

Hullámok és harmonikus felhangjaik feltérjék a forrást



következtetés:

a hangok (frekvenciák) visszatükrözik a hang forrását: a hegedűt vagy a zongorát.

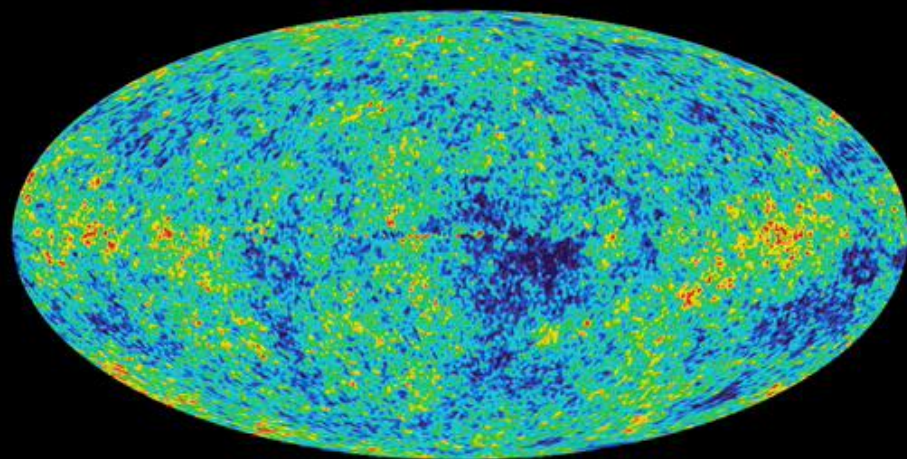
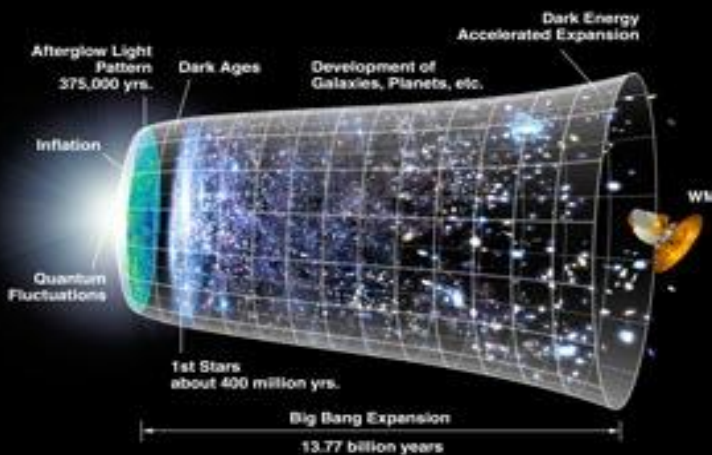
A Wilkinson mikrohullámú anizotrópia szonda

(Wilkinson Microwave Anisotropy Probe, WMAP)

a NASA műholdja, melynek célja, hogy a felderítse az Ősrobbanásból származó mikrohullámú háttérsugárzás térbeli hőmérséklet-ingadozásait (anizotrópiáját).



WMAP célja a teljes csillagos égbolt feltérképezése legalább $0,3^\circ$ felbontással és $20 \mu\text{K}$ érzékenységgel, maximum $5 \mu\text{K}$ szisztematikus mérési hibával.



Preambulum: az élet hajnala és az O₂

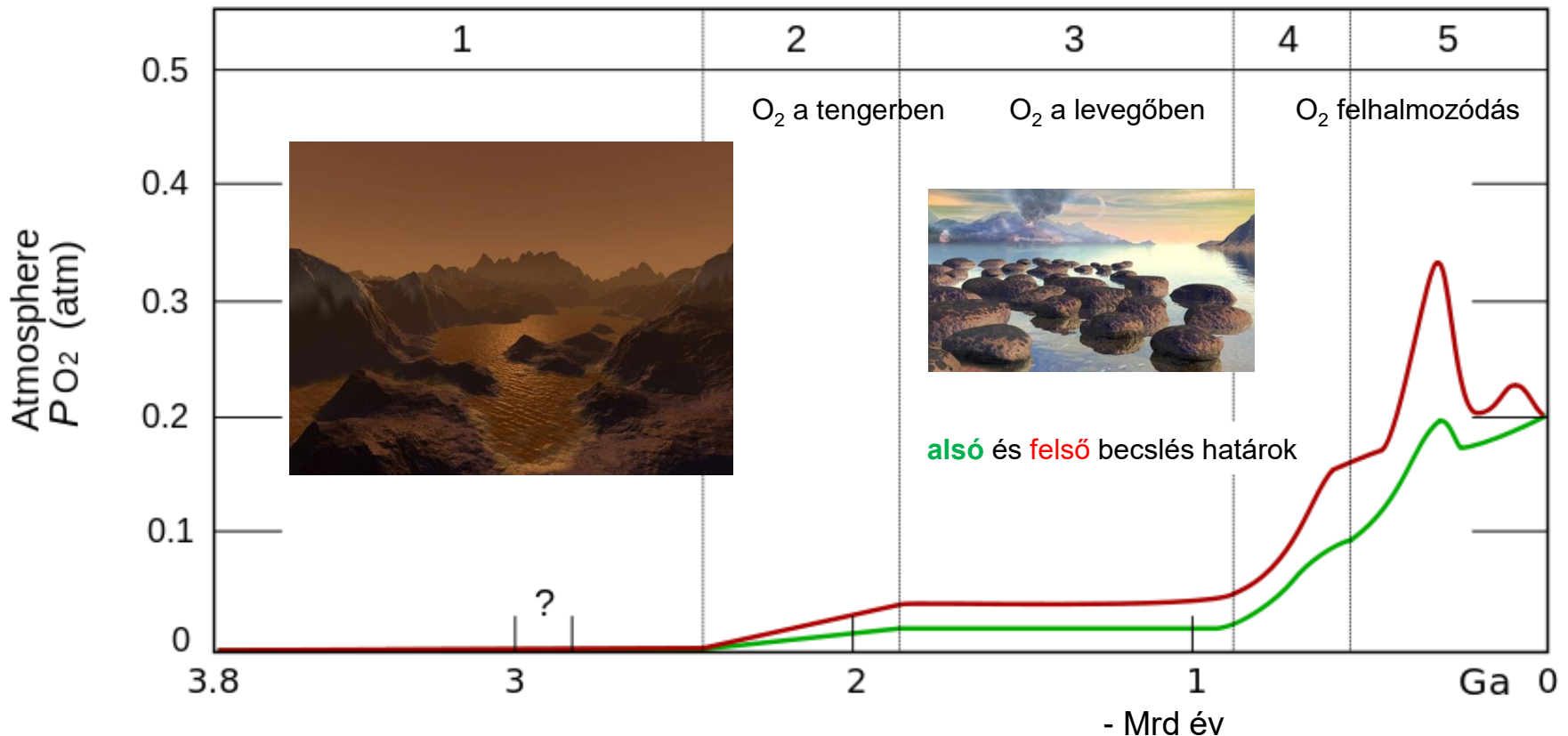
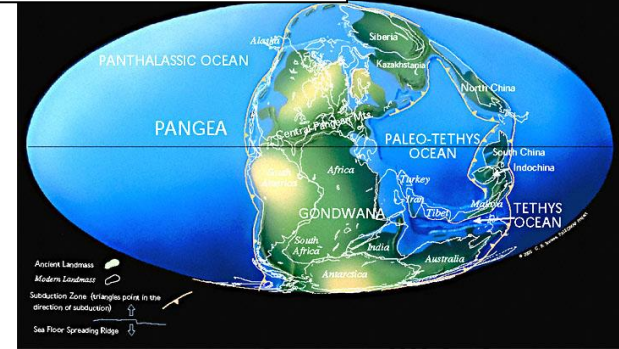
Az O₂ koncentráció a Föld atmoszférájában:

- 1) nincs O₂ termelés; 2) O₂ termelődik, de az óceánok és tengerfenéki kőzetek abszorbeálják; 3) az O₂ kilép az óceánokból, de a földfelszín és az ózonréteg elnyeli; 4–5) az O₂ elnyelők megtelnek, és a gáz felhalmozódik

3-2,6 milliárd éve

Stages

255 millió éve



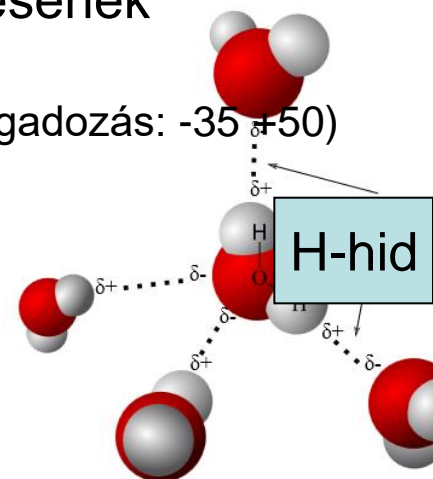
Preambulum: az élet hajnala és a víz



Szilárd kéreg és Ősatmoszféra
(>4,5 milliárd éve): forráság, CO₂, vízgőz

folyadék fázisú víz megjelenésének
számos előfeltétele van:

- optimális Nap - Föld távolság (hőingadozás: -35 +50)
- Föld forgásának szögsebessége
- Hold (árapály)
- ...



- Vizek áramlása és körforgása: gradiens
(vízpára, eső, patak, folyó, tó, óceán,..)

- földön a víz 90% sós (óceánok), de a desztilláció miatt van édesvíz is.

- szelek miatt az édesvíz kvázi homogéneen oszlik el.



- kellően magas forrás- és fagyáspontja van,
- igen jó oldószer (sok mindent tud szállítani),
- felületi feszültség (a gravitációval ellentétesen, felfelé is tud folyni a víz pl. növényekben),
- a jég sűrűsége kisebb mint a vízé (a víz felülről fagy be)

Az első önreprodukcióra, önfenntartásra és önszabályozásra képes anyagi rendszerek kialakulása mintegy 4 milliárd évvel ezelőttre tehető.



átmérője
0,1 - 15 μm
között változik

archeák (*Archaea* vagy *Archaeobacteria*), ([görög](#) αρχαία, „ősi eredetűek”) vagy ősbaktériumok sejtmag nélküli, azaz prokarióta szervezetek. Akár több milliárd évesek?

archeák extrémofilek: extrém helyeken is megélnek és szaporodnak:

- magas hőmérséklet ($>100\text{ }^{\circ}\text{C}$), gejzírekben,
- nagy nyomás (óceán fenekén található hőforrásokban)
- rendkívül hideg
- nagyon sós, savas vagy lúgos vizekben is megtalálhatóak

Felépítésük:

- cirkuláris kromoszóma, $0,5 \text{ E}+6 < \dots < 5 \text{ E}+6$ bázis
- a legkisebb egyed (*Nanoarchaeum equitans*) is >500 fehérjét kódolnak

*Komplexitás-
információtartalom*

Szövet, organizmus

Sejt

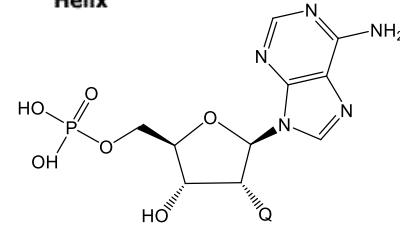
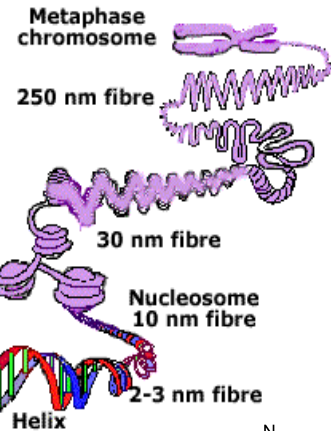
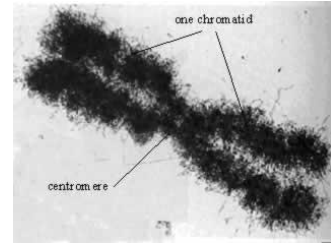
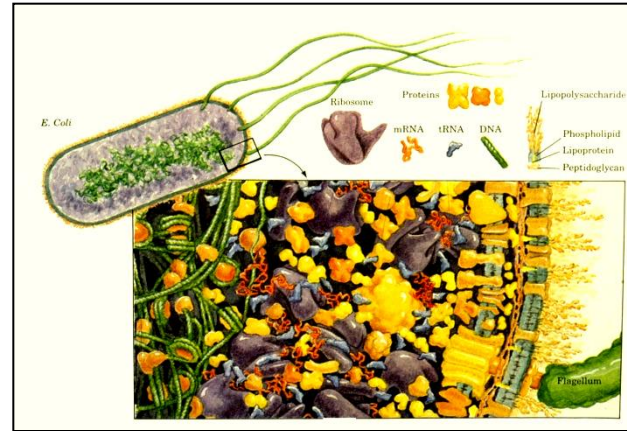
Szupramolekuláris
komplexek és
nanorendszerek

Biomolekulák

biológia

Biológiai
kémia;
a
természetes
vegyületek

kémiája



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

sokaság-sokszínűség
(kDa)

kémia

70 606 400

2013.02.11

/13.45

egy példa

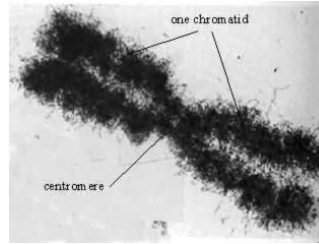
*Komplexitás-
információtartam*

Szövet, organizmus

Sejt

*Szupramolekuláris
komplexek és
nanorendszerek*

Biomolekulák



**Metaphase
chromosome**

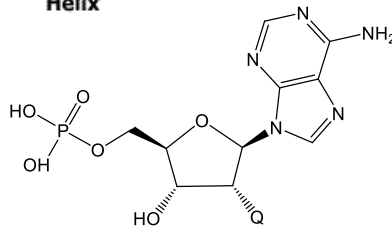
250 nm fibre

30 nm fibre

**Nucleosome
10 nm fibre**

2-3 nm fibre

Helix

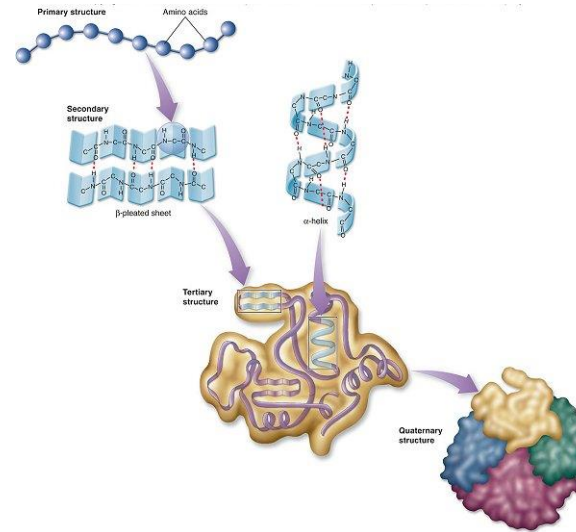


Q=OH adenzin-5'-monofoszfát
Q=H dezoxiadenzin-5'-monofoszfát

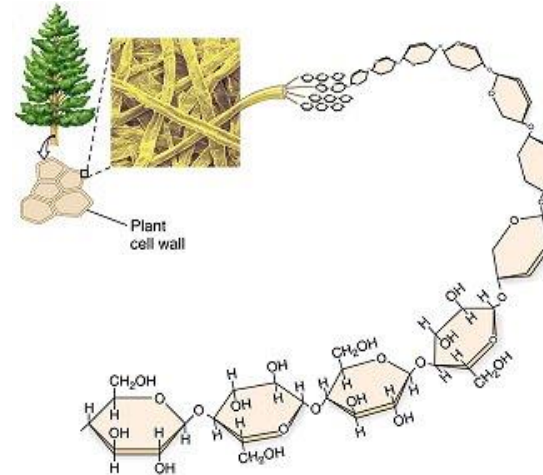
*sokaság-sokszínűség
(kDa)*

A biopolimerek három legfontosabb képviselője:

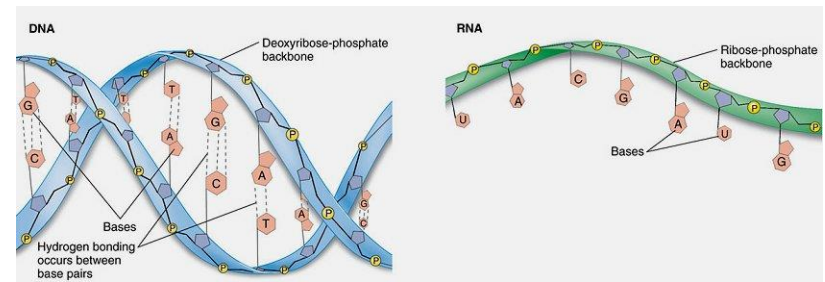
-a peptidek és fehérjék



- 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

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

ELTE Szerves Kémiai Tanszék - Windows Internet Explorer

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

Fájl Szerkesztés Nézet Kedvencek Eszközök Súly

ELTE Szerves Kémiai Tanszék

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

Kutatás Új választható kurzusok:

Diákoknak Csámpai Antal: Szerves kémiai problémák megoldása NMR-
spektroszkópiával

Alapítványok Pintér István: Szénhidrátkémia


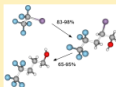
Egyebek

ELTE-MTA Fehérjemodellező Kutatócsoport

ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Tanszékünk 70 éve

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



ELTE Szerves Kémiai Tanszék - Windows Internet Explorer

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

Fájl Szerkesztés Nézet Kedvencek Eszközök Súly

ELTE Szerves Kémiai Tanszék

Szerves Kémiai Tanszék

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

English

Oktatási információk

Nyitólap

Munkatársak

Kutatás

Diákoknak

Alapítványok

Egyebek

ELTE-MTA Fehérjemodellező Kutatócsoport

ELTE-MTA Peptidkémiai Kutatócsoport

Tematikák, segédanyagok

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

A Tanszéken készült könyvek, könyvfejezetek

- Hollósi Miklós, Laczko Ilona, Aszóth Bence: Biomolekuláris kémia I. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2005, ISBN 963 19 5698 9
- Hollósi Miklós, Laczko Ilona, Majer Zsuzsa: A sztereokémia és kiroptikai kémia. 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, Rabai József, 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.): *The Conformational Analysis of Biomolecules*. Plenum Press, 1996, ISBN 0-306-45142-5
- Perczel András, Laczko Ilona, Hollósi Miklós: *Darvildal-térképezés* tévedés

Perczel András kurzusai - Windows Internet Explorer

http://szerves.chem.elte.hu/oktatas/ea/Perczel/index.htm#bioloszerves

Fájl Szerkesztés Nézet Kedvencek Eszközök Súly

Perczel András kurzusai

Perczel András kurzusai

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

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

Szerves kémia biológusoknak: előadásvázlatok

Bevezetés (kedvesindító) (fissítve: 2007.02.19.)

[1. sorozat \(fissítve: 2007.03.08.\)](#) [2. sorozat \(fissítve: 2007.03.20.\)](#) [3. sorozat \(fissítve: 2007.04.25.\)](#) [4. sorozat \(fissítve: 2007.04.25.\)](#)
[5. sorozat \(fissítve: 2007.04.26.\)](#) [6. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#) [7. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#) [8. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#)
[9. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#) [10. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#) [11. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#) [12. sorozat \(fissítve: 2008.01.28.\)](#)

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](#)

Internet 100%

Start biol_szerves Cserélhető lemez (E) Microsoft PowerPoint... Perczel András kurzus...

Tények

Az elkészített anyag az alábbi könyvekre támaszkodik:

1. Szerves kémia (nomenklatóra) I.

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

2. Szerves kémia (nomenklatóra) 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

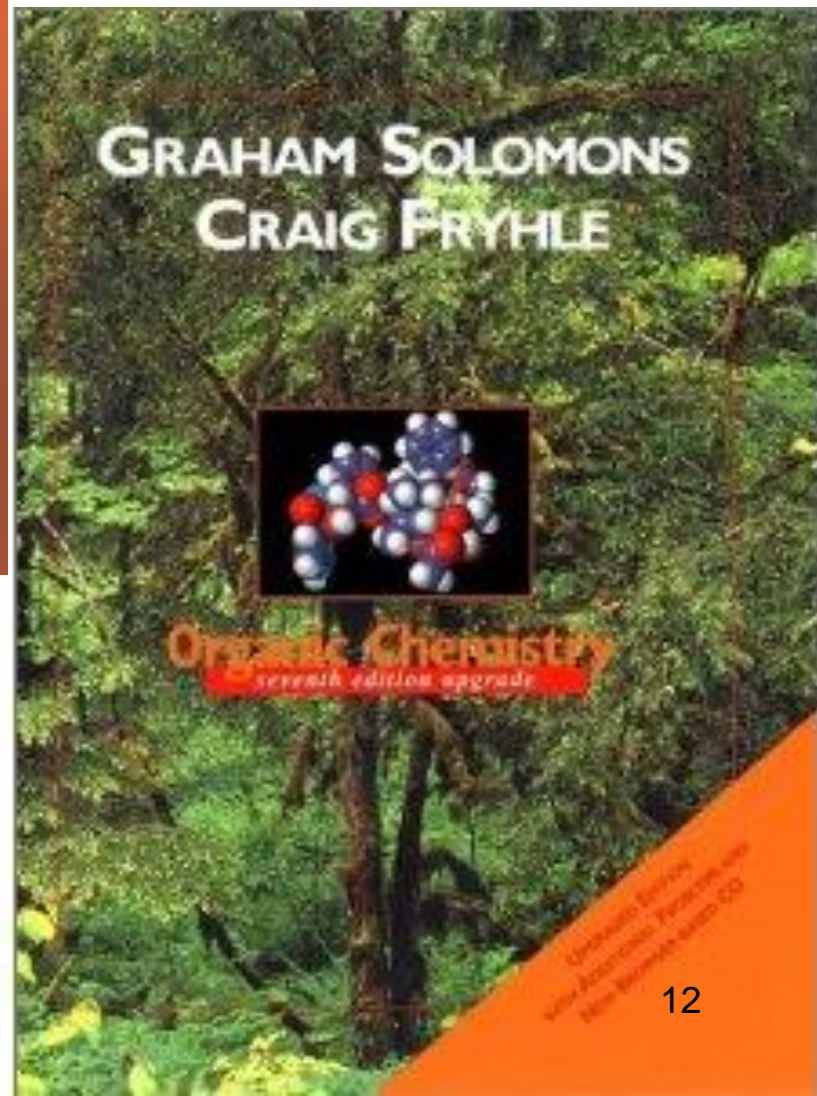
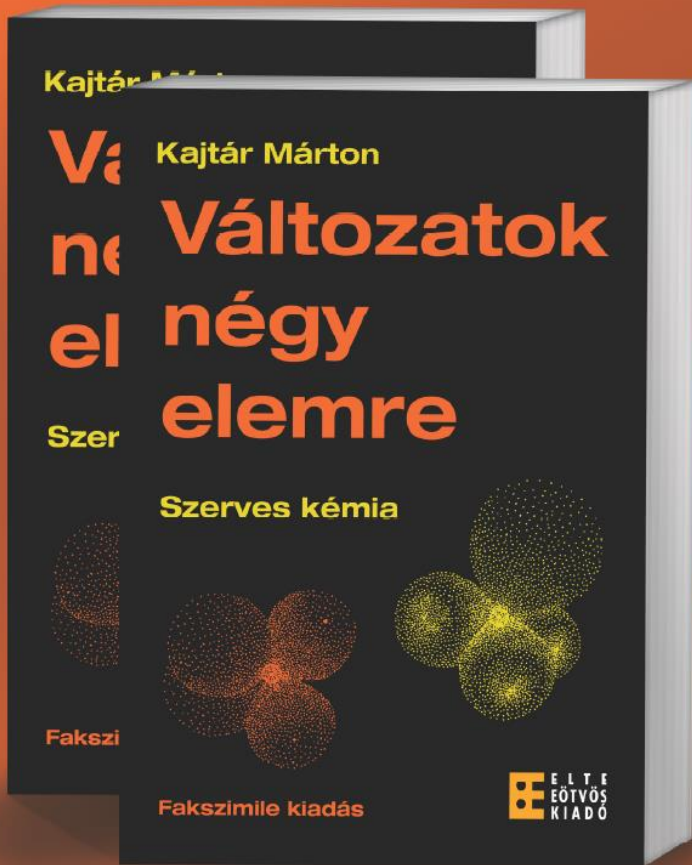
Peter Sykes (1995 Longman Scientific and Technical)

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



Képirás?

Képletírás?

話



言

舌

hanaszu (beszélni)

iu (mondani)

sita (nyelv)

火山



火

山

kazan (tűzhányó)

ka (tűz)

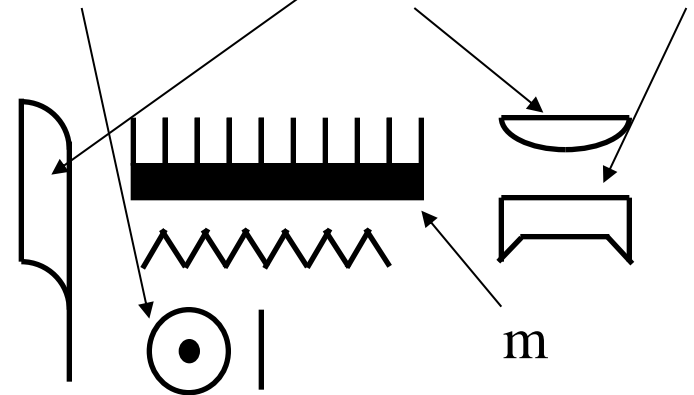
yama (hegy)

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

ré: a Napisten neb: ura pet: eget



memo: - hieroglifák kódolhatnak szavakat vagy hangokat.

szerves kémia: szimbólumai és kódja hasonló:

- nyelvtől független: CH₃CH₂OH

- „kevert” írásmód: Tos-Cl

高山

Takayama



Kémiai jelölések

A vegyjelek és a képletek



ezüst



vas



hidrogén



oxigén



szén



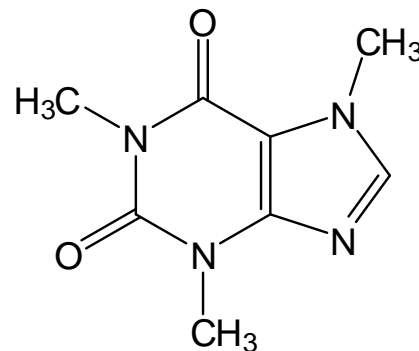
víz

A kémiai szimbólumok fejlődéstörténete

Representation of the benzene ring
in the reports of the
« thirsty chemical society » in 1886



Kekulé álma (1865)
1890-ben a benzol
ünnepségeken

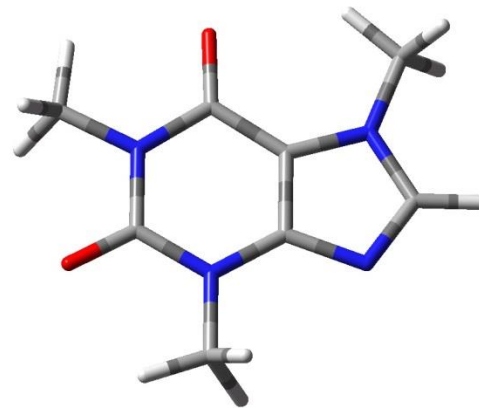


1,3,7-trimetilxantin (**koffein**)

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

Bruckner III-2 1007

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



Friedrich August
Kekulé von Stradonitz
(1829-1896)

„A képletírás”

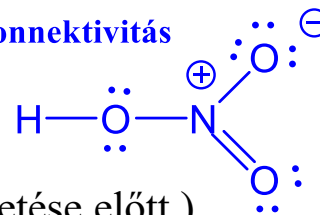
feladat: leírni

az **atommagok**
elrendeződését,

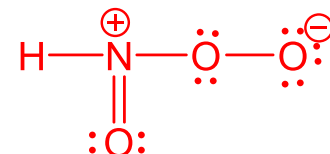
az **elektronszerkezetet**

Mielőtt leírjuk a salétromsav Lewis képletét, azelőtt **tudnunk kell** az atommagok elrendeződését (**konnektivitását**) pl. HNO_3 -ban nincs H,N kötés:

jó konnektivitás



rossz konnektivitás



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** körülvett **atomtörzs**.



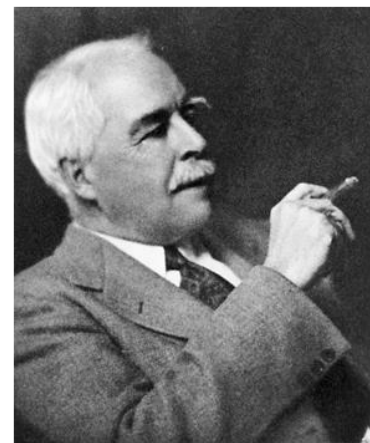
kovalens kötés :

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

nemkötő elektronpár :

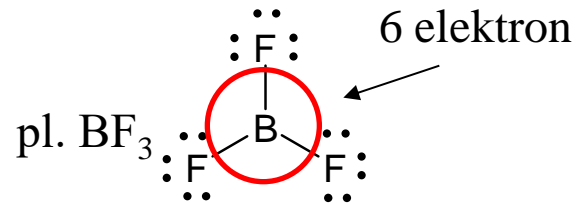
csupán egyetlen atomtörzshöz kapcsolódó
két elektron (pontpárként tüntetjük fel).

Gilbert N. Lewis



Kivételek az oktettszabály alól:

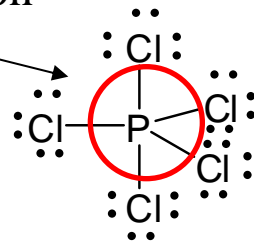
- az elektronhiányos atomok esete:



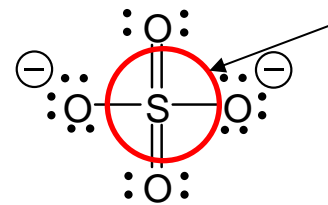
- a nem második periódusbeli atomok esete:

pl. SO_4^{2-} vagy PCl_5

10 elektron



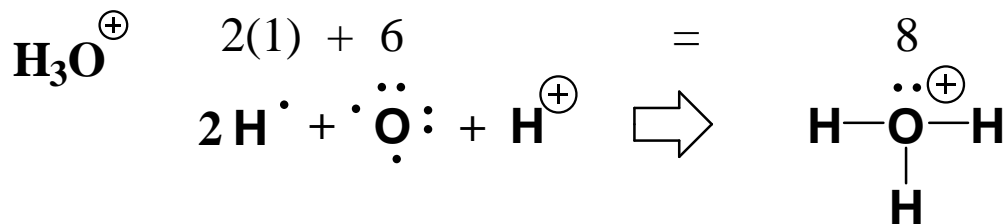
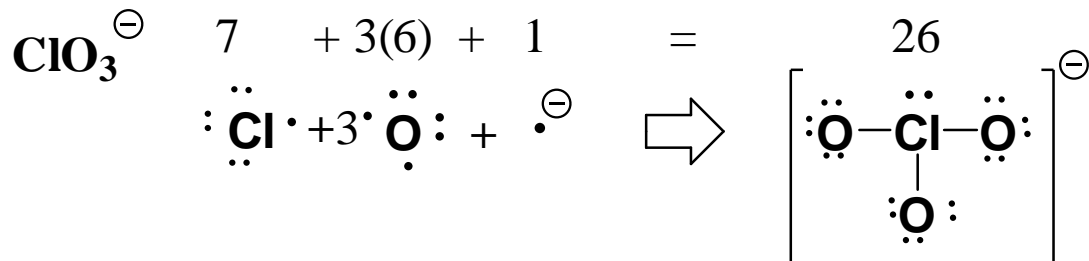
12 elektron



Töltéssel rendelkező molekulák az oktettszabály:

K-héj	H								He
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	

vegyértékelektronok száma:



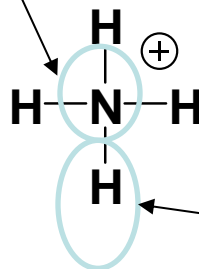
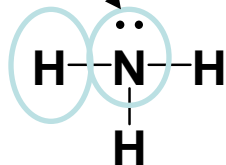
Töltés = (vegyértékelektronok száma) - (asszignált elektronok száma)

1-1=0
H töltése

5-5=0
N töltése

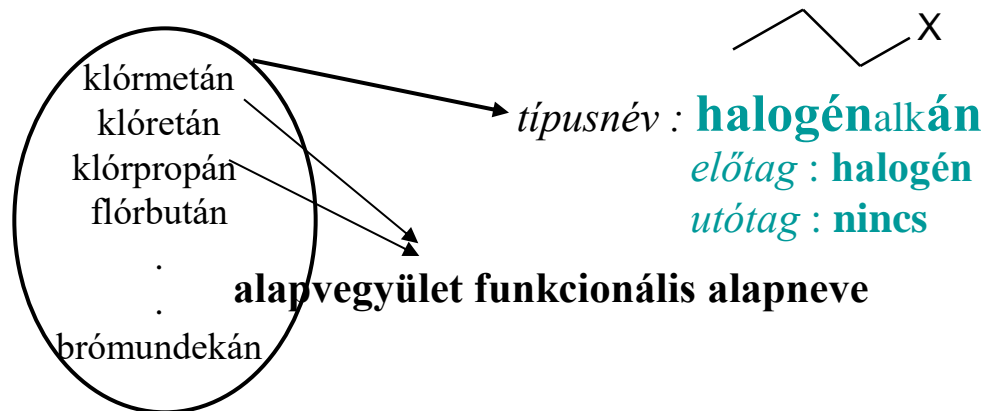
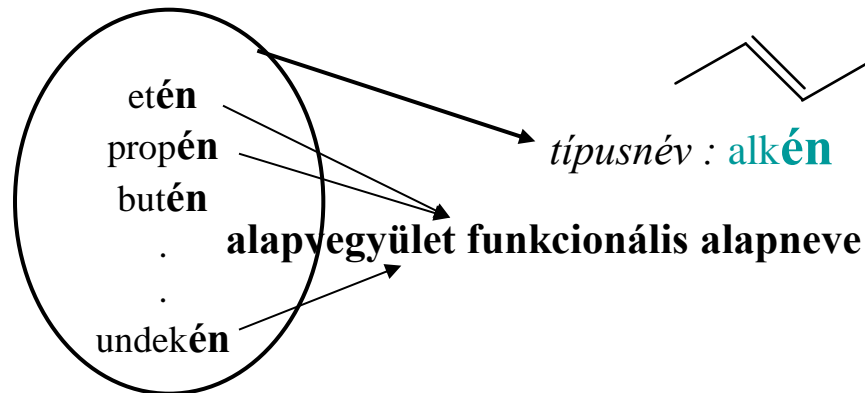
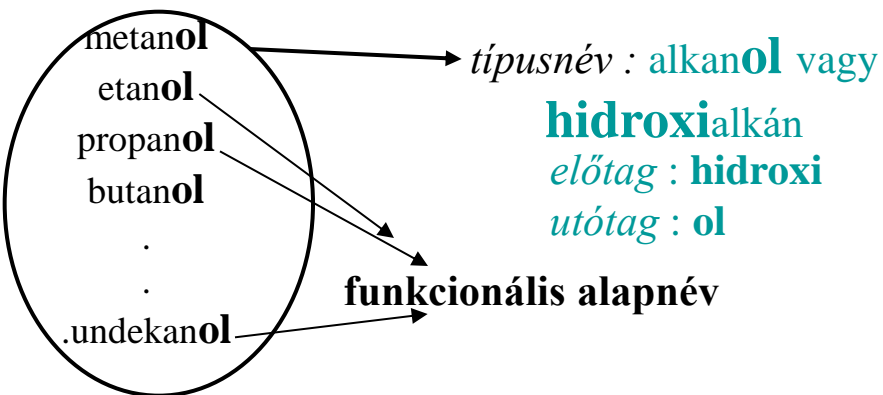
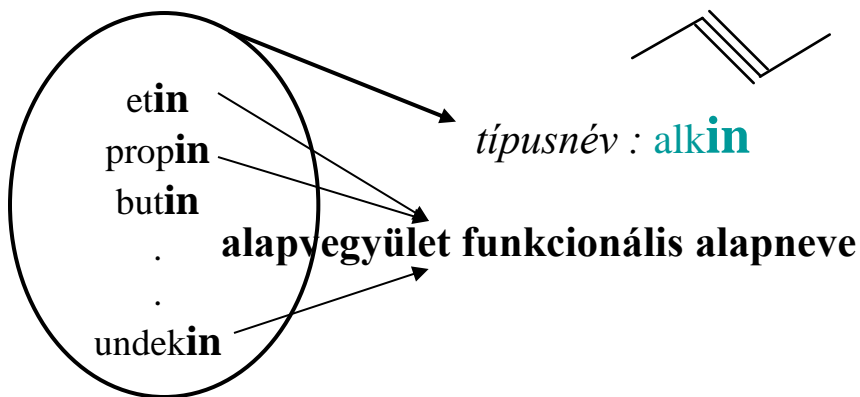
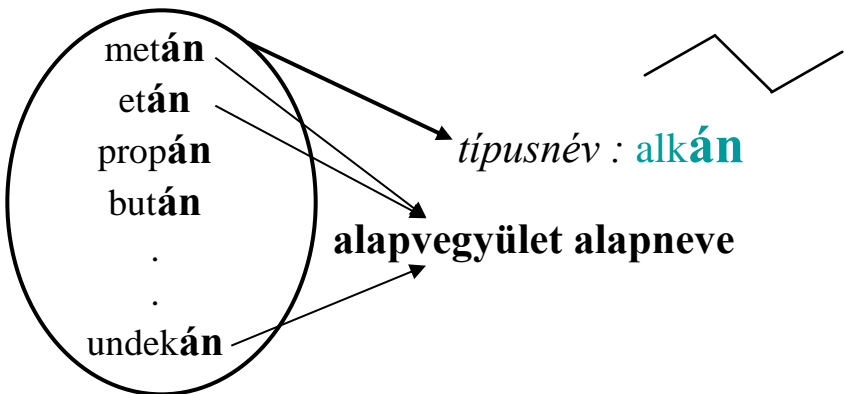
5-4=+1
N töltése

memo: míg az ammóniában 5, addig az ammónium kationban a nitrogénatomhoz csak 4 „e” rendelhető!



