylene

vinilacetilén

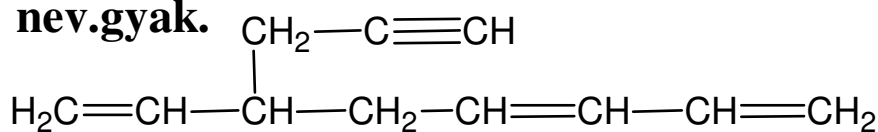


2-Ethyl-but-1-en-3-yne

2-etilbut-1-én-3-in

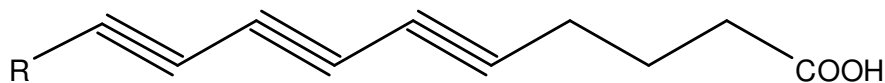
A kettős kötés rangosabb mint a
 hármas kötés

nev.gyak.



6-(propin-2-il)-1,3,7-oktatrién

példa:



acetilénkarbonsav

hármas kötések tartalmazó növényi zsírsav

II. Halogénezett szénhidrogének

alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs

alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

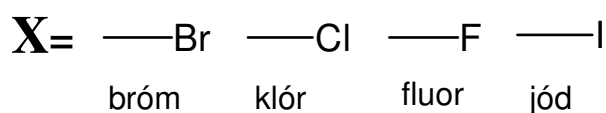
X_n $n=1, 2, 3, \dots$ egy-, két-, többértékű

X = típusa szerint

X = kapcsolódása szerint: elsőrendű \Leftrightarrow másodrendű \Leftrightarrow harmadrendű

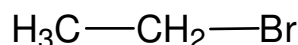
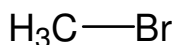
primer szekunder terciér

geminális \Leftrightarrow vicinális \Leftrightarrow diszjunkt



1. Nyílt szénláncú, telített egyértékű halogénezett szénhidrogének ($C_nH_{2n+1}X$)

típusnév: halogénalkán, alkil-halogenid



Bromomethane
brómmetán

Bromoethane
brómetán

Methyl bromide
metil-bromid

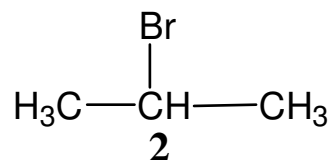
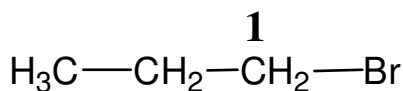
ethyl bromide
etil-bromid

Szn (egybeírjuk)

Csn (kötőjellel írjuk)

helyzetizoméria
(szubsztitúciós izoméria)

Csn (angolul két szóba írjuk)



1-Bromopropane
1-brómpropán

2-Bromopropane
2-brómpropán

propyl bromide
propil-bromid

isopropyl bromide
izopropil-bromid

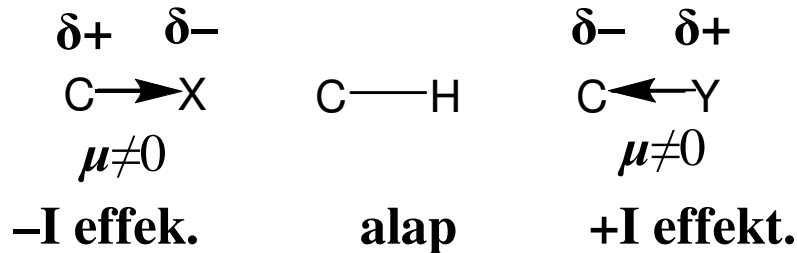
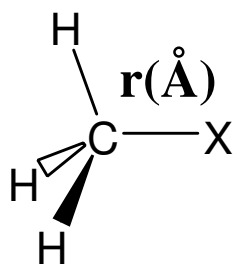
Szn (egybe írjuk)

Csn (kötőjellel írjuk)

Alkil-halogenidek elektronszerkezete

A kapcsolódó atomok eltérő elektron negativitása miatt a heteronukleáris σ -kötések polarizálódnak; pl. C($\delta+$) míg X($\delta-$). **Az elektron negativitás** (EN:= a kötött állapotú atom elektron vonzó képessége) a F \rightarrow I irányba csökken: (F:4,1, Cl: 2,8, Br:2,7, I:2,2). **A kötéshossz** (r) az F \rightarrow I irányba nő. **tehát:** a két hatás ellentétes, ezért a σ -kötések μ értékei nem feltétlenül monoton változnak

C(sp ³) –X(sp ³)	r(Å)	köt. energ. (kcal.mol ⁻¹)	C-X köt. dipol. (D)
C-F	1,41	116	1,51
C-Cl	1,77	81	1,56
C-Br	1,94	68	1,48
C-I	2,12	51	1,29



A mínusz induktív effektus: X halogénatom elektronszívó hatással van a teljes molekula elektronrendszerére.

memo: EN C:2,5, N:3,1. O:3.5 és H:2,1)

metil-halogenidek kísérleti μ (D) értékei:

	CH ₃ X	CH ₂ X ₂	CHX ₃	CX ₄
F	1,82	1,97	1,65	0
Cl	1,94	1,60	1,03	0
Br	1,79	1,45	1,02	0
I	1,64	1,11	1,00	0

Az induktív effektus:

A jelenség leírása: egy dipólus jellegű poláros σ -kötés a molekulában a vele szomszédos kötés(ek)ben a töltések bizonyos fokú szétválását eredményezi, ami a dipólus jelleg erősödését vonja maga után. (További dipólus indukálódhat egy-egy szomszédos σ -kötéseken. A polározódás mértéke a hatást kiváltó atom- vagy atomcsoporttól való távolság függvénye. az induktív effektus erőssége a funkciós csoporttól távolodva szénatomonként kb. 1/3-ára csökken, tehát a molekulának csak az X csoporthoz közel eső részére terjed ki.)

Ha a molekula valamelyik szénatomjához a szénnél nagyobb elektronegativitású, tehát "elektronszívó", elektronakceptor X atom vagy atomcsoport kapcsolódik, akkor a kötés $C \rightarrow X$ irányba polározódik. Így a σ -kötések elektronjai az X irányába tolódnak el és a C-atomon parciális pozitív töltés alakul ki: ezt nevezzük **negatív induktív effektusnak: jele -I.**

Ha elektronküldő (elektron donor) csoport amit jelöljük Y-nal, kapcsolódik, akkor annak hatása természetesen fordított: ezt a **pozitív induktív effektus (+I).**

Induktív effektussal rendelkező csoportok

+I	-I		
$-O^-$	-F	-COOH	$-NO_2$
$-COO^-$	-Cl	-COOR	$-SO_3H$
$-SiR_3$	-Br	$-C(=O)R$	$-NH_3^+$
$-PR_2$	-I	-CN	$-NR_3^+$
	-OH	$-NH_2$	$-C \equiv CR$
	-OR	$-NR_2$	

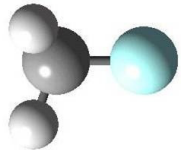
Látható, hogy a -I effektussal rendelkező elektronszívó csoportok száma nagyobb. Pozitív induktív effektust csak egyes negatív töltésű ionok, és a kis elektronegativitású elemek (pl. P, Si, Sn, fémek) fejtenek ki.

Metil-halogenidek szerkezete, elektronsűrűsége

a metil-halogenidek vákuumban számolt dipólusmomentumai:

Me-F

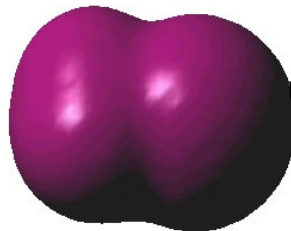
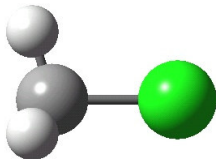
$\mu=2.34$ Debye (RHF/3-21G)
 $\mu=2.37$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)



A teljes
elektronsűrűség
izofelülete
 $\rho \geq 0.0004$ a.u.

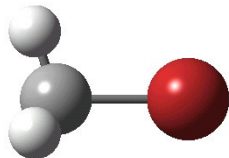
Me-Cl

$\mu=2.87$ Debye (RHF/3-21G)
 $\mu=2.67$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)



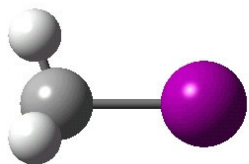
Me-Br

$\mu=2.16$ Debye (RHF/3-21G)
 $\mu=2.45$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)



Me-I

$\mu=1.97$ Debye (RHF/3-21G)

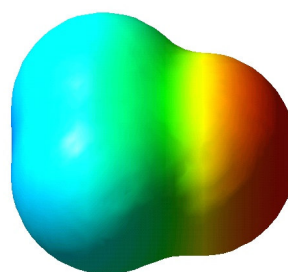
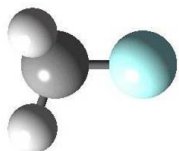


A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.) „izofelszínén” színnel kódolt elektrosztatikus potenciálérték

Me-F $\mu=2.37$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)

piros, sárga, zöld, kék
 $-0.043 \leq \text{töltés} \leq 0.043$

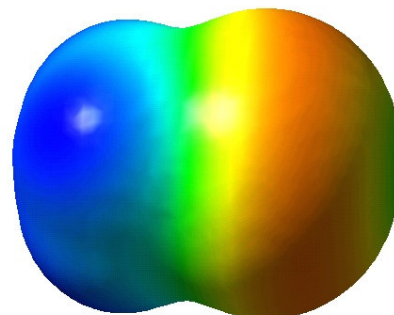
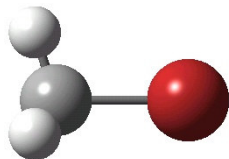
C-X=1.40Å

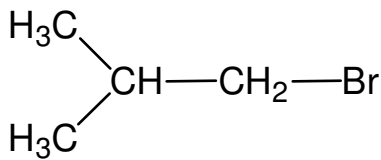


Me-Br $\mu=2.45$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)

piros, sárga, zöld, kék
 $-0.028 \leq \text{töltés} \leq 0.028$

C-X=2.0Å

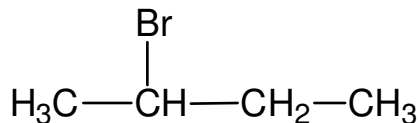




1-Bromo-2-methylpropane

1-bróm-2-metilpropán

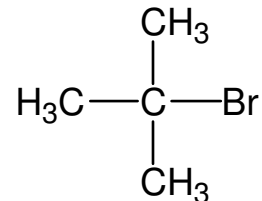
izobutil-bromid



2-Bromo-butane

2-brómbután

szek-butil-bromid



2-Bromo-2-methylpropane

2-bróm-2-metilpropán

terc-butil-bromid

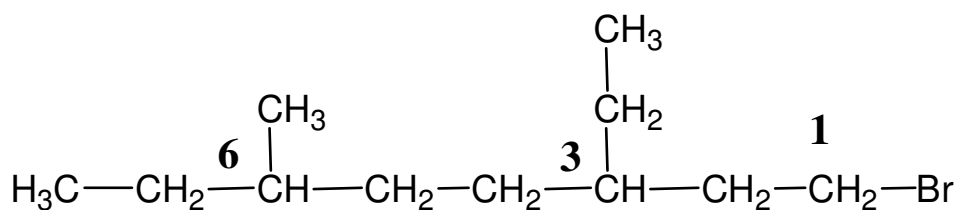
Szn

Csn

IUPAC nevezéktan: vegyük a **leghosszabb** szénláncot.

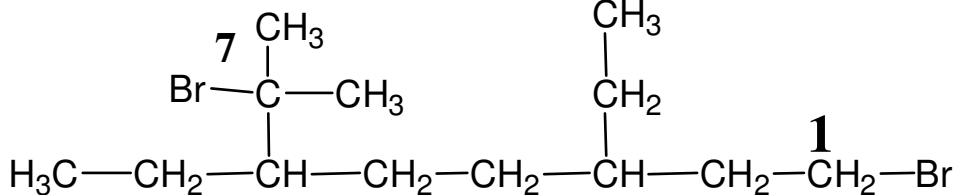
Azon a végen kezdjük a számozást amelyikhez **közelebb** van az első szubsztituens (pl. Br-, CH₃-, ⁱPro-): minden szubszt. **egyforma**. Adjuk az elágazásoknak a lehető **legkisebb sorszámot**, a szubsztituens sorrend az **angol ABC** szerint megy.

nev.gyak.

