

# V. Nitrogéntartalmú szénvegyületek

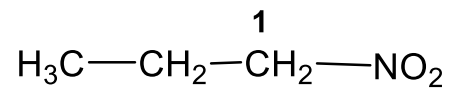


Nitroethene  
nitroetén

## 1. Nitrovegyületek ( $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}\text{NO}_2$ )

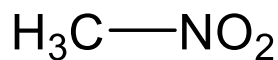
típusnév: nitroalkán

Az alkán hidrogénjét  $\Rightarrow \text{NO}_2$ -re cseréljük  
szubsztitúciós név: „nitro” mindig előtag

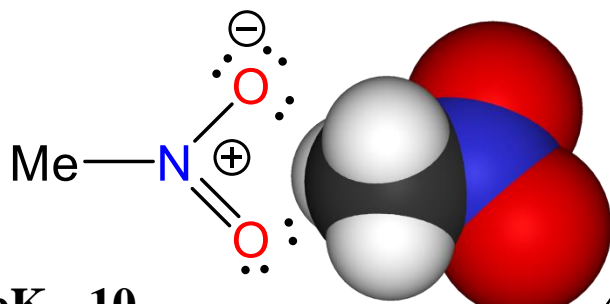


1-Nitropropane 1-nitropropán  
izomerek száma: 2

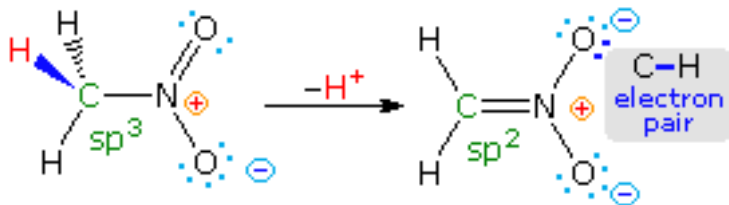
színtelen, éterre emlékeztető szagú folyadék



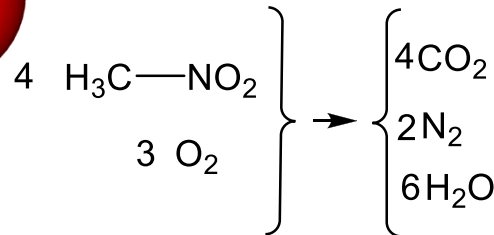
Nitromethane  
nitrometán



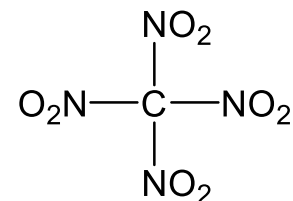
$\text{pK}_a \sim 10$



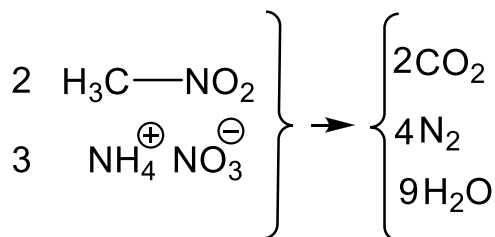
major structural reorganization



A "nitro" Nitrometán égése



Tetranitromethane  
tetranitrometán



Nitrometán és ammónium-nitrát keveréke robbanószer

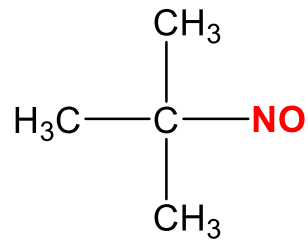


A nitro folyadék előnye a hagyományos szénhidrogénekkel (pl. benzin) szemben az, hogy égéséhez tizedannyi levegő szükséges