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

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

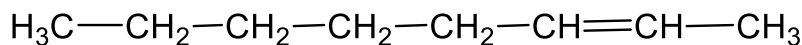
helyes a 3-oxobutánsav

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

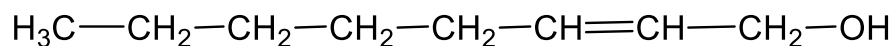
pl. helyes az 4-etil-2-metilheptán-1,6-diol

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

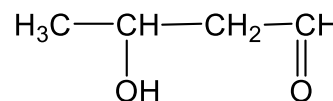
pl. helyes az 1-klór-2-fluorpropán



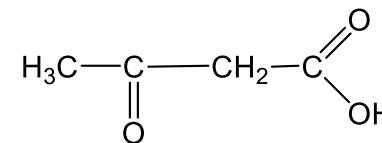
Oct-2-ene



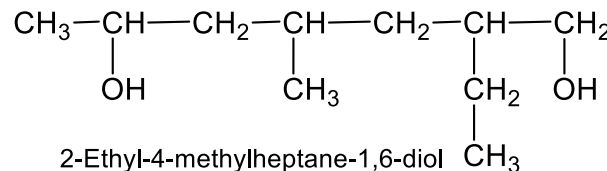
Oct-2-en-1-ol



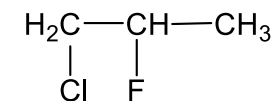
3-Hydroxybutanale



3-Oxo-butyric acid



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



1-Chloro-2-fluoropropane
19

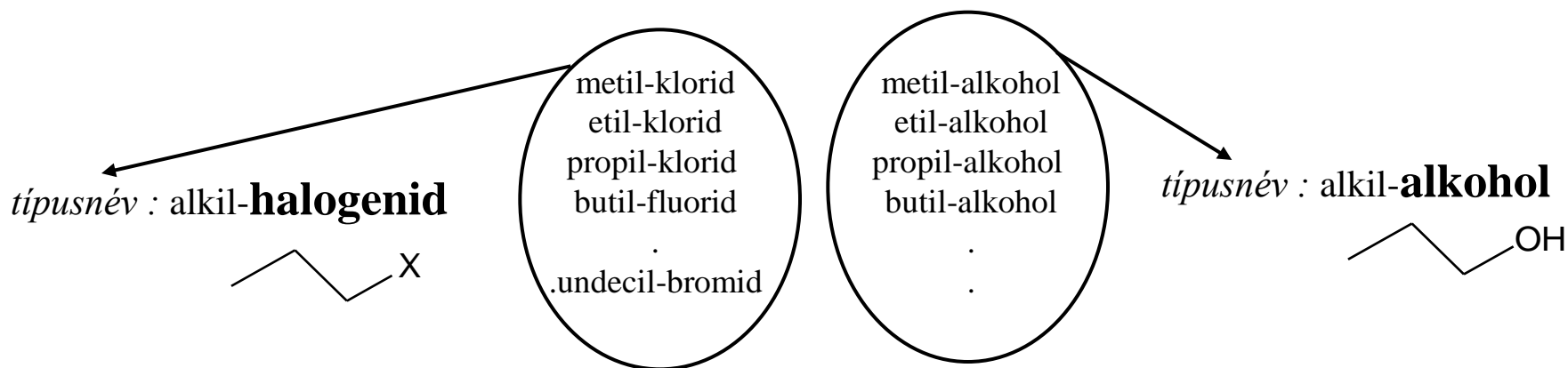
A csoportfunkciós nevezéktan (Csn) alap gondolata

A molekulát gondolatban két részre osztjuk:

csoportra és **funkcióra**, melyeknek megadjuk a nevét és ezeket kötőjellel kötjük össze.

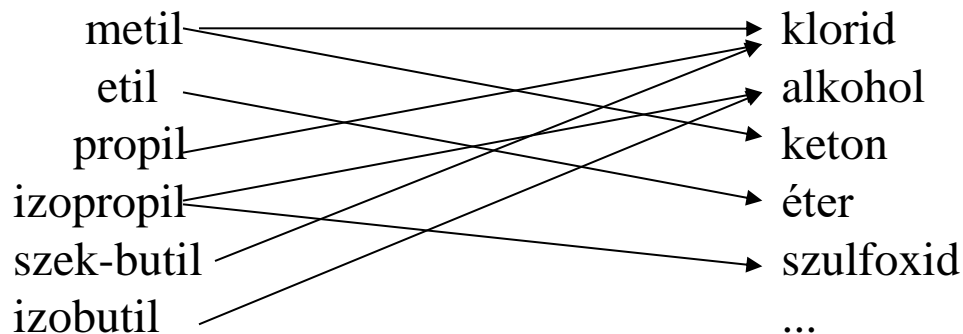
E nevezéktan jelentősége főleg a homológ sorok egyszerűbb tagjainál fontos:

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

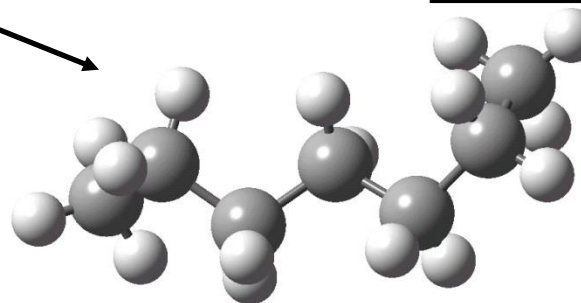
1. Alkánok (paraffinok) (C_nH_{2n+2})

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	$C_{10}H_{22}$		



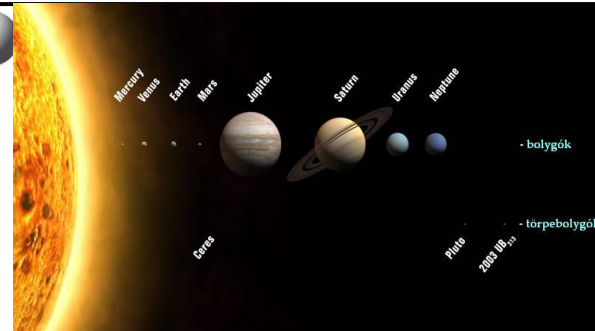
C_1 -től C_4 -ig (normál körülmények között) gáz,

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 elektronegativitás

A kötést létrehozó atomok **elektronegativitási értékének (EN)** ismeretében eldönthető hogy **kovalens, fémes** vagy **ionos** kötés jön létre. Vegyünk két atomot és határozzuk meg a két atom elektronegativitásának:

1) összegét: ΣEN_i

2) különbségét: ΔEN_i

Ha tehát:

- ΣEN **kicsi** és ΔEN **kicsi**, akkor az atomok között **fémes** kötés,
- ΣEN **nagy** és ΔEN **kicsi**, akkor **kovalens** kötés,
- ΔEN **nagy**, akkor **ionos** kötés jön létre.

→ Atomsugár nő → Ionizációs energia nő → Elektronegativitás nő →

Pl.

NaCl: 0,9 és 3,16, tehát $\Sigma EN=4,06$ és $\Delta EN=2,26$:

→ ΔEN **nagy** ezért ionos kötés

HCl: 2,2 és 3,16, tehát $\Sigma EN=5,36$ és $\Delta EN=0,96$:

→ $\Sigma EN=$ **nagy** (5,36) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0,96) ezért kovalens kötés

C-C: 2,55 tehát $\Sigma EN=5,1$ és $\Delta EN=0$:

→ $\Sigma EN=$ **nagy** (5,1) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0) ezért kovalens a kötés

C-H: 2,55 és 2,2 tehát $\Sigma EN=4,75$ és $\Delta EN=0,35$:

→ $\Sigma EN=$ **nagy** (4,75) és $\Delta EN=$ **kicsi** (0,35) ezért kovalens a kötés

memo: az **EN** segítségével határozható meg, hogy

mely atom képes hidrogénkötés kialakítására.

megfigyelés/tapasztalat: csak a három legnagyobb

EN-ú elem, a F, O, N képes erre.

Csoport (oszlopok)

Periódus (sorok)

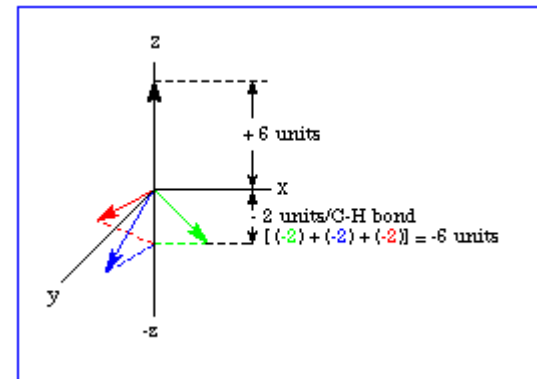
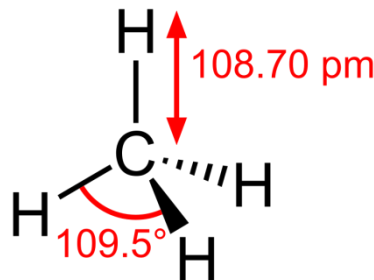
Csoport (oszlopok)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	H 2,20																	He 3,89
	Li 0,98	Be 1,57											B 2,04	C 2,55	N 3,04	O 3,44	F 3,98	Ne 3,67
	Na 0,93	Mg 1,31											Al 1,61	Si 1,90	P 2,19	S 2,58	Cl 3,16	Ar 3,3
	K 0,82	Ca 1,00	Sc 1,36	Ti 1,54	V 1,63	Cr 1,66	Mn 1,55	Fe 1,83	Co 1,88	Ni 1,91	Cu 1,90	Zn 1,65	Ga 1,81	Ge 2,01	As 2,18	Se 2,55	Br 2,96	Kr 3,00
	Rb 0,82	Sr 0,95	Y 1,22	Zr 1,33	Nb 1,6	Mo 2,16	Tc 1,9	Ru 2,2	Rh 2,28	Pd 2,20	Ag 1,93	Cd 1,69	In 1,78	Sn 1,96	Sb 2,05	Te 2,1	I 2,66	Xe 2,67
	Cs 0,79	Ba 0,89	*	Hf 1,3	Ta 1,5	W 2,36	Re 1,9	Os 2,2	Ir 2,20	Pt 2,28	Au 2,54	Hg 2,00	Tl 1,62	Pb 2,33	Bi 2,02	Po 2,0	At 2,2	Rn 2,2
	Fr 0,7	Ra 0,9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
	*	La 1,1	Ce 1,12	Pr 1,13	Nd 1,14	Pm 1,13	Sm 1,17	Eu 1,2	Gd 1,2	Tb 1,1	Dy 1,22	Ho 1,23	Er 1,24	Tm 1,25	Yb 1,1	Lu 1,27		
	**	Ac 1,1	Th 1,3	Pa 1,5	U 1,38	Np 1,36	Pu 1,28	Am 1,13	Cm 1,28	Bk 1,3	Cf 1,3	Es 1,3	Fm 1,3	Md 1,3	No 1,3	Lr 1,291		

A Pauling-féle elektronegativitási állandók periódusos rendszere

A parafinok kötésrendszere és töltésviszonyai

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 $\underline{\mu} = \underline{r} * \Delta(EN)$

Pauling féle **elektronnegativitás**: EN (H)=2,1

EN (C)=2,5

EN (N)=3,0

EN (O)=3,5

EN (F)= 4,0

pl.: $\underline{\mu}(\text{C-H}) = 1.09 * (0.4) =$

0.44 Debye (ez viszonylag

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

A homológ sor dipolértékei:

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

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

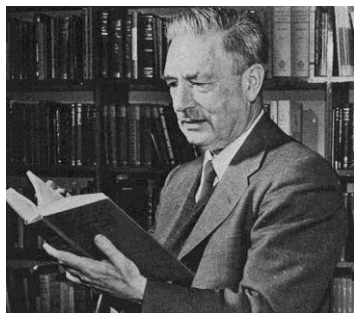
$\underline{\mu}(\text{C}_3\text{H}_8) = 0.1 \text{ D}$

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

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

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

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



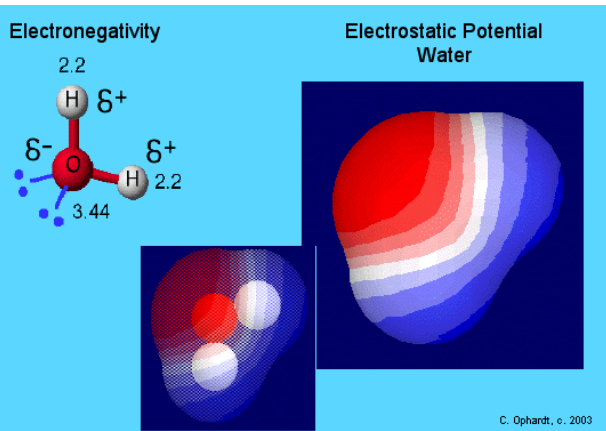
Peter Joseph William **Debye**

1884 – 1966 (Kémiai Nobel-díj 1936)

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

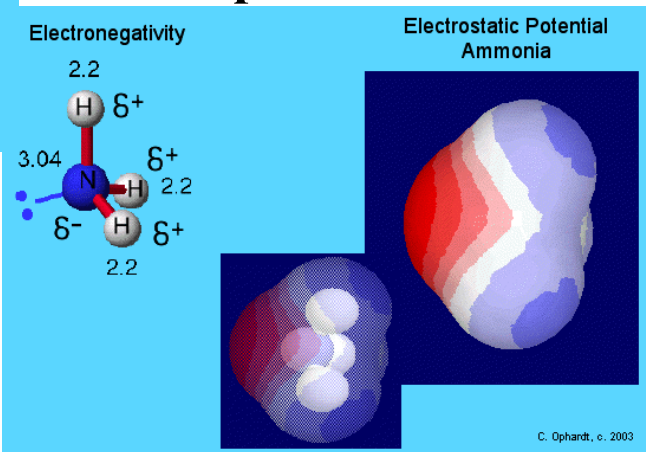
Pauling féle elektronegativitás alapján:

erősen poláris

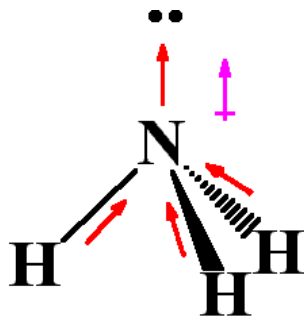
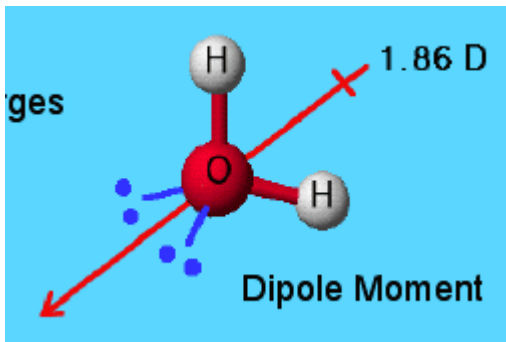
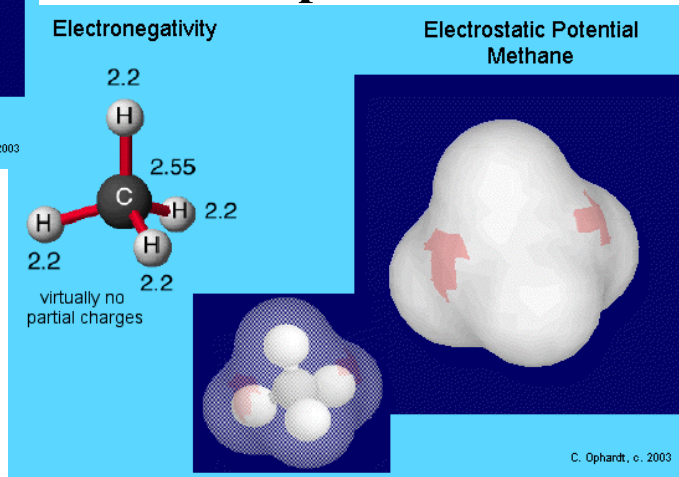


K-héj	2.1							-
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F	He
	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	Ne

poláris



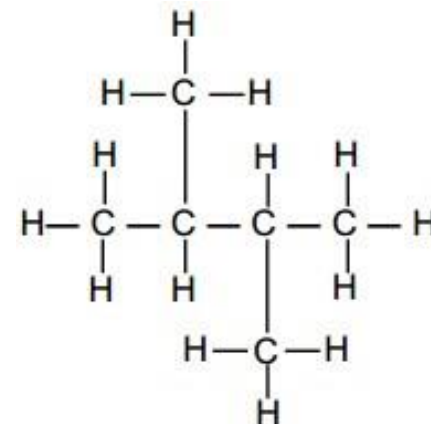
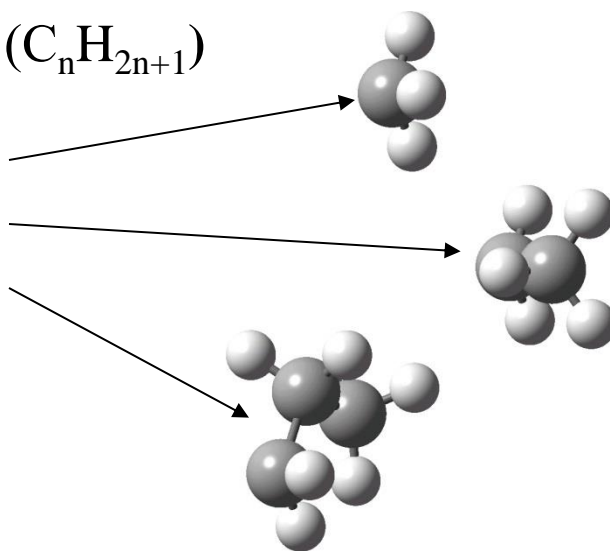
apoláris



$\mu = 1.46 \text{ D}$

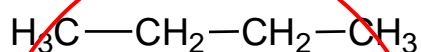
Csoportnevek („-il” végződés) (C_nH_{2n+1})

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	$C_{11}H_{23}$	

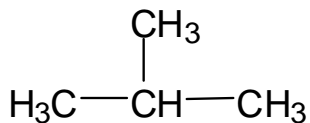


1/B Elágazó szénláncú alkánok

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



Butane
bután

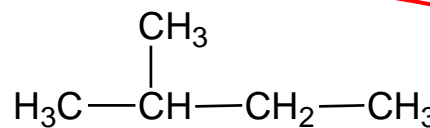


Isobutane
izobután
2-metilpropán

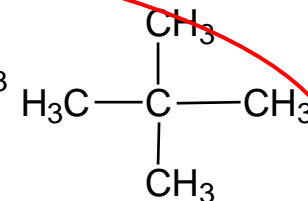
szerkezeti izoméria



Pentane
pentán



2-Methylbutane
2-metilbután
izopentán



2,2-Dimethylpropane
2,2-dimetilpropán
neopentán

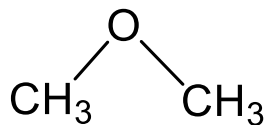
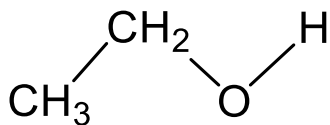
Megjegyzések az izomériáról:

görög: *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)

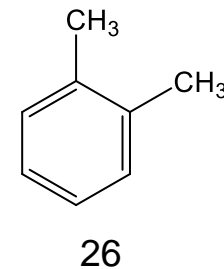
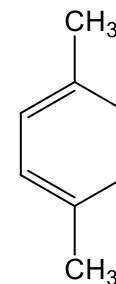
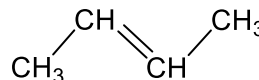
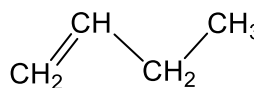
1) *Konstitúciós izoméria* (szerkezeti izoméria):

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)



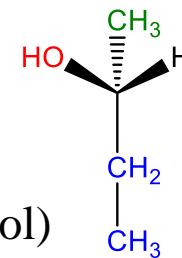
26

2) *Sztereoizoméria:*

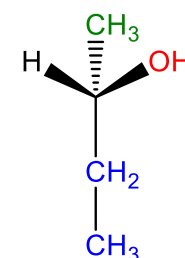
a sztereoizomer vegyületek molekuláinak csak a **térbeli felépítése eltérő**

- **Optikai (konfigurációs) izoméria:**

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



(*R*)-(-)-bután-2-ol

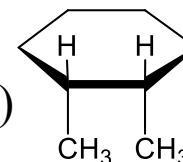


(*S*)-(+)-bután-2-ol

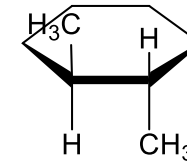
- **Cisz-transz (geometriai) izoméria:**

a sztereoizomer vegyületek molekuláiban a kettőskötés menti elhelyezkedése eltérő

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



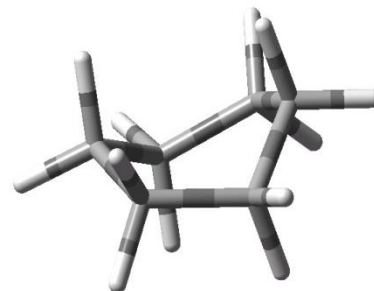
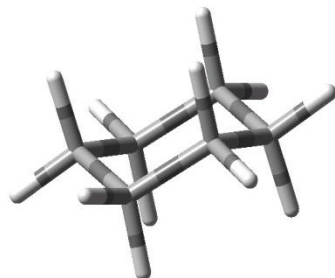
cisz-1,2-dimetilciklohexán
(op -50.1°C, fp 130°C)



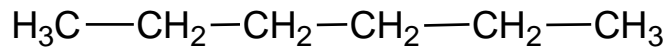
transz-1,2-dimetilciklohexán
(op -89.4°C, fp 123.7°C)

- **Konformációs izoméria:**

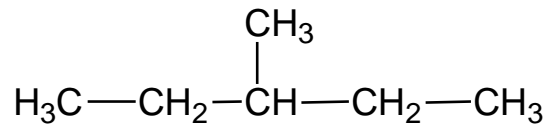
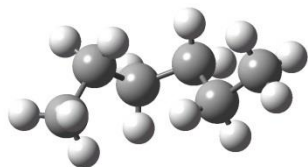
a sztereoizomer vegyületek molekuláiban a lehetséges téralkatok eltérőek (pl. ciklohexán szék és csavartkád téralkata)



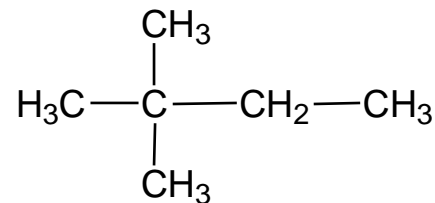
C6-, hexánizomerek (5 különböző molekula)



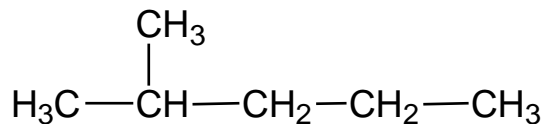
Hexane
hexán



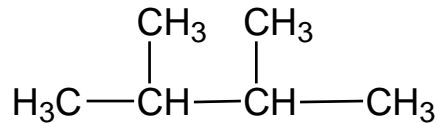
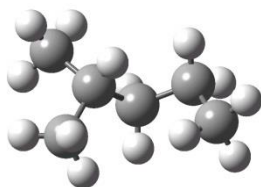
3-Methylpentane
3-metilpentán



2,2-Dimethylbutane
2,2-dimetilbután



2-Methylpentane
2-metilpentán

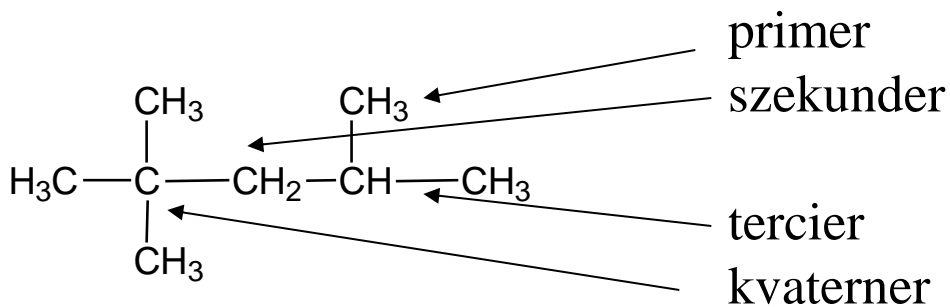


-Dimethylbutane
3-dimetilbután

Szénatomok rendősége

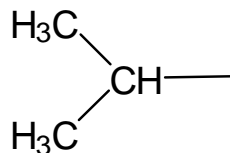
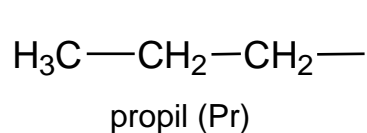
hány szomszédos **szénhez** kapcsolódik a vizsgált szén:

0 ⇒ metán, 1, 2, 3, maximum 4

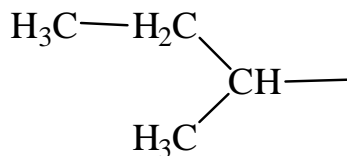
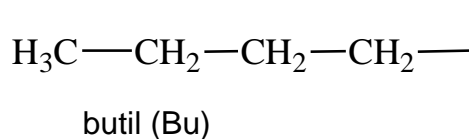


2,2,4-Trimethylpentane
2,2,4-trimetilpentán

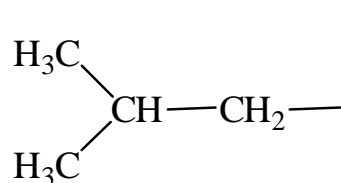
Egyértékű és többértékű csoportnevek



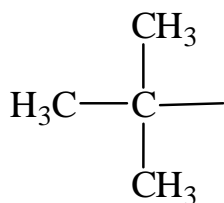
izopropil (i-Pr vagy iso-Pr)



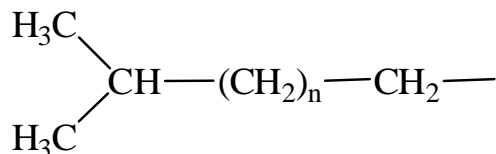
szek-butil (s-Bu vagy sec-Bu)



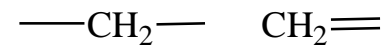
izobutil (i-Bu vagy iso-Bu)



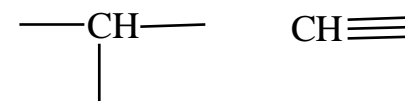
terc-butil (t-Bu vagy terc-Bu)



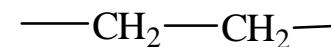
az izoalkil a C5 vagy annál rövidebb esetekben szabályos



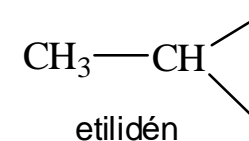
metilén



metin



etilén



Egy szerves molekula IUPAC elnevezésének elemi lépései:

- 1) Határozzuk meg az **alap** szénhidrogénláncot (a leghosszabb, folytonos szénatomok láncolata),
- 2) Azonosítsuk a **funkciós csoportokat** (figyeljünk a funkciós csoportok prioritására)
- 3) Határozzuk meg a funkciós csoport(ok) **pozícióját**.

- Számozzuk meg az alaplánc szénatomjait.

- Minden funkciós csoportnak a **lehető legkisebb számot** kell kapnia.

memo: Az oldalláncok számai a lehető legkisebbek, pl.: helyes a 2,2,5-trimetilhexán,rossza a 2,5,5-trimetilhexán.

- Írjuk a számot a funkciós csoportot jelölő utótag elé (pl. **-ol, -on, -al stb.**).

- 4) **Azonosítsuk** az oldalláncokat, majd **számozzuk** meg azokat.

- Ha azonosból több van, akkor használjuk a di-, tri-, tetra,... előtagot.

- Ha ugyanazon szénatomhoz két oldallánc kapcsolódik, akkor a számot kétszer írjuk le.

- Az oldalláncokat **abc-sorrendben** soroljuk, (a di-,tri- stb. előtagok nem számít a besorolásnál.)

memo: **etil** a **dimetil** előtt áll, mivel a „di”-t figyelmen kívül hagyjuk.

- 5) Azonosítsuk a többszörös kötéseket, majd számozzuk meg azokat (pl. 3-én, 4-in). –

- 6) Használjuk az **írásjeleket**:

- számok közé tegyünk vesszőt (pl. 2,5,5)

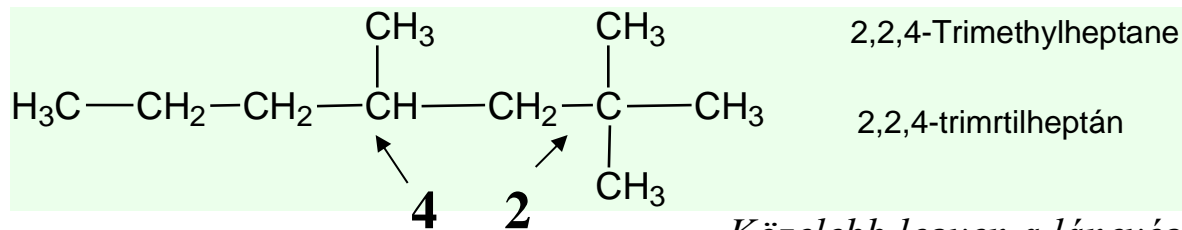
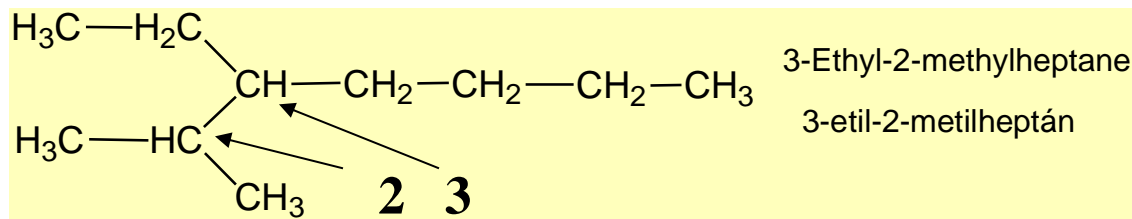
- számok és betűk közé tegyünk kötőjelet (2,5,5-trimetilhexán)

- az egymást követő szavak egybeírandók (pl. trimetilhexán)

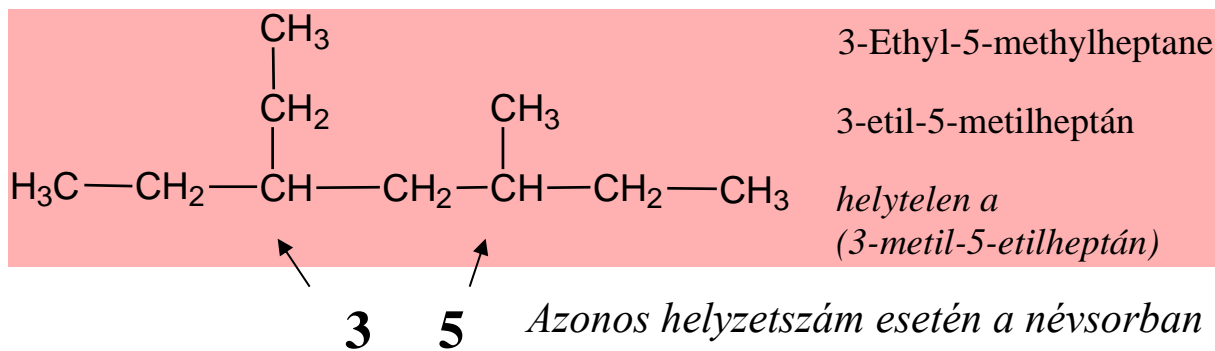
memo: a IUPAC egyszavas neveket használ: a név minden tagja össze van kötve.

Példák az alkánok elnevezésére:

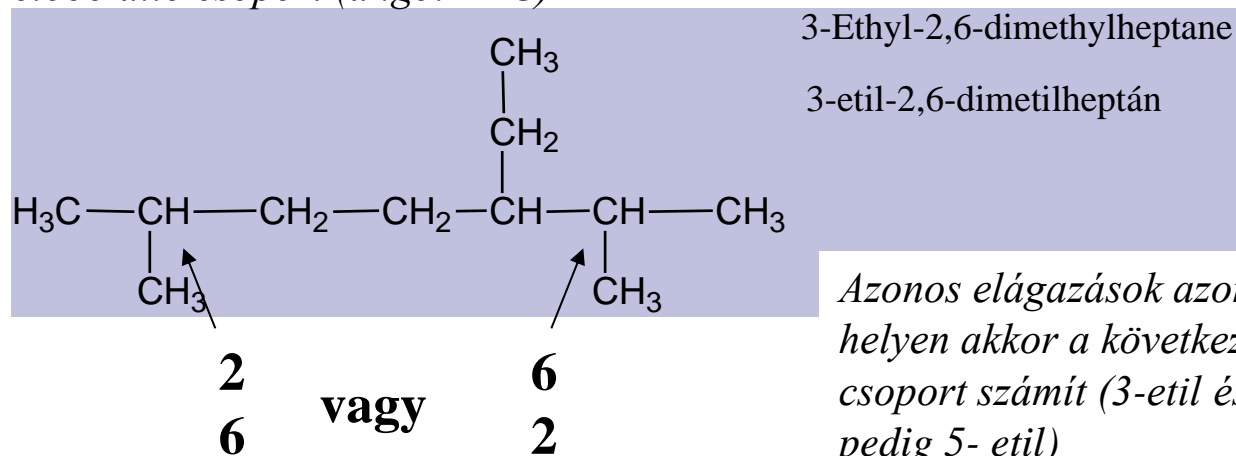
nev.gyak.