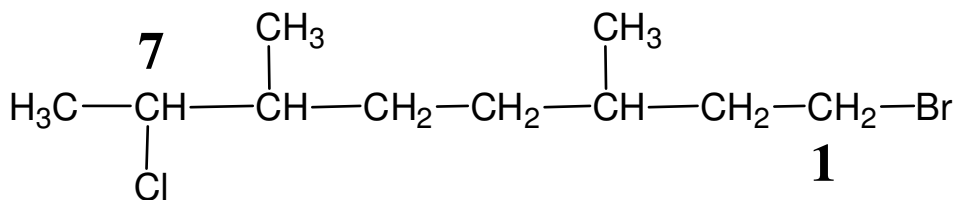


1-Bromo-3-ethyl-6-methyloctane

1-bróm-3-etil-6-metiloktán



1,7-Dibromo-3,6-diethyl-7-methyloctane

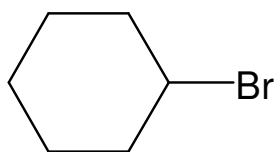


1-Bromo-7-chloro-3,6-dimethyloctane

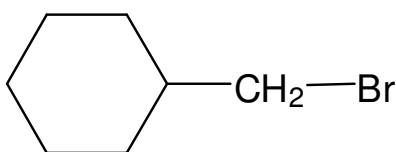
2. Gyűrűs, telített egyértékű halogénezett szénhidrogének ($C_nH_{2n-1}X$)

típusnév: halogéncikloalkán (Szn)

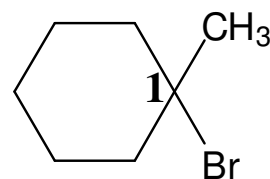
cikloalkil-halogenid (Csn)



Bromocyclohexane
brómciklohexán



Bromomethylcyclohexane
brómmetilciklohexán

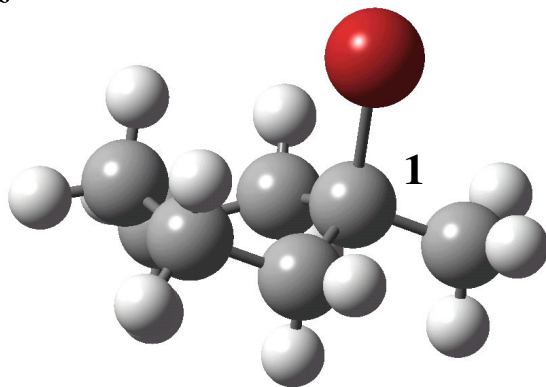


1-Bromo-1-methylcyclohexane
1-bróm-1-metilciklohexán

konformációanalízis

az 1-bróm-1-metil-ciklohexán térszerkezete

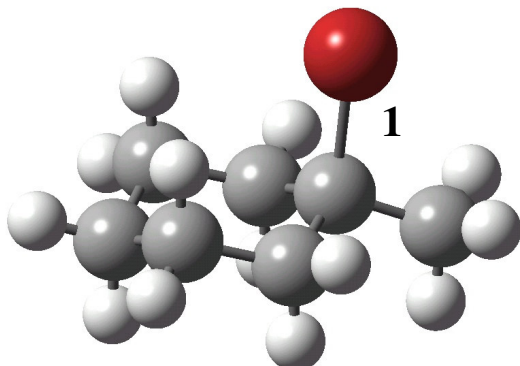
csavart kád



$E_{\text{RHF/3-21G}} = -2831.211184$ Hartree
 $\mu = 2.5$ Debye

+7.75 kcal/mol

szék



$E_{\text{RHF/3-21G}} = -2831.223541$ Hartree
 $\mu = 2.46$ Debye

Alkil-halogenidek előállítása:

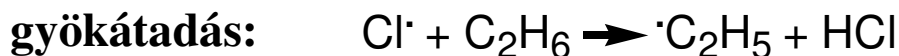
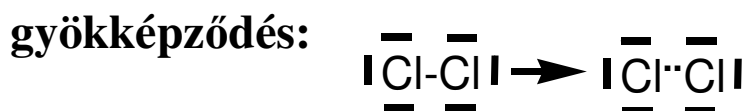
Bruckner I-1 / 204. o.

1. Alkánokból halogénezéssel: szubsztitúciós reakció

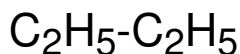


ahol X=F, Cl, Br mellett a I igen lomha, nem megy

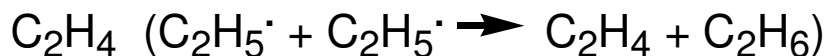
A gyökös reakció elemi lépései:



termék:



melléktermék:



A gyökös reakció nehezen „tartható kézben”
(a folyamat exoterm BUMM!)



2. Alkénekből haloidsav addícióval:



Addíciós reakció

alkil-halogenid

Markovnyikov-szabály

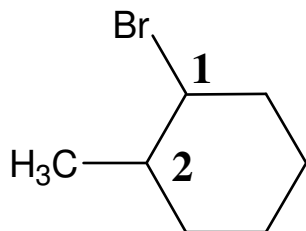
3. Alkoholokból szubsztitúcióval:



alkohol

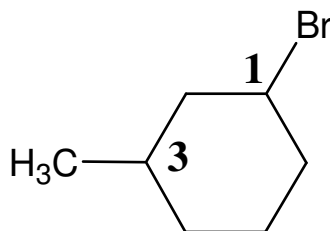
haloidsav

alkil-halogenid



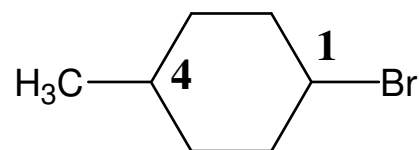
1-Bromo-2-methylcyclohexane

1-bróm-2-metilciklohexán



1-Bromo-3-methylcyclohexane

1-bróm-3-metilciklohexán



1-Bromo-4-methylcyclohexane

1-bróm-4-metilciklohexán

3. Telítetlen, egyértékű halogénezett szénhidrogének

alkénből (olefinből) ($C_nH_{2n-1}X$)

típusnév: halogénalkén (Szn), alkenil-halogenid (Csn)

alkinből (acetilénből) ($C_nH_{2n-3}X$)

típusnév: halogénalkin (Szn), alkinil-halogenid (Csn)



Bromoethene

brómetilén

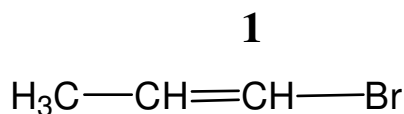
vinil-bromid

IUPAC nevezéktan:

a telítetlen kötés rangosabb
mint a szubsztituens

helyzetizoméria

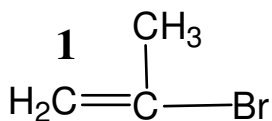
(szubsztitúciós izoméria)



1-Bromoprop-1-ene

1-brómprop-1-én

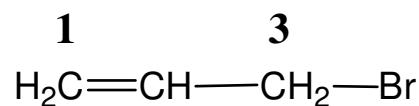
propenil-bromid



2-Bromoprop-1-ene

2-brómprop-1-én

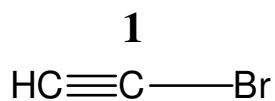
izopropenil-bromid



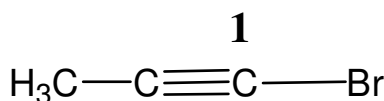
3-Bromoprop-1-ene

3-brómprop-1-én

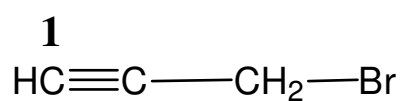
allil-bromid



Bromoethyne
brómacetilén
etinil-bromid

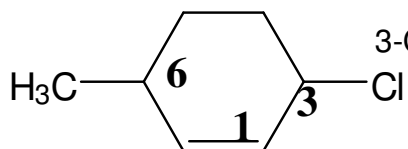


1-Bromoprop-1-yne
1-brómprop-1-in
propinil-bromid



3-Bromoprop-1-yne
3-brómprop-1-in
propargil-bromid

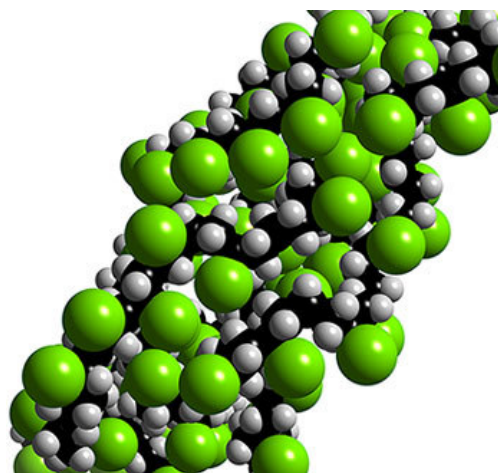
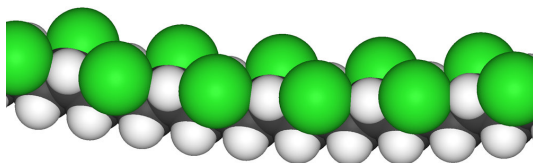
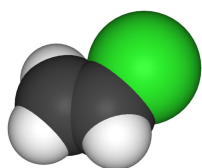
nev.gyak.



3-Chloro-6-methylcyclohex-1-ene

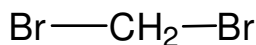
3-klór-6-metilciklohex-1-én

vinilklorid → PVC (polivinilklorid)

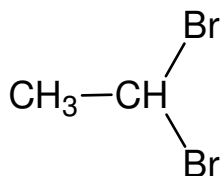


4. Két- és többértékű halogénezett szénhidrogének

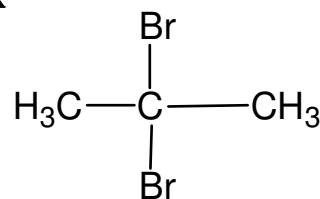
Geminális helyzetű halogének



Dibromomethane
dibrómmetán
metilén-dibromid



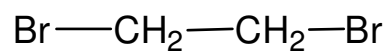
1,1-Dibromoethane
1,1-dibrómetán
etilidén-dibromid



2,2-Dibromopropane
2,2-dibrómpropán
izopropilidén-dibromid

haloformok: CHX_3

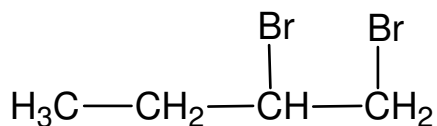
Vicinális helyzetű halogének



1,2-Dibromoethane

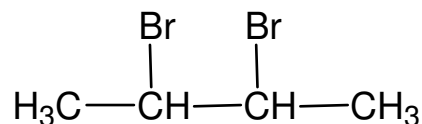
1,2-dibrómetán

etilén-dibromid



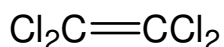
1,2-Dibromobutane

1,2-dibrómbután



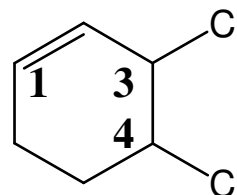
2,3-Dibromobutane

2,3-dibrómbután



1,1,2,2-Tetrachloroethene

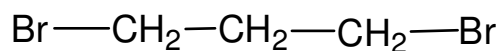
(perklór-etilén) *ma már tiltott név*



3,4-Dichlorocyclohex-1-ene

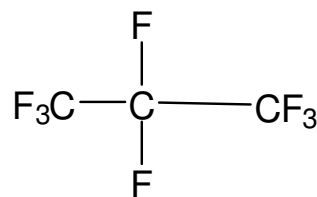
3,4-diklórciklohex-1-én

Diszjunkt helyzetű halogének



1,3-Dibromopropane

1,3-dibrómpropán

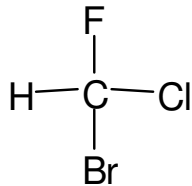


1,1,1,2,2,3,3,3-Oktafluoropropane

1,1,1,2,2,3,3,3-oktafluorpropán

perflorpropán

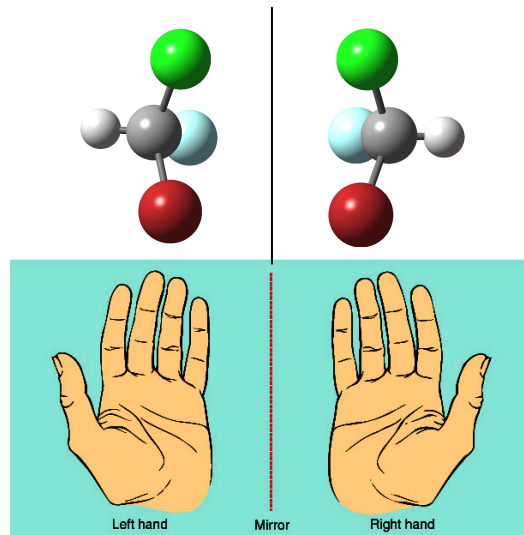
Az optikai izoméria:



kérdés: hány fajta létezik?

válasz: 2 molekulatípus, melyek egymás enantiomerjei.

def.: az enantiomerek egymással fedésbe nem hozható sztereoizomerek, amelyeket az R-S vagy L-D prefix segítségével különböztetünk meg.