## 2. Nitrozovegyületek (C<sub>n</sub>H<sub>2n+1</sub>NO)

típusnév: nitrozoalkán

az alkán hidrogénjét ⇒ NO –ra cseréljük  
szubsztitúciós név: „nitrozo” előtag

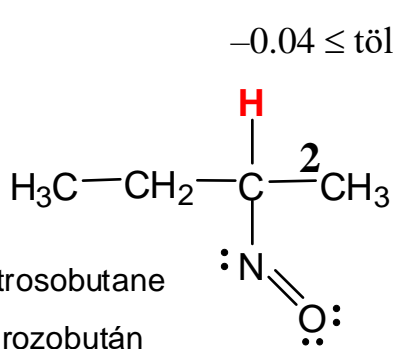


2-Methyl-2-nitrosopropane  
2-metil-2-nitrozopropán

**tautoméria** (egy H és egy  
kötés helyzete különbözik)

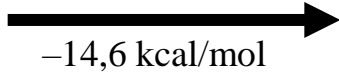
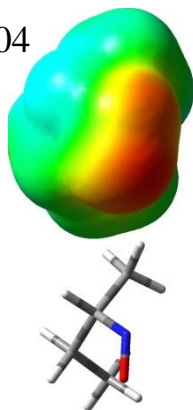
(memo: lásd még  
vinilalkohol)

Alifás nitrozovegyület  
inkább az izonitrozó  
(oxovegyület oximja)  
formában van jelen.

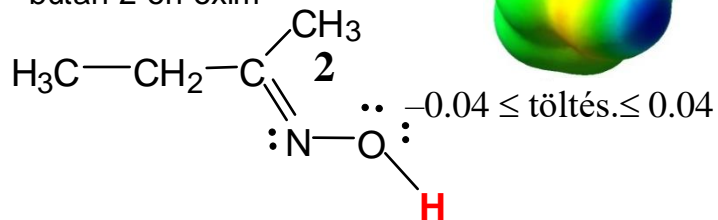


2-Nitrosobutane  
2-nitrozobután

-0.04 ≤ töltés. ≤ 0.04

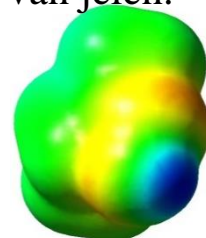


Butan-2-one oxime  
butan-2-on-oxim

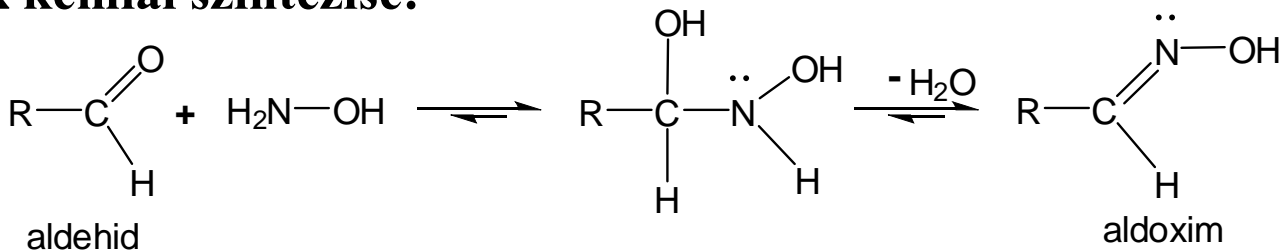


μ = 0.83 Debye  
E(RHF/6-31G(d)) = -285.95921885 Hartree

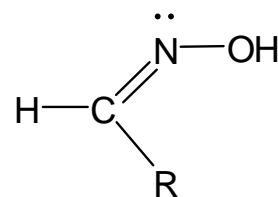
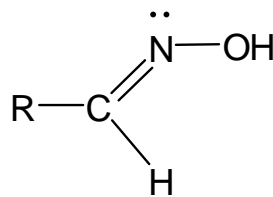
-0.04 ≤ töltés. ≤ 0.04