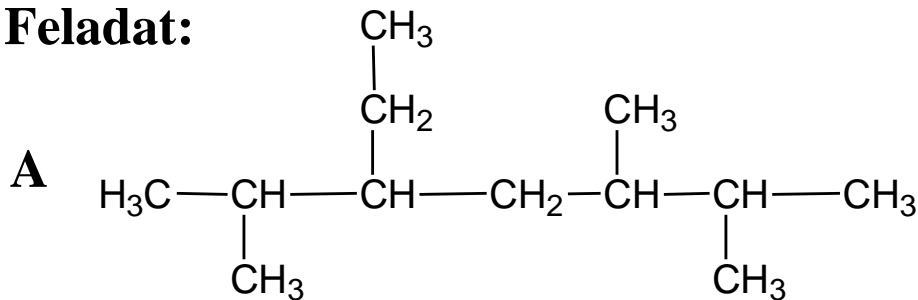
Közelebb legyen a láncvéghez az elágazás (kisebb szám) nem 6,6,4 vagy 4,6,6



Azonos helyzetszám esetén a névsorban előbb álló csoport (angol ABC)

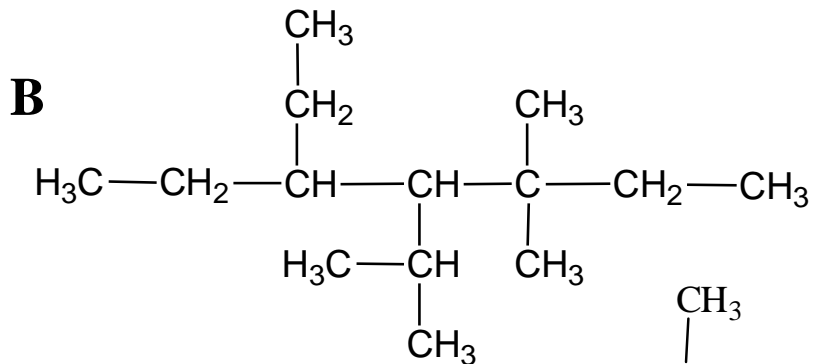


Azonos elágazások azonos helyen akkor a következő csoport számít (3-etil és nem pedig 5- etil)

Feladat:

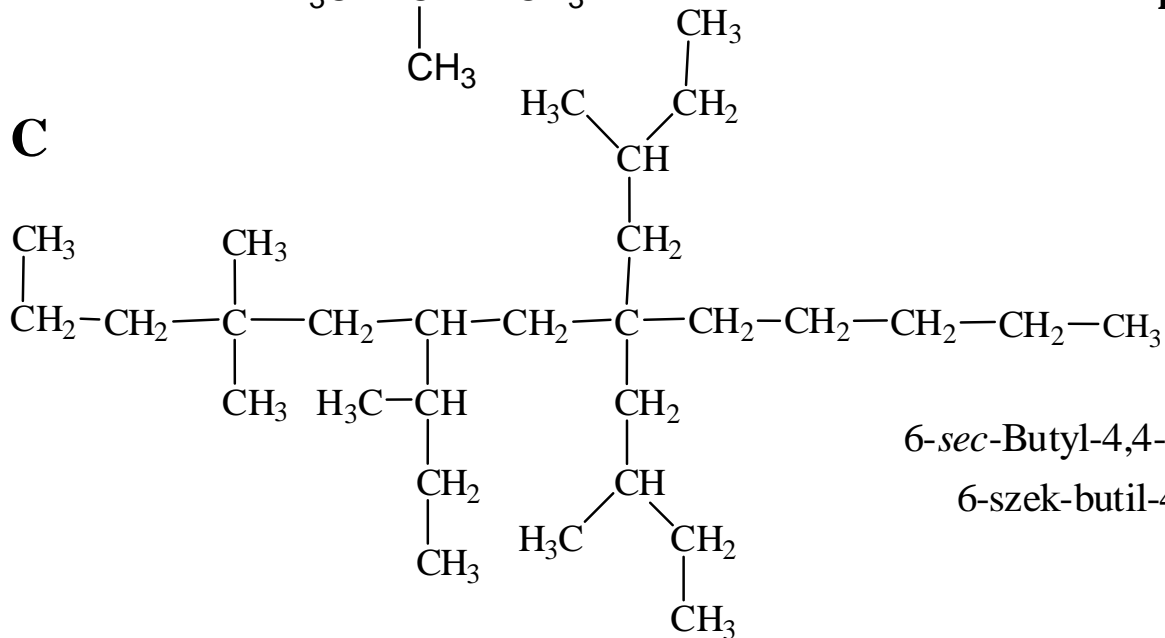
3-Ethyl-2,5,6-trimethylheptane

3-etil-2,5,6-trimetilheptán



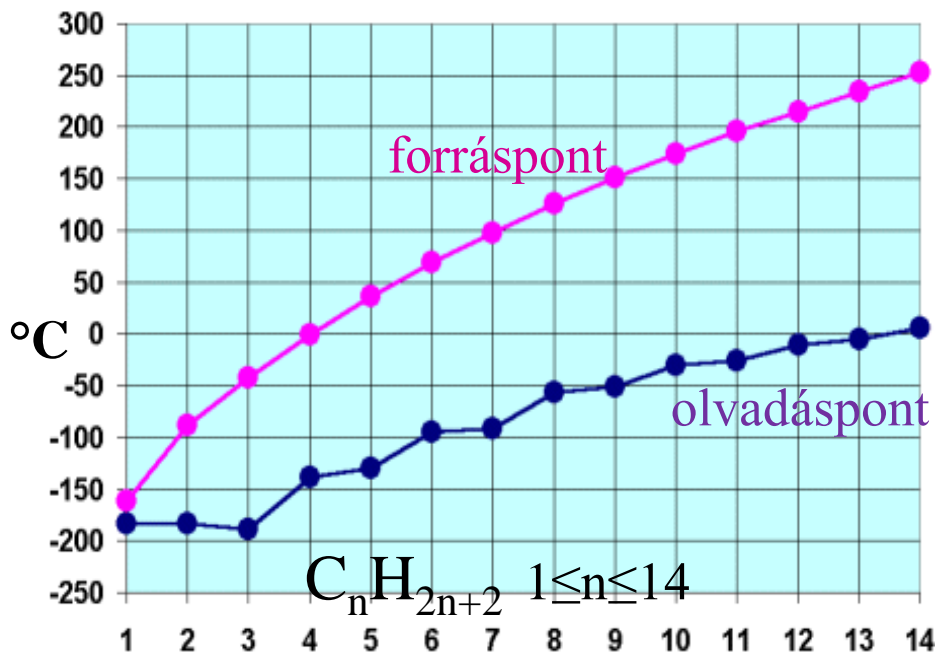
3-Ethyl-4-isopropyl-5,5-dimethylheptane

3-etil-4-izopropil-5,5-dimetilheptán

memo: a di- sokszorozó tag nem számít6-*sec*-Butyl-4,4-dimethyl-8,8-bis-(2-methyl-butyl)-tridecane

6-szek-butil-4,4-dimetil-8,8-bisz(2'-metil-butil)-tridekán

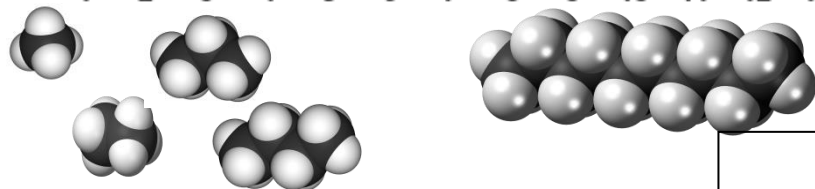
Alkánok és cikloalkánok olvadás és forráspontja



- Az alkánok **felületének nagysága** határozza meg azok **forráspontját**:

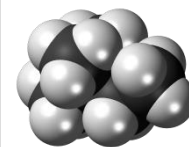
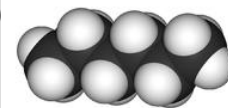
- minél kisebb a felületük annál alacsonyabb a forráspontjuk,
- mivel ilyenkor a *van der Waals* erők a molekulák között gyengébbek.

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



- A felület **elágazó szénláncú-** vagy cikloalkánok esetében kisebb lehet, ami **forráspontcsökkenés**hez 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 esetében.

- 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 olvadás ($-182,6^{\circ}\text{C}$) és forráspontja (-162°C) alacsony.

kérdés: miért?

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

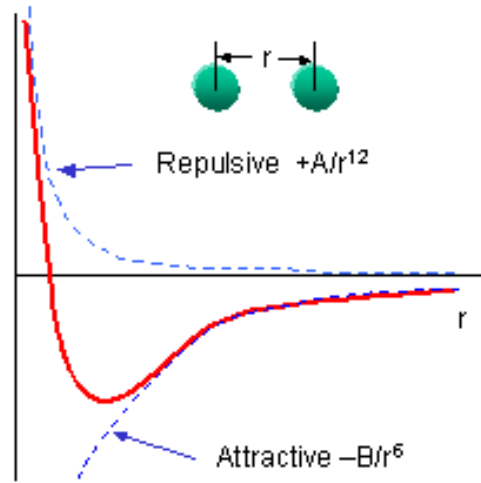
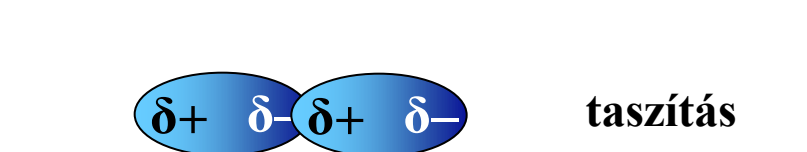
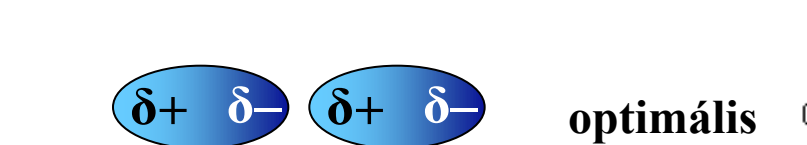
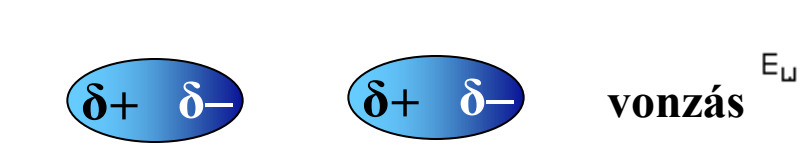
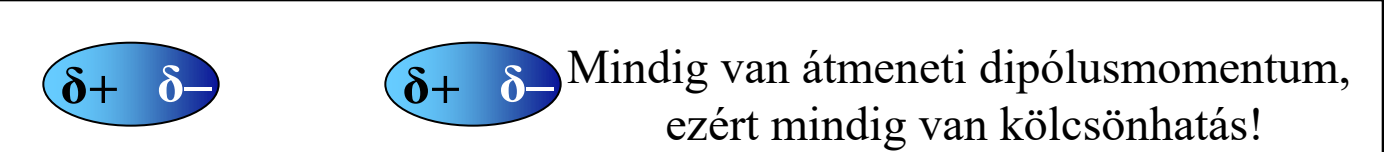
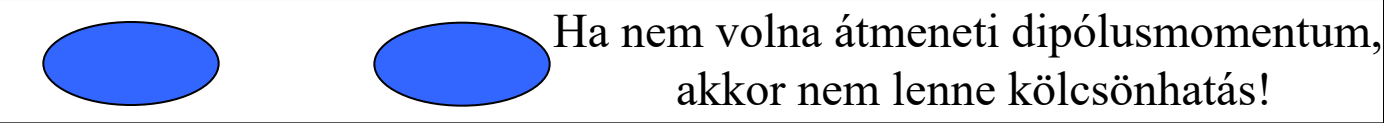
magyarázat: alkánok esetén a töltéseloszlás időátlagban zéró, ezért **nincs permanens dipóljuk** ($\mu=0$).

Az elektronok mozgása miatt, egy adott pillanatban viszont van töltésszeparáció:

tehát létezik ekkor is **átmeneti dipólmomentum**.

A tranziens polarizáció eredménye:

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



Johannes Diderik van der Waals
(holland, 1837-1923)
Fizikai Nobel-díj: 1910

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

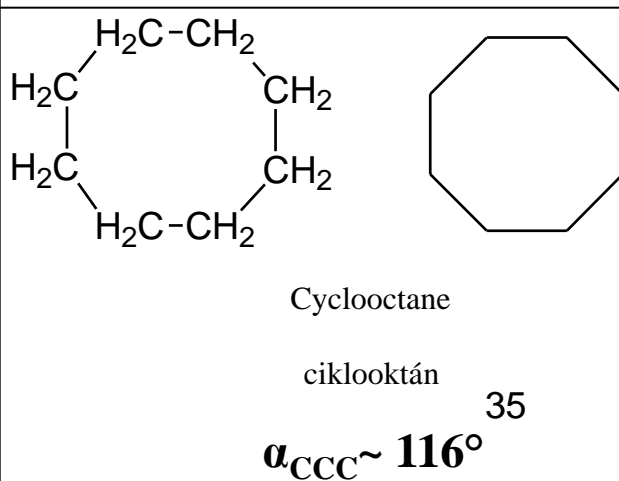
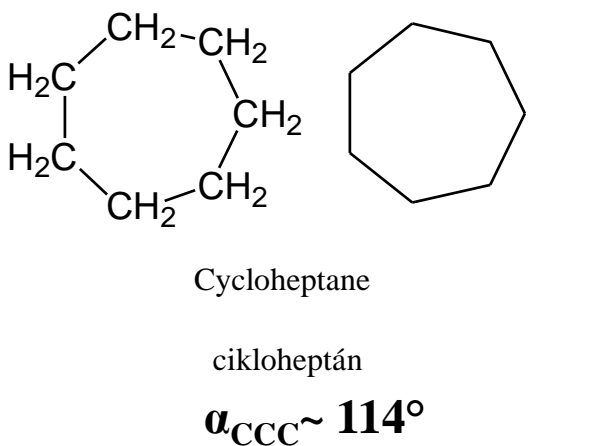
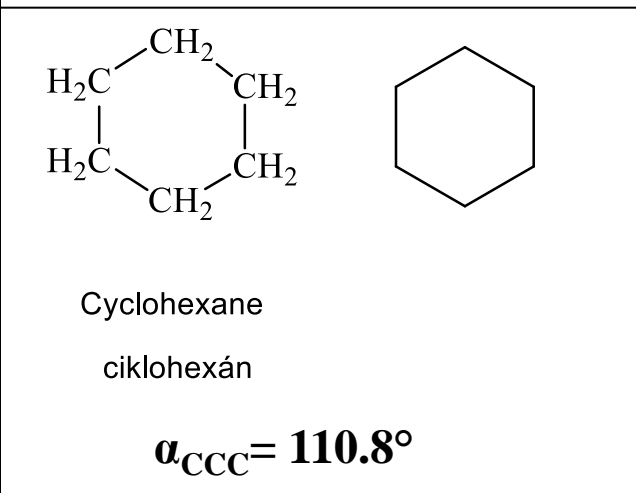
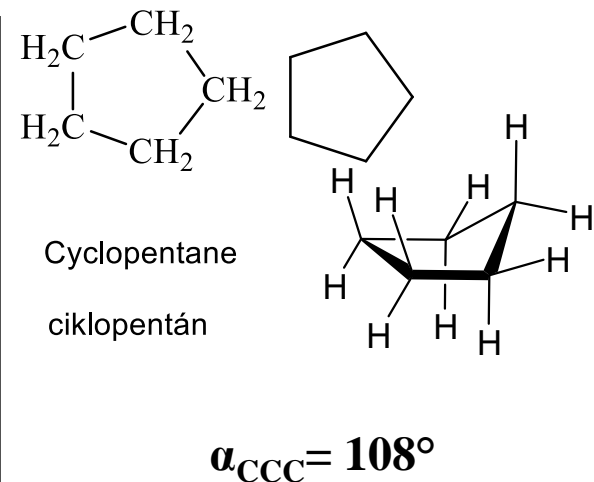
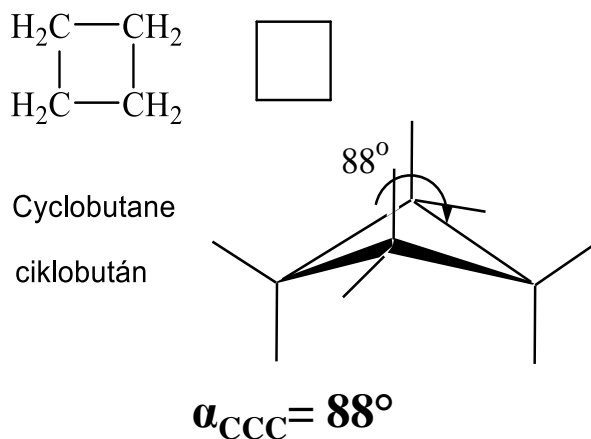
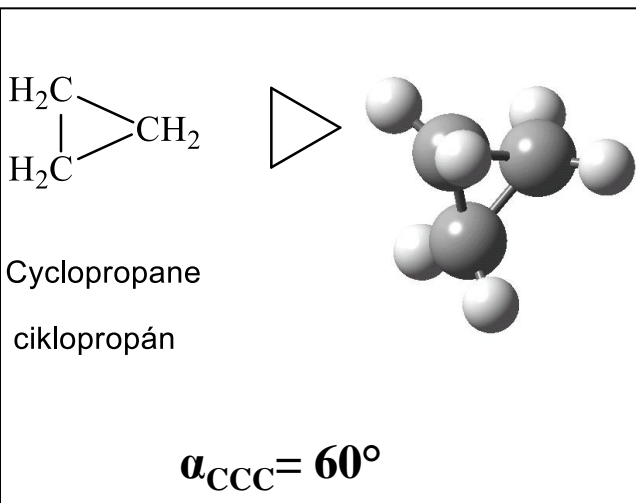
2. Cikloalkánok cikloparafinok (C_nH_{2n})

típusnév: cikloalkán

2/A Elágazásmentes egygyűrűs cikloalkánok

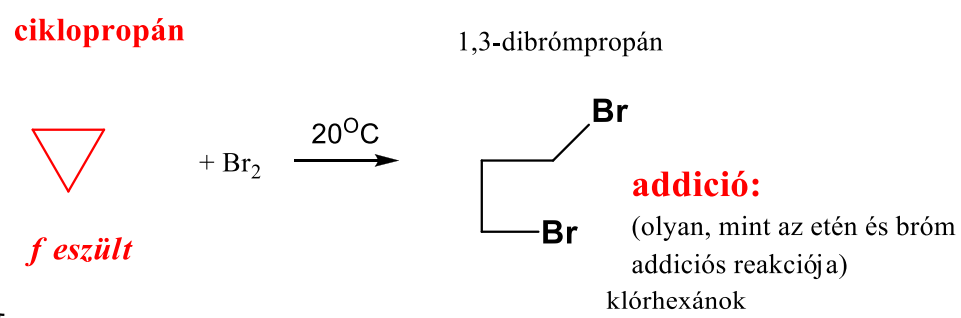
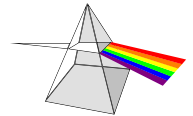
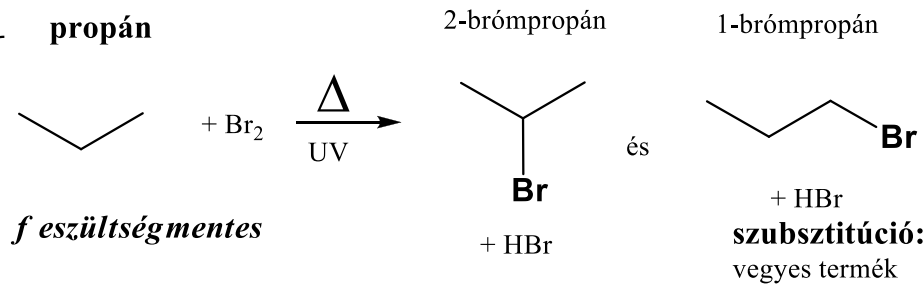
homológ sor („-án” végződés)

konformációs feszültség a gyűrű tagszám függvényében



Cikloalkánok gyűrűfeszültsége és reaktivitása

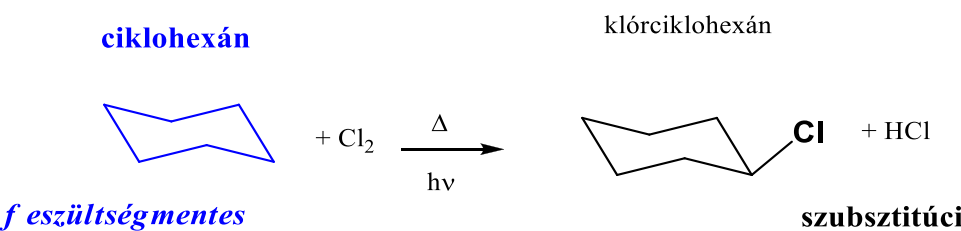
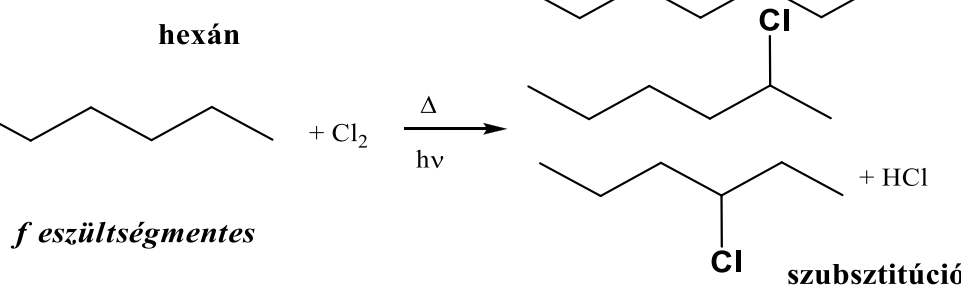
C₃



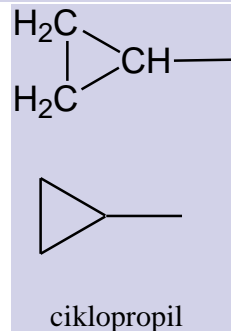
memo: van aki ezért a ciklopropil gyűrűt pseudo-kettőskötésként emlegeti

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

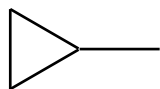
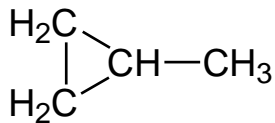
C₆



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

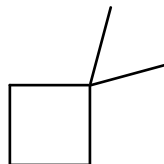
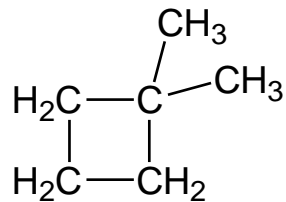


2/B Oldalláncot tartalmazó egygyűrűs cikloalkánok



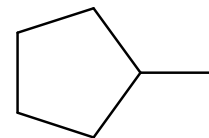
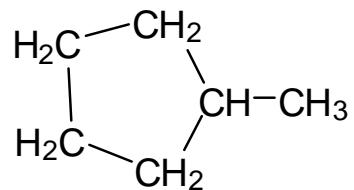
Methylcyclopropane

metilciklopropán



1,1-Dimethylcyclobutane

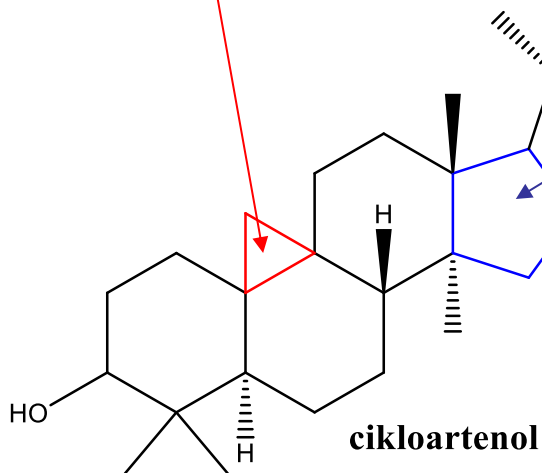
1,1-dimetilciklobután



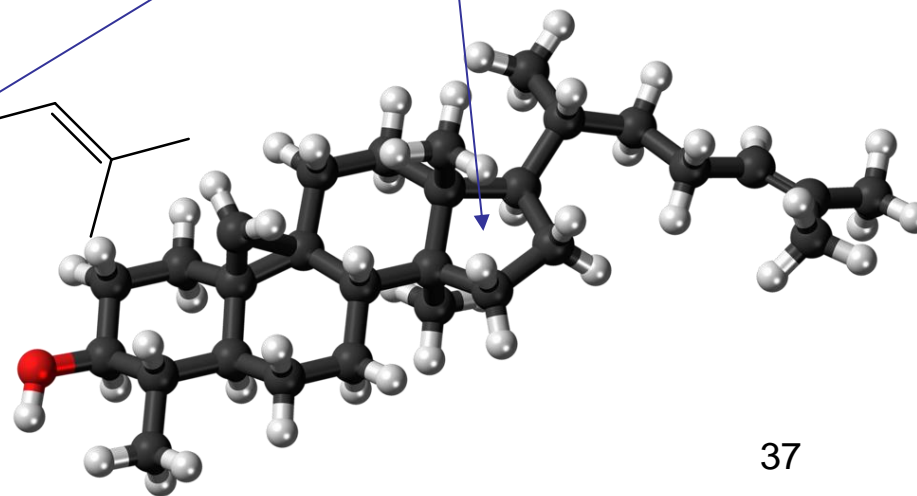
Methylcyclopentane

metilciklopentán

Példa:
szteroidok
bioszintézise
növényekben
szkvalénből
izolálható
intermedier



cikloartenol

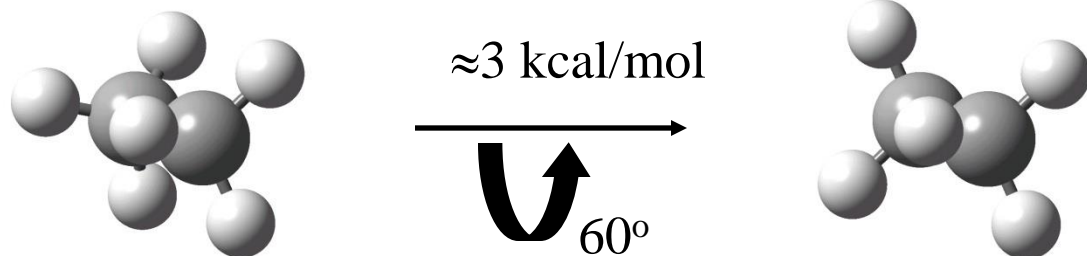


Konstitúció: szerkezeti izoméria

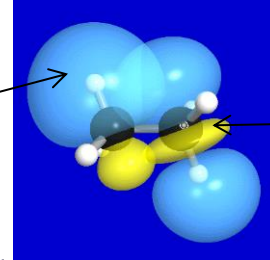
(bután, izobután esete)

Konformáció: egymásba alakuló lehetséges térakatok

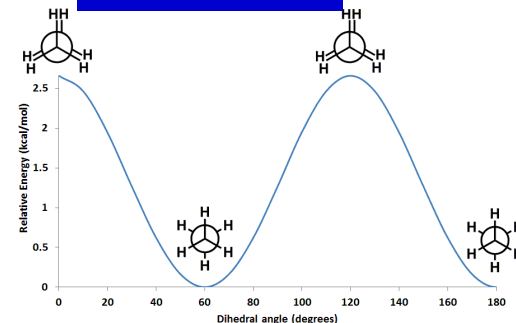
1) etán fedő térállás, etán nyitott térállás



a C-H
kötő MO-ja

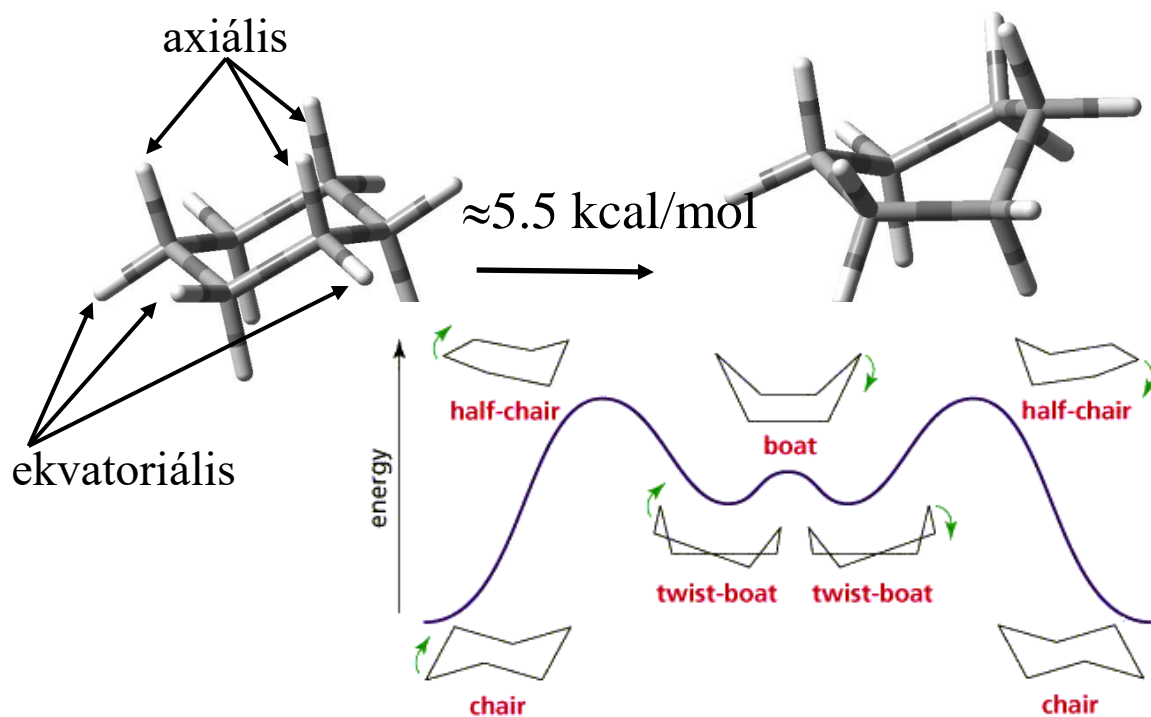


C-H
lazító
MO-ja



hiperkonjugáció mértéke változik a torziósszög függvényében

2) A ciklohexán szék és csavart kád térállása:

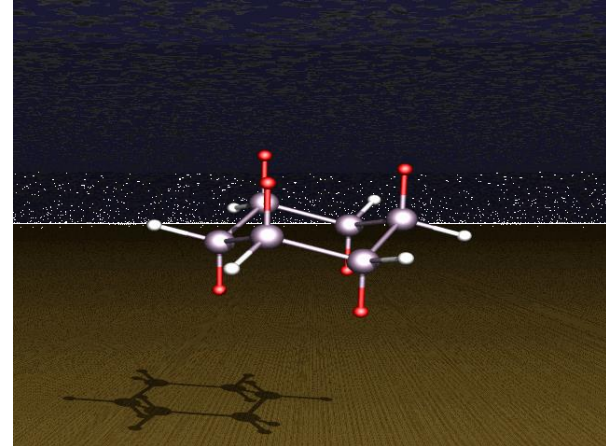


memo:

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

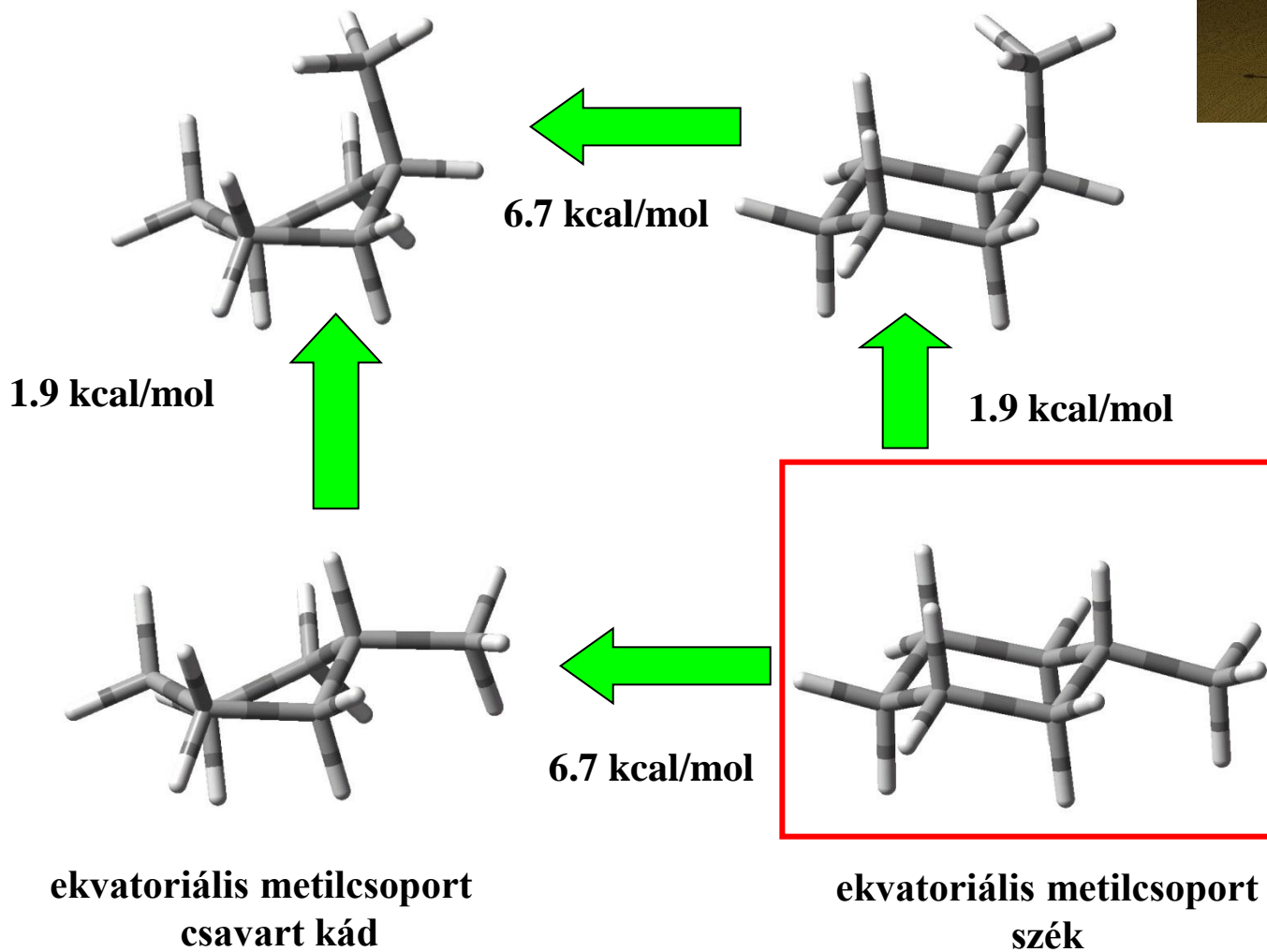
energia minimum: szék és a csavart kád térállások
átmeneti állapot: félszék (5 atom egy síkban) és a kád téralkatok

Térszerkezet (konformáció): *a metilciklohexán konformációja*



axiális metilsoport
csavart kád

axiális metilsoport
szék



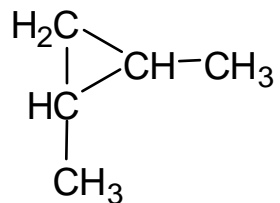
memo: a nagy
térgényű
szubsztituensek az
ekvatoriális pozícióban
általában stabilabbak
mint ha axiális
helyzetben volnának.

Diszubsztituált cikloalkánok: (bővebben lásd a konformációs fejezetet)

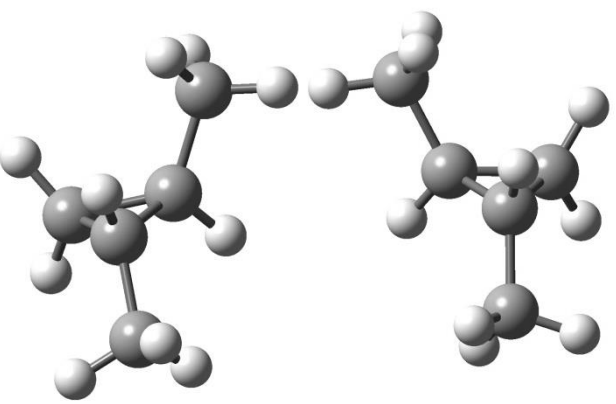
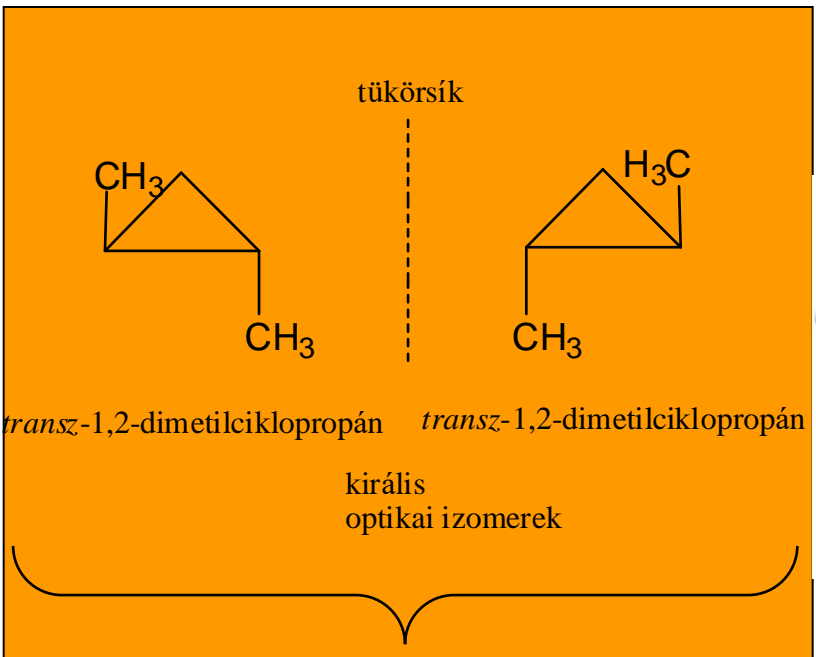
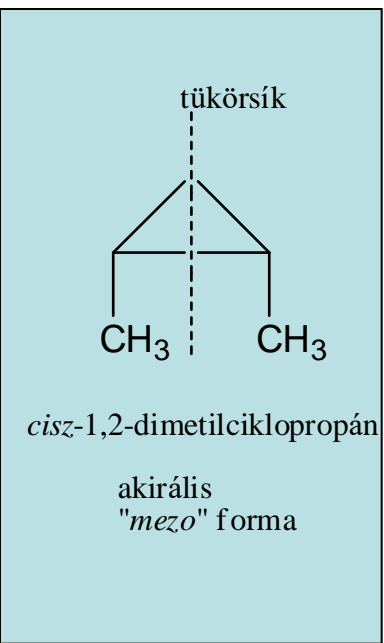
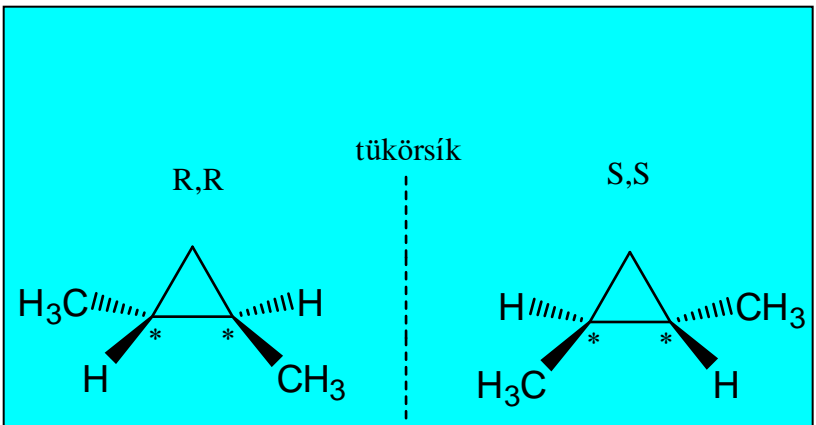
Kérdés: hány 1,2-dimetilciklopropán létezik?