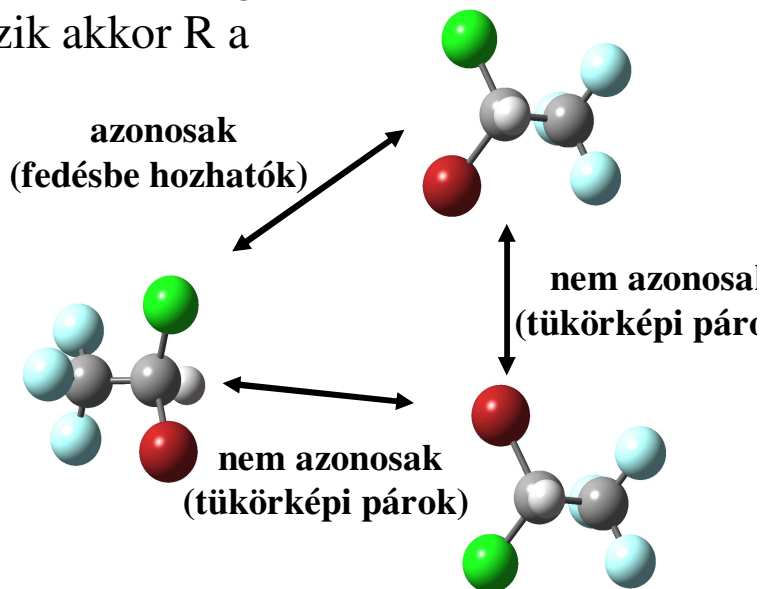
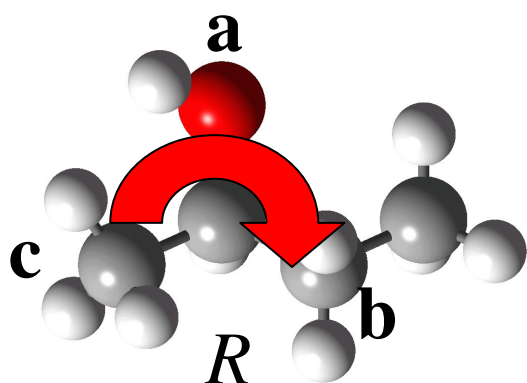
kérdés: hogyan határozzuk meg hogy mi egy molekula abszolút konfigurációja?

válasz: 1. megkeressük a királis C-atomot (sp^3 -as C kell legyen).
2. Felállítjuk a szubsztituensek rangsorát a C^* (sztereo-centrum) közvetlenül kapcsolódó atomok növekvő atomszáma (rendszáma) alapján ($H < C < N < O < F < Cl < \dots$).

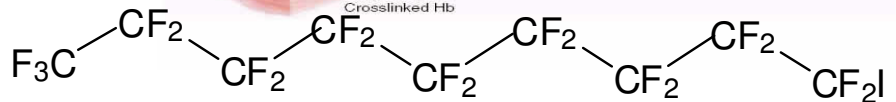
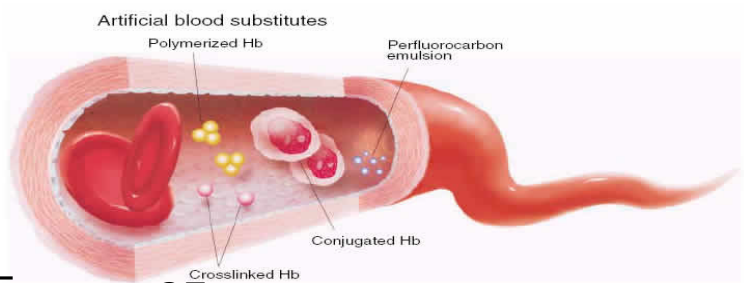
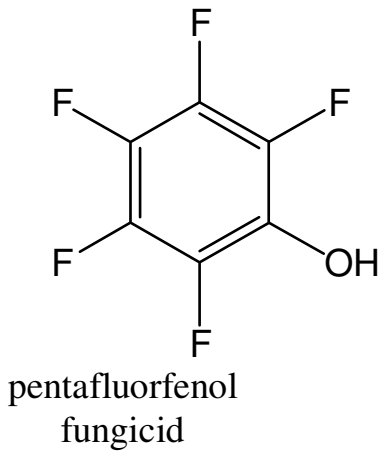
3. elforgatjuk a királis C-t úgy, hogy a legkisebb rangú szubsztituens „ne lássuk”.

4. meghatározzuk a „megmaradt” 3 szubsztituens körüljárási irányát azok rangja szerint: ha a rang az óramutató járása szerint növekszik akkor R a királis C abszolút konfigurációja.

Ellenkező esetben S.

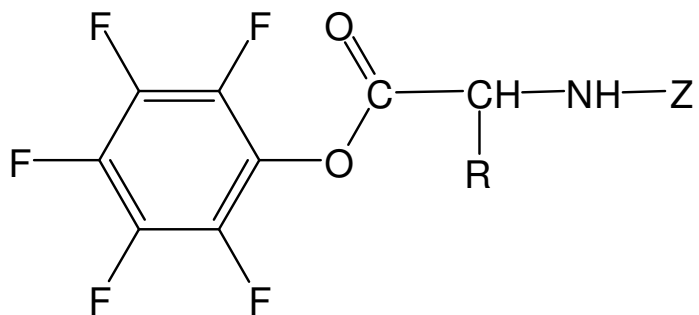


Példák: érdekes halogénezett alkánok:

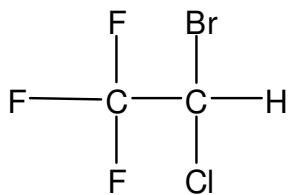
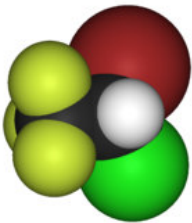


perfluor-1-jódnonán (jól keveredik oxigénnel: művér komponens)

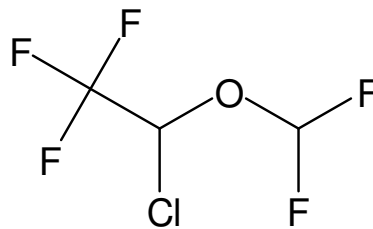
peptidszintézisnél karboxilcsoport aktivátor
("aktív észter")



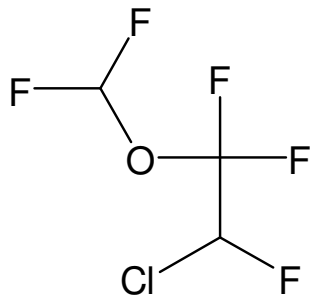
állatorvosi gyakorlatban használt **inhalációs anesztetikum**, májkárosító



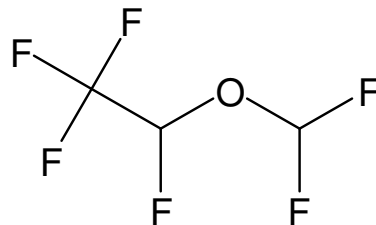
Halotán (narkotikum)
[GyT1 149]



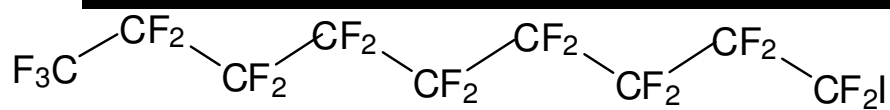
2-chloro-2-(difluoromethoxy)-1,1,1-trifluoro-ethane



2-chloro-1-(difluoromethoxy)-
1,1,2-trifluoro-ethane



2-(difluoromethoxy)-1,1,1,2-tetrafluoro-ethane



perfluor-1-jódnonán (jól keveredik oxigénnel: művér komponens)

Élő egér a „művérben”, miközben fölötte a vízben halak úszkálnak

III. Alkoholok és származékaik

alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs

alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

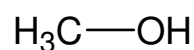
[OH]_n n= 1, 2, 3, ...egy-, két-, többértékű

OH-k kapcsolódása szerint: elsőrendű \Leftrightarrow másodrendű \Leftrightarrow harmadrendű

primer szekunder tercier

geminális \Leftrightarrow vicinális \Leftrightarrow diszjunkt

1. Nyíltszénláncú, telített egyértékű alkoholok (C_nH_{2n+1}OH)



típusnév: alkanol

alkil-alkohol

Szn

Csn

Methanol
metanol

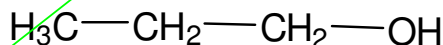
metil-alkohol
faszesz



Ethanol
etanol

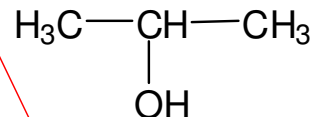
etil-alkohol
ethyl alcohol

borszesz (Saussure 1808)
hexóz \rightarrow 2EtOH + 2CO₂



Propan-1-ol
propan-1-ol

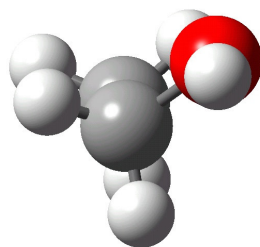
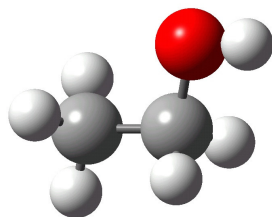
propil-alkohol
propyl alcohol



Propan-2-ol
propan-2-ol

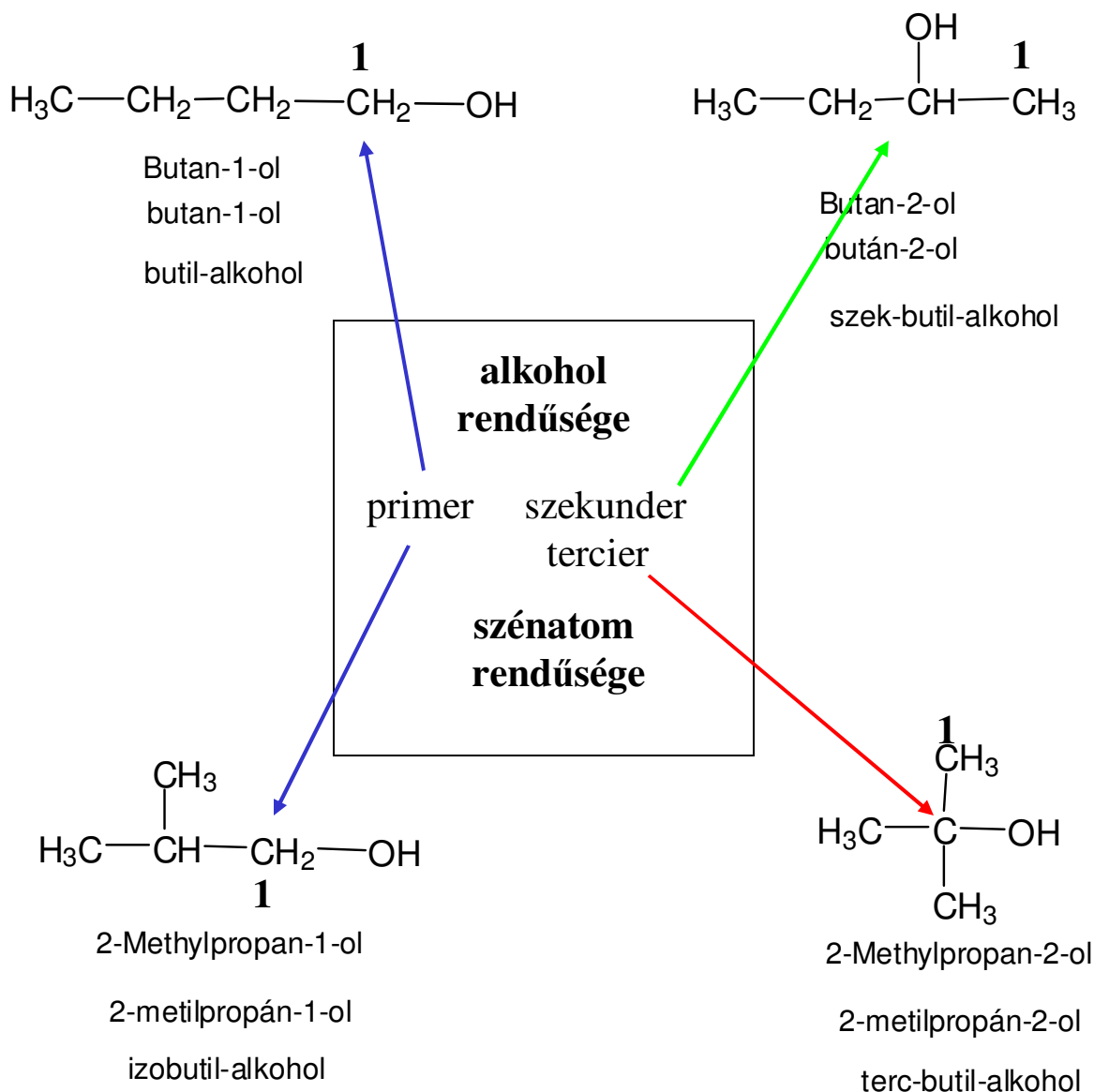
izopropil-alkohol
isopropyl alcohol

konformáció és térállás



fedő állás

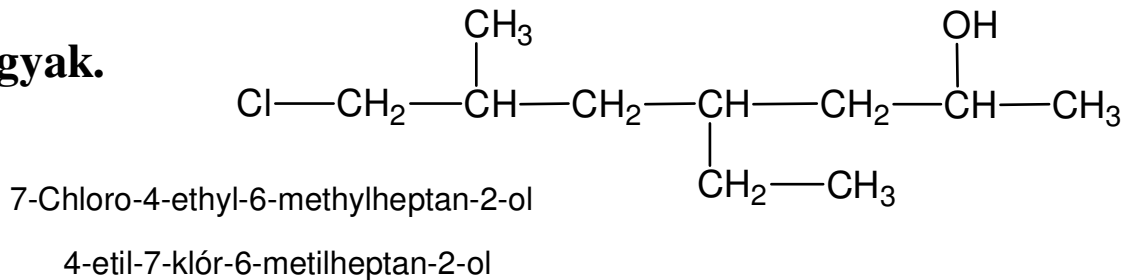
nyitott állás



IUPAC nevezéktan: (*Szn* esetében a utótág „ol”, az előtág „hidroxi” ha van rangosabb)