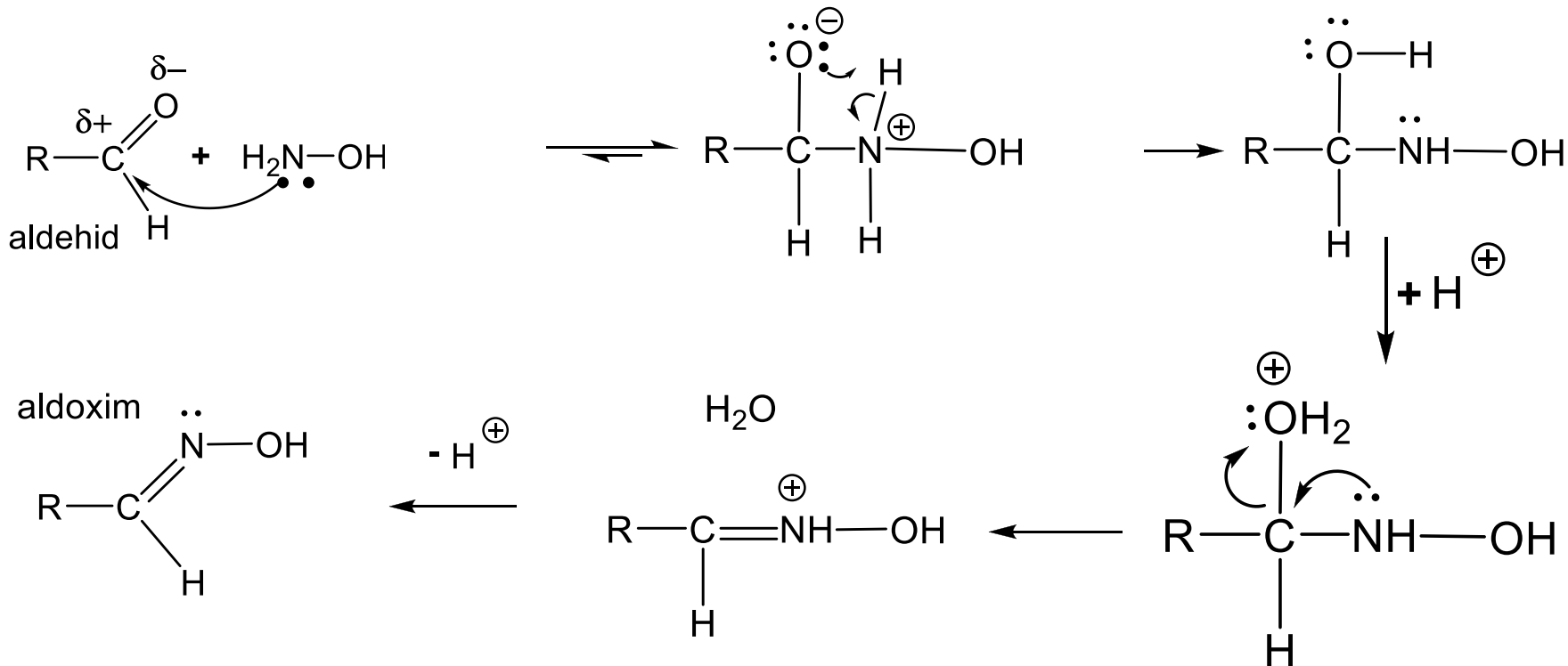
### Aldoximok kémiai szintézise:



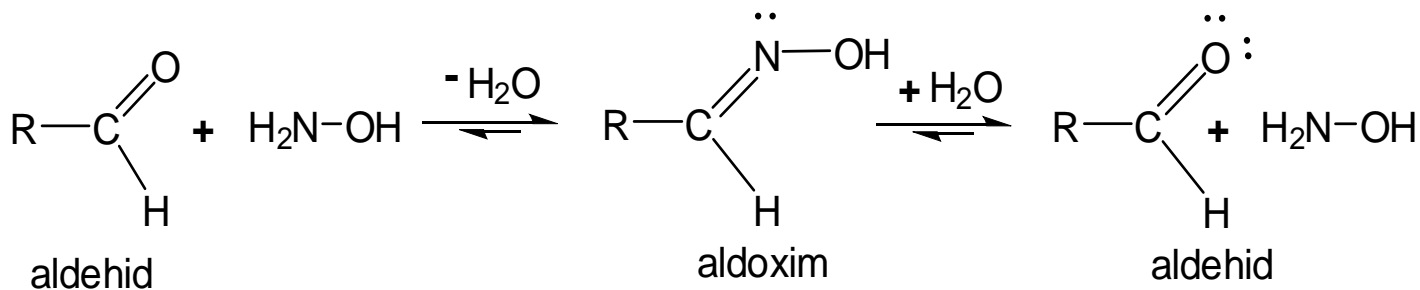
cisz-transz izoméria



## Aldoximok előállításának reakciómechanizmusa:



## Aldoximok mint védőcsoportok:



Az aldoxim elbontása enyhén savas közegben (pl. Ac-OH) történhet.