Válasz: 3 sztereoizomer különíthető el

Eliel 405



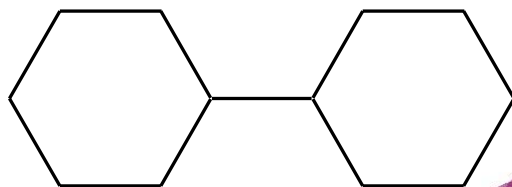
1,2-Dimethylcyclopropane
1,2-dimetilciklopropán



enantiomer pár

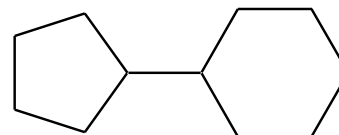
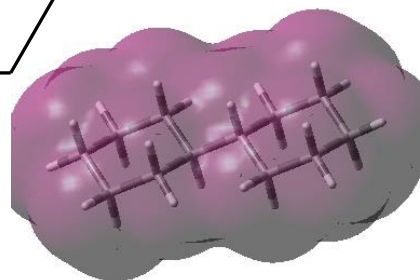
3. Többgyűrűs telített szénhidrogének

3/A Izolált gyűrűket tartalmazó szénhidrogének



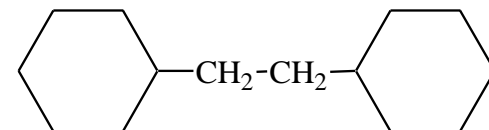
Bicyclohexyl

biciklohexil



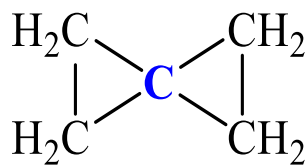
Cyclopentylcyclohexane

ciklopentilciklohexán



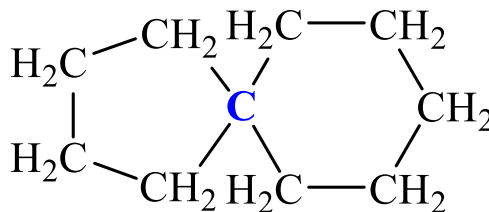
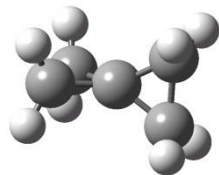
1,2-diciklohexiletán

3/B Kétgyűrűs rendszerek egy közös szénatommal (spiránok)



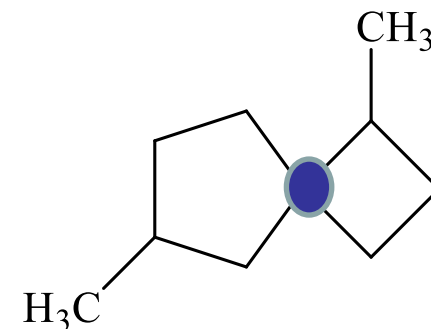
Spiro[2.2]pentane

spiro[2.2]pentán



Spiro[4.5]decane

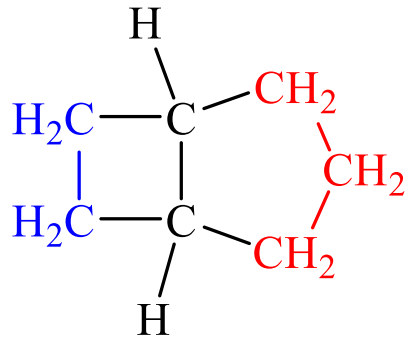
spiro[4.5]dekán



1,6-Dimethylspiro[3.4]oktán

1,6-dimetilspiro[3.4]oktán

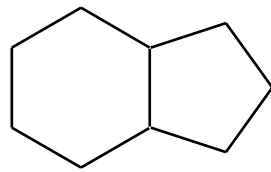
3/C Kétgyűrűs rendszerek két közös szénatommal



Bicyclo[3.2.0]heptane

biciklo[3.2.0]heptán

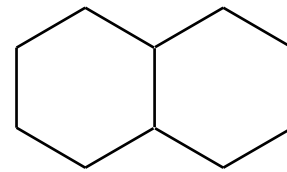
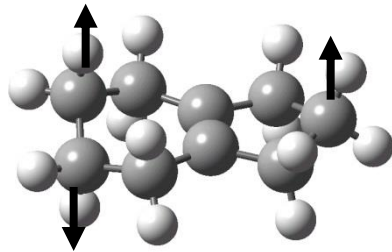
gyűrű anelláció



Octahydro-indene
biciklo[4.3.0]nonán

hidrindán

nem síkalkatú



Decahydro-naphthalene
biciklo[4.4.0]dekán

dekalin

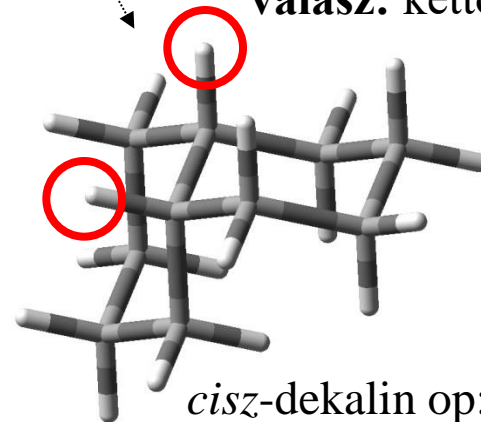
előzmény:

Baeyer (1885):
ciklohexán síkalkatú

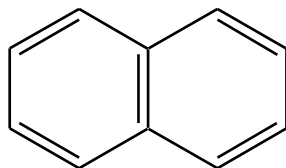
Mohr (1918):
ciklohexán szék-kád alkatú

kérdés: a dekalinnak hány
stereoizomerje van?

válasz: kettő

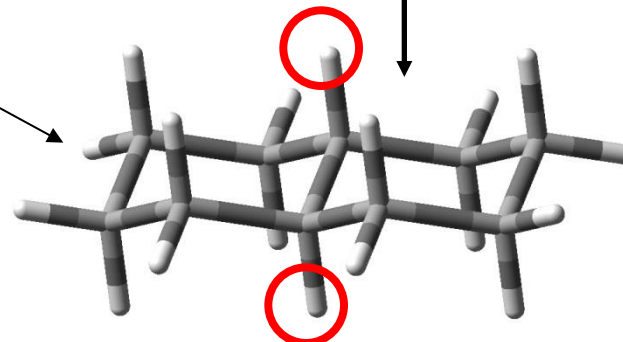


H_2/Pt
(CH_3COOH)

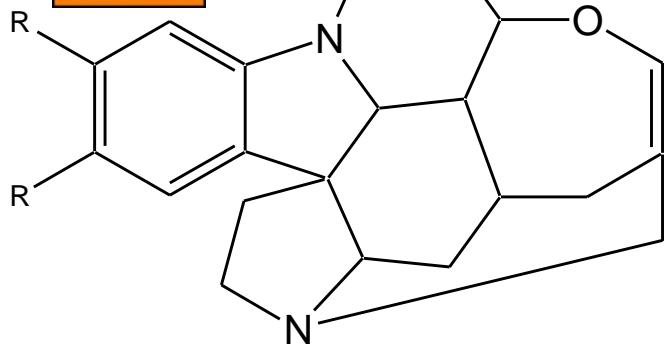


Naphthalene
naftalin
Hückel (1925)

H_2/Pt (gáz)



Érdekes kondenzáltgyűrűs rendszerek: a sztrichnin és a brucin



R=H sztrichnin

R=OCH₃ brucin

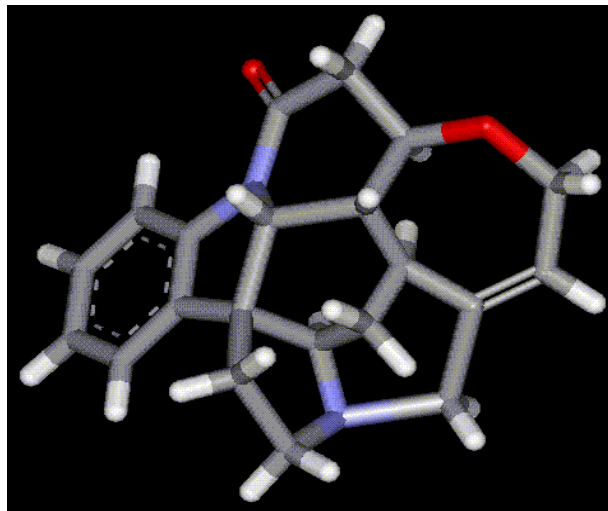
- hétgyűrűs molekula,
- bázisos kémhatás,
- tercier amin,
- reszolválás (savakat)

eredet: növényi cserje (*Strychnos* faj)

Pelletier és Caventou (1819)

fiziológiás hatás:

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



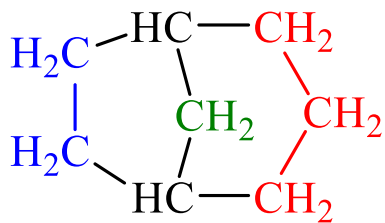
Bruckner : III-2/1002



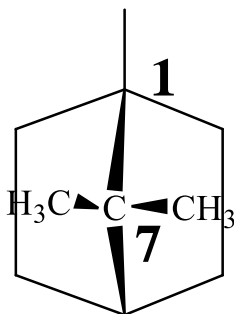
Strychnos nux-vomica)
dél-kelet Ázsiában honos,
örökzöld fafélé

az egész testre kiterjedő heves görcsroham, majd merev görcs (tonikus görcs) következik, mely alatt az izmok fakeménységűen összehúzódnak, főképp a borda közti izmok, amik a légzésben fontos szerepet játszanak

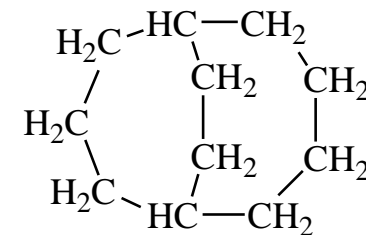
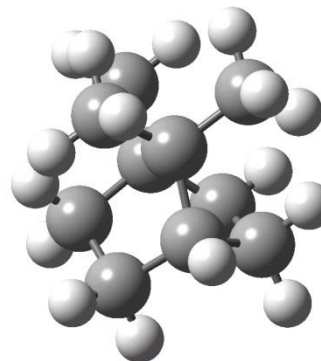
3/D Áthidalt gyűrűs rendszerek



Bicyclo[3.2.1]octane
biciklo[3.2.1]oktán

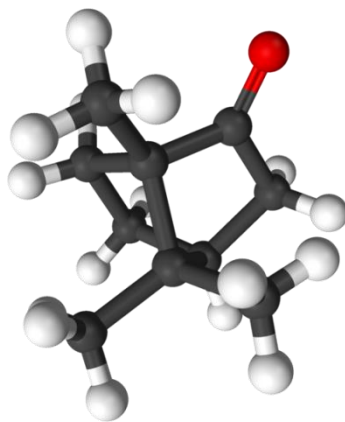
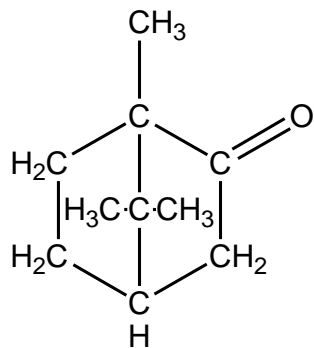


1,7,7-Trimethyl-bicyclo[2.2.1]heptane
1,7,7-trimetil-biciklo[2.2.1]heptán



Bicyclo[4.3.2]undecane
biciklo[4.3.2]undekán

Példa: a kámfor (op 175°C, fp, 204°C)



Cinnamomum camphora
fás részéből nyerhető



kérdés: miért illan
el (szublimál) a
kámfor?

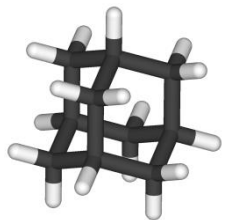


PLATE XXX.—*Cinnamomum camphora*. This laurel is the source of camphor, which is prepared from the chipped wood—distilled with steam. It is also prepared synthetically. (From Jackson: *Experimental Pharmacology and Materia Medica*.)

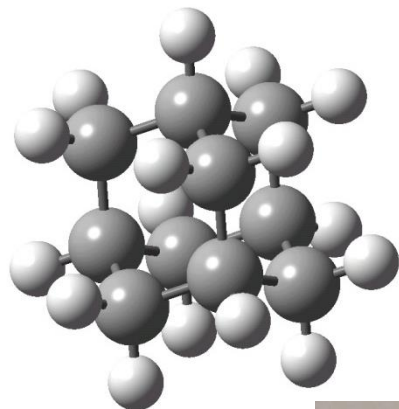
memo: a kámfor áttetsző, viaszos, szilárd kristályos anyag, erős és átható aromás illattal, helyi keringésfokozóként reumás kenőcsökben...

Példa:

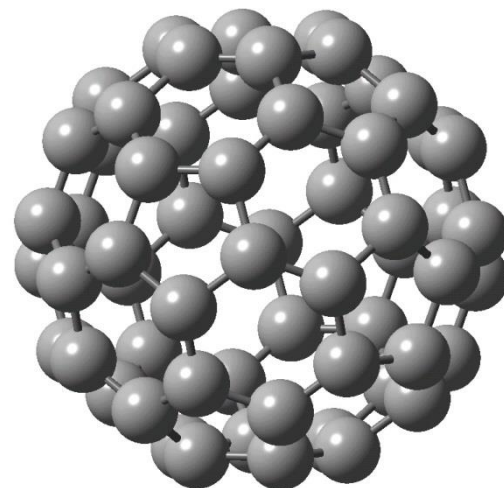
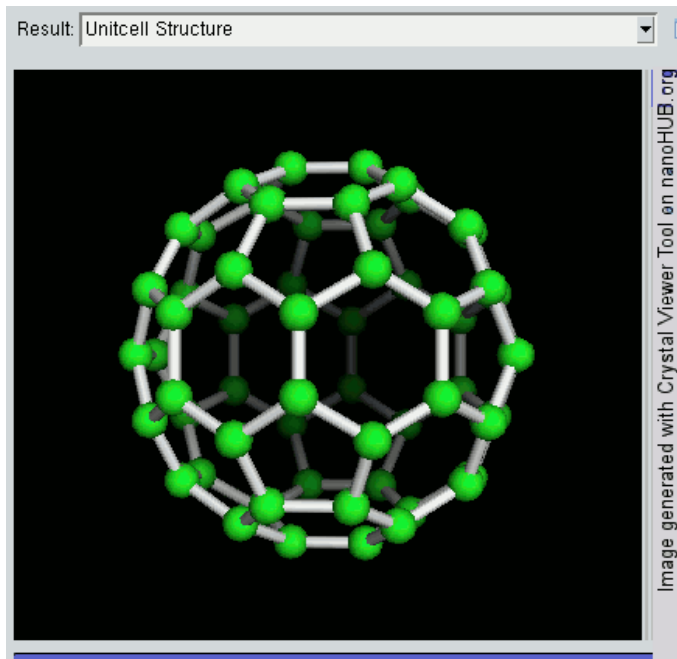
gyémántrács része



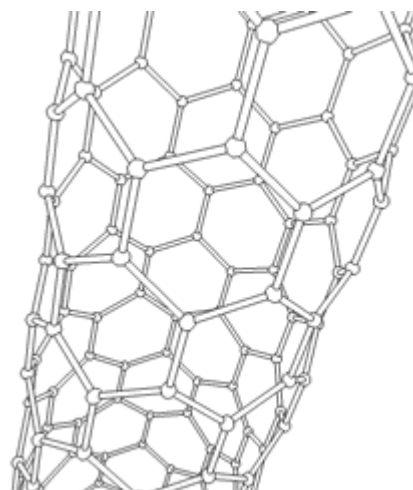
adamantán



fullerének



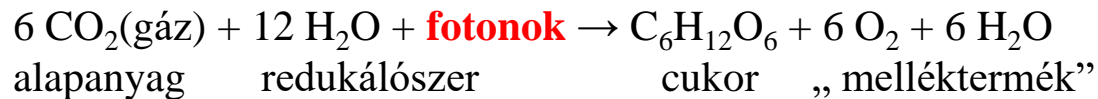
Fullerenes are not hydrocarbons, but consist of **carbon atoms only!** These compounds are composed solely of an even number of carbon atoms, which form a cage-like fused-ring polycyclic system with **12** five-membered rings and **the rest** six-membered rings. The archetypal example is **[60]fullerene**, where the atoms and bonds delineate a truncated icosahedron. The larger **[70]fullerene** is expanded by an additional ring of six-membered rings along the equator of its longer axis.



C₆₀

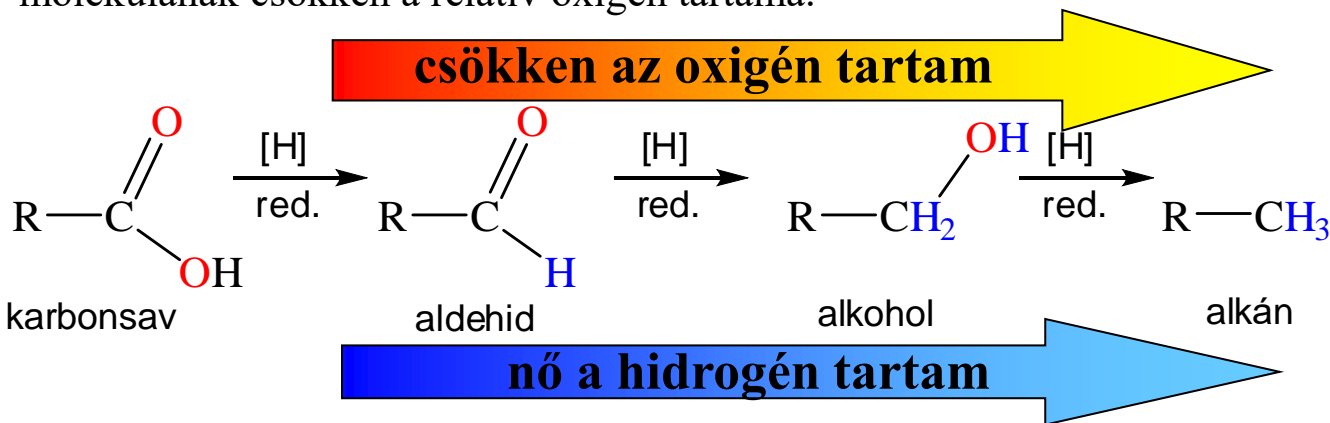
Oxidáció és redukció (a szerves kémiában):

Példa: a fotoszintézis



kérdés: mit jelent az hogy a víz redukálószer?

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



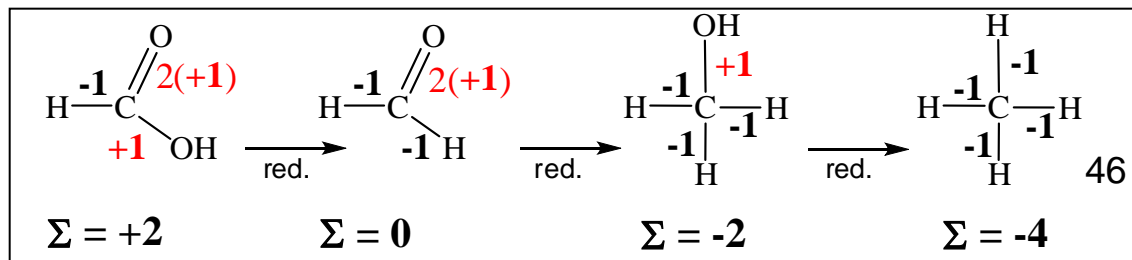
kérdés: hogyan tegyük kvantitatívá?

válasz: 1. keressük meg azt a szén atomot (C-t) amelyik (amelyek) oxidációs száma a reakcióhoz köthetően változik.

2. C-X kötés (-1) ha X e.-negativitása < C; pl. **C-H** kötés értéke **-1**
3. C-Y kötés (+1) ha Y e.-negativitása > C; pl. **C-F** kötés értéke **+1**
4. C-C kötés értéke **0**.

Egy példa redukcióna:

az oxidációs állapot egyre csökken:



példák: 1) rendezze a szén oxidációs állapota szerint **sorba** a következő vegyületeket:

CH₄, CO₂, metanol, hangyasav, formaldehid!



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

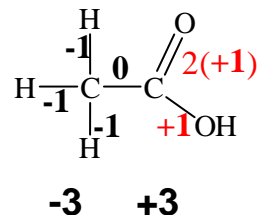
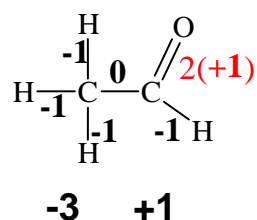
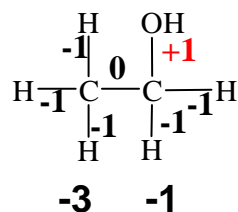
CH₃OH (-2) → HCOH (0) tehát: -2 → 0 ami oxidációt jelent hiszen az oxidációs állapot nő

memo: az előbbi oxidációt végezhetjük H₂CrO₄-el amiből Cr³⁺ lesz

[kromátanion CrO₄²⁻ (Cr⁶⁺) → kromit (Cr³⁺)]

tehát a Cr redukálódik +6 → +3.

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



memo: (elektronnegativitás)

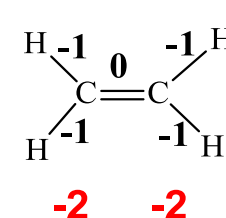
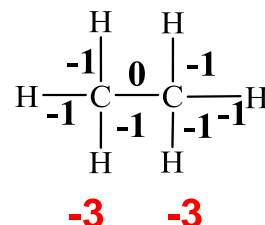
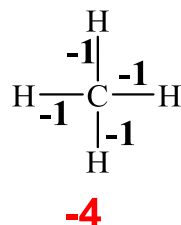
	2.1								-
K-héj	H								He
L-héj	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4		-

4) Mi is történik a fotoszintézis során?



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

5) Mi a szén ox.-állapota a metánban, az etánban és az eténben?

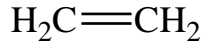


memo: az ox.-szám nő, a folyamat oxidáció, pedig nem jelenik meg O-atom a mol.-ban.

4. Alkének (olefinek) (C_nH_{2n}) típusnév: alkén

4/A Láncelágazástól mentes

homológ sor(„-én” végződés)



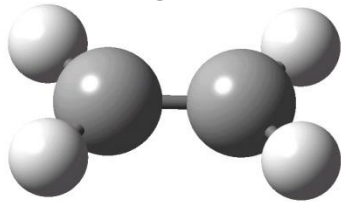
Ethene
etén
(etilén)



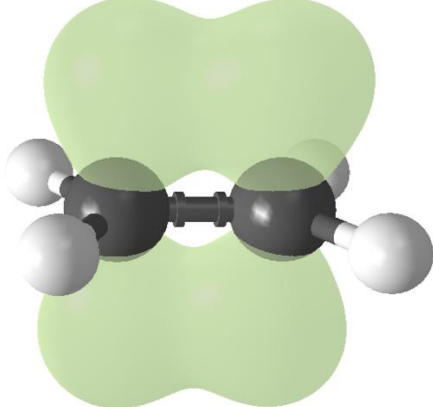
Propene
propén

(propilén)

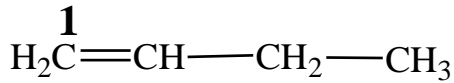
régi nevek



Az etén „szigma-váza”:
5 lokalizálható kötés

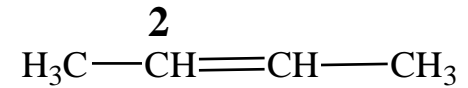


Az etén „π-pályája”:
1 delokalizált kötés



But-1-ene

but-1-én



But-2-ene

but-2-én

(2-butén)

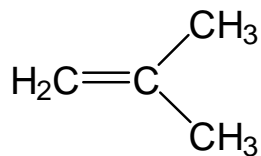


Pent-1-ene pent-1-én



Pent-2-ene pent-2-én

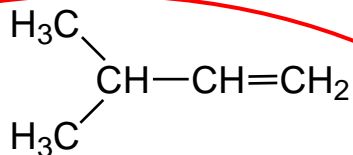
4/B Elágazó szénláncú alkének



Isobutylene

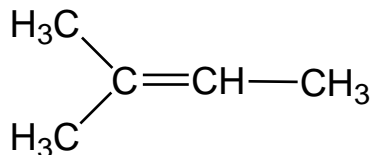
2-metilpropén

izobutilén



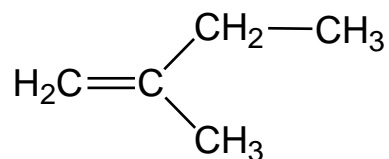
3-Methyl-but-1-ene

3-metilbut-1-én



2-Methyl-but-2-ene

2-metilbut-2-én

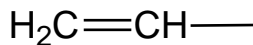


2-Methyl-but-1-ene

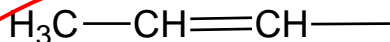
2-metilbut-1-én

szerkezeti izomerek

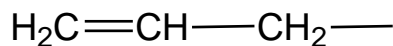
Csoportnevek („-il” végződés) ($\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$)



vinil

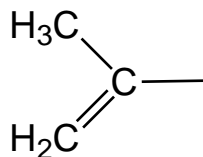


propenil



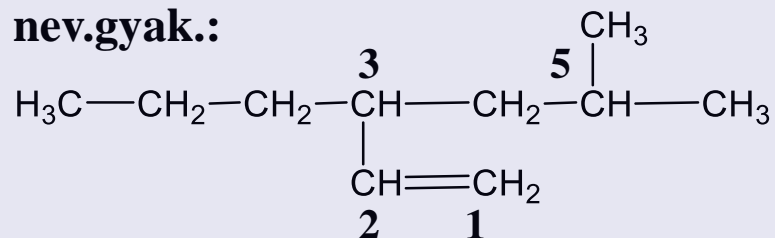
allil

szerkezeti izomerek



izopropenil

nev.gyak.:

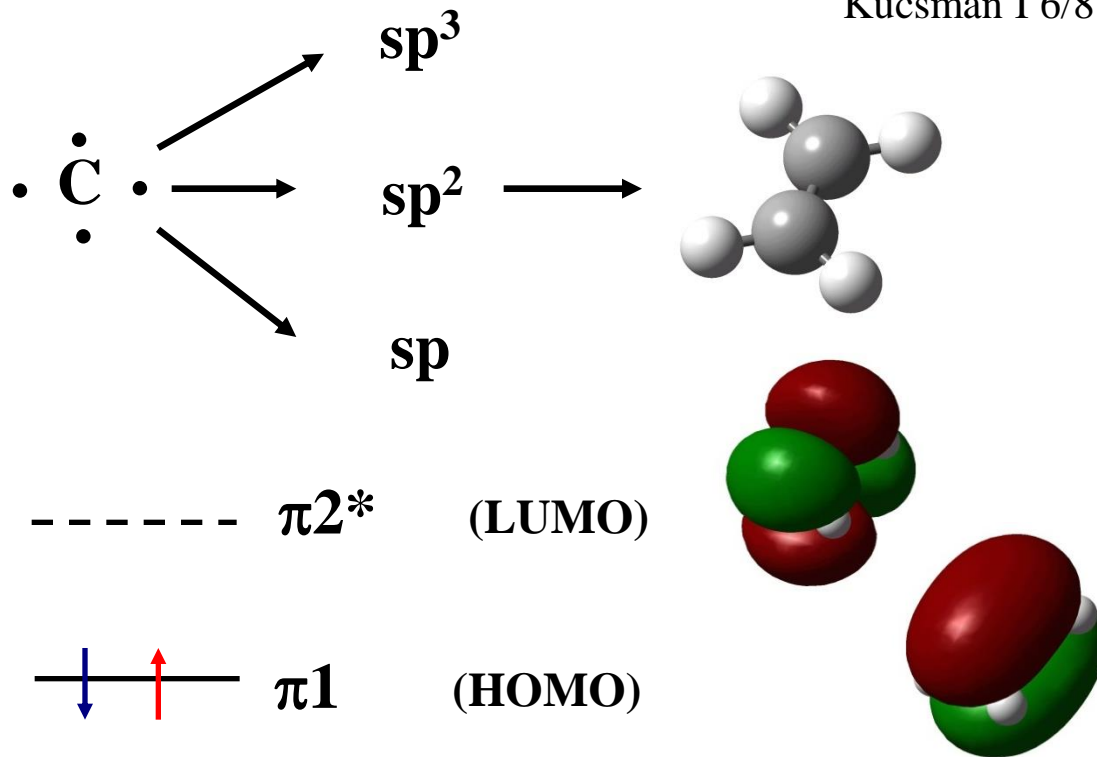


5-Methyl-3-propylhex-1-ene

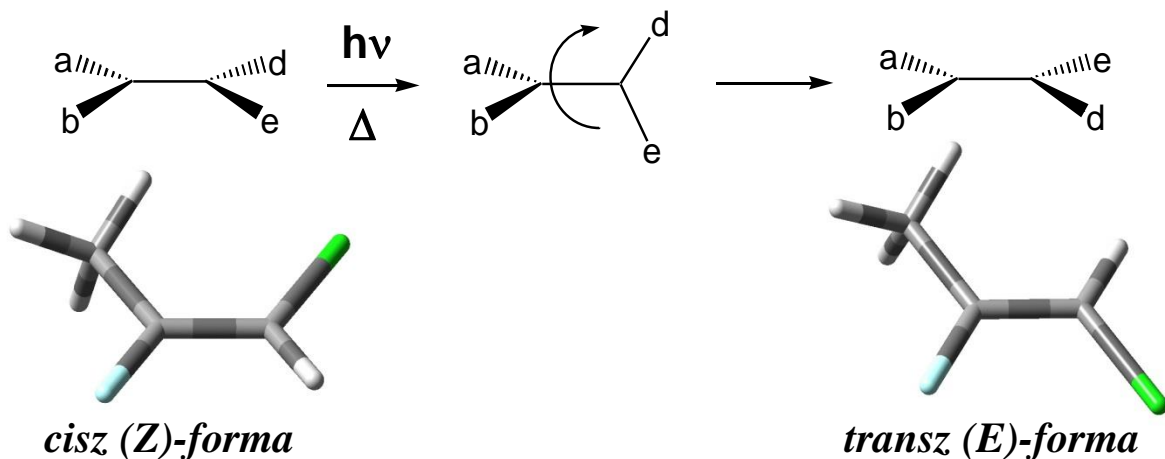
5-metil-3-propilhex-1-én

Az alkének (olefinek) elektronszerkezete

Kucsman I 6/8



Az olefinek geometriai izomériája (tér szerkezete): a *cisz-transz* izoméria



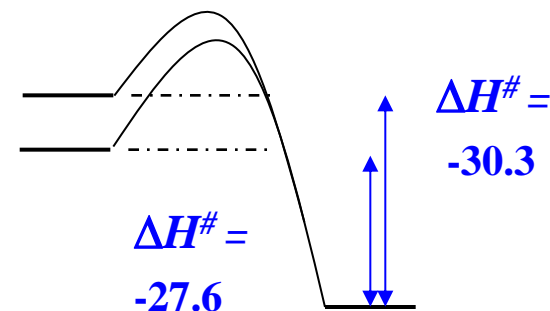
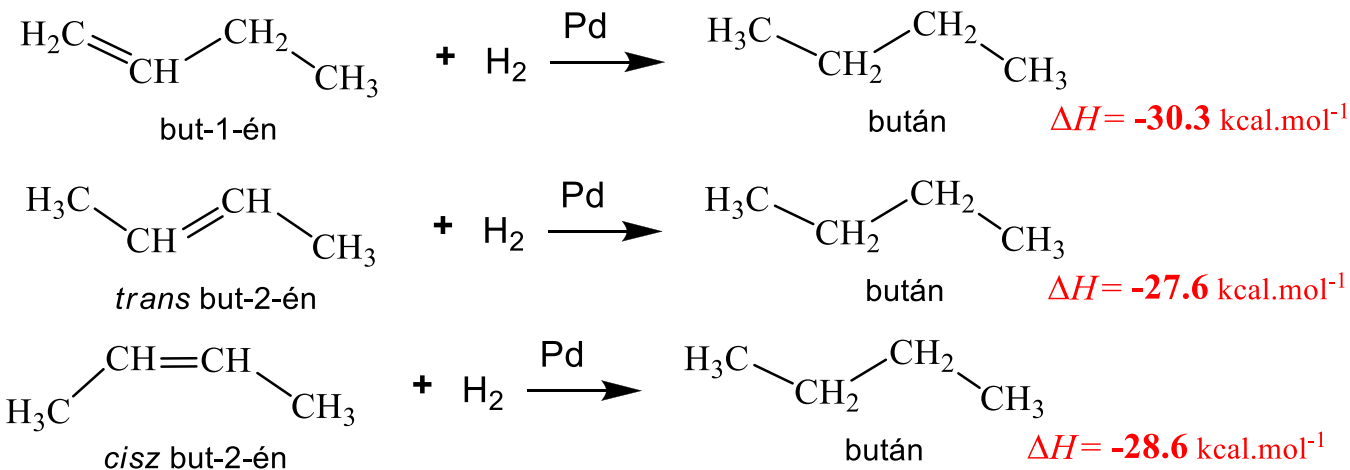
memo:

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

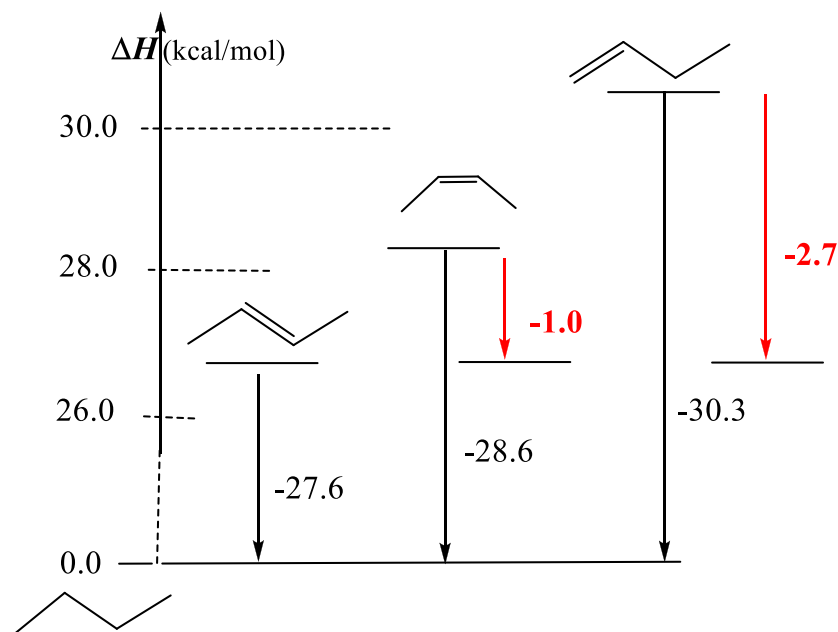
Alkének stabilitása:

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:

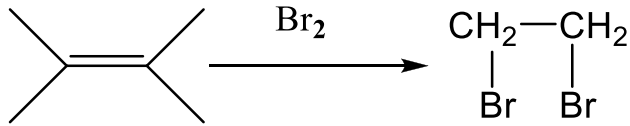


memo: minél **nagyobb** a hidrogénezési hő (a képződési entalpia), **annál instabilabb** volt a kiindulási alkén. Ebben az esetben tehát, a ΔH értékek alapján a *transz* but-2-én a legstabilabb, a *cisz* forma labilisabb (~1 kcal.mol⁻¹) és a but-1-én a leginstabilabb (~2.7 kcal.mol⁻¹) alkén.