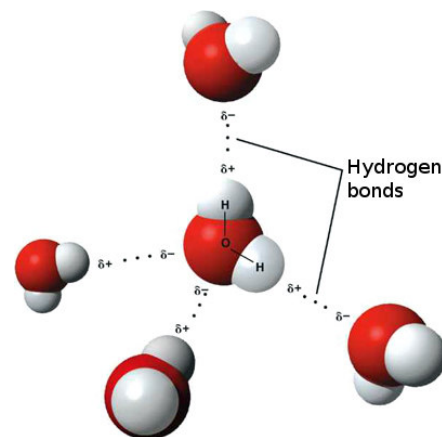
a leghosszabb szénláncot amin az OH van,
az OH a legkisebb számot,
szubsztituens sorrendet az (angol) ABC szerint
(a halogén ugyanolyan szubsztituens mint az alkil)

nev.gyak.



A hidrogén kötések szerepe:

Már a legkisebb szénatomszámú alkohol is folyadék és nem gáz halmazállapotú:



<i>alkán</i>	Fp °C	<i>alkilhalogenid</i>	Fp °C	<i>alkohol</i>	Fp °C
Me-H	-162	Me-F	-78	Me-OH	+65
Et-H	-89	Et-F	-32	Et-OH	+78
Pr-H	-42	Pr-F	-3	Pr-OH	+97

memo: érdekes hogy C₁₀-től már szilárdak:

	Op °C
dekánol	+7
undekánol	+19
dodekánol	+24

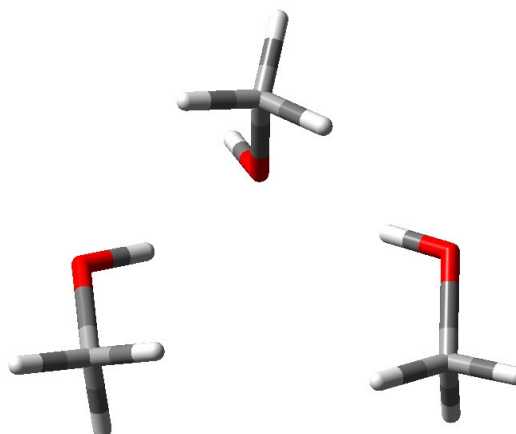
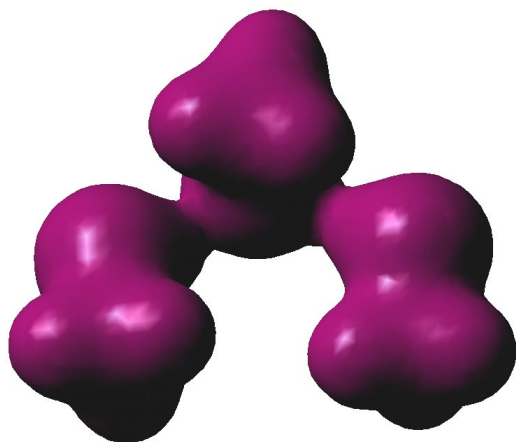
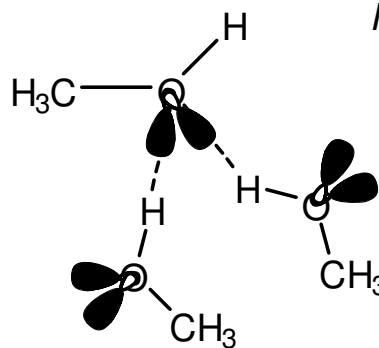
*Bruckner
I-1/245. o.*

Hidrogén kötés-hálózat:

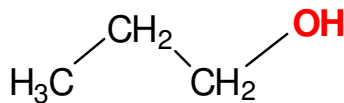
gázfázisú stabil. energia :

(RHF/3-21G[no BSSE]) ~10 kcal/H-híd

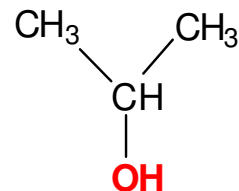
(RHF/3-21G[with BSSE]) ~5 kcal/H-híd



C₃-alkoholok
(propil-alkoholok)
2 izomer

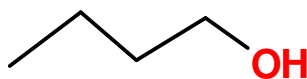


propán-1-ol
 fp = 97.2°C

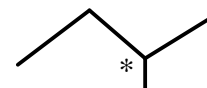


propán-2-ol
 fp = 82.5°C

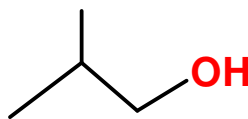
C₄-alkoholok
(butil-alkoholok)
4 izomer



bután-1-ol



bután-2-ol

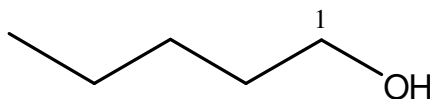


2-metilpropan-1-ol

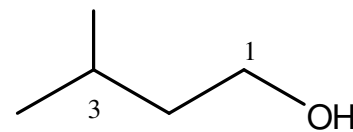


2-metilpropan-2-ol

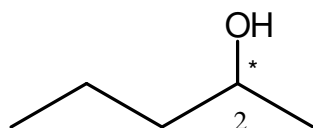
C₅-alkoholok
(amil-alkoholok)
8 izomer



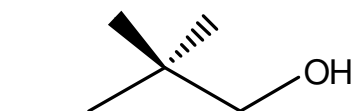
pentan-1-ol



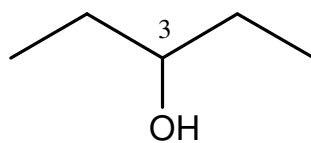
3-methylbutan-1-ol



pentan-2-ol



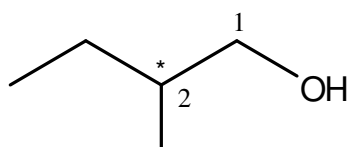
2,2-dimethylpropan-1-ol



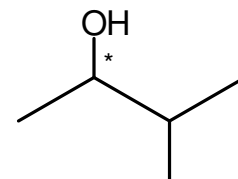
pentan-3-ol



2-methylbutan-2-ol



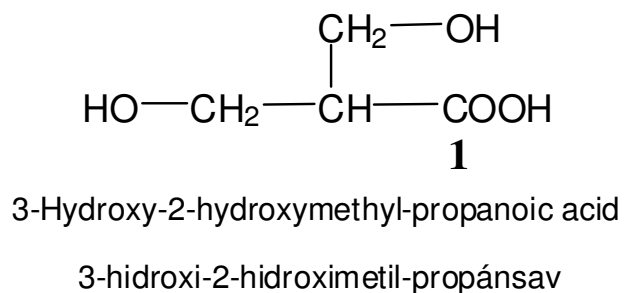
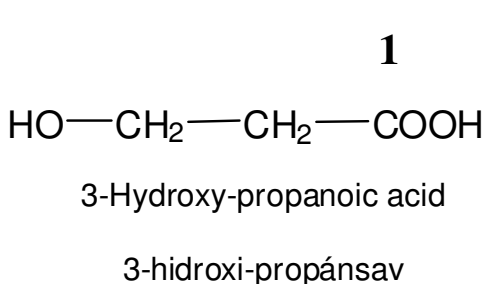
A name could not be generated for
 this structure.




3-methylbutan-2-ol

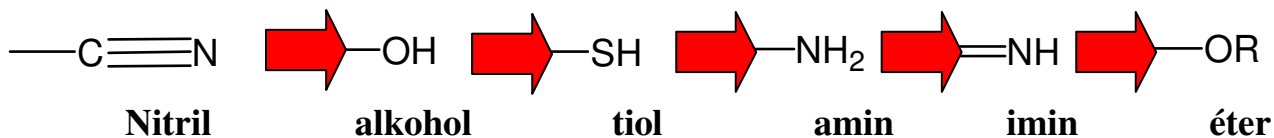
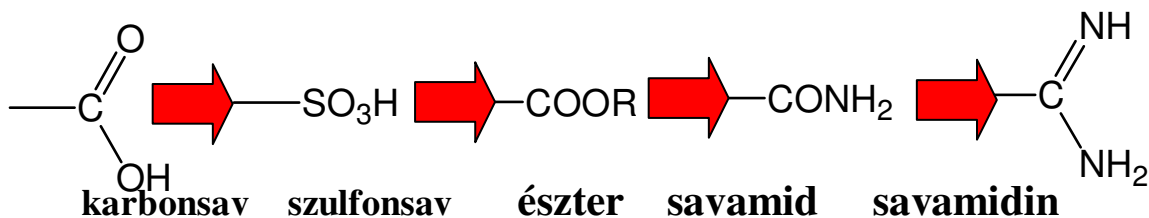
Csoportnevek és „rangok”:

kiválasztani a legrangosabb csoportot tartalmazó leghosszabb szénláncot,
 a csoport száma a legkisebb legyen,
 szubsztituens-sorrend az (angol) ABC szerint

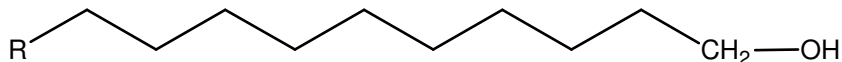


rangok:

 csökkenés
 iránya

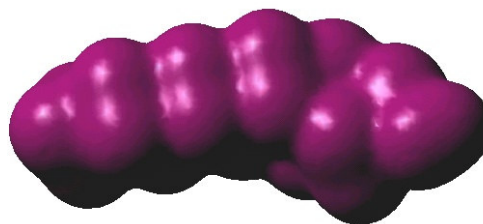
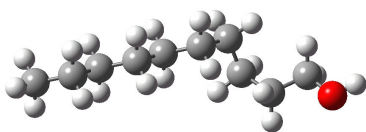


Példa:



zsíralkohol

[NÉT1 207]

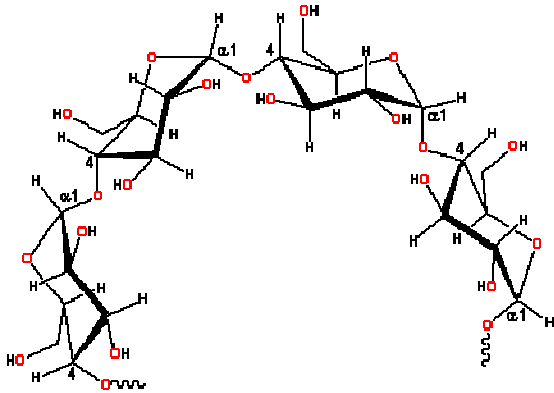


$\rho \geq 0.0004 \text{ a.u.}$

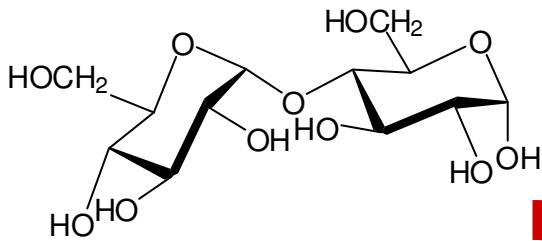
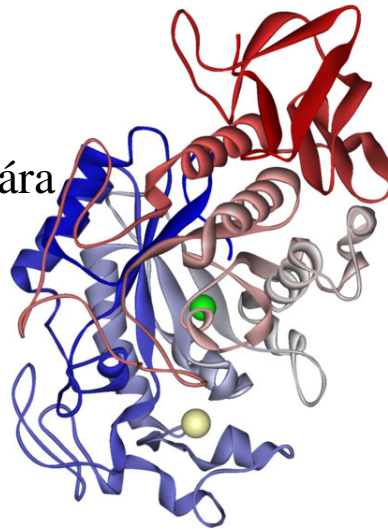


A fermentálás kémiája

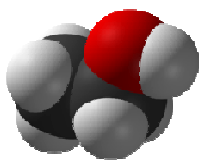
Erjesztés során a cereáliákban (pl. árpa) lévő keményítőtől az **amiláz enzimeknek** köszönhetően **maltózt** kapunk.



keményítő:
növények
energiaraktára



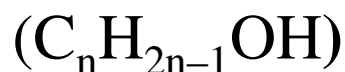
maltóz
 α -D-glükopiranozil-D-glükopiranóz



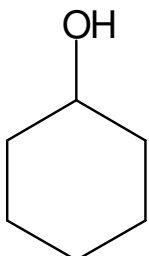
Fermentálás során az élesztő a maltózt EtOH-ra és CO₂-re bontja:
 $C_6H_{12}O_6 \rightarrow 2 C_2H_5OH + 2 CO_2$,
amely folyamat

1) **piroszólósav** (egy keto-karbonsav: CH₃COCOOH), majd
2) **acetaldehid** keletkezésén keresztül megy.