### 3. Aminok ( $C_nH_{2n+1}NH_2$ ) típusnév: alkil-amin

Ammónia hidrogénjét  $\Rightarrow$  alkil csop.-ra cser.

szubsztitúciós név:

előtag: „amino” (aminoecetsav)

utótag: „amin” (etánamin)

csop.funkciós név: alkil-amin, stb.

alapszénhidrogén: nyílt  $\Leftrightarrow$  gyűrűs

alapszénhidrogén: telített  $\Leftrightarrow$  telítetlen

$[NH_2]_n$   $n=1, 2, 3, \dots$  egy-, két-, többértékű amin

N-hez kapcsolódó szénatomok száma szerint

: elsőrendű  $\Leftrightarrow$  másodrendű  $\Leftrightarrow$  harmadrendű

primer

szekunder

tercier

$(RNH_2)$

$(R^1R^2NH)$

$(R^1R^2R^3N)$

negyedrendű (kvaterner) ammónium ion  $(R^1R^2R^3R^4N^+)$

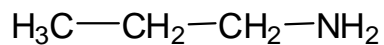
$NH_2$ -k elhelyezkedése szerint: geminális  $\Leftrightarrow$  vicinális  $\Leftrightarrow$  diszjunkt

#### A) Egyértékű primer aminok: $RNH_2$



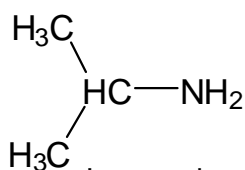
Ethylamine

etil-amin



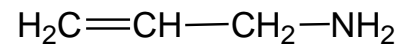
Propylamine

propil-amin



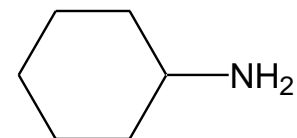
Isopropylamine

izopropil-amin



Allylamine

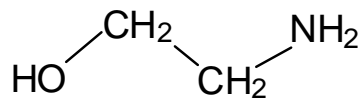
allil-amin



Cyclohexylamine

ciklohexil-amin

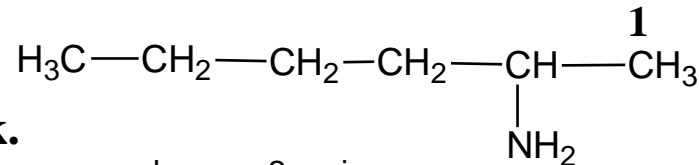
## példa:



2-Amino-ethan-1-ol

2-aminoetán-1-ol

kolamin



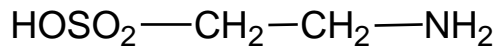
nev.gyak.

hexane-2-amine  
hexán-2-amin (Szn)  
(hexan-2-yle)-amine  
(hexán-2-il)-amin (Csn)

## ikerionos szerkezet:

$\mu = 4.69$  Debye  
 $E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$   
 $-752.18757694$  Hartree

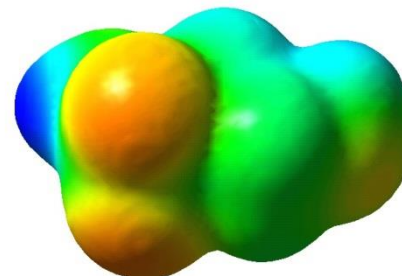
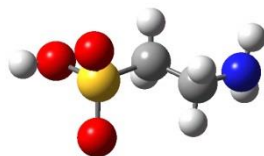
piros                  kék  
 $-0.09 \leq \text{töltés} \leq 0.09$