Alkének kimutatása

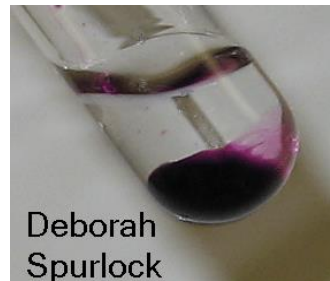
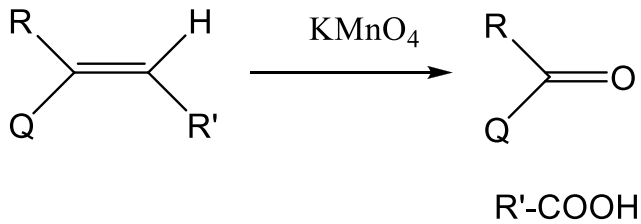
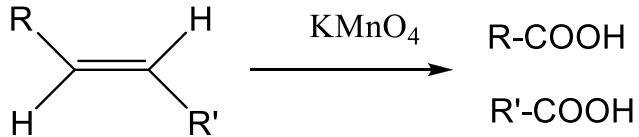
brómaddíció:



a brómos víz elszíntelenedik

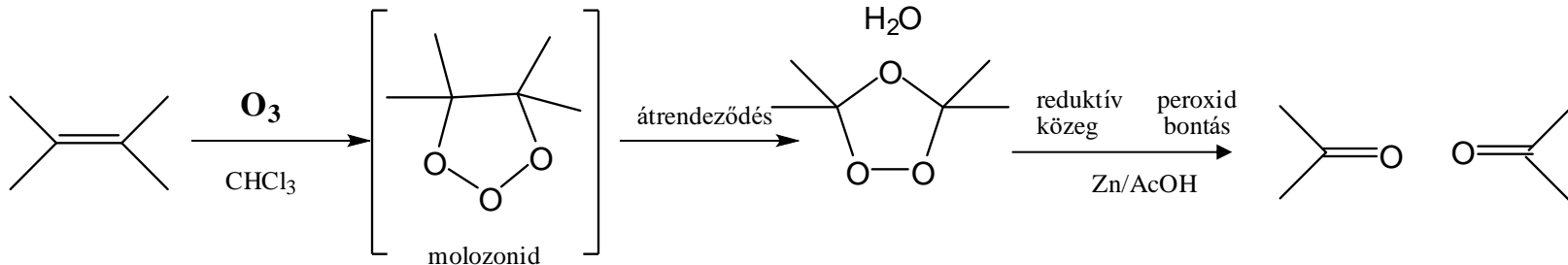
<https://www.youtube.com/watch?v=PE1CDR1S5pk>

permanganátos oxidáció:



az ibolya szín barnára vált

ozonolízis:



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

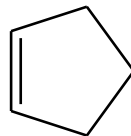
típusnév: cikloalkén



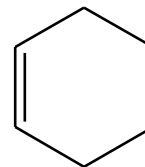
Cyclopropene
ciklopropén



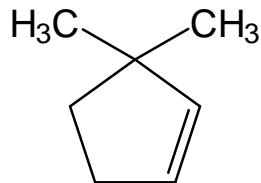
Cyclobutene
ciklobutén



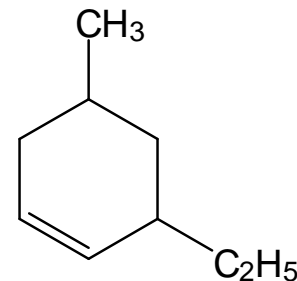
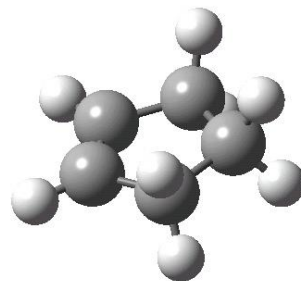
Cyclopentene
ciklopentén



Cyclohexene
ciklohexén

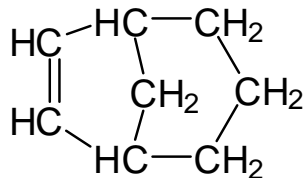


3,3-Dimethylcyclopent-1-en
3,3-dimetilciklopent-1-én

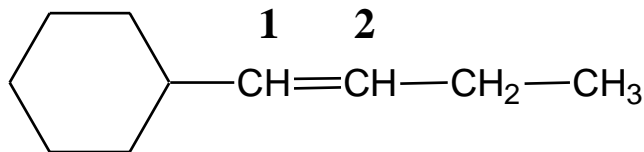


3-Ethyl-5-methylcyclohex-1-en
3-etil-5-metilciklohex-1-én

Bonyolultabb cikloalkánok (cikloparafinok)



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

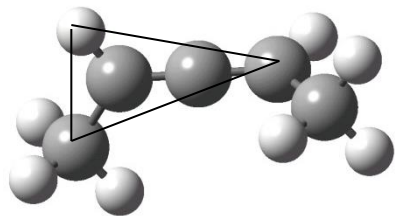


But-1-enyl-cyclohexane
1-ciklohexilbut-1-én

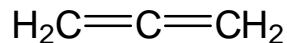
6. Két vagy több kettőskötést tartalmazó szénhidrogének (C_nH_{2n-2})

típusnév: alkadién, alkapolién

6/A1 kumulált diének



5 atom egy síkban

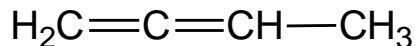


allene

allén

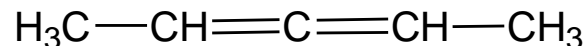
Propa-1,2-diene

propa-1,2-dién



Buta-1,2-diene

buta-1,2-dién

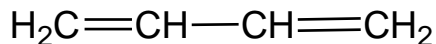


Penta-2,3-diene

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.

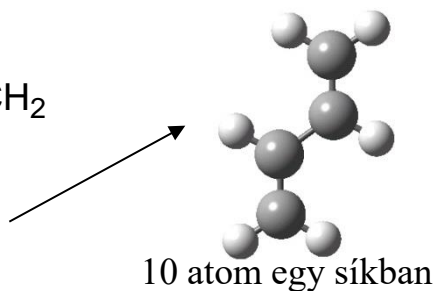


Buta-1,3-diene

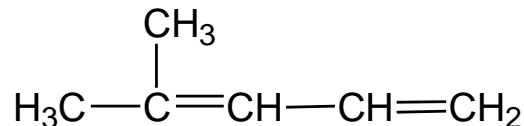
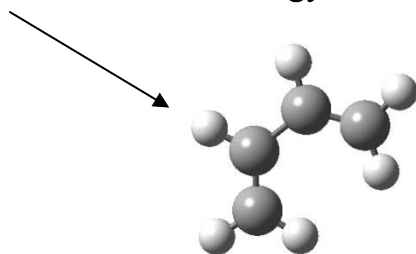
buta-1,3-dién

butadiene

butadién

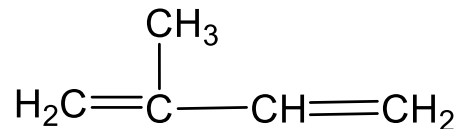


10 atom egy síkban



4-Methyl-penta-1,3-diene

4-metilpenta-1,3-dién



2-Methyl-buta-1,3-diene

2-metilbuta-1,3-dién

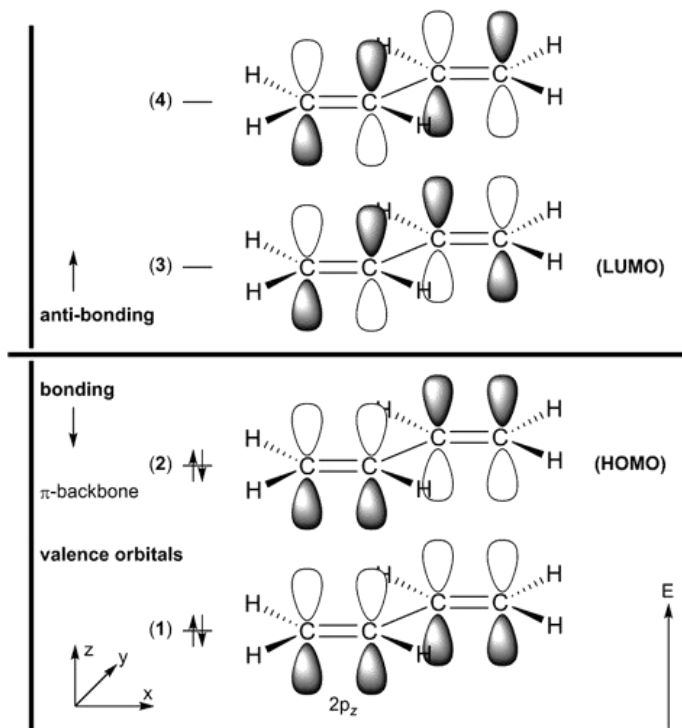
isoprene **izoprén**

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

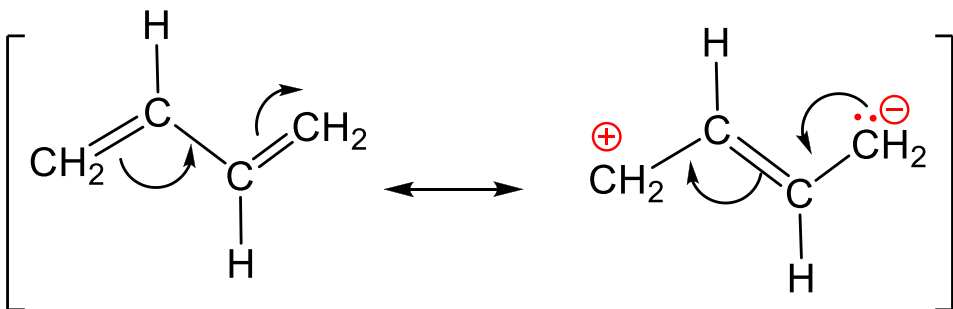
buta-1,3-dién

Elektronszerkezet:

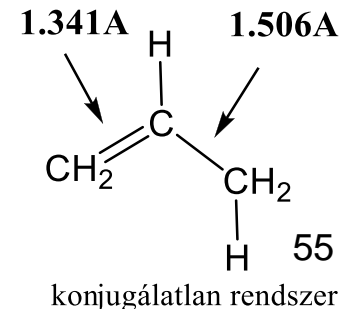
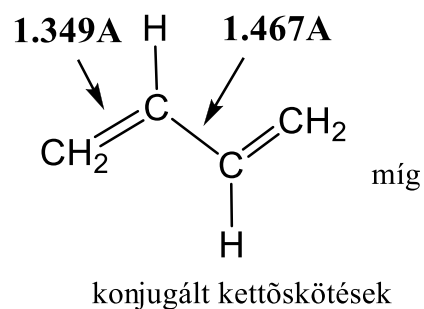
konjugáció



Határszerkezetek: konjugáció



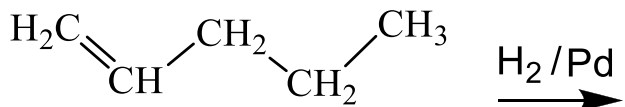
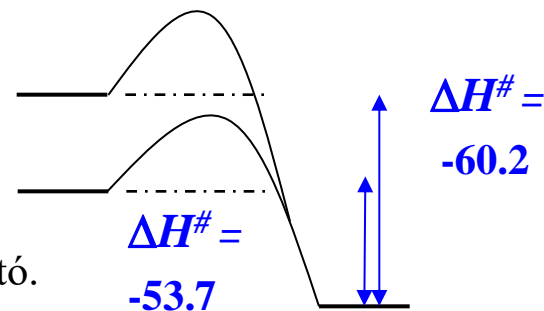
Kötéshosszak: konjugáció



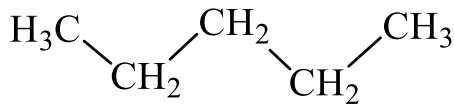
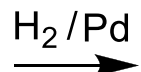
Alkadiének stabilitása:

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 úton kvantifikálható.

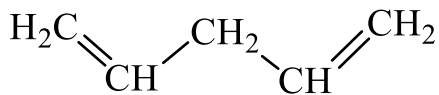


pent-1-én

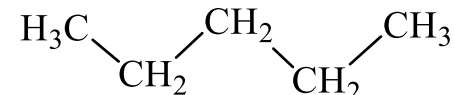
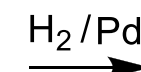


pentán

$\Delta H = -30.0 \text{ kcal.mol}^{-1}$

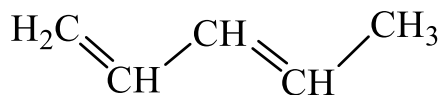


pent-1,4-dién

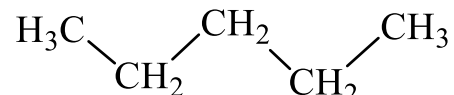
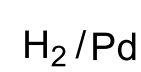


pentán

$\Delta H = -60.2 \text{ kcal.mol}^{-1}$



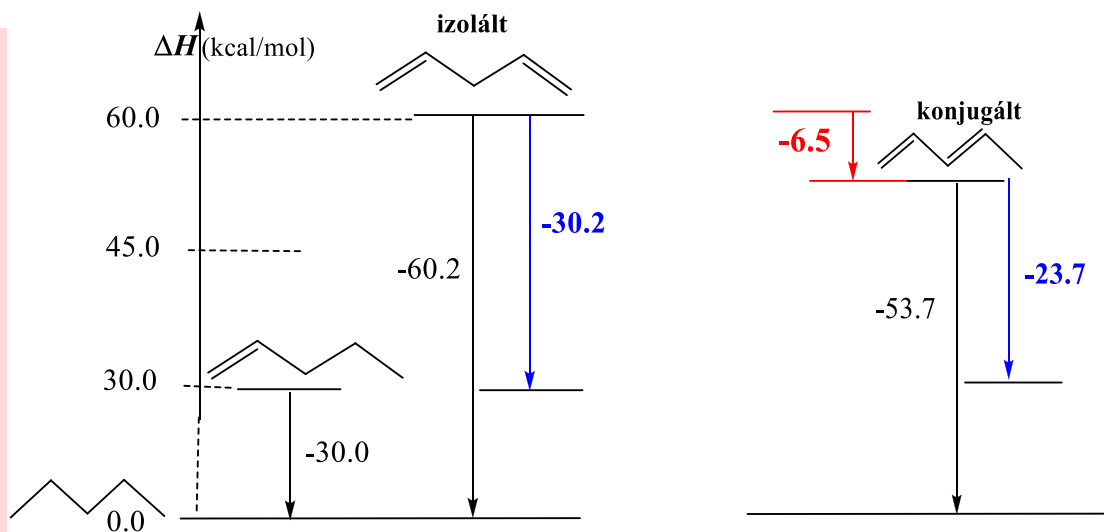
pent-1,3-dién



pentán

$\Delta H = -53,7 \text{ kcal.mol}^{-1}$

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.



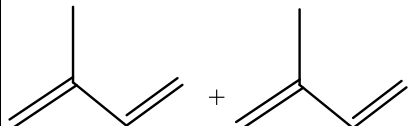
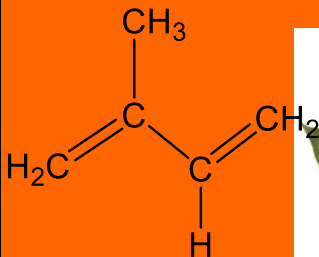
Példák természetes konjugált di- és pliénekre:

az izoprénvázas vegyületek (terpenoidok és karotinoidok)

izoprén



C_5H_8

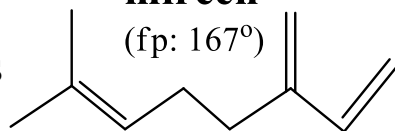


monoterpének

$(C_5H_8)_2$

mircén

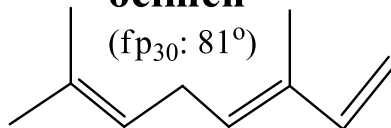
(fp: 167°)



„fej-láb” illeszkedés

ocimén

(fp₃₀: 81°)



Homológsor

monoterpének
szeszkviterpének
diterpének
szeszterterpének
triterpének

$C_{10}H_{16}$

$C_{15}H_{24}$

$C_{20}H_{32}$

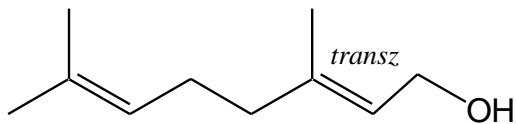
$C_{25}H_{40}$

$C_{30}H_{48}$



memo:
a babérfa
illóolaja

Példák érdekesebb aciklusos monoterpén származékokra:

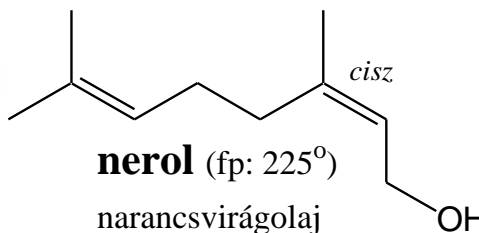


geraniol (fp: 229°)

geraniumolaj



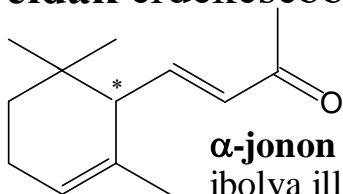
Bruckner II-1284



nerol (fp: 225°)

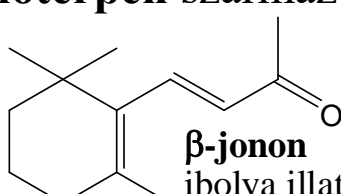
narancsvirágolaj

Példák érdekesebb ciklusos monoterpén származékokra:



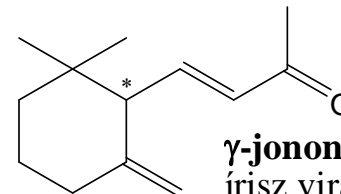
α-jonon

ibolya illatú olaj
királis



β-jonon

ibolya illatú olaj
akirális

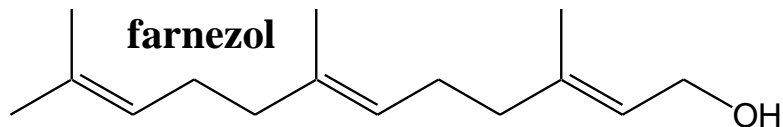


γ-jonon

írisz virágból izolálható
királis

57

Egy érdekes **szeszkviterpén** ($C_{15}H_{24}$):

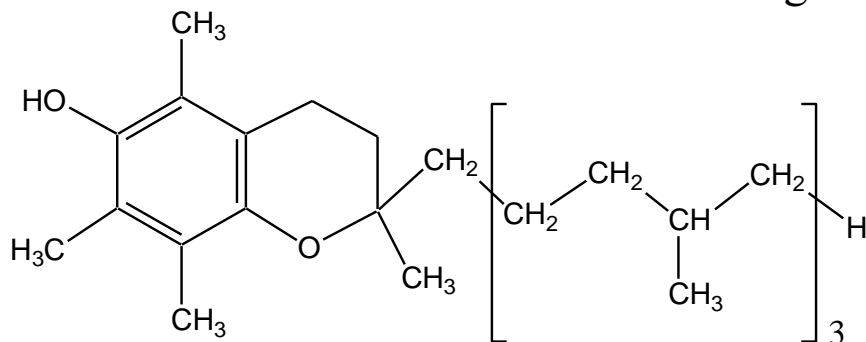


memo:

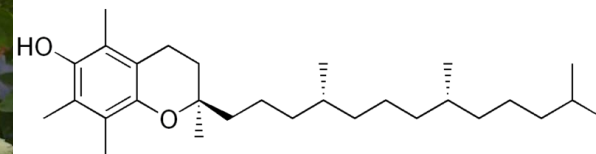
a juvenil hormonnal (rovarok növekedési faktorával) azonos hatású anyag

Két fontos **diterpén** ($C_{20}H_{32}$):

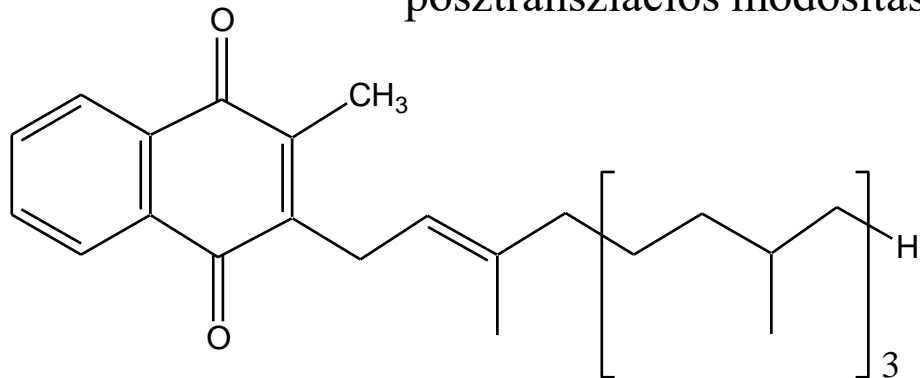
- E-vitamin: tokoferol (zsíroldható vitamin, antioxidáns)
avitaminózis: terhesség megszakadása



55.8 mg/100 g
napraforgóolaj



- K-vitamin: fillokinon(zsíroldható vitamin, posztranszlációs módosítások során szükséges) avitaminózis: vérzékenység

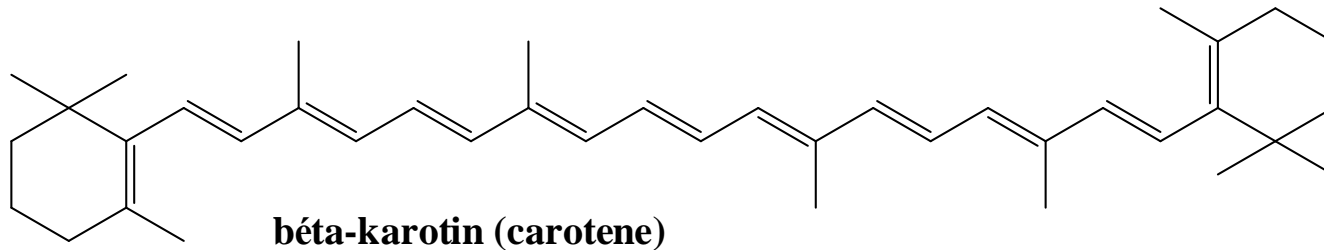


sóska, spenót, káposzta

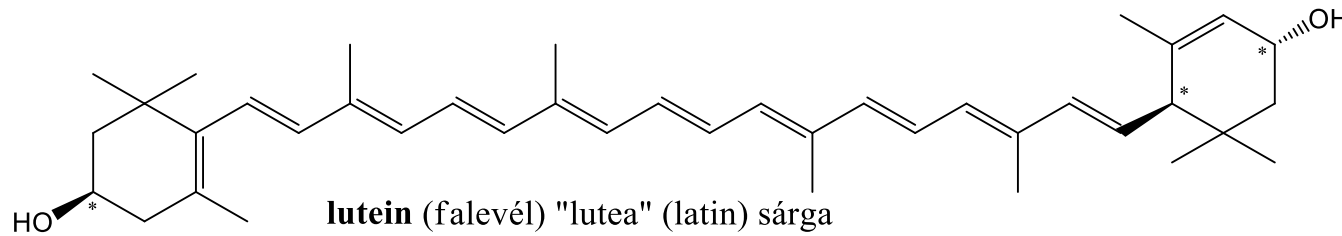
Néhány fontos szeszterterpén ($C_{25}H_{40}$)

- a karotinoidok

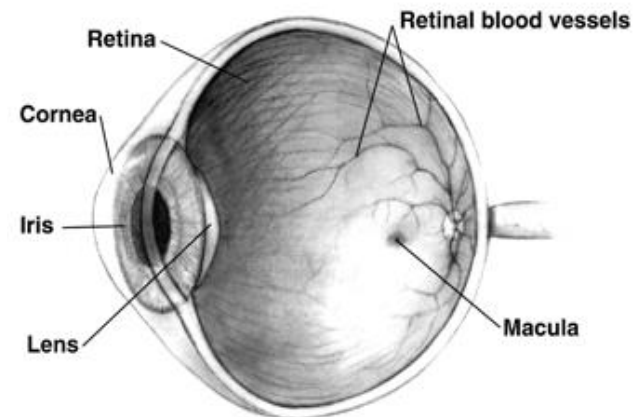
Egy igen fontos, a konjugáció miatt színes polién: a β -karotin:



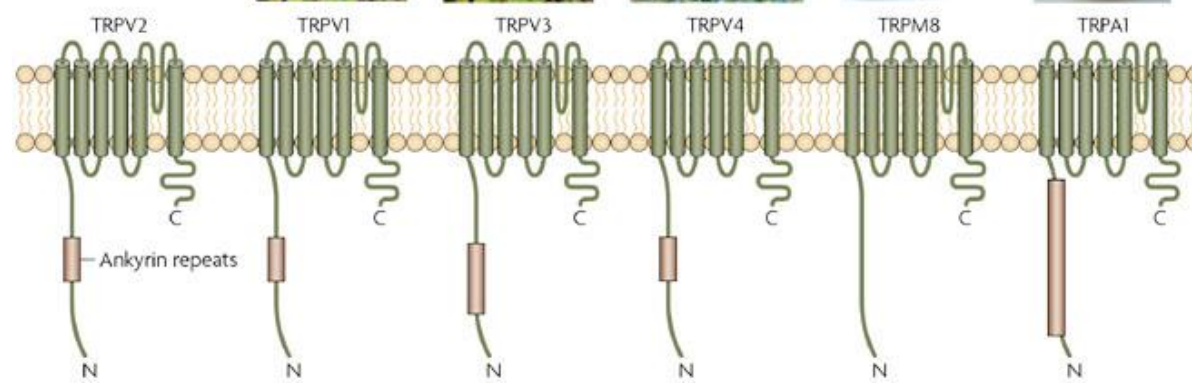
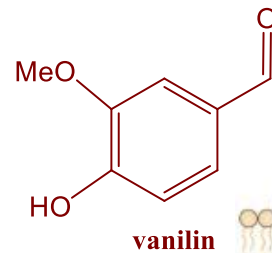
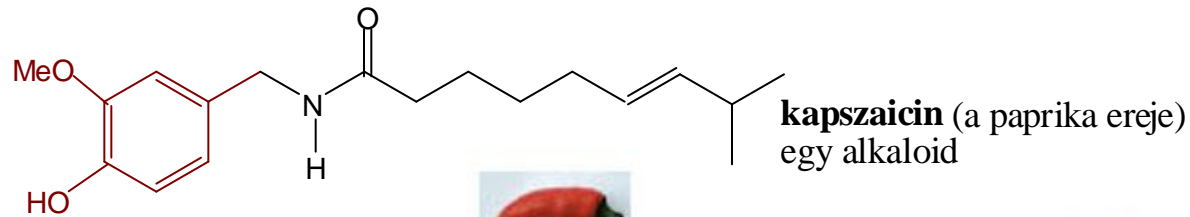
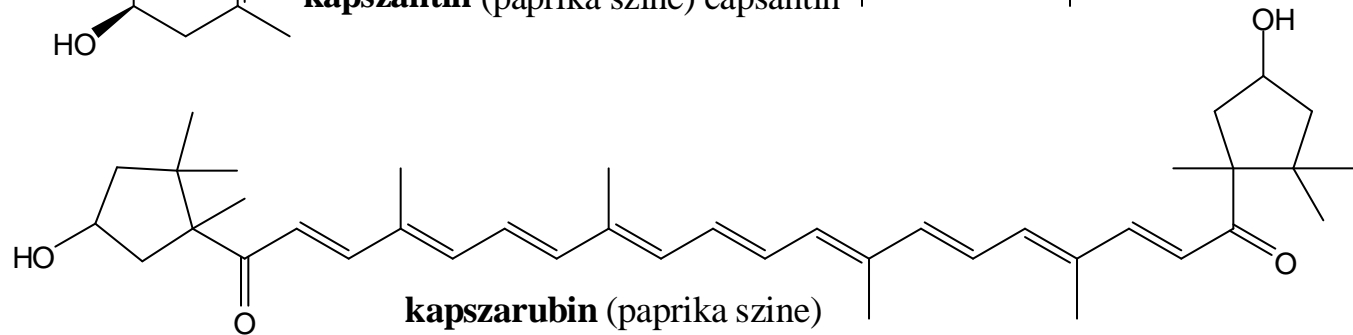
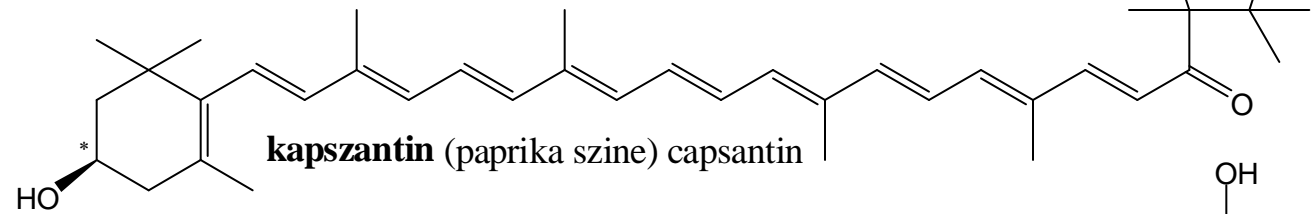
lipofil, antioxidáns



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



További fontos diterpén származékok:



színtelen, szagtalan fehér kristály a paprika „ereje”, az I típusú **vanilloid** receptorhoz köt

6/A3 Izolált diének

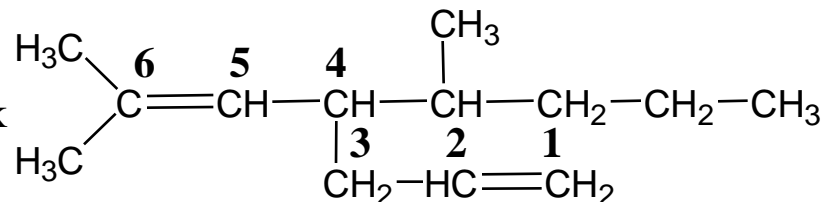


Penta-1,4-diene

penta-1,4-dién

nev.gyak.

Azt a szénláncot válasszuk
amelyik a legtöbb
kettőskötést tartalmazza:



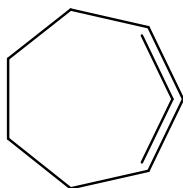
6-Methyl-4-(1-methyl-butyl)-hepta-1,5-diene

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

6/B Ciklusos diének, ciklodiolefinek ($\text{C}_n\text{H}_{2n-4}$)

típusnév: cikoalkadién

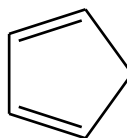
kumulált:



Cyclohepta-1,2-diene

ciklohepta-1,2-dién

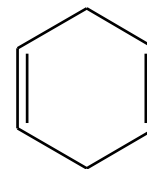
konjugált:



Cyclopenta-1,3-diene

ciklopenta-1,3-dién

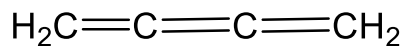
izolált:



Cyclohexa-1,4-diene

ciklohexa-1,4-dién

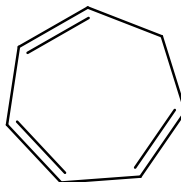
6/C Poliének



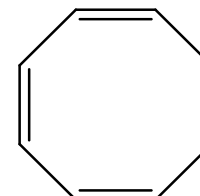
Buta-1,2,3-triene

buta-1,2,3-trién

típusnév: kumulén

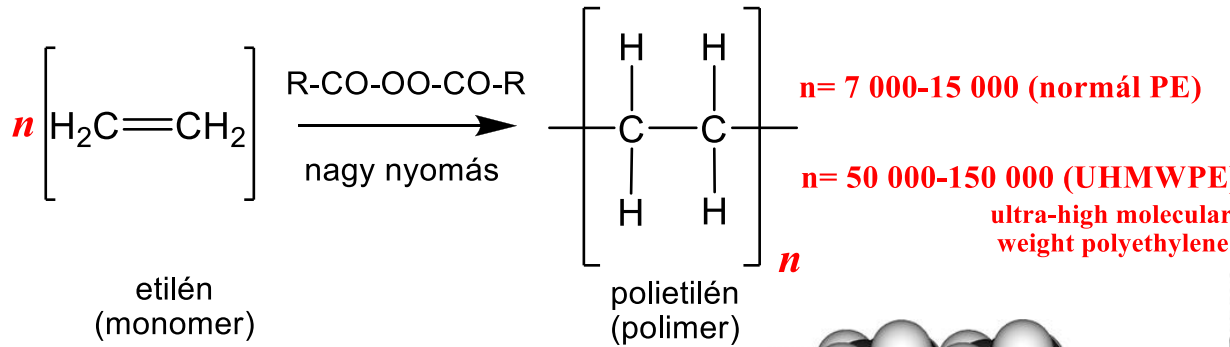


cyclohepta-1,3,5-triene



(1Z,3Z,5Z,7Z)-cycloocta-
1,3,5,7-tetraene

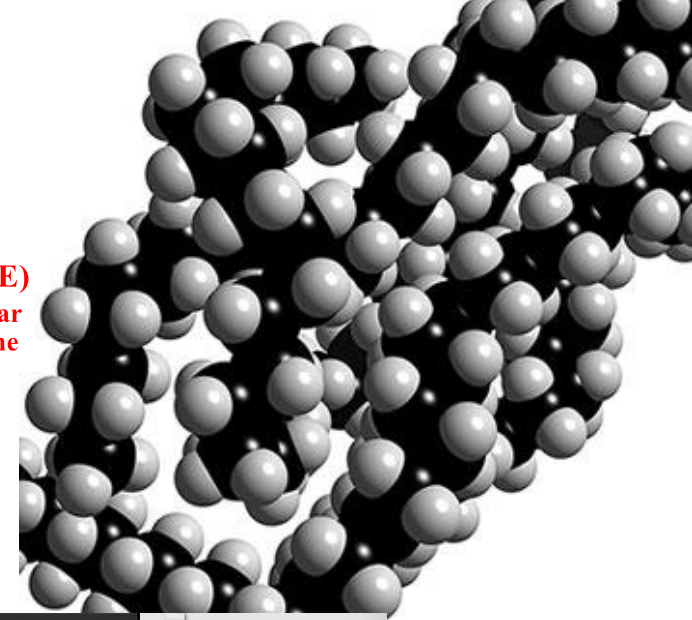
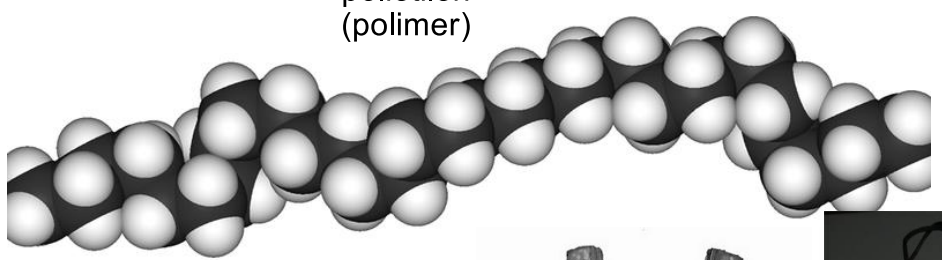
Polietilén: (C_nH_{2n})



n = 7 000-15 000 (normál PE)
n = 50 000-150 000 (UHMWPE)
 ultra-high molecular weight polyethylene

etilén (monomer)

polietilén (polimer)



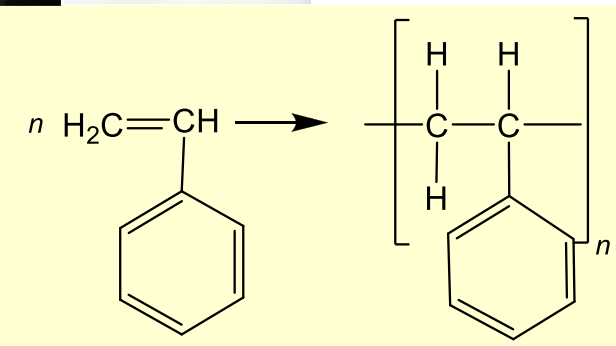
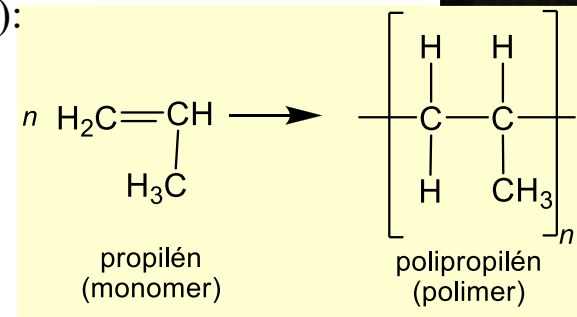
Előállítás: gyökös reakció (CO₂[↑] + R•)
 mol.tömeg szabályozható az iniciátor koncentrációval.