2. Ciklusos, telített egyértékű alkoholok

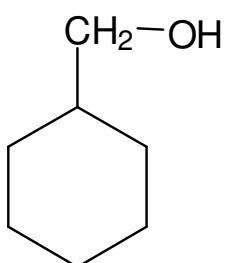


típusnév: cikloalkanol, cikloalkil-alkohol

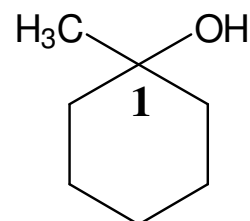


Cyclohexanol
ciklohexanol

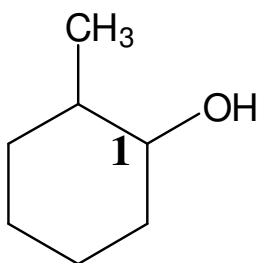
ciklohexil-alkohol



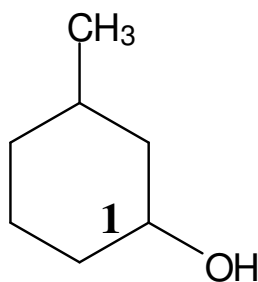
Cyclohexylmethanol
ciklohexilmetanol



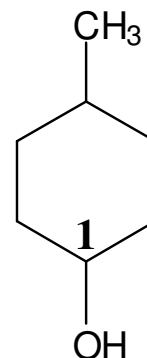
1-Methylcyclohexan-1-ol
1-metilciklohexan-1-ol



2-Methylcyclohexan-1-ol
2-metilciklohexán-1-ol

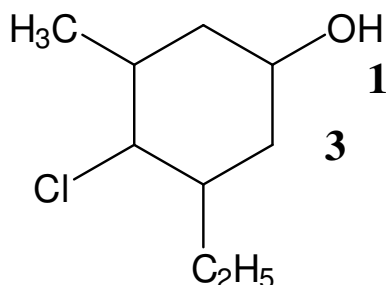


3-Methylcyclohexan-1-ol
3-metilciklohexán-1-ol



4-Methylcyclohexan-1-ol
4-metilciklohexán-1-ol

nev.gyak.



4-Chloro-3-ethyl-5-methylcyclohexan-1-ol

(3-etil-4-klór-5-metilciklohexan-1-ol)

4-klór-3-etil-5-metilciklohexan-1-ol magyar *név, magyar ABC sorrend!*

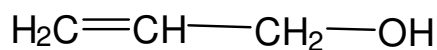
3. Telítetlen, egyértékű alkoholok

alkénből levezetve ($C_nH_{2n-1}OH$)

típusnév: alkenol (Szn), alkenil-alkohol (Csn)

alkinből levezetve ($C_nH_{2n-3}OH$)

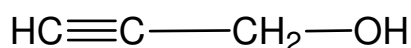
típusnév: alkinol (Szn), alkinil-alkohol (Csn)



Prop-2-en-1-ol

prop-2-én-1-ol

allyl alcohol
allil-alkohol

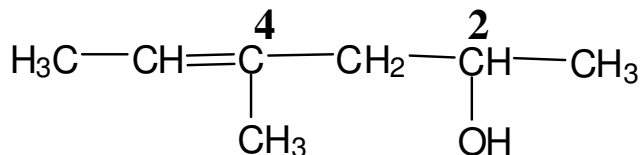


Prop-2-yn-1-ol

prop-2-in-1-ol

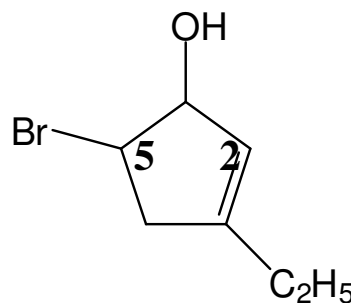
propargil-alkohol

nev.gyak.



4-Methylhex-4-en-2-ol

4-metilhex-4-én-2-ol



5-Bromo-3-ethylcyclopent-2-en-1-ol

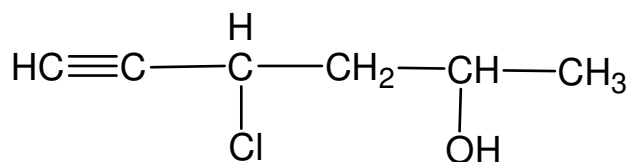
5-bróm-3-etilciklopent-2-én-1-ol

memo.: Szn esetében a utótag „ol”, az előtag „hidroxi”

(ha van rangosabb csoport)

„énol” és „inol” megengedett mert

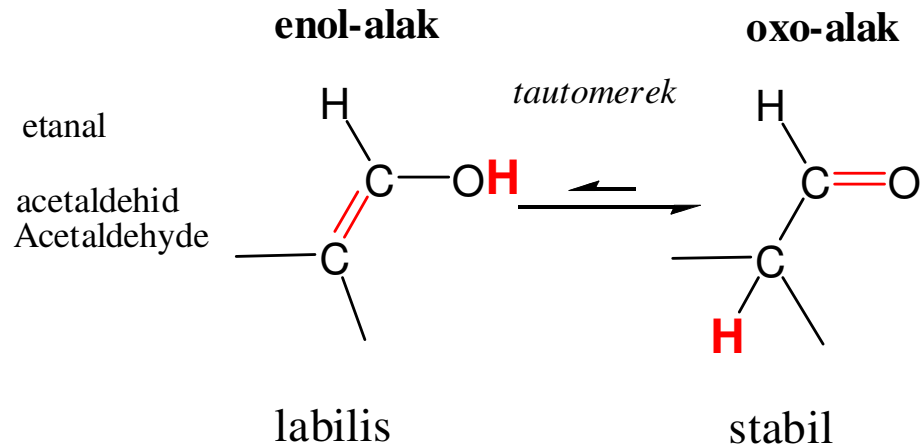
az „án→én” „án→in” alapnév módosítás és nem utótag



4-Chloro-hex-5-yn-2-ol

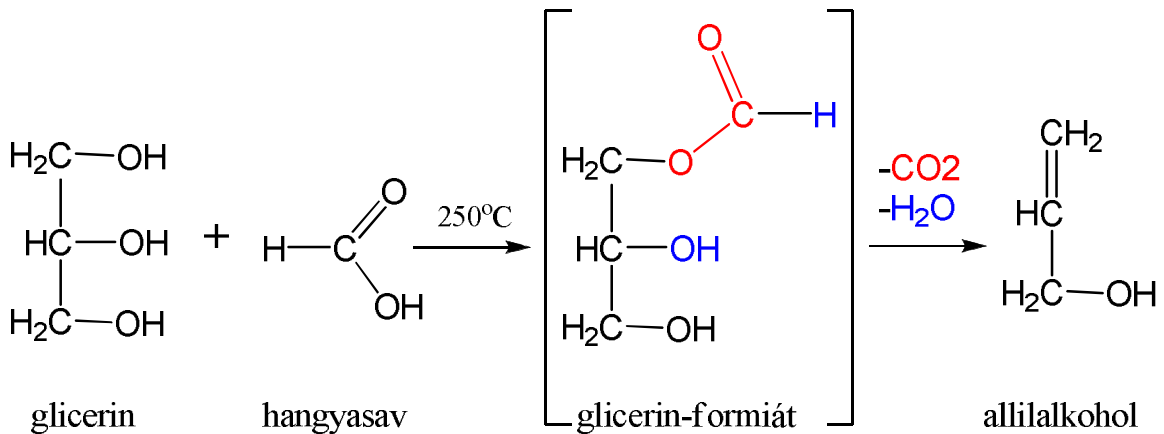
4-klórohex-5-in-2-ol

A vinilalkohol: a tautoméria jelensége

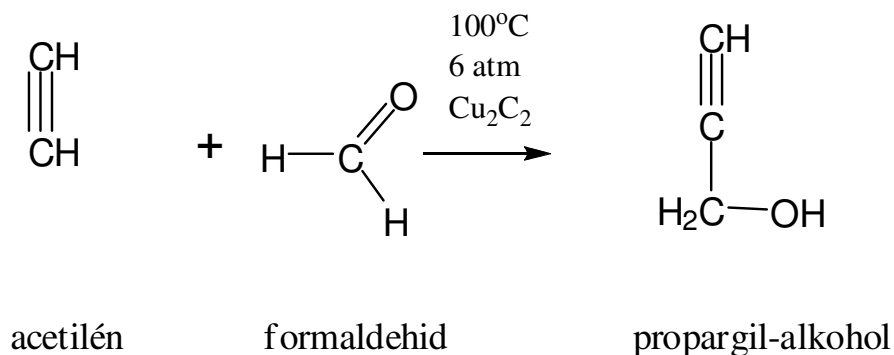


memo: a legegyszerűbb **telítetlen alkohol** az nem is alkohol, **hanem aldehid!**

Allil-alkohol szintézise: reakció ahol az „alkatrészek” **elillannak**



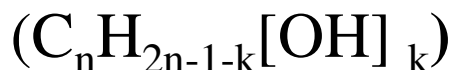
Propargil-alkohol szintézise: reakció ahol az „alkatrészek” **beépülnek:**



Reppe-féle szintézis

4. Két- és többértékű alkoholok

típusnév: diol, triol, tetrit, pentit, hexit stb.



alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs

alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

$[OH]_k$ $k=1, 2, 3, \dots$ egy-, két-, többértékű

$[OH]$ kapcsolódása szerint: elsőrendű \Leftrightarrow másodrendű \Leftrightarrow harmadrendű

primer szekunder terciér

geminális \Leftrightarrow vicinális \Leftrightarrow diszjunkt

Geminális diolok

(instabil, vízvesztés,
megfelelő oxovegyület)

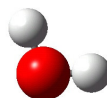
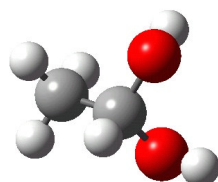
instabil



Methanediol

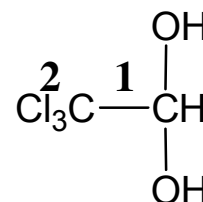
metándiol

formaldehid-hidrát



stabil

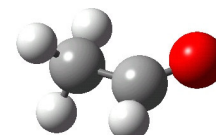
-I effektus stabilizál



2,2,2-Trichloroethane-1,1-diol

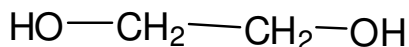
2,2,2-triklóretán-1,1-diol

klorál-hidrát



formalin: a HCOH 30-40%-os vizes oldata ahol a metándiol és formaldehid van egyensúlyban!