2-Aminoethanesulfonic acid

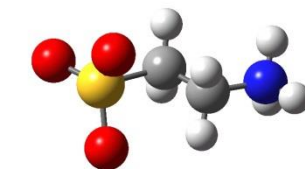
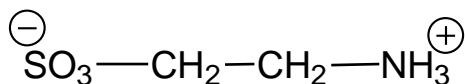
2-aminoetánszulfonsav

taurin



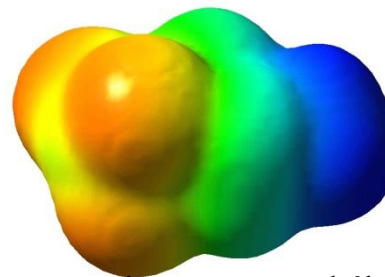
**33.6 kcal/mol**

Bruckner I-1 432  
epesavak alkotórésze



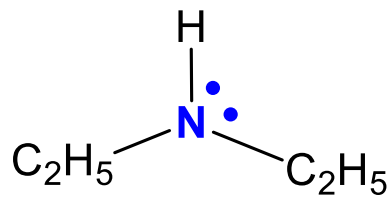
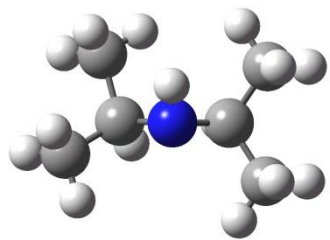
$\mu = 18.35$  Debye  
 $E(\text{RHF}/3\text{-}21\text{G}) =$   
 $-752.13406739$  Hartree

piros                  kék  
 $-0.15 \leq \text{töltés} \leq 0.15$



## B) Egyértékű szekunder aminok $R^1R^2NH$

- szimmetrikus (di- vagy bisz)



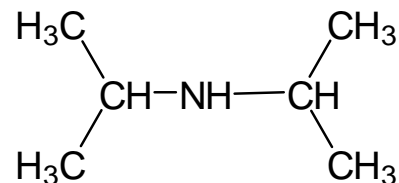
Diethylamine dietil-amin

gyúlékony, színtelen folyadék,  
kellemetlen szagú, erős szerves bázis

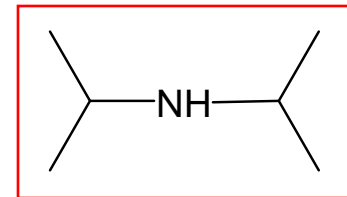
Izoméria:



Dipropylamine  
dipropil-amin



Diisopropyl-amine  
diizopropil-amin

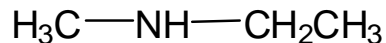


nev.gyak.:

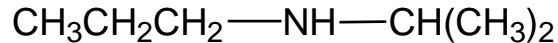


Bis(2-chloroethyl)amine  
bisz(2-klóretil)-amin

- nem-szimmetrikus

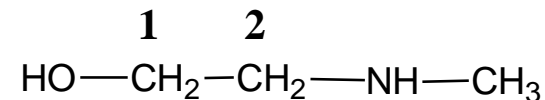


Ethylmethanamine  
etil-metilamin



N-Isopropylpropylamine  
N-izopropil-propil-amin

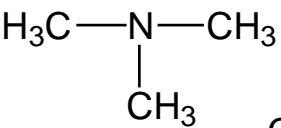
nev.gyak.  
rangok!



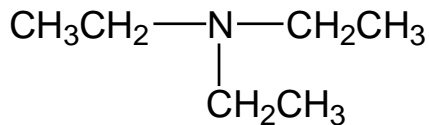
2-Methylaminoethan-1-ol

2-metilamino-etán-1-ol 6

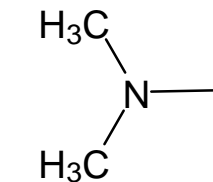
# C) Egyértékű tercier aminok: $R^1R^2R^3N$



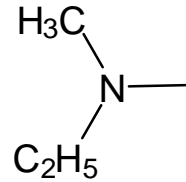
Trimethylamine  
trimetil-amin



Triethylamine  
trietyl-amin



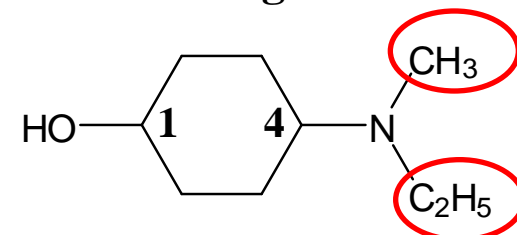
N,N-dimetilamino



N-metil-N-etilamino

**csoportnév:**

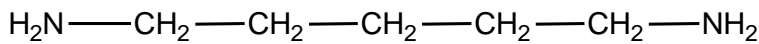
**nev.gyak.  
rangok!**



4-(N-Ethyl-N-methylamino)cyclohexan-1-ol  
4-(N-metil-N-etilamino)ciklohexan-1-ol