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).



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

típusnév: alkin

homológ sor („-in” végződés)

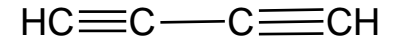
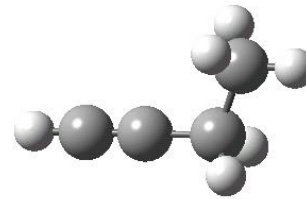
7/A Nyílt szénláncú



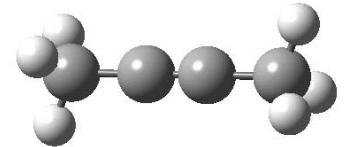
Ethyne
etin
acetylene
acetilén



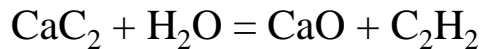
Propyne
propin
metilacetilén



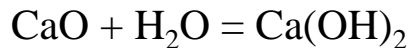
Buta-1,3-diyne
buta-1,3-diin



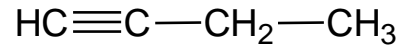
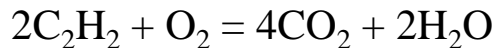
karbidlámpa működés során:



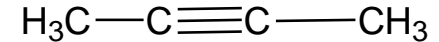
Miközben az égetett mészből oltott mész lesz:



Az acetilén elég és ez világít:



But-1-yne
but-1-in



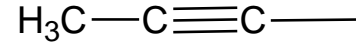
But-2-yne
but-2-in

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

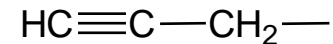
Csoportnevek („alkinil” végződés):



etinil



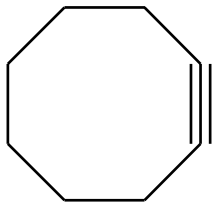
propin-1-il



propin-2-il
propargil

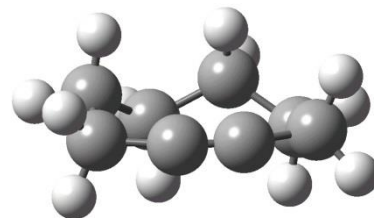
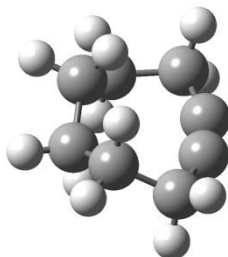
7/B Ciklusos alkinek (cikloalkin): C_nH_{2n-4}

típusnév: cikloalkin

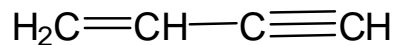


Cyclooct-1-yne

ciklooktin



7/C kettős és hármas kötések tartalmazó szénhidrogének

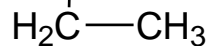
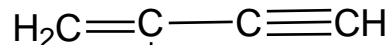


But-1-en-3-yne

but-1-én-3-in

vinylacetylene

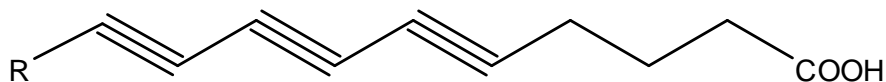
vinilacetilén



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

2-etilbut-1-én-3-in

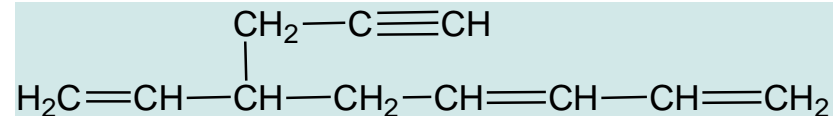
példa:



acetilénkarbonsav

hármas kötések tartalmazó növényi zsírsav

nev.gyak.



6-(propin-2-il)-1,3,7-oktatrién

A kettős kötés rangosabb mint a hármas kötés

II. Halogénezett szénhidrogének

alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs

alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

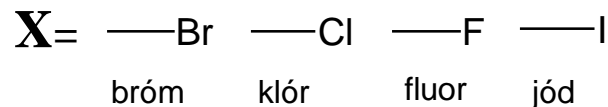
X_n $n=1, 2, 3, \dots$ egy-, két-, többértékű

X = típusa szerint

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

primer szekunder terciér

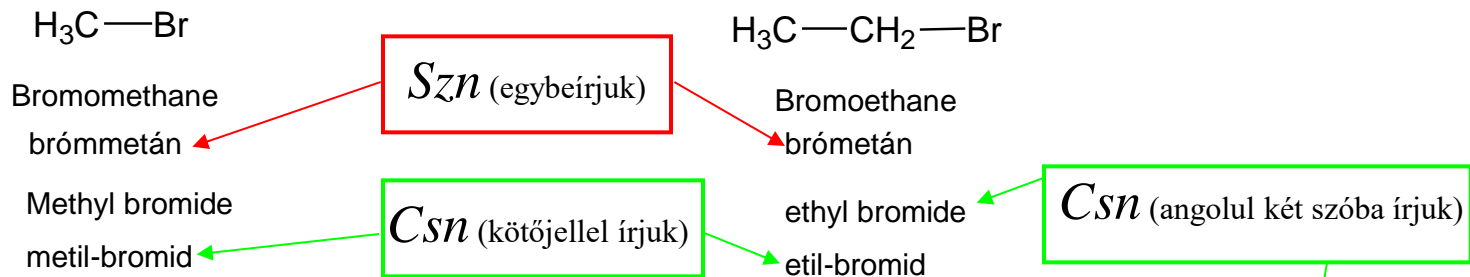
geminális \Leftrightarrow vicinális \Leftrightarrow diszjunkt



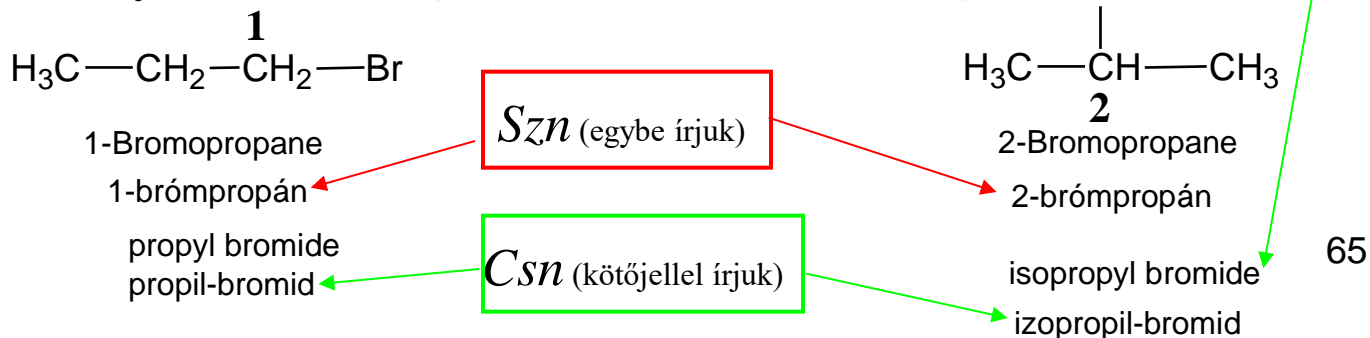
1. Nyílt szénláncú, telített egyértékű halogénezett szénhidrogének



típusnév: halogénalkán, alkil-halogenid



helyzetizoméria (szubsztitúciós izoméria)



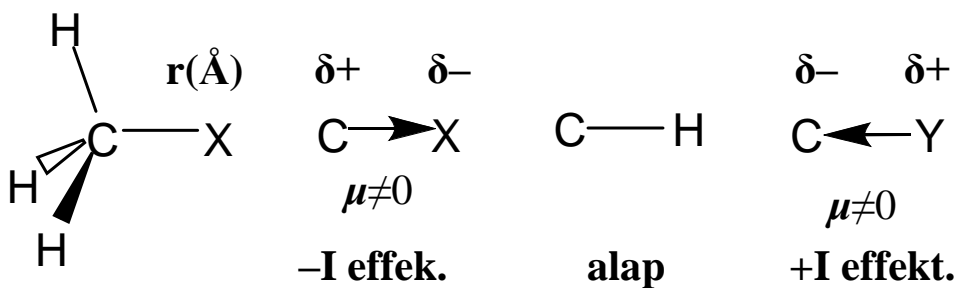
Alkil-halogenidek elektronszerkezete

F	Ne
3,98	3,67
Cl	Ar
3,16	3,3
Br	Kr
2,96	3,00
I	Xe
2,66	2,67

A kapcsolódó atomok **eltérő elektron-negativitása** miatt a heteronukleáris σ -kötések **polarizálódnak**; pl. C(δ^+) míg X(δ^-).

Az **elektronegativitás** (EN:= a kötött állapotú atom elektron vonzó képessége) a F \rightarrow I irányba csökken: (F:4, Cl: 3,16, Br: 2,96, I: 2,66). 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)	dipol.mom. (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 hatása csak a molekulának X csoportjához 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→X** irányba polározódik. Így a σ -kötések elektronjai az X irányába tolódnak el és a C-atomon parciális pozitív töltés **C(δ^+)** míg **X(δ^-)** alakul ki: ez a **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

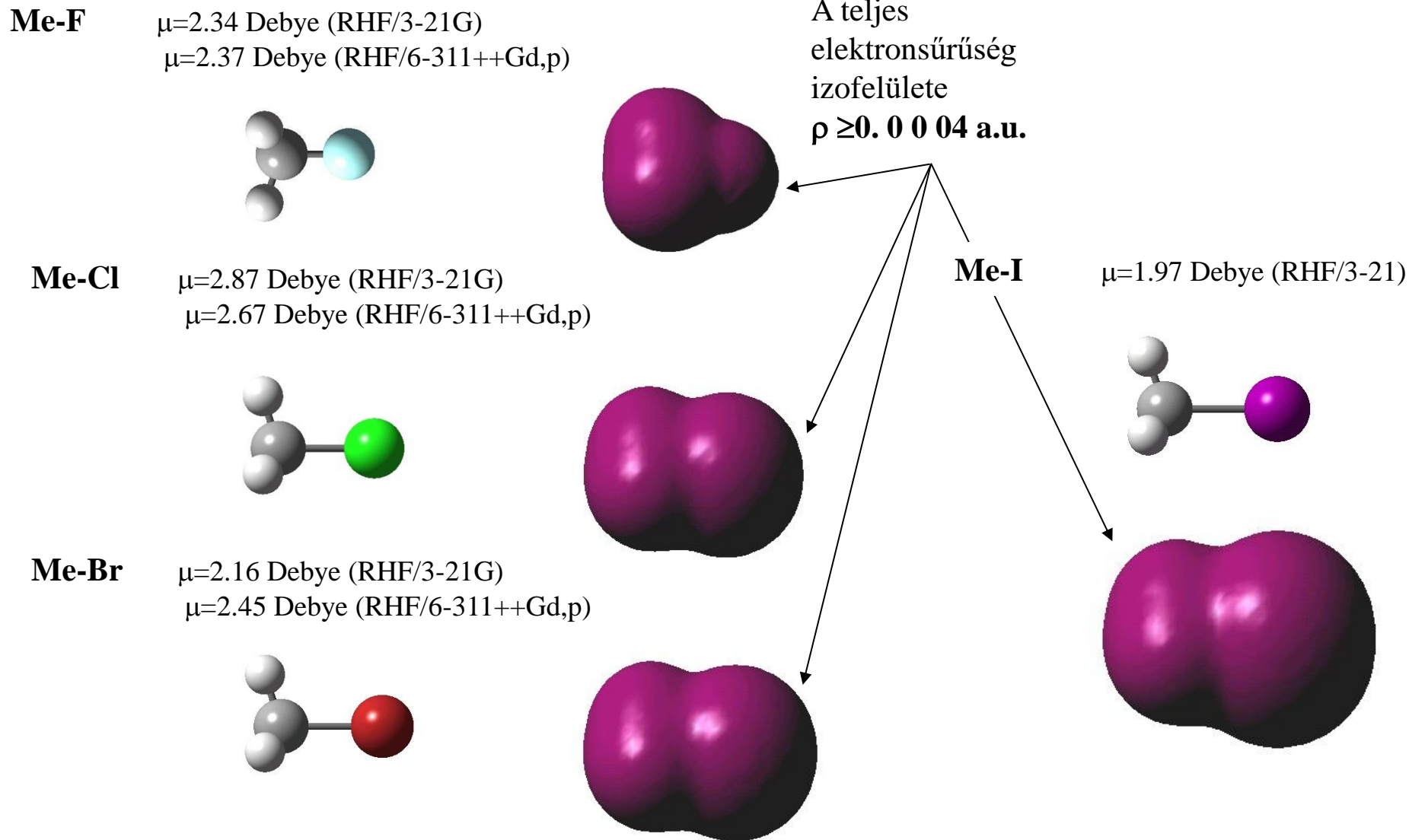
+I	-I		
-O ⁻	-F	-COOH	-NO ₂
-COO ⁻	-Cl	-COOR	-SO ₃ H
-SiR ₃	-Br	-C(=O)R	-NH ₃ ⁺
-PR ₂	-I	-CN	-NR ₃ ⁺
	-OH	-NH ₂	-C≡CR
	-OR	-NR ₂	

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:



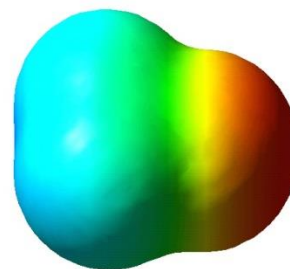
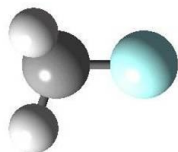
A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.) „izofelszínén” színnel kódolt elektrosztatikus potenciálérték

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

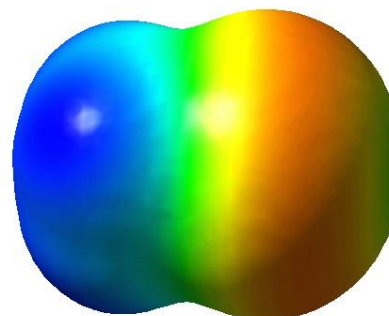
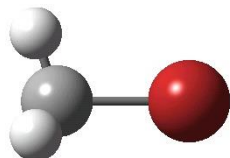


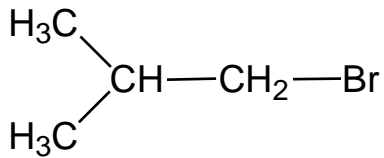
Me-Br

$\mu=2.45$ Debye (RHF/6-311++Gd,

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

C-X=2.0Å

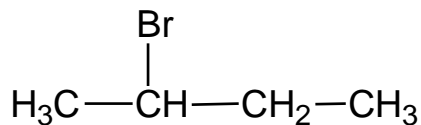




1-Bromo-2-methylpropane

1-bróm-2-metilpropán

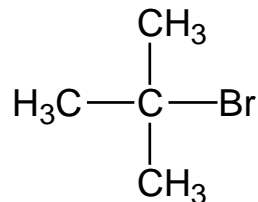
izobutil-bromid



2-Bromo-butane

2-brómbután

szek-butil-bromid



2-Bromo-2-methylpropane

2-bróm-2-metilpropán

terc-butil-bromid

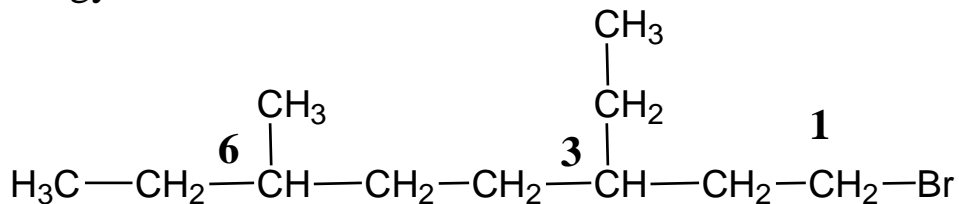
Szn

Csn

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

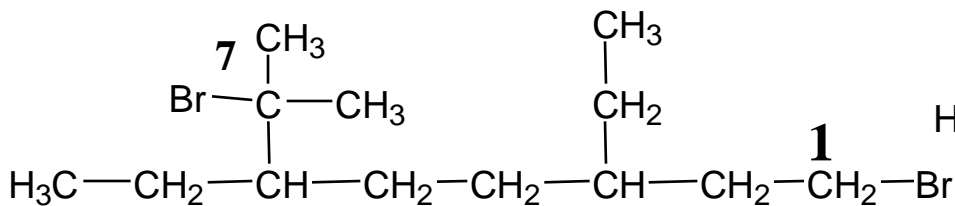
Azon a végen kezdjük a számozást amelyikhez **közelebb** van az első szubsztituens (pl. Br-, CH₃-, ⁱPro-): minden szubszt. **egyforma**. Adjuk az elágazásoknak a lehető **legkisebb sorszámot**, a szubsztituens sorrend az **angol ABC** szerint megy.

nev.gyak.

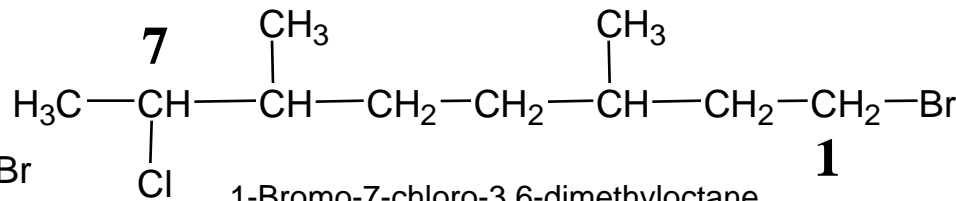


1-Bromo-3-ethyl-6-methyloctane

1-bróm-3-etil-6-metiloktán



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



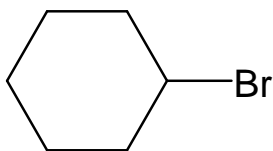
1-Bromo-7-chloro-3,6-dimethyloctane

2. Gyűrűs, telített egyértékű halogénezett szénhidrogének

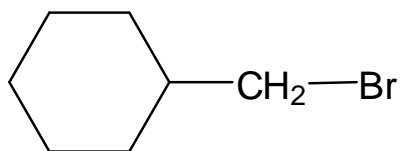


típusnév: halogéncikloalkán (Szn)

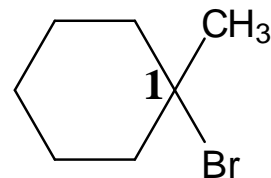
cikloalkil-halogenid (Csn)



Bromocyclohexane
brómciklohexán



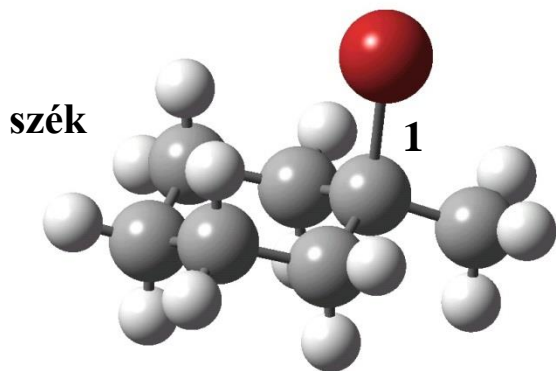
Bromomethylcyclohexane
brómmetilciklohexán



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

konformációanalízis

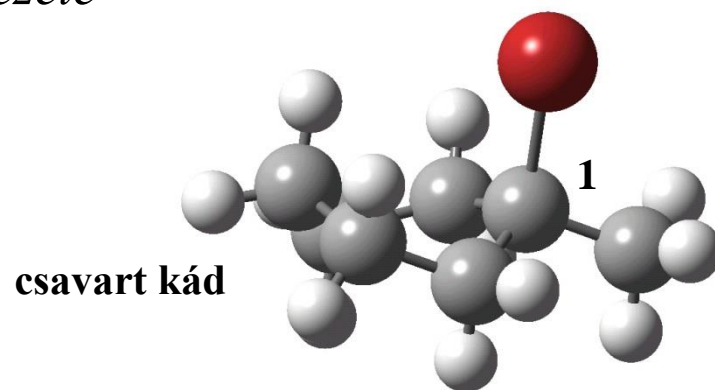
az 1-bróm-1-metil-ciklohexán térszerkezete



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



+7.75 kcal/mol



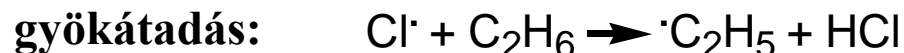
$E_{\text{RHF/3-21G}} = -2831.211184$ Hartree
 $\mu = 2.5$ Debye

1. Alkánokból halogénezéssel: szubsztitúciós reakció

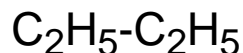


ahol X=F, Cl, Br mellett a I igen lomha, nem megy

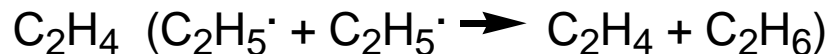
A gyökös reakció elemi lépései:



termék:



melléktermék:



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



2. Alkénekből haloidsav addícióval:



Addíciós reakció

alkil-halogenid

Markovnyikov-szabály

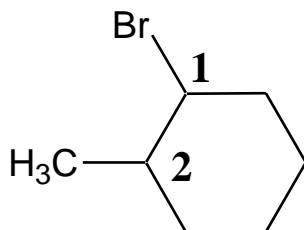
3. Alkoholokból szubsztitúcióval:



alkohol

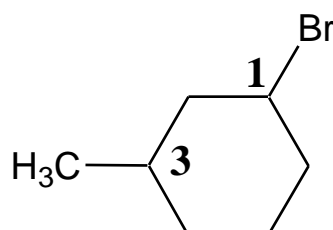
haloidsav

alkil-halogenid



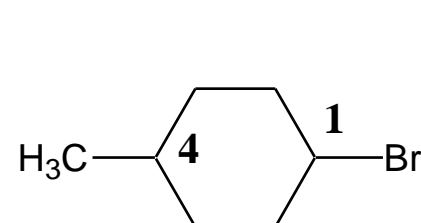
1-Bromo-2-methylcyclohexane

1-bróm-2-metilciklohexán



1-Bromo-3-methylcyclohexane

1-bróm-3-metilciklohexán



1-Bromo-4-methylcyclohexane

1-bróm-4-metilciklohexán

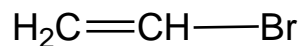
3. Telítetlen, egyértékű halogénezett szénhidrogének

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

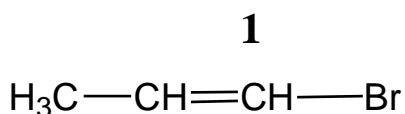
vinil-bromid

helyzetizoméria

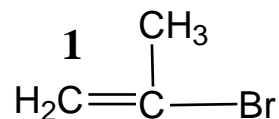
(szubsztitúciós izoméria)

IUPAC nevezéktan:

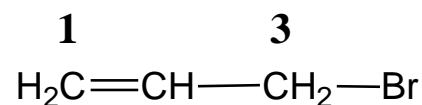
a telítetlen kötés rangosabb
mint a szubsztituens



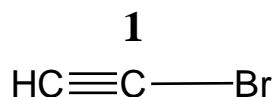
1-Bromoprop-1-ene
1-brómprop-1-én
propenil-bromid



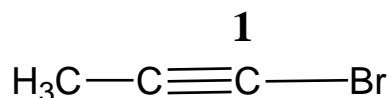
2-Bromoprop-1-ene
2-brómprop-1-én
izopropenil-bromid



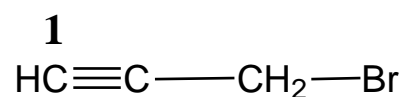
3-Bromoprop-1-ene
3-brómprop-1-én
allil-bromid



Bromoethyne
brómacetilén
etinil-bromid

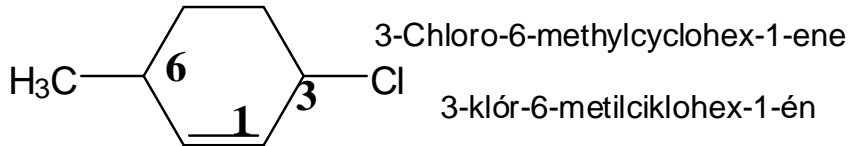


1-Bromoprop-1-yne
1-brómprop-1-in
propinil-bromid

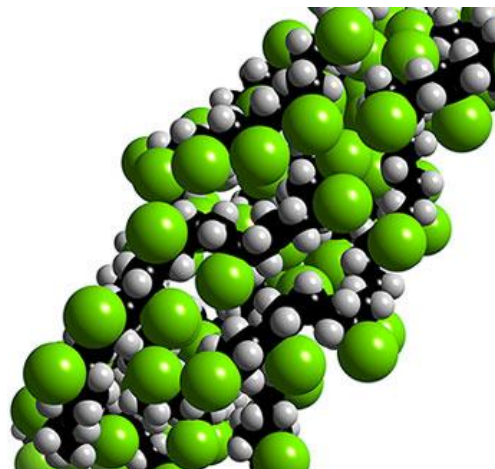
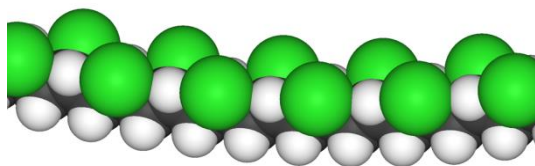
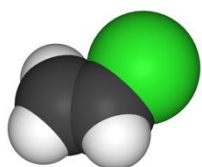
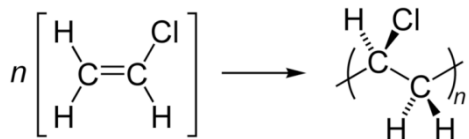


3-Bromoprop-1-yne
3-brómprop-1-in
propargil-bromid

nev.gyak.

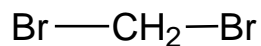


vinilklorid → PVC (polivinilklorid)



4. Két- és többértékű halogénezett szénhidrogének

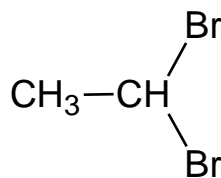
Geminális helyzetű halogének



Dibromomethane

dibrómmetán

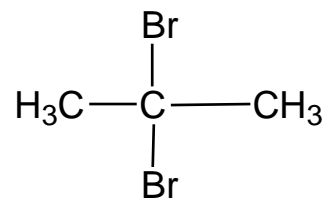
metilén-dibromid



1,1-Dibromoethane

1,1-dibrómetán

etilidén-dibromid



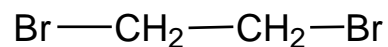
2,2-Dibromopropane

2,2-dibrómpropán

izopropilidén-dibromid

haloformok: CHX_3

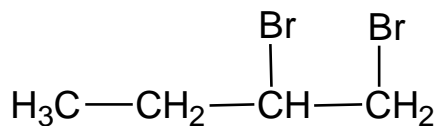
Vicinális helyzetű halogének



1,2-Dibromoethane

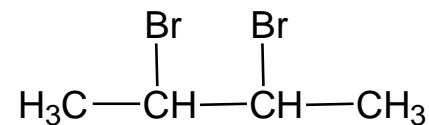
1,2-dibrómetán

etilén-dibromid



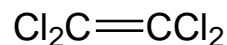
1,2-Dibromobutane

1,2-dibrómbután



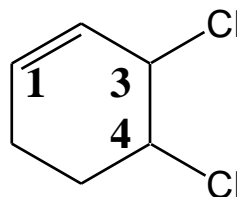
2,3-Dibromobutane

2,3-dibrómbután



1,1,2,2-Tetrachloroethene

(perklór-etilén) *ma már tiltott név*



3,4-Dichlorocyclohex-1-ene

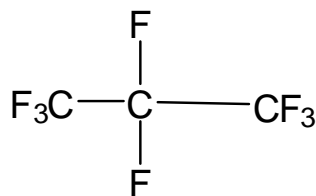
3,4-diklórciklohex-1-én

Diszjunkt helyzetű halogének



1,3-Dibromopropane

1,3-dibrómpropán

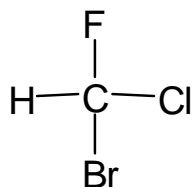


1,1,1,2,2,3,3,3-Oktafluoropropane

1,1,1,2,2,3,3,3-oktafluorpropán

perflorpropán

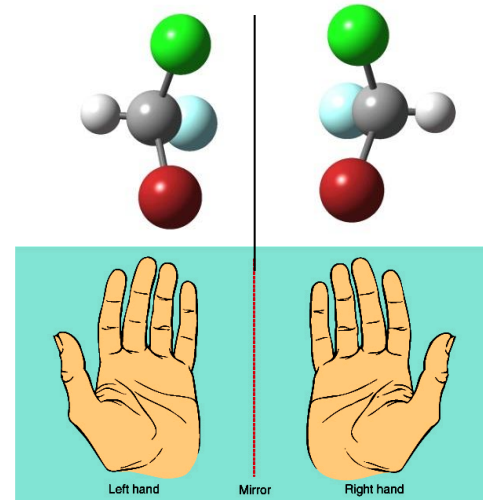
Az optikai izoméria:



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?

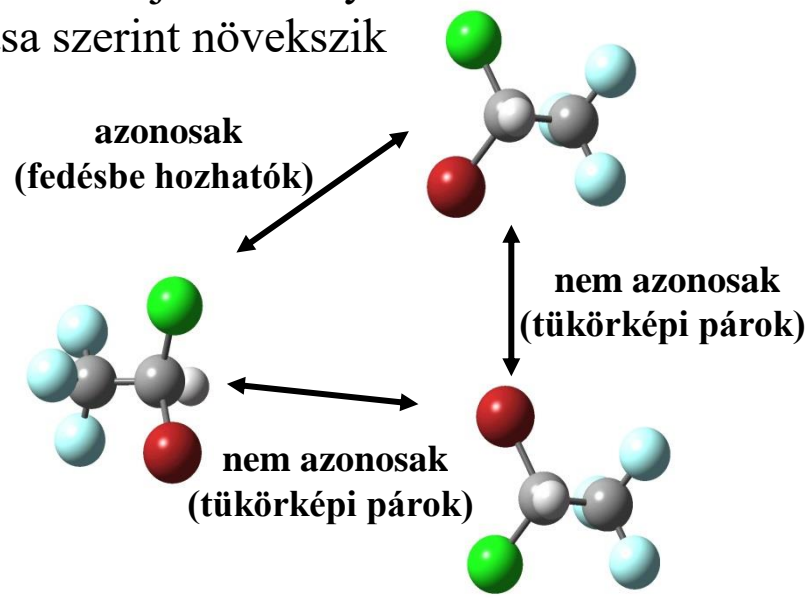
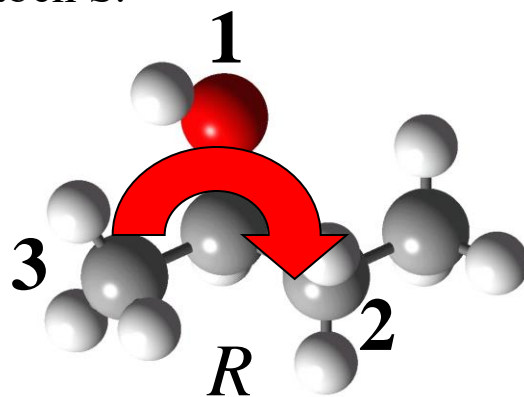
válasz: 1. megkeressük a királis C-atomot (sp^3 -as C kell legyen).

2. felállítjuk a szubsztituensek rangsorát a C^* (sztereo-centrum) közvetlenül kapcsolódó atomok növekvő atomszáma (rendszáma) alapján ($H < C < N < O < F < Cl < \dots$).

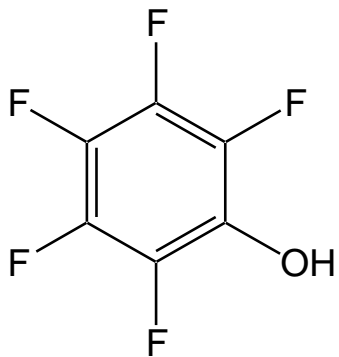
3. elforgatjuk a királis C-t úgy, hogy a legkisebb rangú szubsztituens „ne lássuk”.