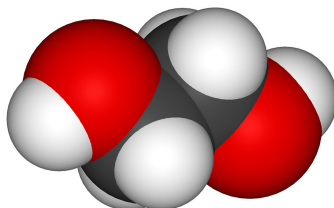
Vicinális diolok



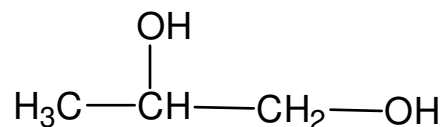
Ethane-1,2-diol
etán-1,2-diol

ethylene glycol
etilénglikol

glikol

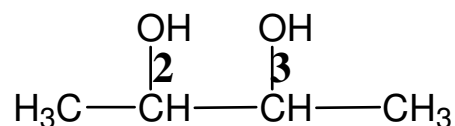


glüküsz (görög) édes \Rightarrow glikol
Színtelen, szagtalan,
mérgező (két teáskanál),
fagyálló (-12.9°C) folyadék

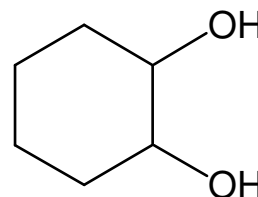


Propane-1,2-diol
propán-1,2-diol

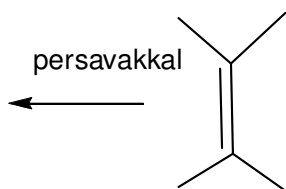
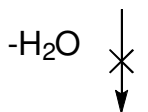
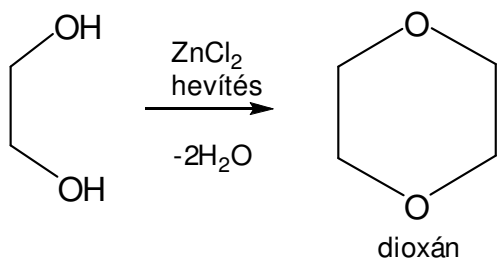
(propilén-glikol) régi név



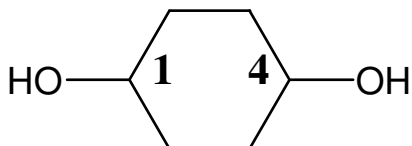
Butane-2,3-diol
bután-2,3-diol



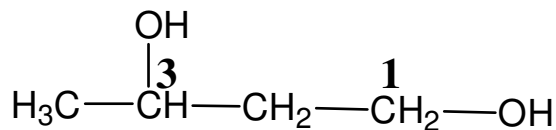
Cyclohexane-1,2-diol
ciklohexán-1,2-diol



Diszjunkt diolok



Cyclohexane-1,4-diol
ciklohexán-1,4-diol

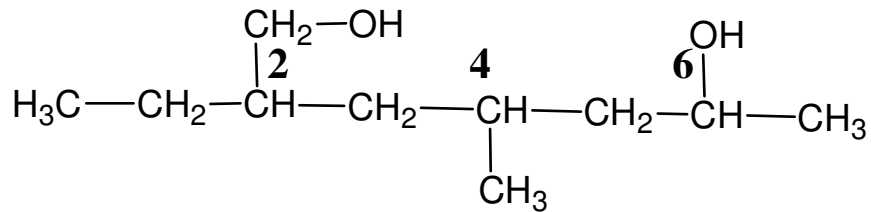


Butane-1,3-diol
bután-1,3-diol

Szubsztitúciós nomenklatúra:

azt a leghosszabb szénláncot amelyen a legtöbb hidroxilcsoport van,

nev.gyak.



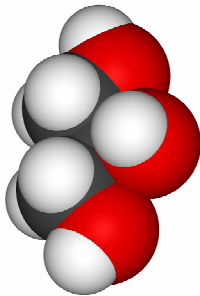
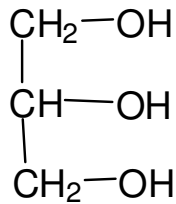
2-Ethyl-4-methylheptane-1,6-diol

2-etil-4-metilheptán-1,6-diol

4-metil-2-etilheptán-1,6-diol (*ABC sorrend rossz*)

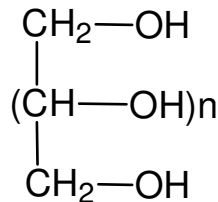
Többértékű alkoholok

glicerín



Propane-1,2,3-triol
propán-1,2,3-triol
glycerol
glicerín

térhálósítás
műgyanták,
lakkok, stb.



n=2

bután-1,2,3,4-tetrol

tetrit

n=3

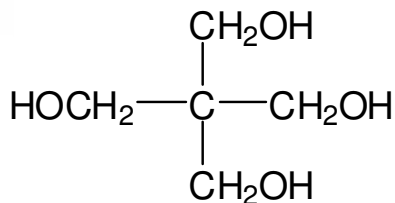
pentán-1,2,3,4,5-pentol

pentit

n=4

hexán-1,2,3,4,5,6-hexol

hexit

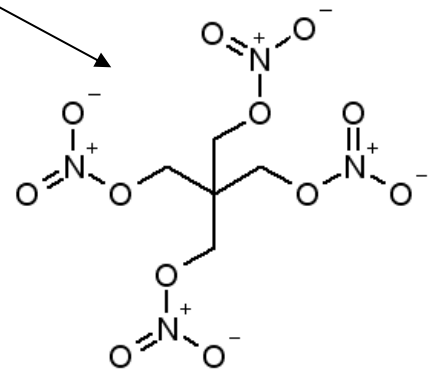


2,2-Bis(hydroxymethyl)-propane-1,3-diol

2,2-bisz(hidroximetil)-propán-1,3-diol

pentaerythritol
pentaeritrit

HNO₃
(H₂SO₄)



PETN

(pentaerythritol tetranitrate)

kiváló robbanószer

Semtex plasztikbomba komponense

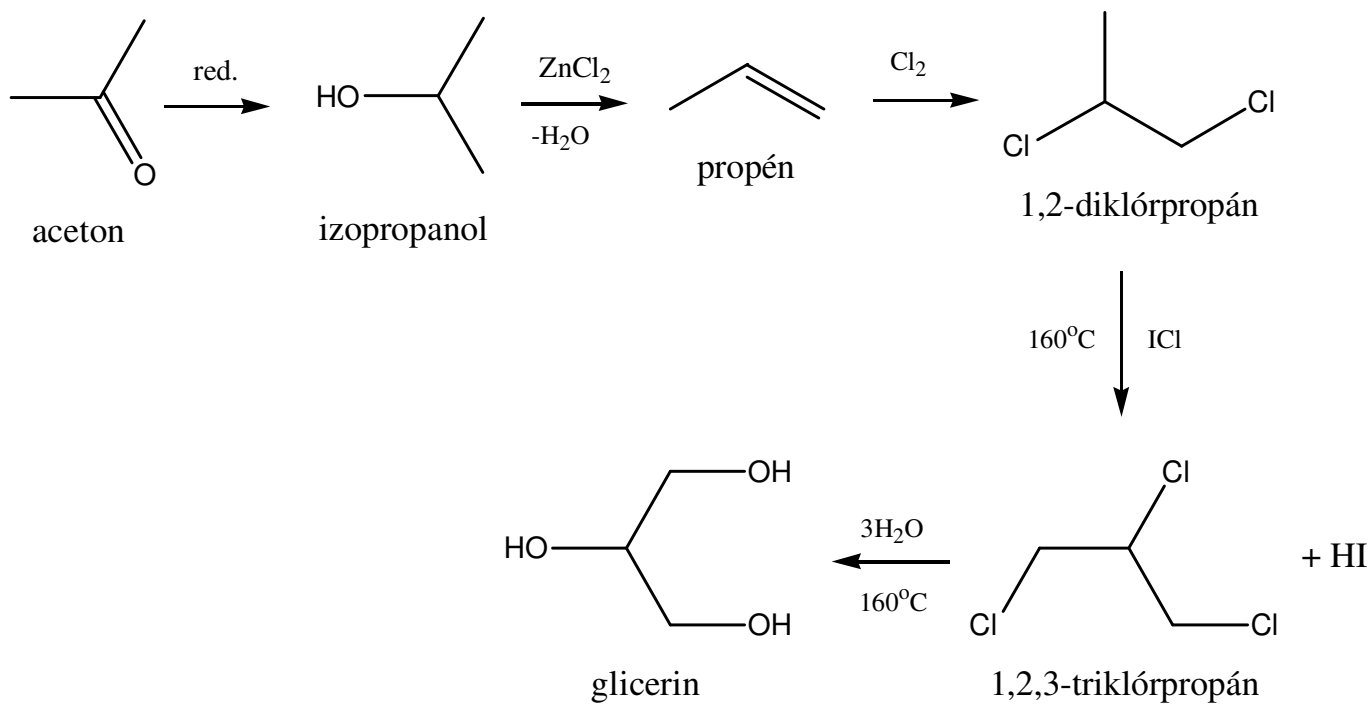
Glicerín (Scheele: 1779)

Bruckner I-1 324. o.

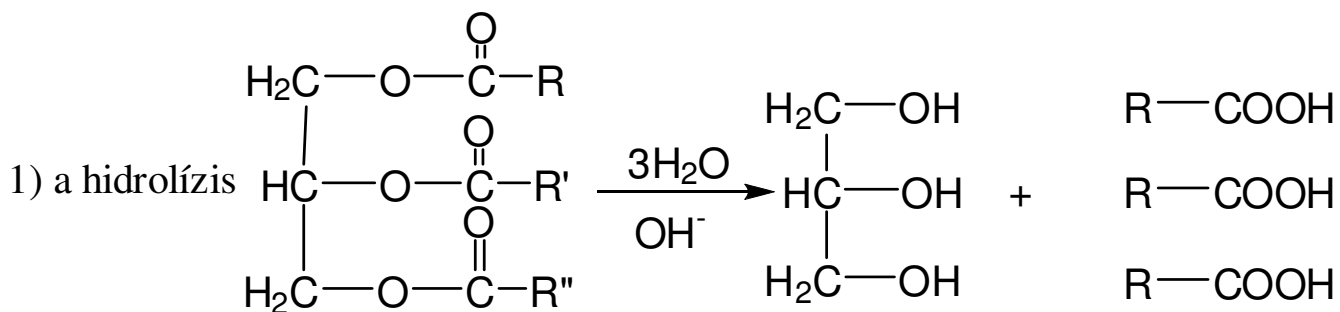
-oliva olaj vizes PbO szappanosítással nyerte

-Berthelot (1853) szerkezetazonosítás

szintézis (1873) (régi elavult eljárás, igen sok lépésben, ma főleg hidrolízis útján)

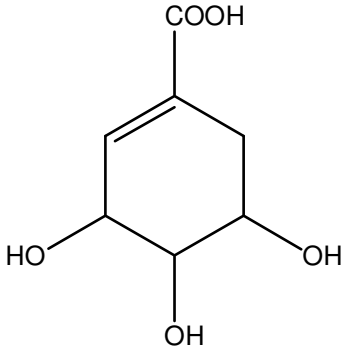


izolálás és tisztítás: gliceridek (növényi, állati zsiradékokból)



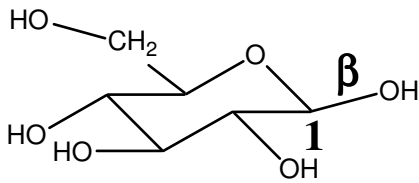
- 2) a karbonsav leválasztása
- 3) a vizes oldat desztillálása
- 4) tiszta glicerint kapunk

Példa:

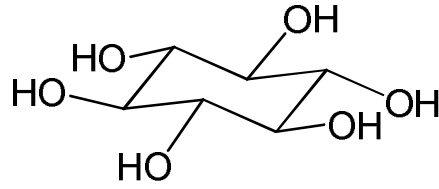
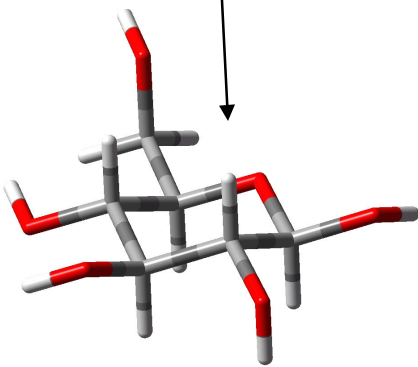


sikimisav
aminosav-bioszintézis

[Stryer 724]

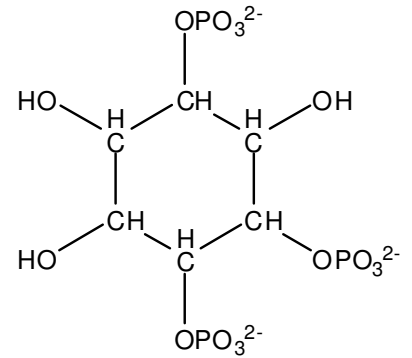


β -D-glükóz
[Gimn2 175]

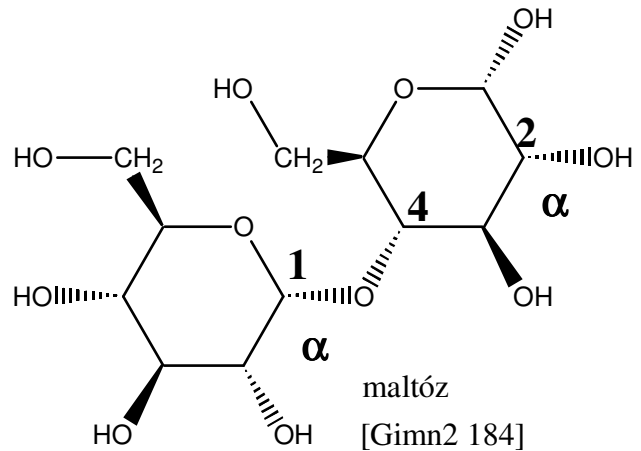


inositol
inozít

Az inozitnak hány
sztereoizomerje létezik?