**Példa:** Hullaméreg

(Lys bomlásterméke)



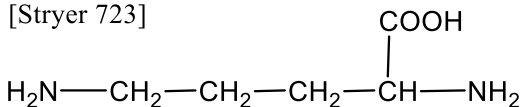
Pentane-1,5-diamine

pentán-1,5-diamin

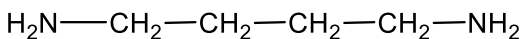
kadaverin

## A hem bioszintézisének kezdő lépései:

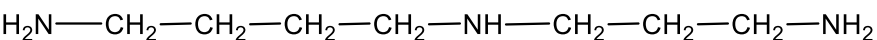
[Stryer 723]



2,5-Diaminopentánsav

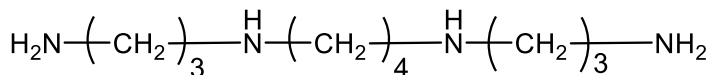


ornitin



putreszcin

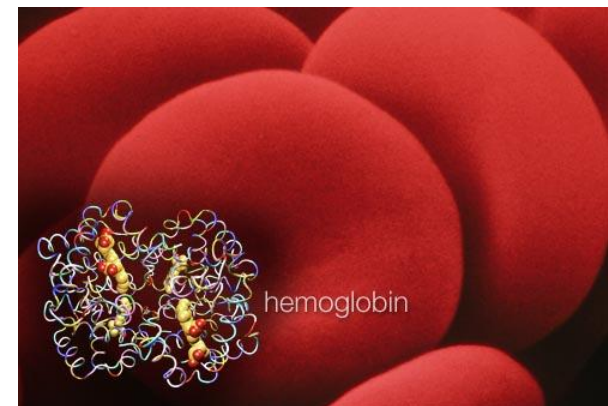
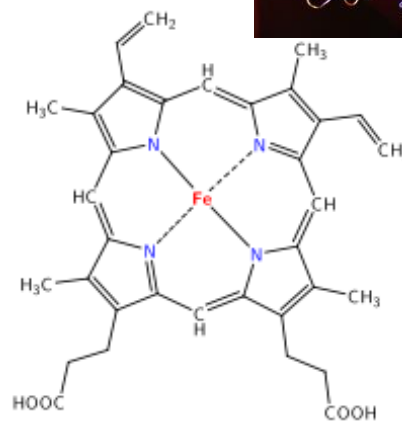
spermidin



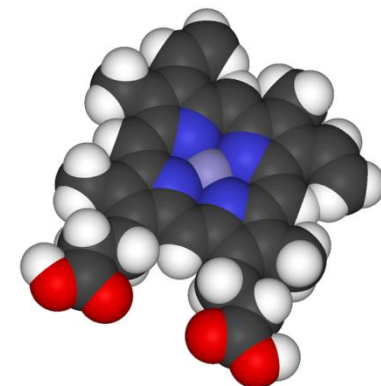
spermin

hem

## Hem B



hemoglobin



A globin nevű fehérjéhez kapcsolódó hem alkotja a vörösvértestekben a hemoglobint.