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:

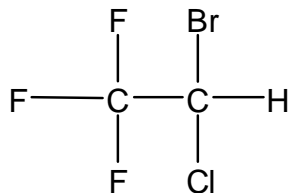
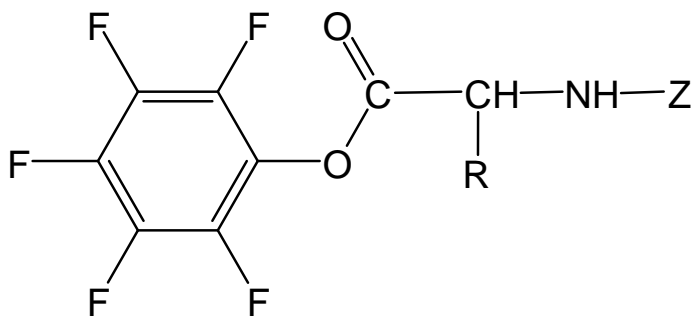


pentafluorfenol
fungicid

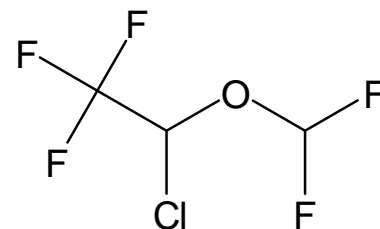
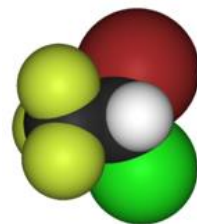


állatorvosi gyakorlatban
használt **inhalációs
anesztetikum,**
májkárosító

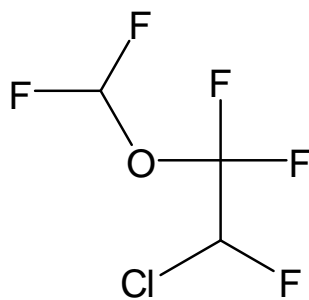
peptidszintézisnél karboxilcsoport aktivátor
("aktív észter")



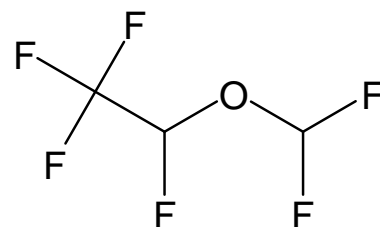
Halotán (narkotikum)
[GyT1 149]



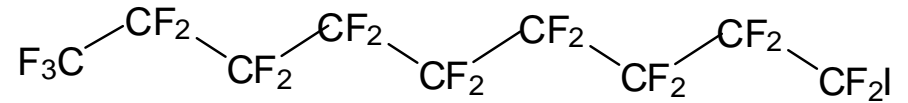
2-chloro-2-(difluoromethoxy)-1,1,1-trifluoro-ethane



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

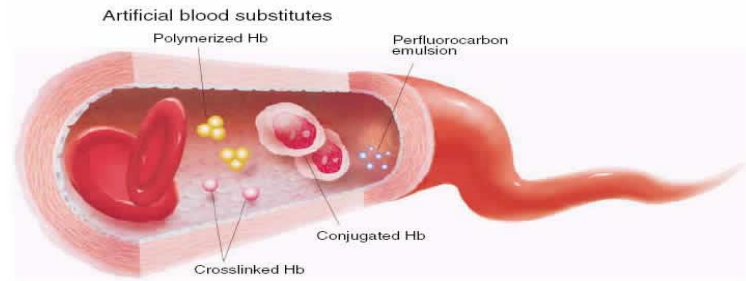


2-(difluoromethoxy)-1,1,1,2-tetrafluoro-~~78~~
ethane



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

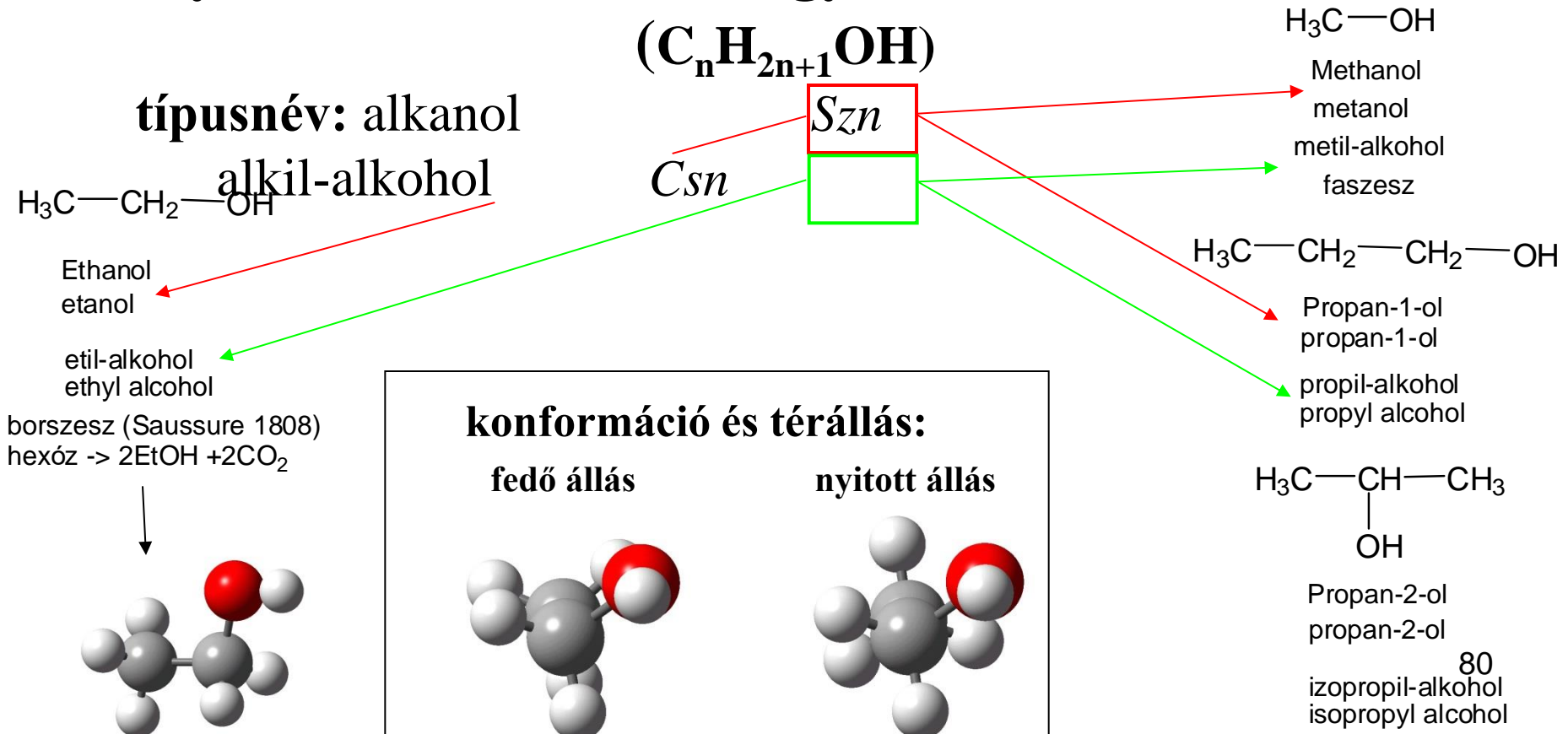
$[OH]_n$ $n= 1, 2, 3, \dots$ egy-, két-, többértékű

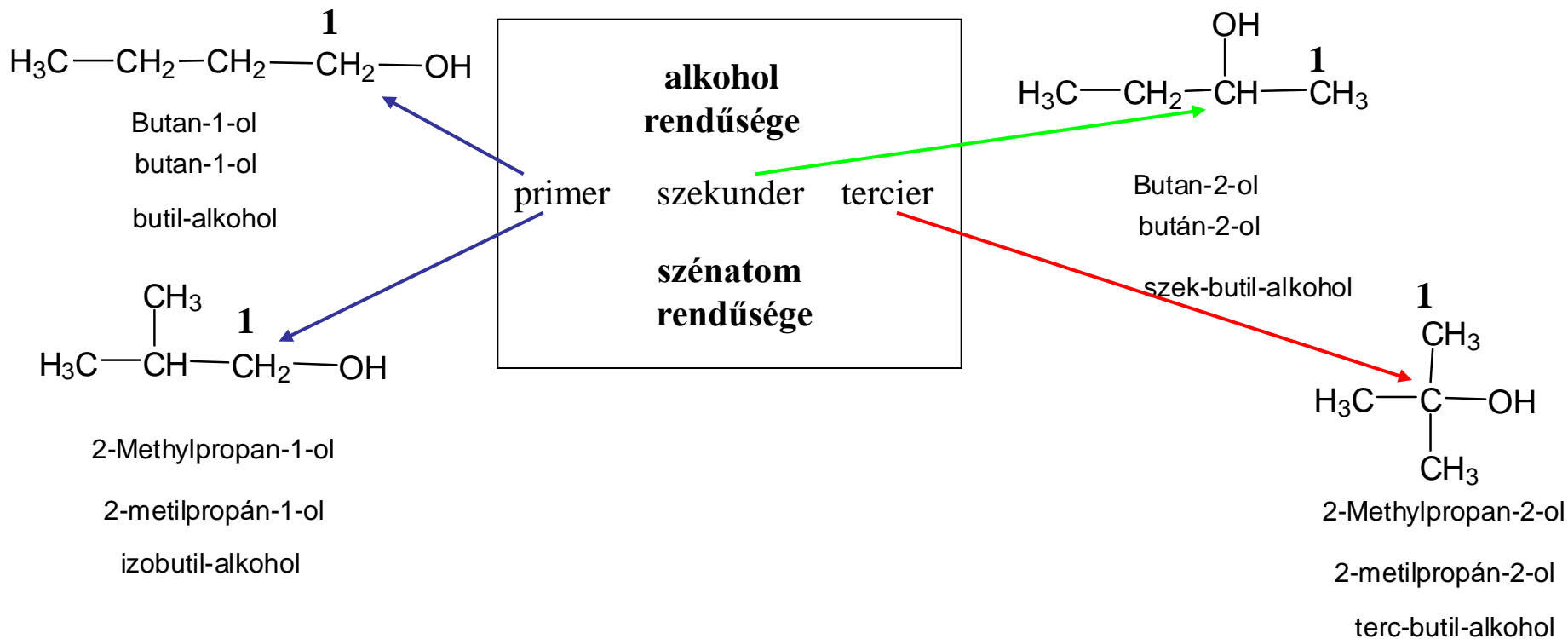
OH-k kapcsolódása szerint: elsőrendű \Leftrightarrow másodrendű \Leftrightarrow harmadrendű

primer szekunder tercier

geminális \Leftrightarrow vicinális \Leftrightarrow diszjunkt

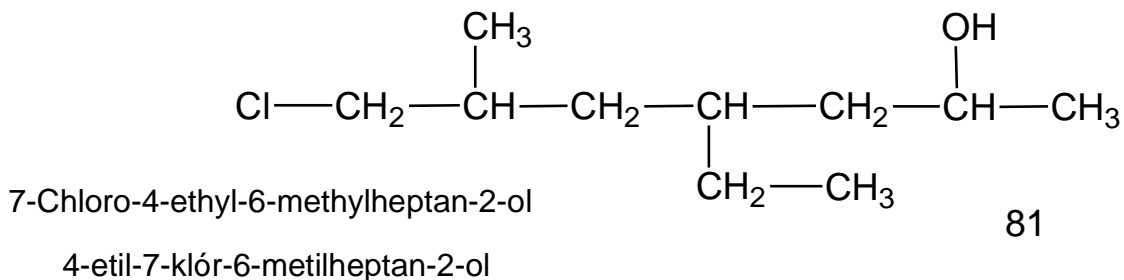
1. Nyíltzénláncú, telített egyértékű alkoholok





IUPAC nevezéktan: (*Szn* esetében a utótag „ol”, az előtag „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.:



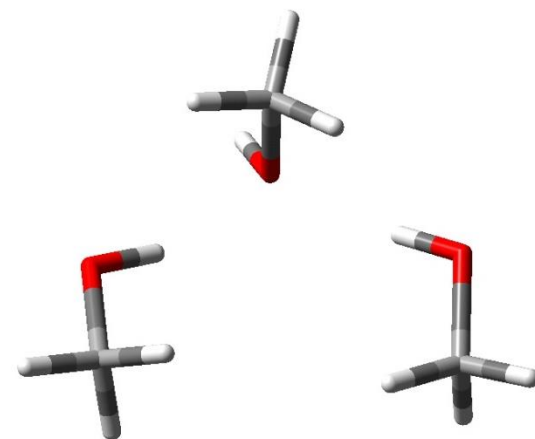
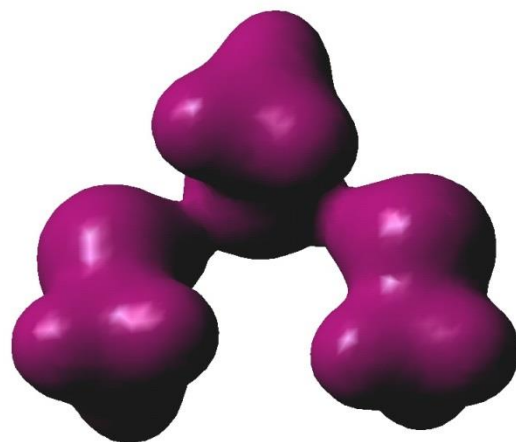
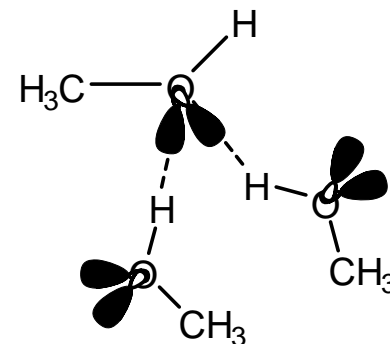
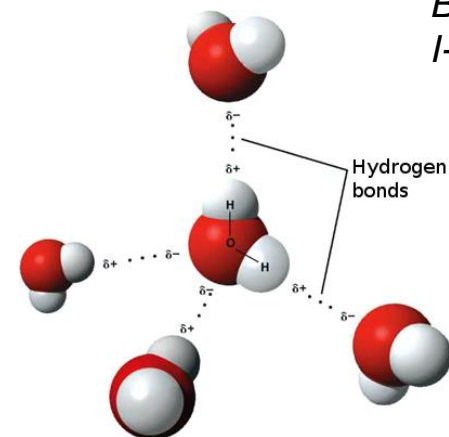
A hidrogén kötések szerepe:

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



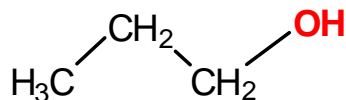
Hidrogén kötés-hálózat:

gázfázisú stabilizációs energia :

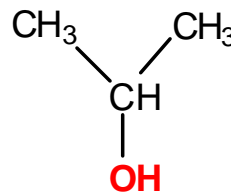
(RHF/3-21G[no BSSE]) ~10 kcal/H-híd
(RHF/3-21G[with BSSE]) ~5 kcal/H-híd

*C*₃-alkoholok
(propil-alkoholok)

2 izomer:



propán-1-ol
fp = 97.2°C



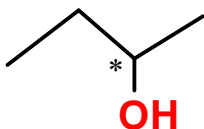
propán-2-ol
fp = 82.5°C

*C*₄-alkoholok
(butil-alkoholok)

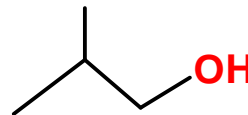
4 izomer:



bután-1-ol



bután-2-ol



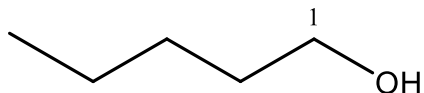
2-metilpropan-1-ol



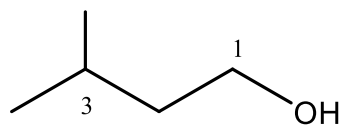
2-metilpropan-2-ol

*C*₅-alkoholok
(amil-alkoholok)

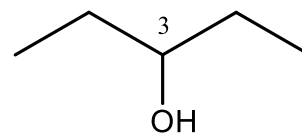
8 izomer:



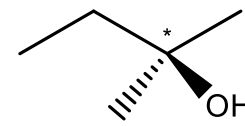
pentan-1-ol



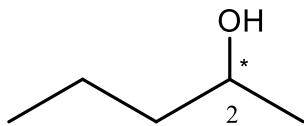
3-methylbutan-1-ol



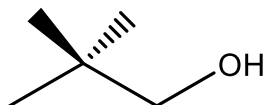
pentan-3-ol



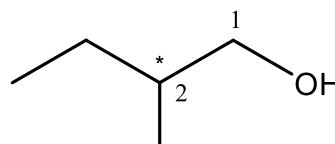
2-methylbutan-2-ol



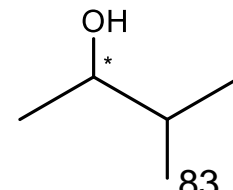
pentan-2-ol



2,2-dimetilpropan-1-ol



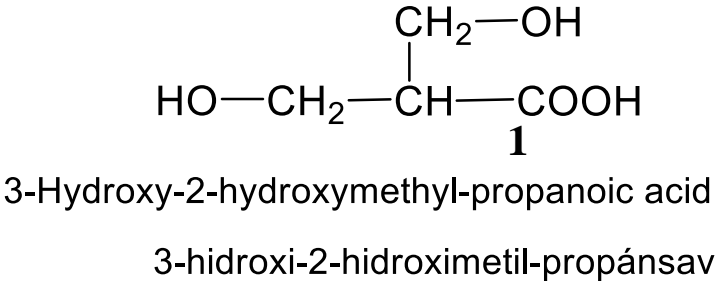
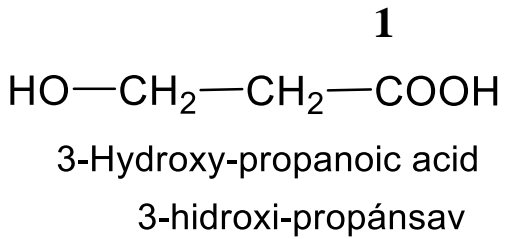
2-metilbutan-1-ol



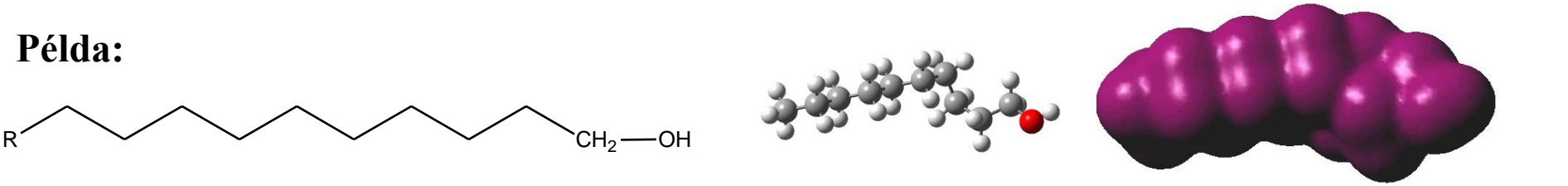
3-metilbutan-2-ol

Csoportnevek és „rangok”:

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



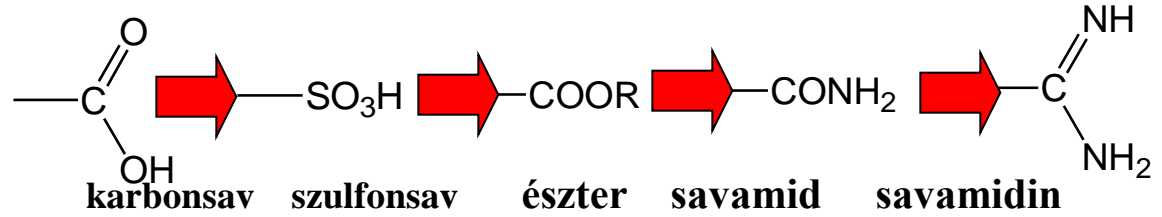
Példa:



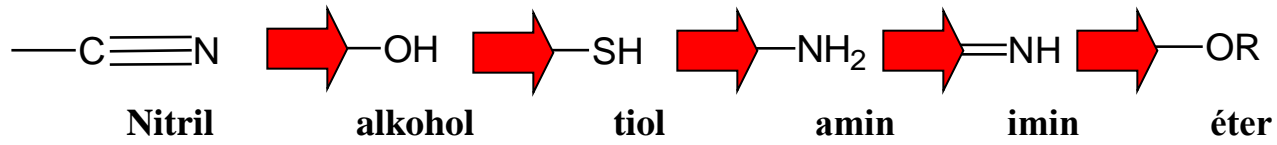
zsíralkohol

rangok:

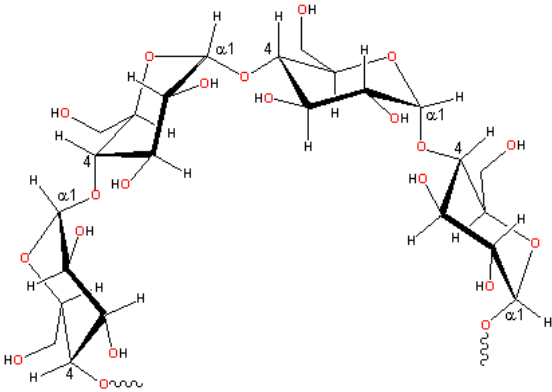
csökkenés
 irány



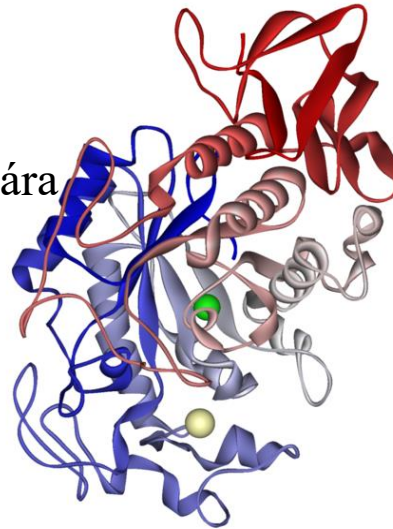
$\rho \geq 0.0004 \text{ a.u.}$



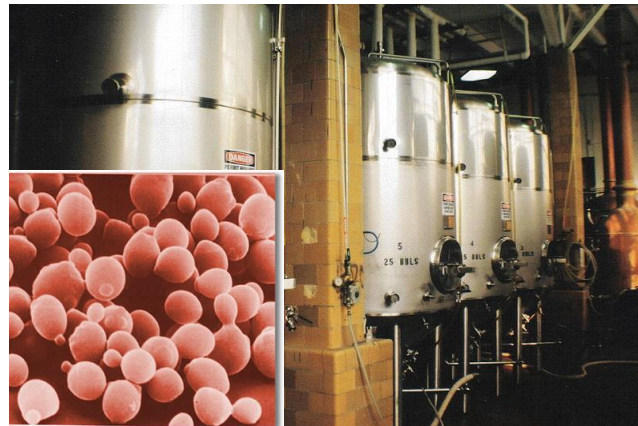
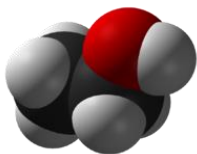
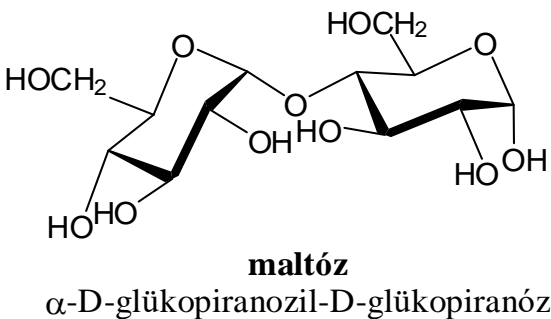
A fermentálás kémiaja



keményítő:
növények
energiaraktára



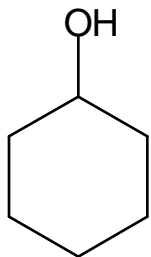
Erjesztés során a cereáliákban
(pl. árpa) lévő keményítőtől az
amiláz enzimeknek
köszönhetően **maltózt** kapunk.



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

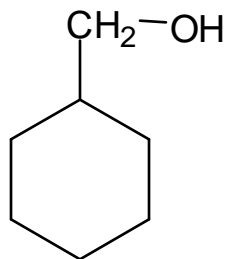
2. Ciklusos, telített egyértékű alkoholok ($C_nH_{2n-1}OH$)

típusnév: cikloalkanol, cikloalkil-alkohol

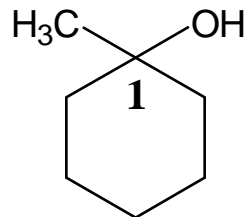


Cyclohexanol
ciklohexanol

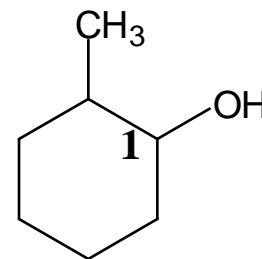
ciklohexil-alkohol



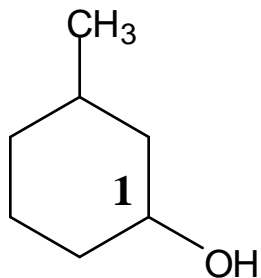
Cyclohexylmethanol
ciklohexilmetanol



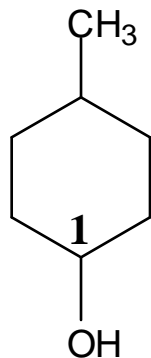
1-Methylcyclohexan-1-ol
1-metilciklohexan-1-ol



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

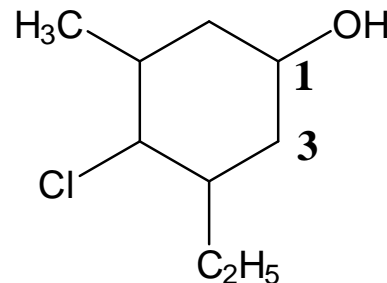


3-Methylcyclohexan-1-ol
3-metilciklohexán-1-ol



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!

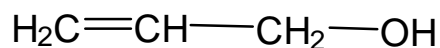
3. Telítetlen, egyértékű alkoholok

alkénből levezetve ($C_nH_{2n-1}OH$)

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

alkinből levezetve ($C_nH_{2n-3}OH$)

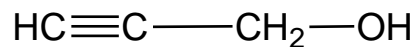
típusnév: alkinol (Szn), alkinil-alkohol (Csn)



Prop-2-en-1-ol

prop-2-én-1-ol

allyl alcohol
allil-alkohol

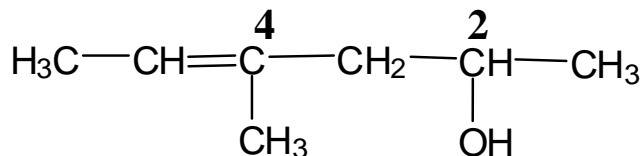


Prop-2-yn-1-ol

prop-2-in-1-ol

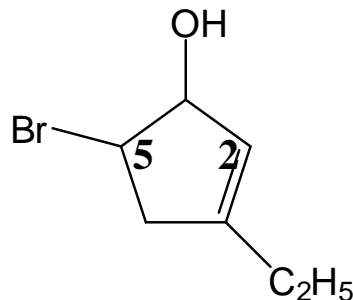
propargil-alkohol

nev.gyak.:



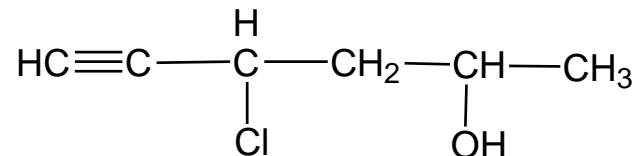
4-Methylhex-4-en-2-ol

4-metilhex-4-én-2-ol



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

5-bróm-3-etilciklopent-2-én-1-ol



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

4-klórohex-5-in-2-ol

memo.: Szn esetében az utótag „ol”, az előtag „hidroxi”
(ha van rangosabb csoport)

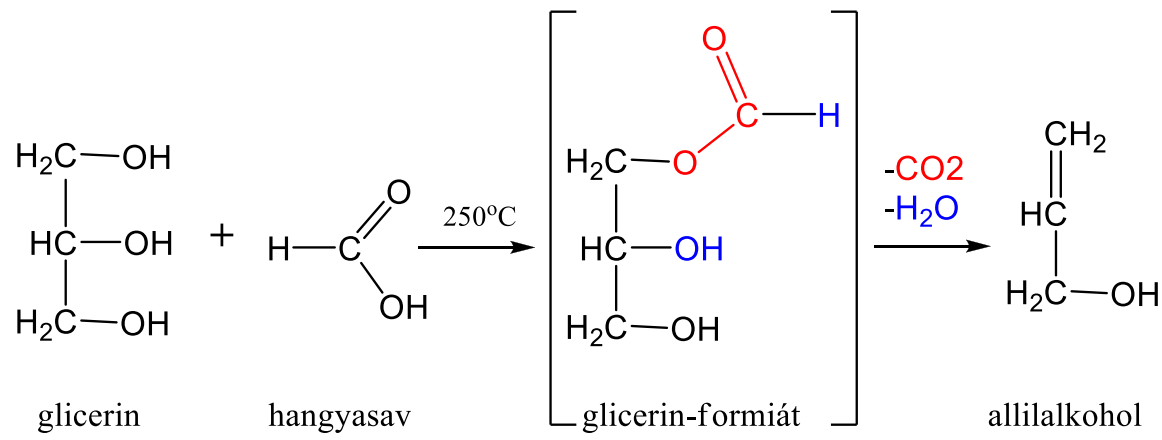
„énol” és „inol” megengedett mert

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

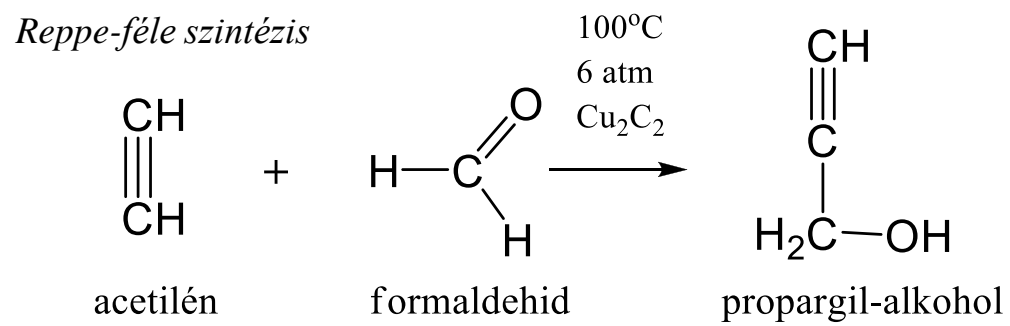
A vinilalkohol: a tautoméria jelensége

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

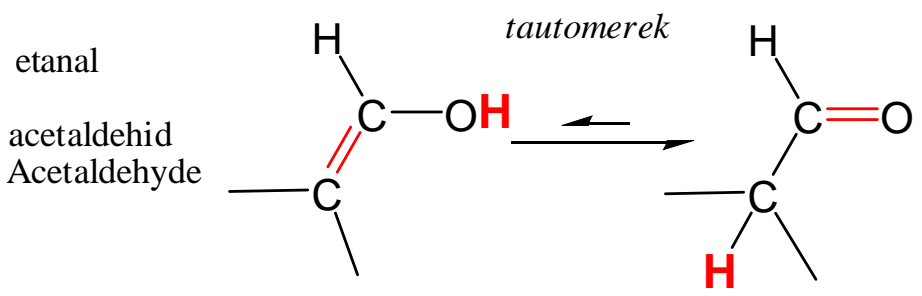
Allil-alkohol szintézise:
reakció ahol az „alkatrészek” **elillannak**



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



enol-alak **oxo-alak**

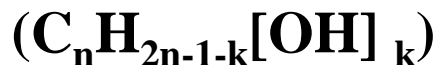


A **tautoméria** a szerkezeti vagy konstitúciós izoméria egyik fajtája: a tautomerek **dinamikus egyensúlyban** vannak egymással (folymatosan egymásba alakulnak).

Leggyakrabban formája a **prototrópia**, melyben a 2 tautomer egymástól egy **hidrogén és egy kettős kötés** helyzetében különbözik.

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, ... 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:

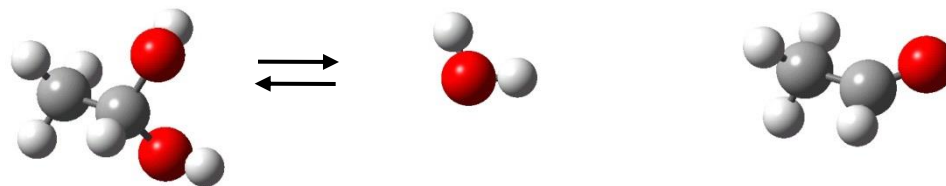


Methanediol

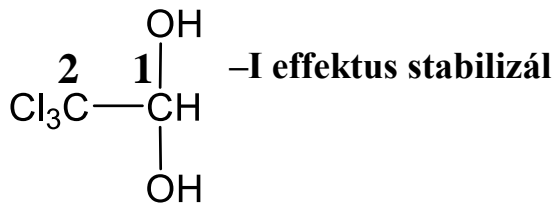
metándiol

formaldehid-hidrát

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



stabil:

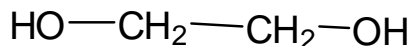


2,2,2-Trichloroethane-1,1-diol

2,2,2-triklóretán-1,1-diol

klorál-hidrát

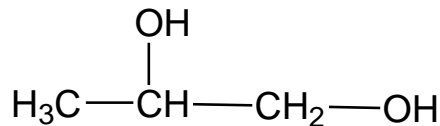
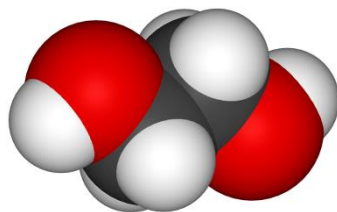
Vicinális diolok



Ethane-1,2-diol
etán-1,2-diol

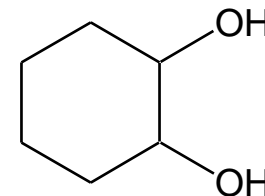
ethylene glycol
etilénglikol

glikol



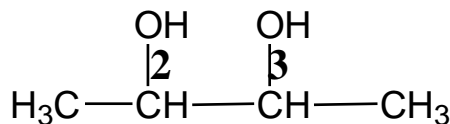
Propane-1,2-diol
propán-1,2-diol

(propilén-glikol) régi név

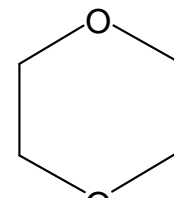
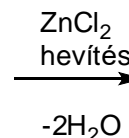
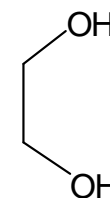


Cyclohexane-1,2-diol
ciklohexán-1,2-diol

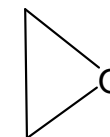
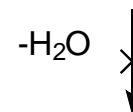
glüküsz (görög) édes \Rightarrow glikol
Színtelen, szagtalan,
mérgező (két teáskanál),
fagyálló (-12.9°C) folyadék



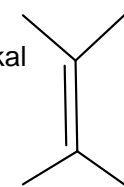
Butane-2,3-diol
bután-2,3-diol



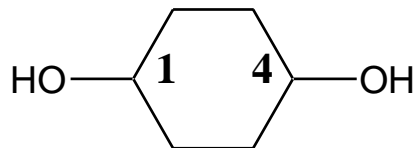
dioxán



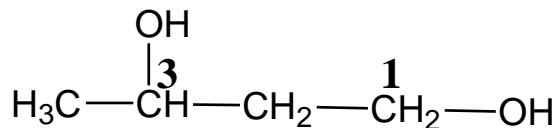
persavakkal



Diszjunkt diolok

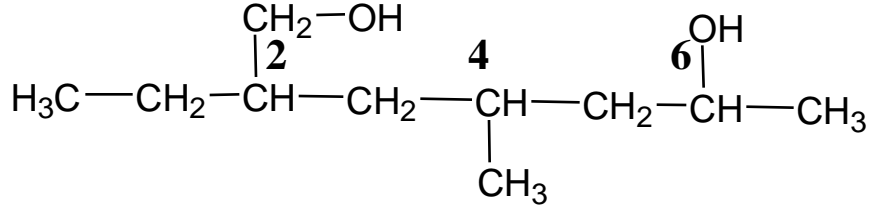


Cyclohexane-1,4-diol
ciklohexán-1,4-diol



Butane-1,3-diol
bután-1,3-diol

Szubsztitúciós nomenklatúra:
 azt a leghosszabb szénláncot amelyen
 a legtöbb hidroxilcsoport van,

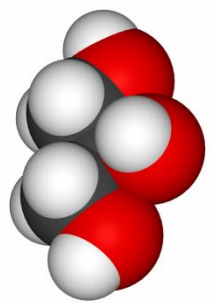
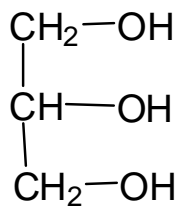


nev.gyak.:

- 2-Ethyl-4-methylheptane-1,6-diol
- 2-etil-4-metilheptán-1,6-diol
- 4-metil-2-etilheptán-1,6-diol (ABC sorrend rossz)

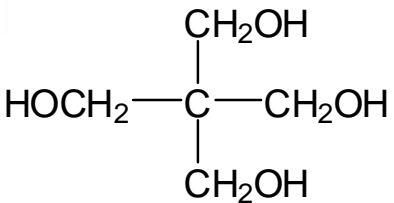
Többértékű alkoholok

glicerín

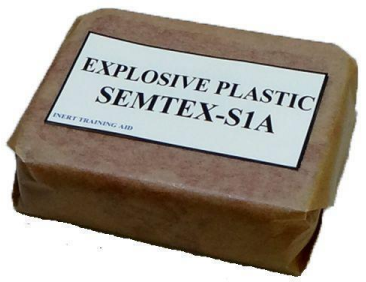
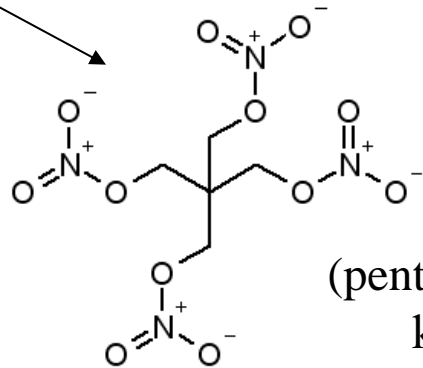
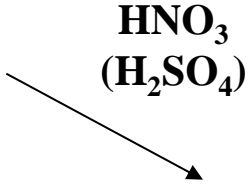


$\begin{array}{c} \text{CH}_2-\text{OH} \\ \\ (\text{CH}-\text{OH})_n \\ \\ \text{CH}_2-\text{OH} \end{array}$	n=2	bután-1,2,3,4-tetrol	tetrit
	n=3	pentán-1,2,3,4,5-pentol	pentit
	n=4	hexán-1,2,3,4,5,6-hexol	hexit

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



2,2-Bis(hydroxymethyl)-propane-1,3-diol
 2,2-bisz(hidroximetil)-propán-1,3-diol
 pentaerythritol
 pentaeritrit



PETN
 (pentaerythritol tetranitrate)

kiváló robbanószer 91
 Semtex plasztikbomba komponense

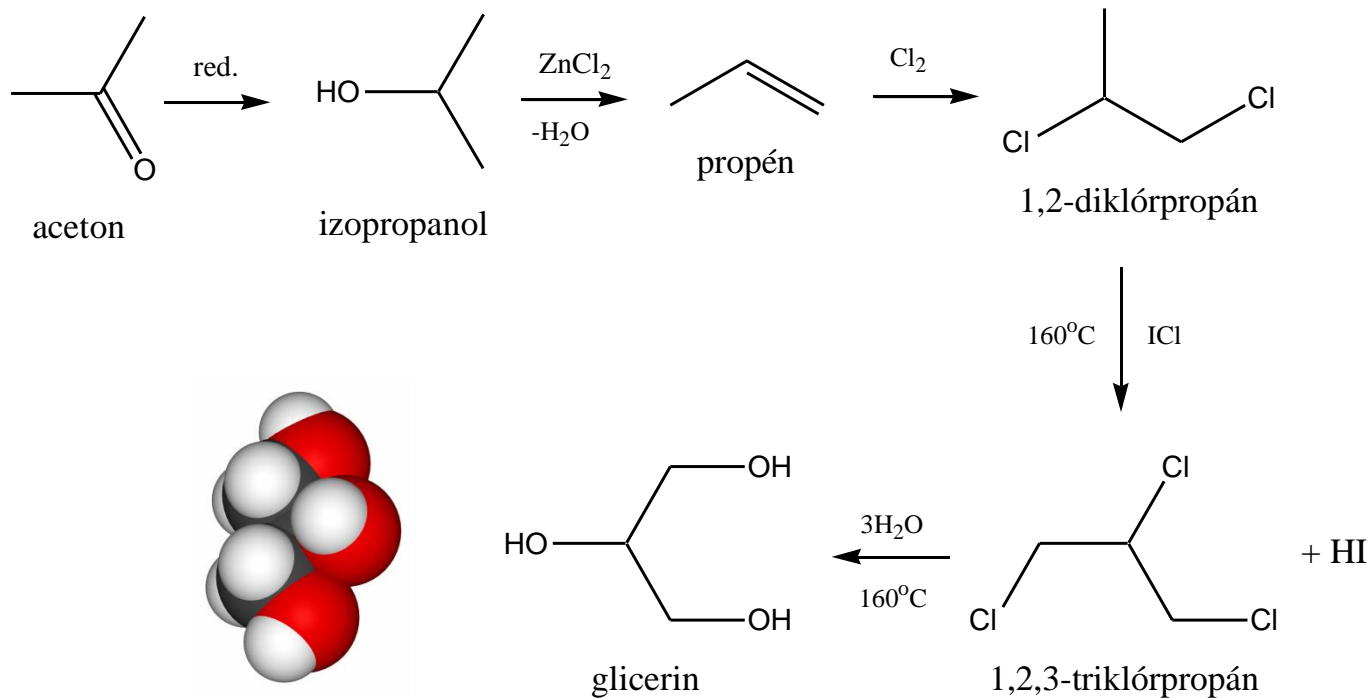
térhálósítás
 műgyanták,
 lakkok, stb.