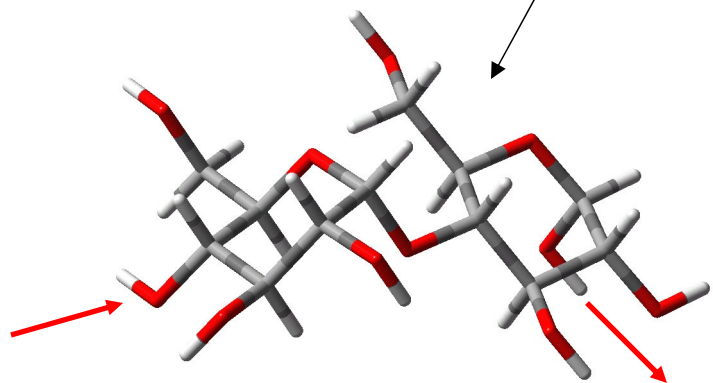
inositol-trifoszfát
IP₃ : Ca²⁺-szintet emel



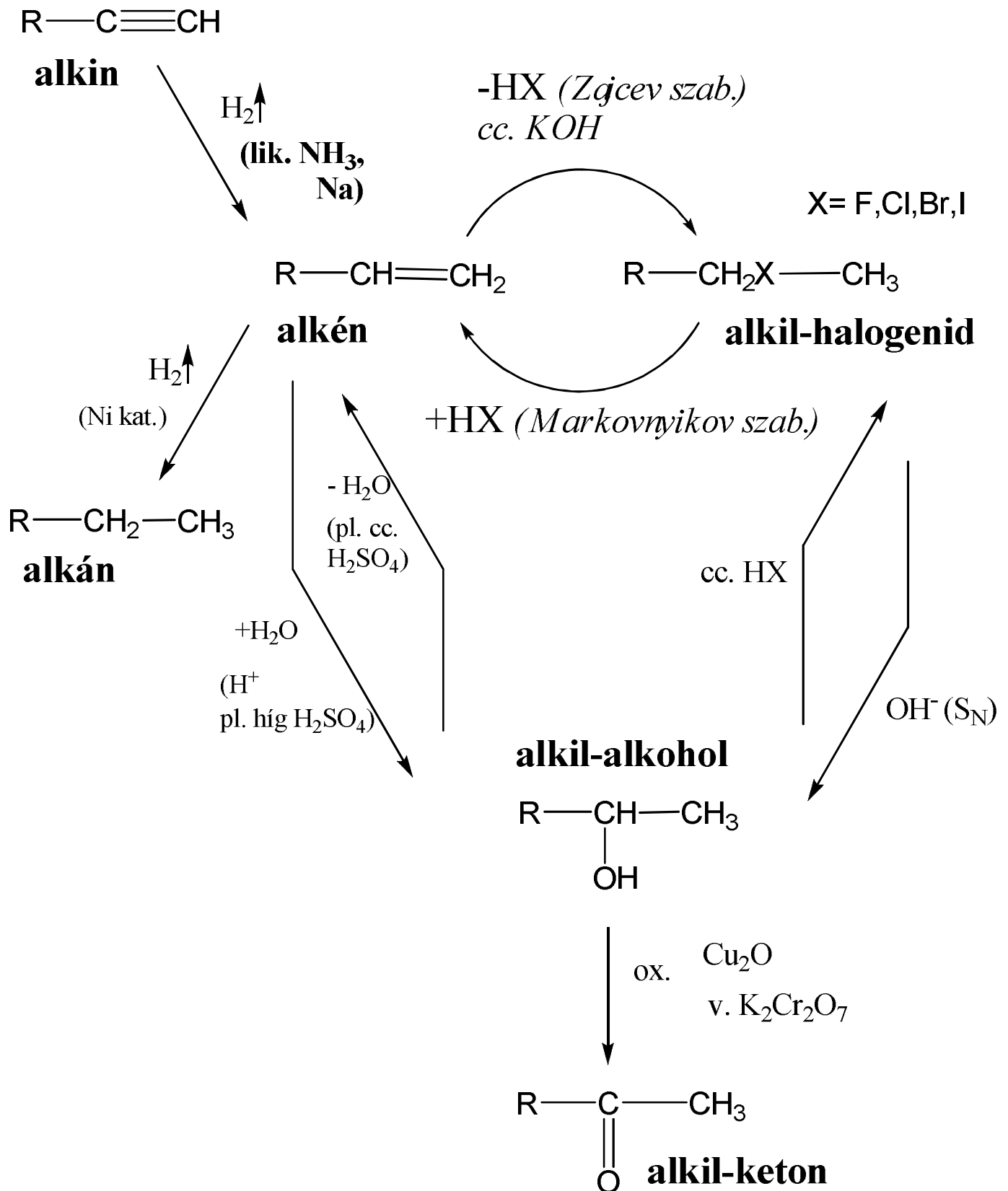
maltóz
[Gimn2 184]

cellulóz (lineáris)
keményítő (spirális)

hidrolízis \Rightarrow cellobióz (β -forma)
hidrolízis \Rightarrow maltóz (α -forma)



Néhány sematikus reakció amely során az alkének, alkinok, alkil-halogenidek és alkoholok egymásba alakíthatók:

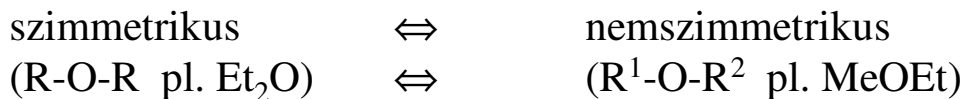


5. Éterek

típusnév: alkoxialkán (Szn), alkilén-oxid (Csn)

(Szn esetében az előtag „alkoxi”)

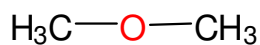
Víz két hidrogénjét alkilcsoportokkal helyettesítjük



telített \Leftrightarrow telítetlen

nyíltláncú \Leftrightarrow gyűrűs

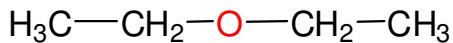
szimmetrikus telített



Methoxymethane

dimethyl ether
dimetil-éter

fp = **-23** °C



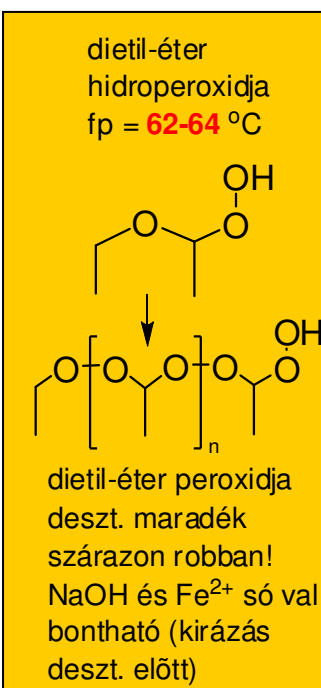
Ethoxy-ethane

diethyl ether
dietil-éter

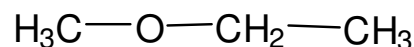
éter

fp = **34.6** °C

ρ = **0.71** g/cm³



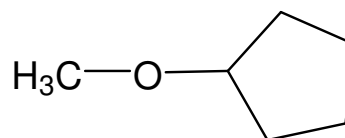
nem-szimmetrikus telített



Methoxyethane

ethyl methyl ether
etil-metil-éter

fp = **7.6** °C

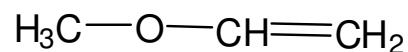


Methoxycyclopentane

metoxiciklopentán

cyclopentyl methyl ether
ciklopentil-metil-éter

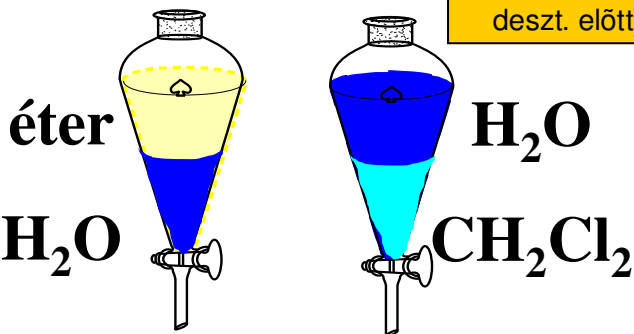
nem-szimmetrikus telítetlen



Methoxyethene

metoxietén

methyl vinyl ether
metil-vinil-éter

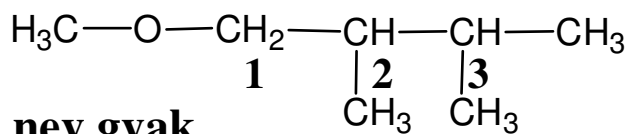


memo: az éter csak korlátozottan elegyedik a vízzel; extrakciós rendszer.

kérdés: miért alacsony az alkoholokhoz képest az éterek forráspontja?

válasz: mert nem tudnak intermolekuláris H-hidakat képezni.

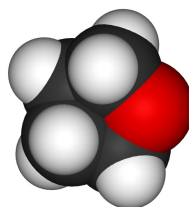
Szubsztitúciós nomenklatúra: (*Szn* esetében az előtag „alkoxi”) a leghosszabb szénláncnak megfelelő alkil illetve alkoxi csoporttal képezzük a nevet



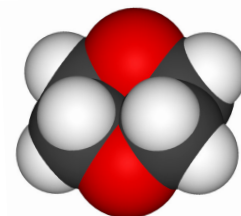
nev.gyak.

1-Methoxy-2,3-dimethylbutane

1-metoxi-2,3-dimetilbután

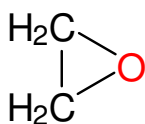


poláris éter:
 $\mu = 1,8$ Debye



apoláris éter:
 $\mu = 0$ Debye

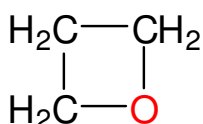
Gyűrűs éterek



Oxirane
oxirán

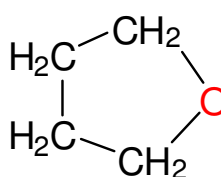
fp = 11 °C

etilén-oxid



Oxetane
oxetán

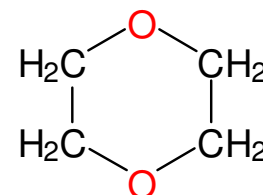
fp = 49-50 °C



Oxolane
oxolán

Tetrahydrofuran
tetrahydrofurán

fp = 66 °C



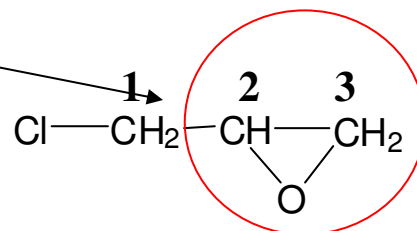
1,4-Dioxane

1,4-dioxán

fp = 101,1 °C

nev.gyak.

szomszédos szeneket összekötő éter az epoxid



2-(Chloromethyl)oxirane

2,3-epoxi-1-klórpropán

Példa:

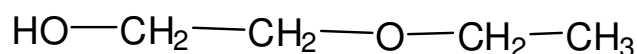


2-Methoxyethan-1-ol

2-metoxietán-1-ol

etilénglikol-monometiléter

metilcelloszolv



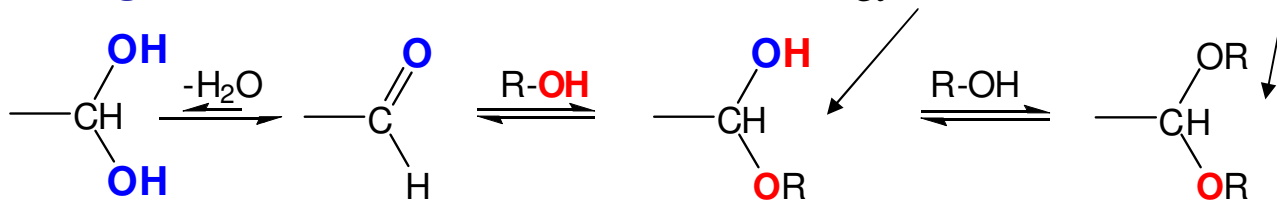
2-Ethoxyethan-1-ol

2-etoxietán-1-ol

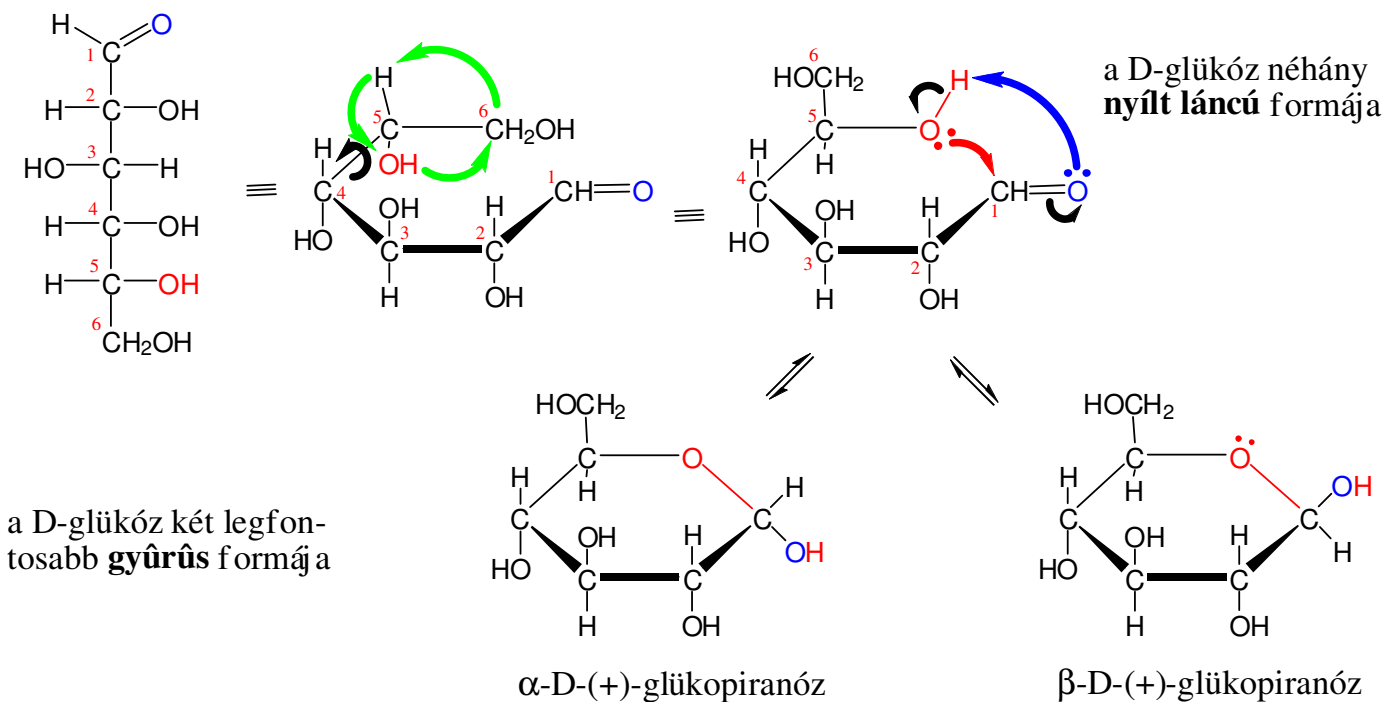
etilénglikol-monoetiléter

celloszolv

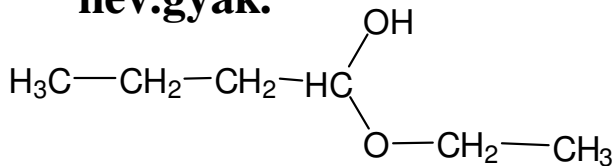
geminális diolból levezethető „**féléter**” vagy **félacetál** illetve **acetál**



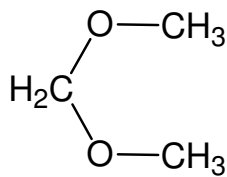
Az intramolekuláris félacetál képződés a glükóz esetében:



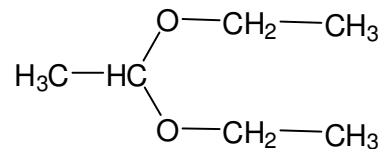
nev.gyak.



1-Ethoxy-butan-1-ol
1-etoxibután-1-ol

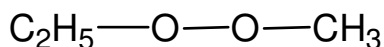


Dimethoxymethane
dimetoximetán



1,1-Diethoxyethane

Peroxidok

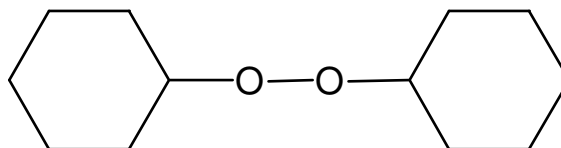


Methylperoxyethane
metilperoxietán

etil-metil-peroxid

formaldehid-dimetil-acetál
metilál

1,1-dietoxietán
acetaldehid-dietil avagy acetál



diciklohexil-peroxid

IV. Kéntartalmú szénvegyületek

alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs

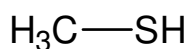
alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

1. Tiolok ($C_nH_{2n+1}SH$)

típusnév: alkántiol, tioalkohol

-SH „merkaptó” csoport (elavult)

előtag: szulfanil, utótag: tiol

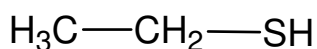


Methanethiol

metántiol

metil-hidrogén-szulfid

metil-merkaptán

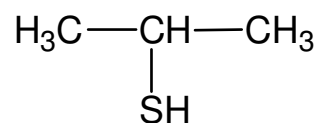


Ethanethiol

etántiol

etil-hidrogén-szulfid

etil-merkaptán



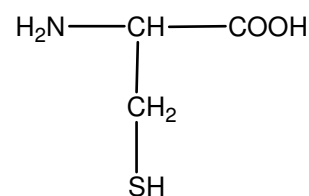
Propane-2-thiol

2-propántiol

izopropil-hidrogén-szulfid

izopropil-merkaptán

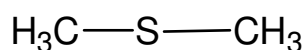
Példa:



cisztein

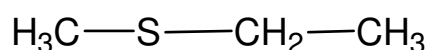
2. Tioéterek szulfidok R^1-S-R^2

típusnév: dialkil-szulfid (tioéter)



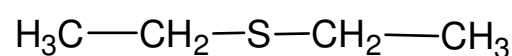
Methylsulfanylmethane

dimetil-szulfid



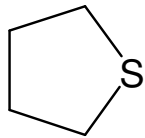
Methylsulfanylethane

metil-etil-szulfid



Ethylsulfanyl-ethane

dietil-szulfid

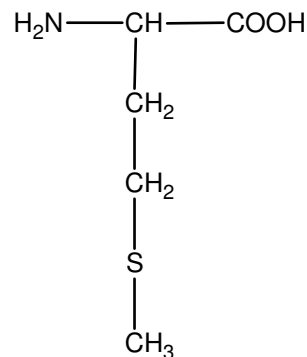


Tetrahydrothiophene
tetrahidrotiofén

thiolane
tiolán

Illékony, bűdös,
színtelen folyadék
op: -96°C , fp: 119°C
földgáz „illatosítására”
használják

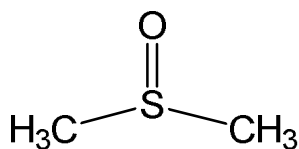
Példa:



metionin

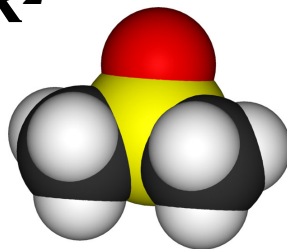
3. Szulfoxidok és szulfonok

$\text{R}^1\text{-SO-R}^2$ és $\text{R}^1\text{-SO}_2\text{-R}^2$



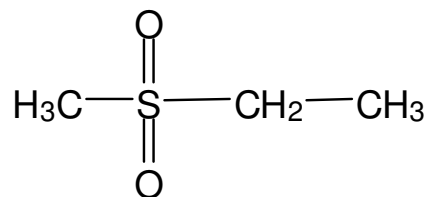
Methylsulfinylmethane
metilszulfinitmetán

dimethyl sulfoxide
dimetil-szulfoxid



DMSO:

dipoláris aprotikus oldószer
op: 18.5°C , fp: 189°C
érdekesség: PCR reakcióknál
hasz., meggátolja a DNS kettős
spirál téralkat kialakulását

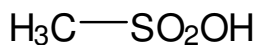


Methylsulfonylethane
metilszulfonietán

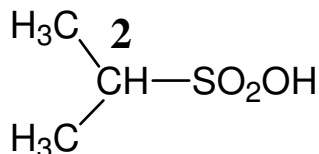
ethyl methyl sulfone
metil-etil-szulfon

4. Szulfonsavak

$\text{R}^1\text{-SO}_2\text{-OH}$

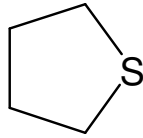


Methanesulfonic acid
metánszulfonsav



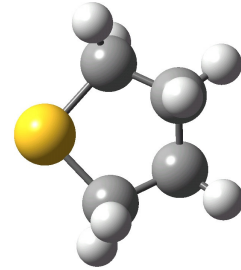
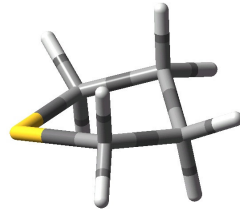
Propane-2-sulfonic acid
propán-2-szulfonsav

Kép a tetrahidrotiofénről

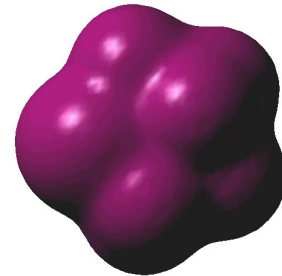


Tetrahydrothiophene
tetrahidrotiofén

thiolane
tiolán

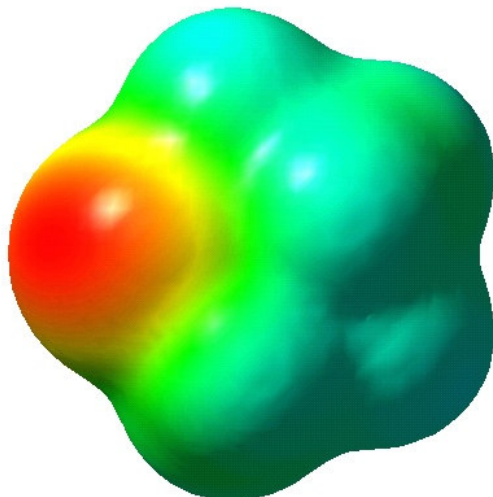


A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.) „izo-felzine”



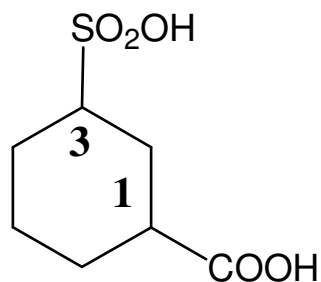
$\mu=2.34$ Debye (RHF/6-311++Gd,p)

A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.)
„izo-felzinen” színnel kódolt
elektrosztatikus potenciálérték



piros, sárga, zöld, kék
 $-0.035 \leq \text{töltés} \leq 0.035$

nev.gyak.
rangok!

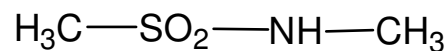


3-Sulfocyclohexane-1-carboxylic acid

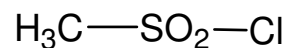
3-szulfociklohexán-1-karbonsav

Példa: $\text{H}_3\text{C}-\text{SO}_2-\text{NH}_2$

metánszulfonamid

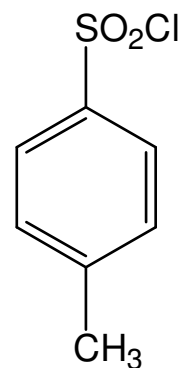


N-metil-metánszulfonamid



metánszulfonil-klorid

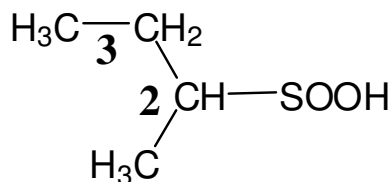
mezil-klorid



4-Methyl-benzenesulfonyl chloride

tozil-klorid

5. Szulfínsavak $\text{R}^1-\text{SO}-\text{OH}$



Butane-2-sulfinic acid

bután-2-szulfínsav

6. Szulfénsavak $\text{R}^1-\text{S}-\text{OH}$