# Polaritás: $\text{RNH}_2 > \text{R}^1\text{R}^2\text{NH} > \text{R}^1\text{R}^2\text{R}^3\text{N}$

**MeNH<sub>2</sub>**

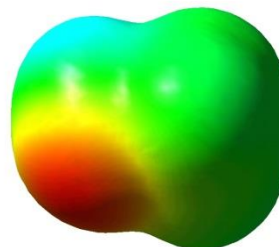
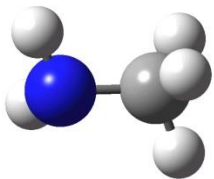
$\mu=1.54$  Debye RHF/6-31G(d)

$\rho \geq 0.0004$  a.u.

piros

kék

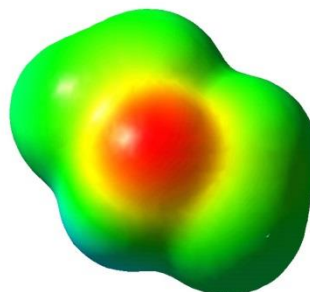
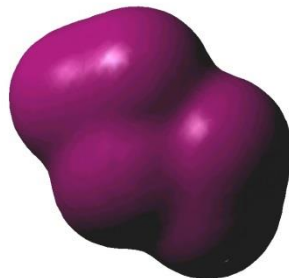
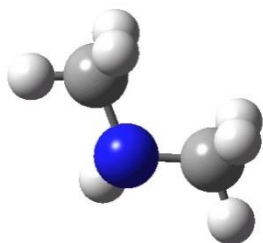
$-0.06 \leq \text{töltés} \leq 0.06$



**Me<sub>2</sub>NH**

$\mu=1.14$  Debye RHF/6-31G(d)

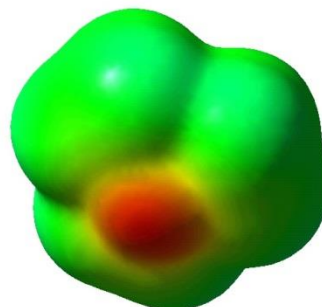
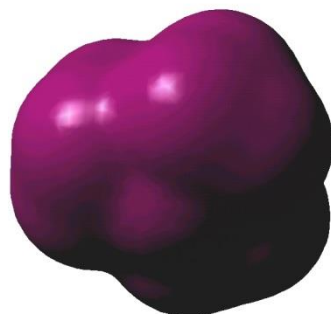
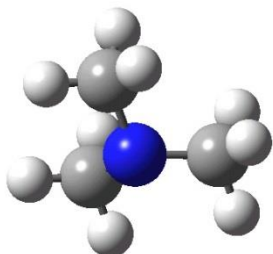
$\rho \geq 0.0004$  a.u.



**Me<sub>3</sub>N**

$\mu=0.74$  Debye RHF/6-31G(d)

$-0.05 \leq \text{töltés} \leq 0.05$



**-bázicitás gázfázisban:**

az ónium só stabilitási sorrendje számít, ami:  
 $\text{R}^1\text{R}^2\text{R}^3\text{N} > \text{R}^1\text{R}^2\text{NH} > \text{RNH}_2$   
(a Me csop. +I effektusa - elektronküldés N-re: stabilizálja a sót)

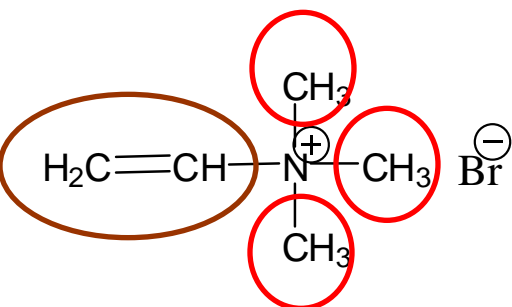
**-bázicitás protikus közegben:**

a szolvatált ónium só stabilitási sorrendje számít: a szekunder amin ( $\text{R}^1\text{R}^2\text{NH}$ ) a legstabilabb.