Glicerín (*Scheele: 1779*): -oliva olaj vizes PbO szappanosítással nyerte

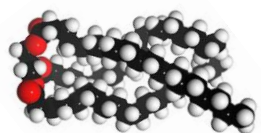
-*Berthelot (1853)* szerkezetazonosítás

Bruckner
I-1 324. o.

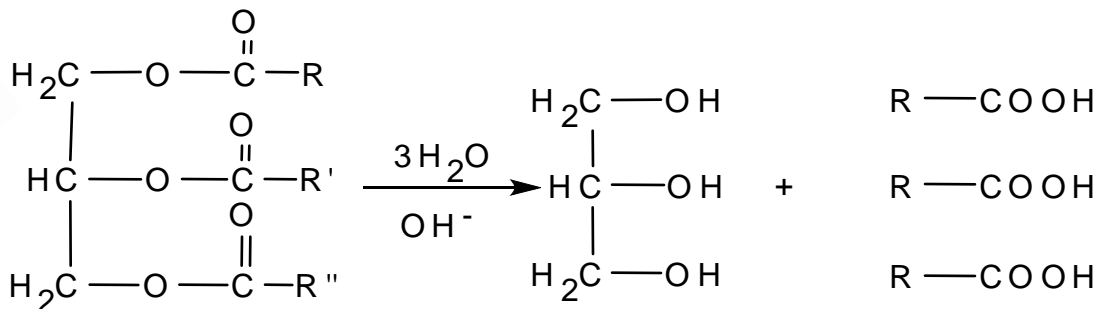
szintézis (1873) (régóta elavult eljárás,
igen sok lépésben, ma főleg hidrolízis útján)



izolálás és tisztítás: gliceridek (növényi, állati zsiradékokból)

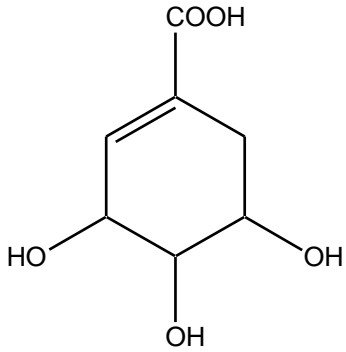


1) a hidrolízis



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

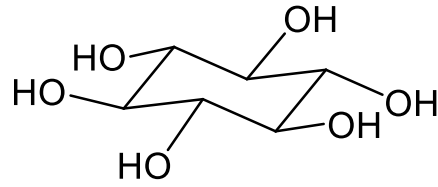
Példa:



sikimisav

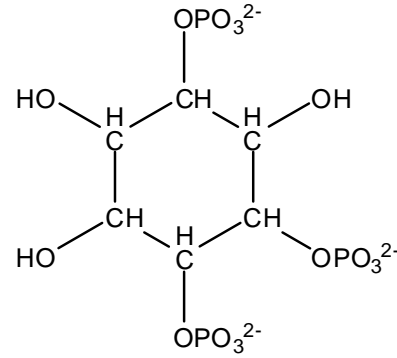
aminosav-bioszintézis

[Stryer 724]



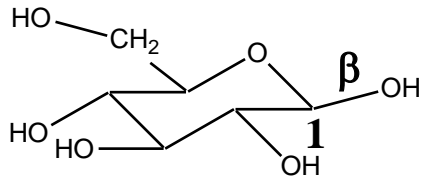
inositol
inozit

Az inozitnak hány
sztereoizomerje létezik?



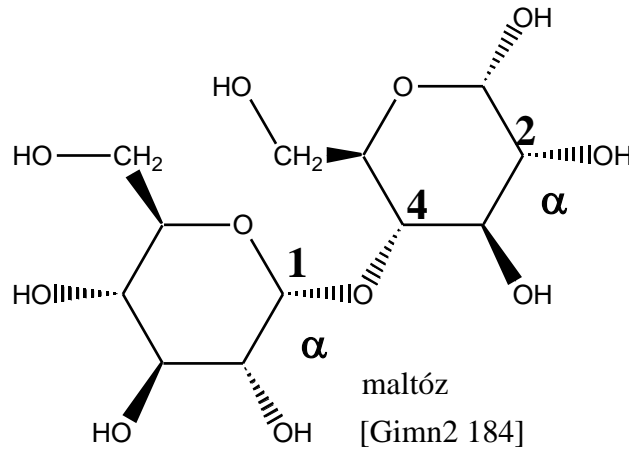
inozit-trifoszfát

IP₃ : Ca²⁺-szintet emel



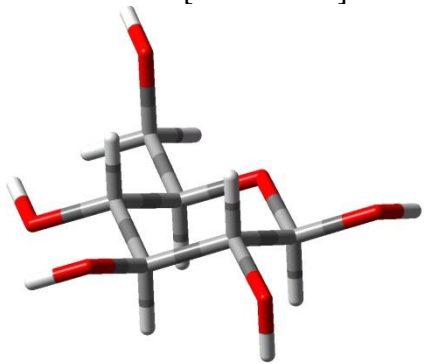
β-D-glükóz

[Gimn2 175]

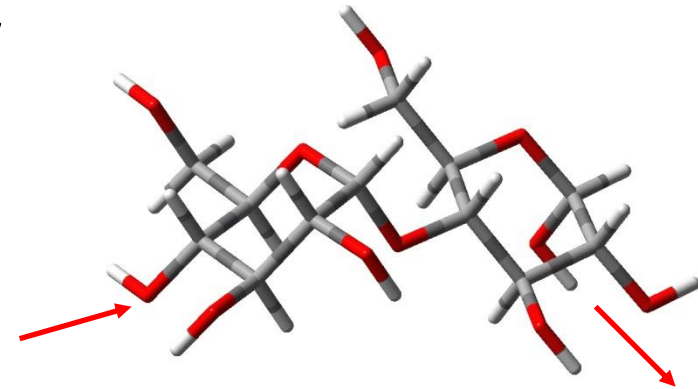


maltóz

[Gimn2 184]

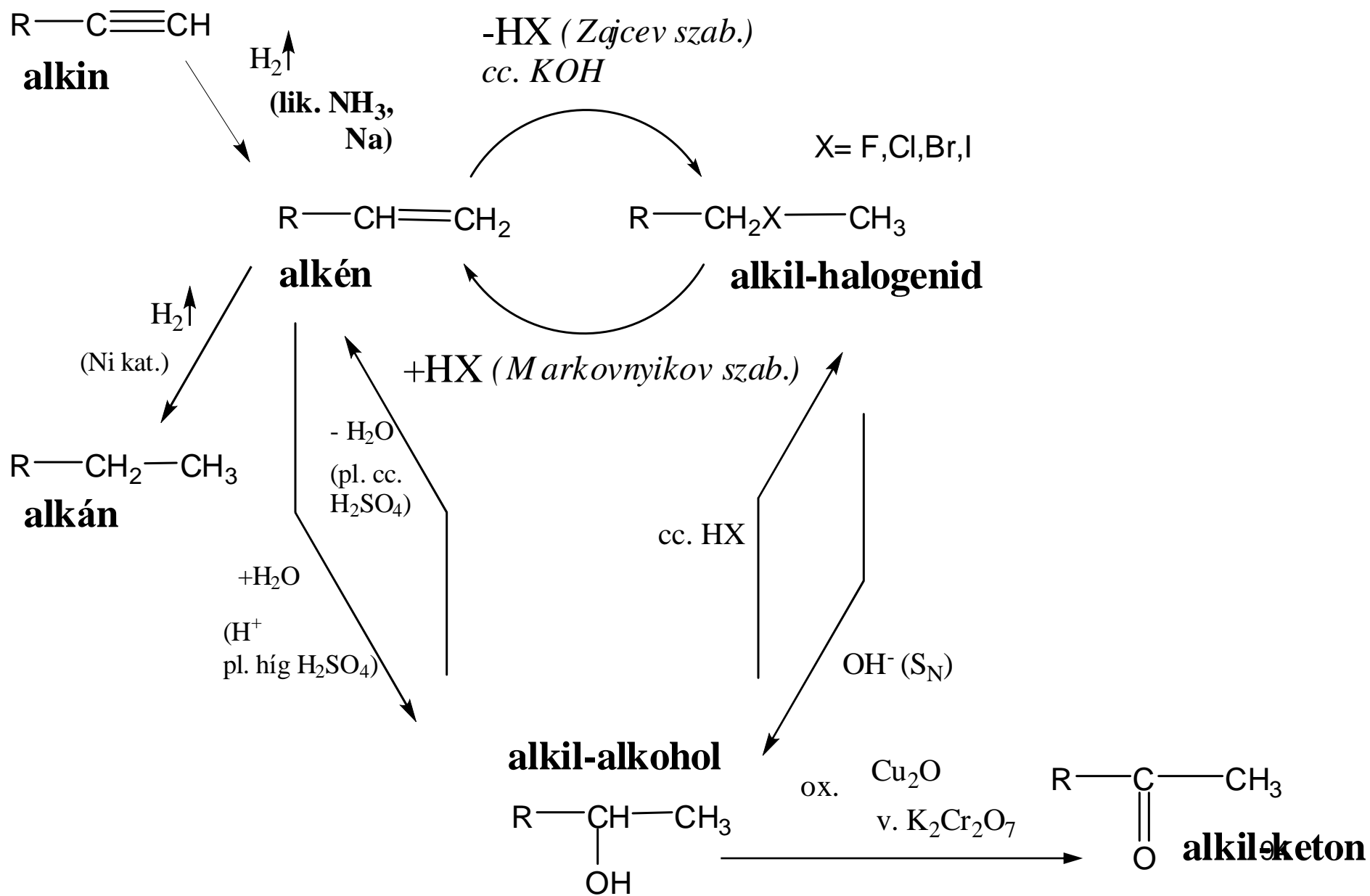


cellulóz (lineáris)
keményítő (spirális)



hidrolízis ⇒ cellobióz (β-forma)
hidrolízis ⇒ maltóz (α-forma)

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



5. Éterek

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

(Szn esetében az előtag „alkoxi”)

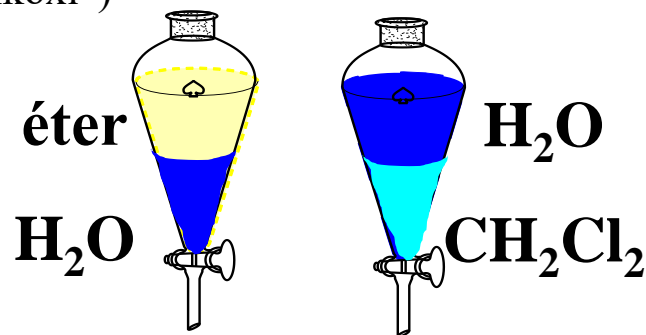
Víz két hidrogénjét alkilcsoportokkal helyettesítjük

szimmetrikus \Leftrightarrow nemszimmetrikus

($R-O-R$ pl. Et_2O) \Leftrightarrow (R^1-O-R^2 pl. $MeOEt$)

telített \Leftrightarrow telítetlen

nyíltlancú \Leftrightarrow gyűrűs



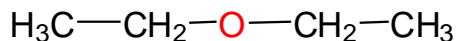
szimmetrikus telített



Methoxymethane

dimethyl ether
dimetil-éter

fp = **-23** °C



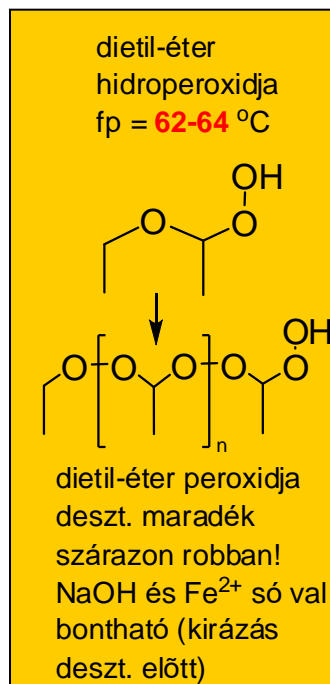
Ethoxy-ethane

diethyl ether
dietil-éter

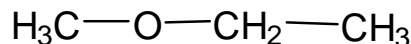
éter

fp = **34.6** °C

ρ = **0.71** g/cm³



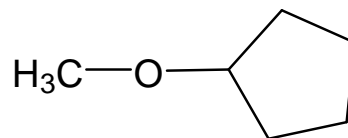
nem-szimmetrikus telített



Methoxyethane

ethyl methyl ether
etil-metil-éter

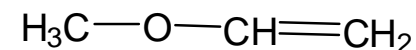
fp = **7.6** °C



Methoxycyclopentane
metoxiciklopentán

cyclopentyl methyl ether
ciklopentil-metil-éter

nem-szimmetrikus telítetlen



Methoxyethene

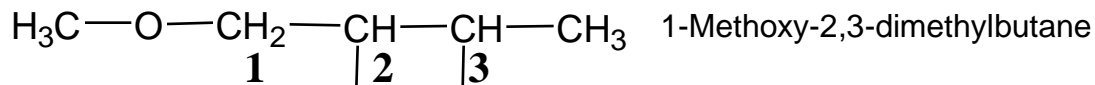
metoxietén

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.

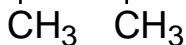
Szubsztitúciós nomenklatúra: (*Szn* esetében az előtag „alkoxi”)

a leghosszabb szénláncnak megfelelő alkil illetve alkoxi csoporttal képezzük a nevet



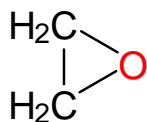
1-Methoxy-2,3-dimethylbutane

nev.gyak.:



1-metoxi-2,3-dimetilbután

Gyűrűs éterek

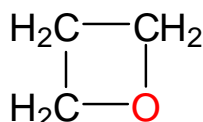


Oxirane

oxirán

fp = 11 °C

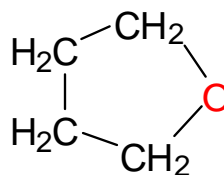
etilén-oxid



Oxetane

oxetán

fp = 49-50 °C



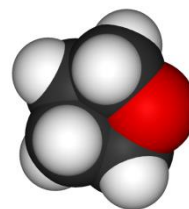
Oxolane

oxolán

Tetrahydrofuran

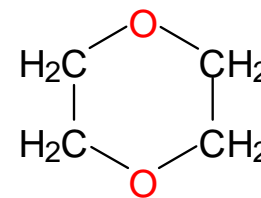
tetrahidrofurán

fp = 66 °C



poláris éter:

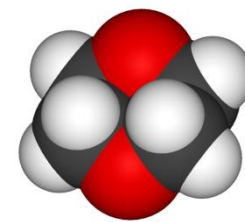
$\mu = 1,8$ Debye



1,4-Dioxane

1,4-dioxán

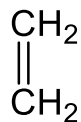
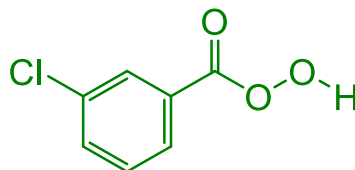
fp = 101,1 °C



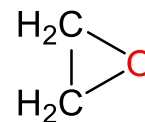
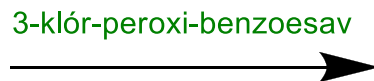
apoláris éter:

$\mu = 0$ Debye

Epoxidok előállítása:



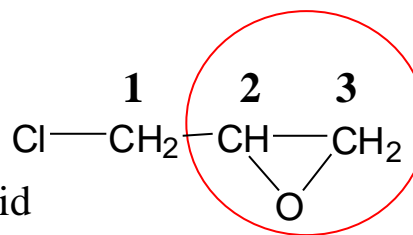
etilén



etilén-oxid

nev.gyak.:

szomszédos széneket összekötő éter az epoxid



2-(Chloromethyl)oxirane

2,3-epoxi-1-klórpropán

Példa:

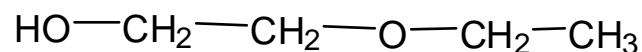


2-Methoxyethan-1-ol

2-metoxietán-1-ol

etilénglikol-monometiléter

metilcelloszolv



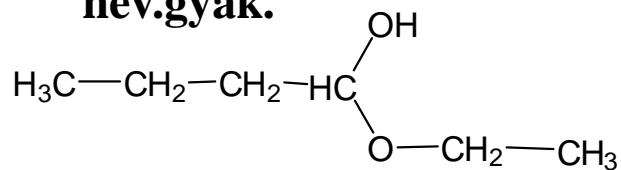
2-Ethoxyethan-1-ol

2-etoxietán-1-ol

etilénglikol-monoetiléter

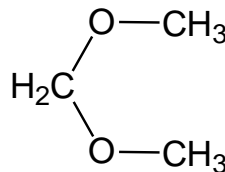
celloszolv

nev.gyak.



1-Ethoxy-butan-1-ol

1-etoxibután-1-ol

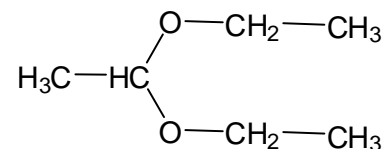


Dimethoxymethane

dimetoximetán

formaldehid-dimetil-acetál

metilál

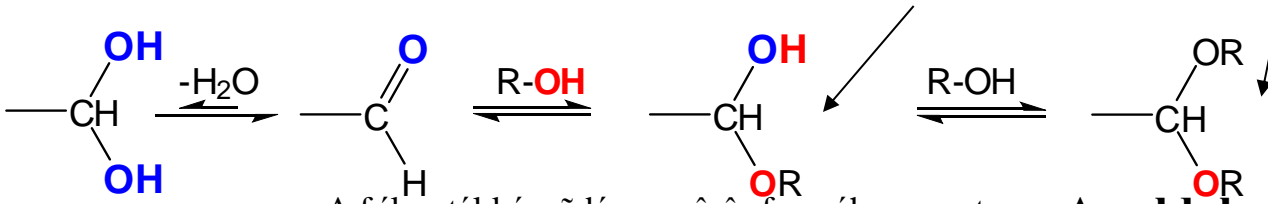


1,1-Diethoxyethane

1,1-dietoxietán

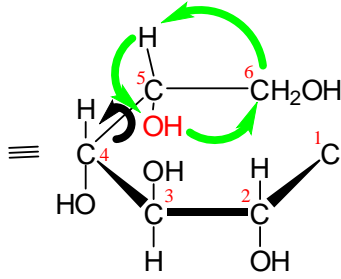
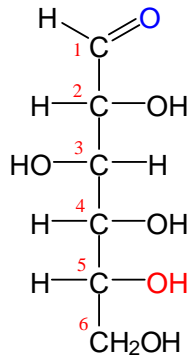
acetaldehyd-dietil avagy acetál

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

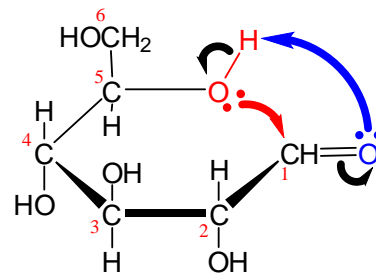


A félacetál képződés a gyűrűs formához vezet:

Az aldohexózok tényleges térszerkezete:



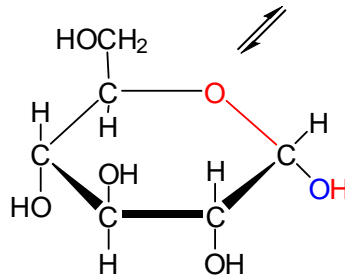
nyílt láncú D-glükóz



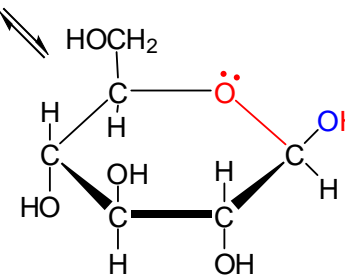
nyílt láncú D-glükóz

Ciklizálással
félacetál képződik,

kiralitáscentrummá
válík a C1-atom
(anomer szénatom)



α -D-(+)-glükopiranoz



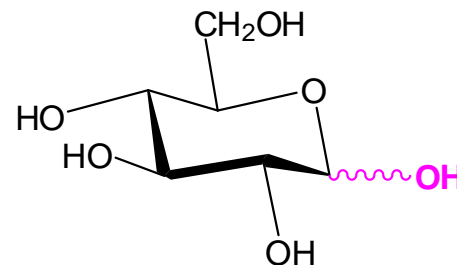
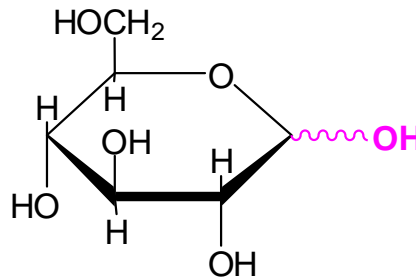
β -D-(+)-glükopiranoz

az így kialakuló
diasztereomerek

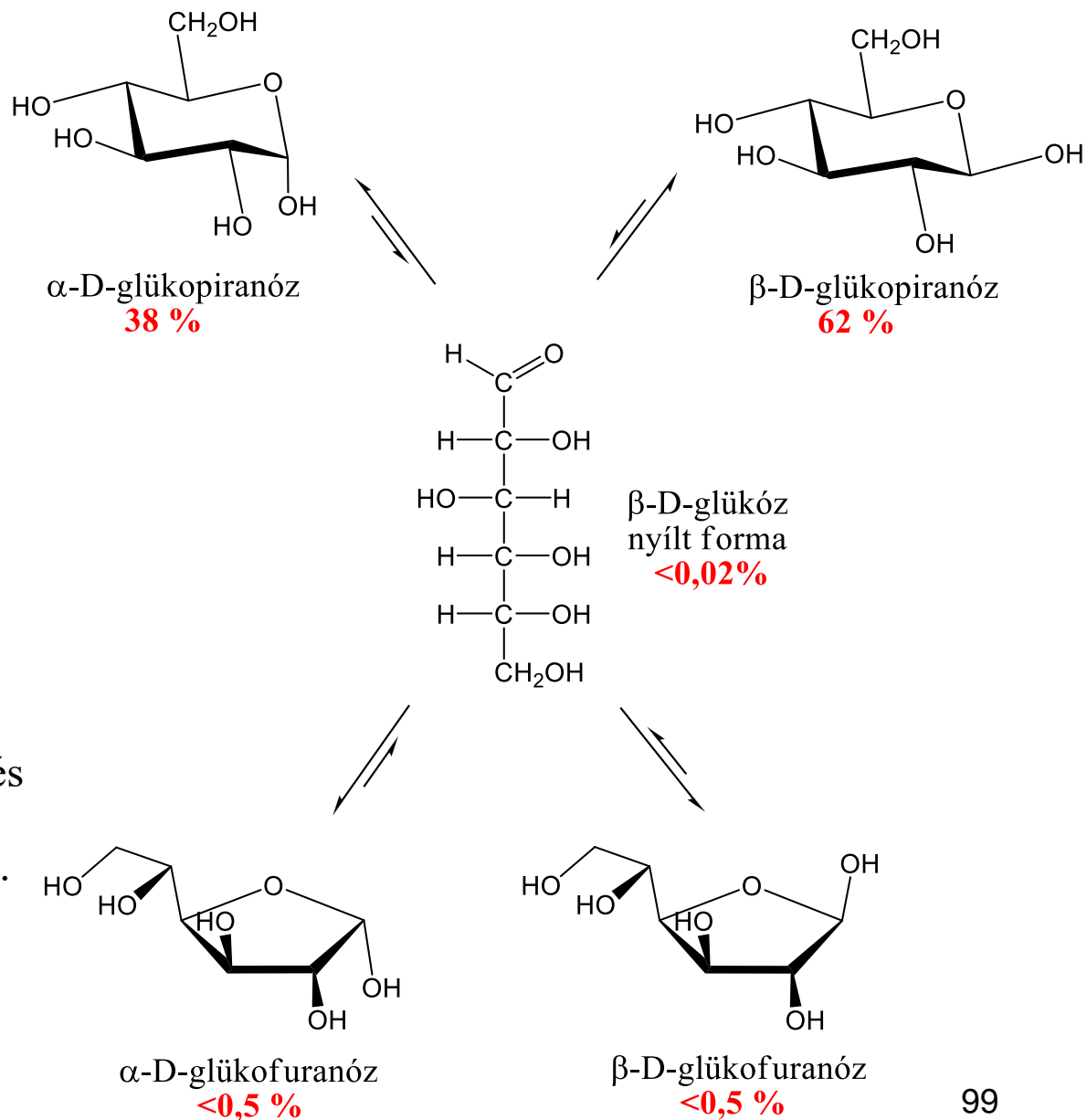
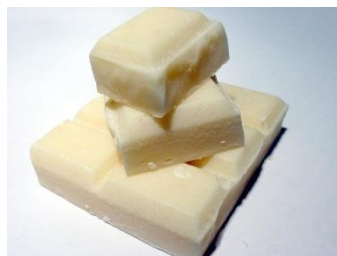
anomerek

α/β -D-(+)-glükopiranoz: az anomer konfiguráció nem definiált

**C1-epimerek vagy
 α -anomer ill. β -anomer**

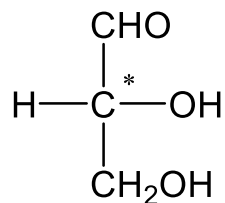


A D-glükóz anomerjeinek és izomereinek egyensúlya:

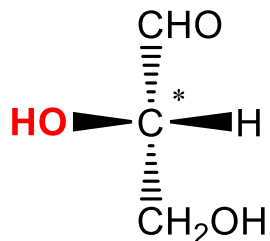


memo:

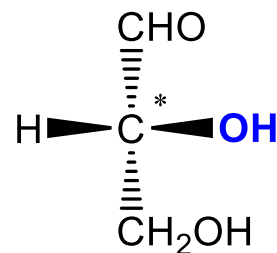
- 1) Oldatban az α - és β -anomerek illetve a furanoz- és piranozgyűrűk egymással termikus egyensúlyt tartanak.
- 2) A lineáris forma fajlagos súlya kicsi, jelenléte mégis fontos egyes jelenségek és reakciók magyarázatához.



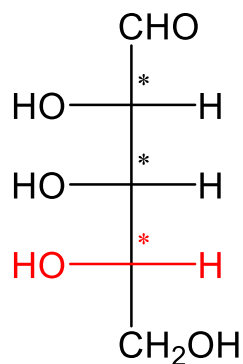
gliceraldehid
aldotrióz



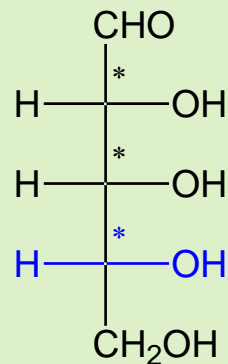
L-glicerinaldehid



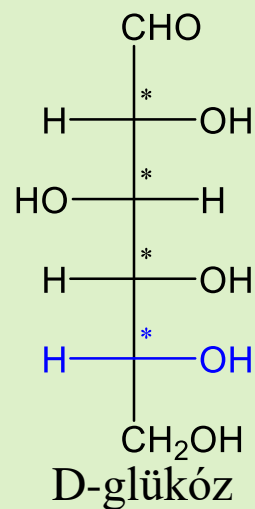
D-glicerinaldehid



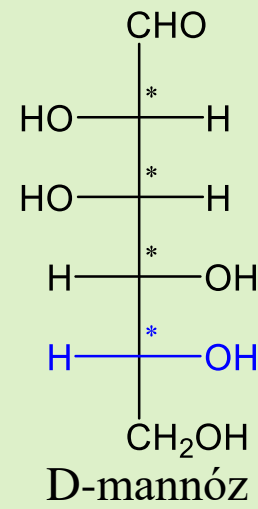
L-ribóz



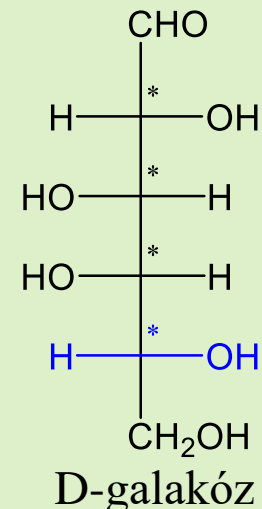
D-ribóz



D-glükóz



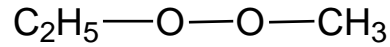
D-mannóz



D-galakóz

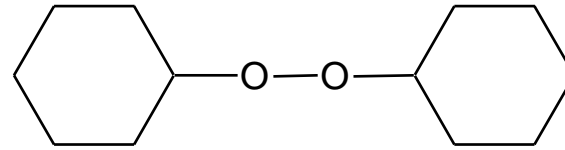
A természetben előforduló leggyakoribb D-sorozatbeli aldózok:

Peroxidok



Methylperoxyethane
metilperoxietán

etil-metil-peroxid

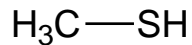


diciklohexil-peroxid

IV. Kéntartalmú szénvegyületek

alapszénhidrogén: nyílt \Leftrightarrow gyűrűs
alapszénhidrogén: telített \Leftrightarrow telítetlen

1. Tiolok ($\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{SH}$): típusnév: alkántiol, tioalkohol -SH „merkpto” csoport (elavult) előtag: szulfanil, utótag: tiol



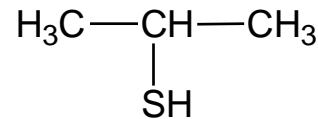
Methanethiol

metántiol



Ethanethiol

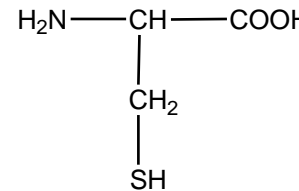
etántiol



Propane-2-thiol

2-propántiol

Példa:



cisztein

metil-hidrogén-szulfid

metil-merkaptán

etil-hidrogén-szulfid

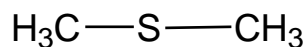
etil-merkaptán

izopropil-hidrogén-szulfid

izopropil-merkaptán

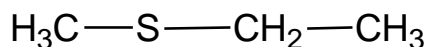
2. Tioéterek szulfidok R^1-S-R^2

típusnév: dialkil-szulfid (tioéter)



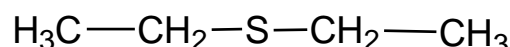
Methylsulfanylmethane

dimetil-szulfid



Methylsulfanylethane

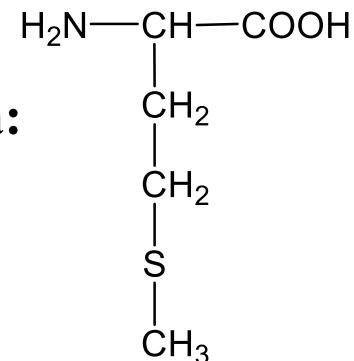
metil-etil-szulfid



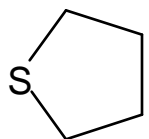
Ethylsulfanyl-ethane

dietil-szulfid

Példa:



metionin



Tetrahydrothiophene
tetrahidrotiofén

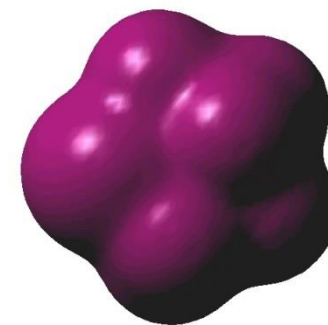
thiolane
tiolán



Illékony, bűdös, színtelen folyadék
op: $-96^\circ C$, fp: $119^\circ C$
földgáz „illatosítására” használják

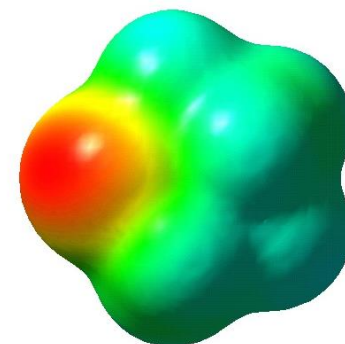
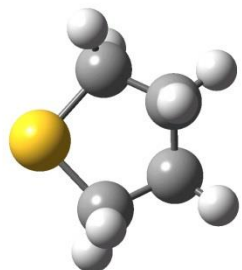
A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.)
„izo-felszine”

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

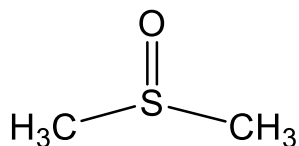


A teljes elektronsűrűség ($\rho \geq 0.0004$ a.u.)
„izo-felszínén” színnel kódolt
elektrosztatikus potenciálérték

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

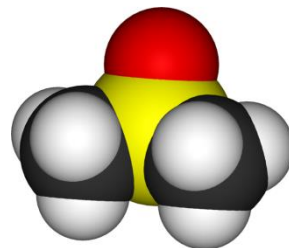


3. Szulfoxidok és szulfonok



Methylsulfinylmethane
metilszulfonilmetán

dimethyl sulfoxide
dimetil-szulfoxid



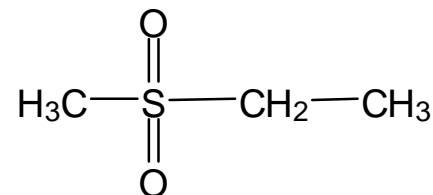
DMSO:

dipoláris aprotikus oldószer

op: 18.5°C, fp: 189°C

érdekesség: PCR reakcióknál

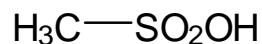
hasz., meggátolja a DNS kettős
spirál téralkat kialakulását



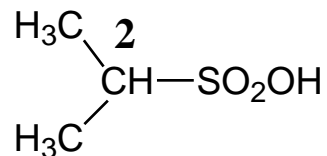
Methylsulfonylethane
metilszulfoniletán

ethyl methyl sulfone
metil-etil-szulfon

4. Szulfonsavak

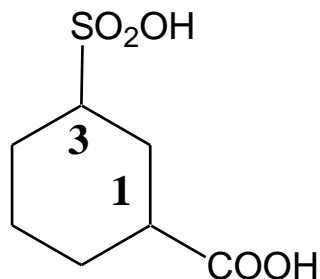


Methanesulfonic acid
metánszulfonsav



Propane-2-sulfonic acid
propán-2-szulfonosav

nev.gyak.
rangok!

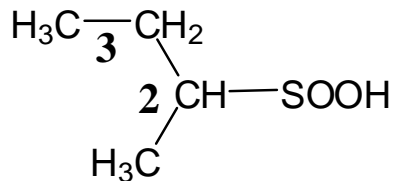


3-Sulfocyclohexane-1-carboxylic acid

3-szulfociklohexán-1-karbonsav

5. Szulfínsavak

R¹-SO-OH

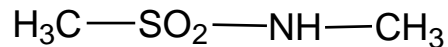


Butane-2-sulfinic acid

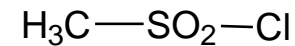
bután-2-szulfínsav

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

metánszulfonamid

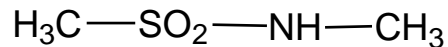


N-metil-metánszulfonamid

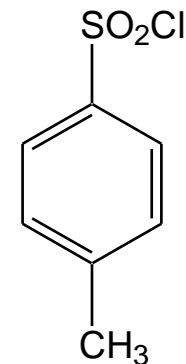


metánszulfonil-klorid

mezil-klorid



N-metil-metánszulfonamid



4-Methyl-benzenesulfonyl chloride

tozil-klorid

6. Szulfénsavak

R¹-S-OH

Összefoglaló (a fejezet legfontosabb fogalmai)

- elektronegativitás
- kötésrendszerek és töltésviszonyok
- izoméria: konstitúciós és sztereoizoméria
- intermolekuláris-erők: Van der Waals-, London- vagy diszperziós-erők
- reaktivitás, funkcióscsoport és gyűrűfeszültség
- téralkat és konformáció
- oxidáció és redukció
- alkánok, alkének és alkinek elektronszerkezete (hibridállapotok)
- konjugáció, delokalizáció és a határszerkezet(ek)
- stabilitás (alkének)
- induktív effektus
- optikai izoméria és kiralitás
- a hidrogén-híd
- tautoméria (nem azonos a határszerkezettel)
- egy molekula „több” formája és ezek stabilitása (monoszacharidok)