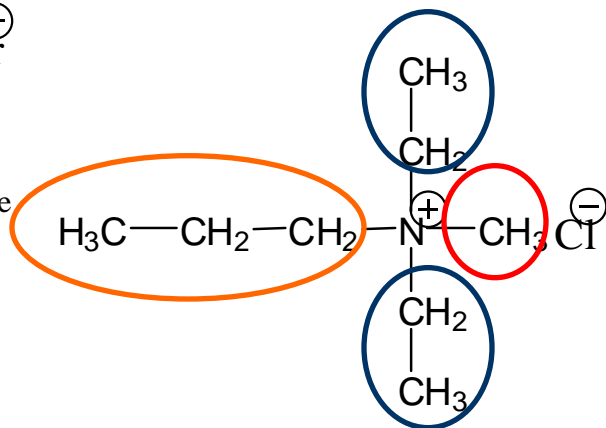
*Kajtár: 383*



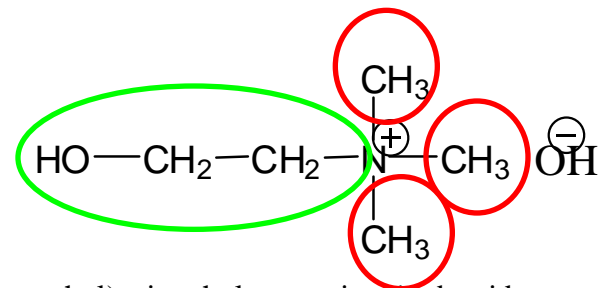
## D) Kvaterner ammónium sók



Trimethylvinylammonium bromide  
trimetil-vinil-ammónium-bromid



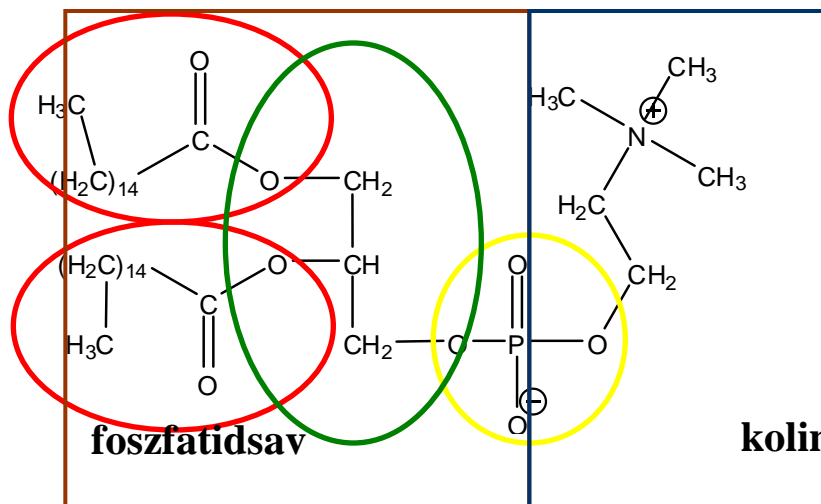
Diethyl-methylpropylammonium chloride  
dietil-metil-propil-ammónium-klorid



(2-Hydroxyethyl)-trimethylammonium hydroxide  
(2-hidroxietil)-trimetil-ammónium-hidroxid

**kolin**

**példa:**



**palmitinsav**

**glicerin**

**foszforsav**

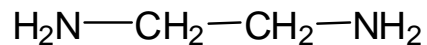
[Gimn2 137]

**lecitin**

(foszfatidil-kolin)  
sejthártyák építőeleme

**kolin**

## E) Többértékű aminok



Ethane-1,2-diamine ethylenediamine

etán-1,2-diamin

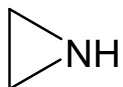
**etilén-diamin**



Propane-1,3-diamine

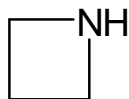
propán-1,3-diamin

## F) Gyűrűs aminok



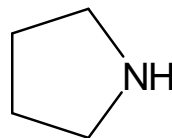
Aziridine

etilén-imin



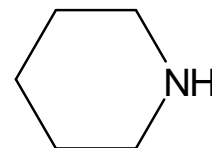
Azetidine

trimetilén-imin



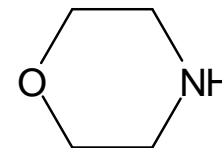
Pyrrolidine

pirrolidin



Piperidine

piperidin



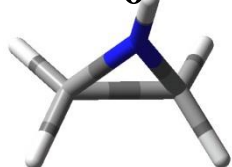
Morpholine

morfolin

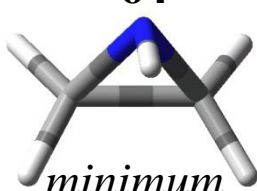
**-18.4 kcal/mol**

**0°**

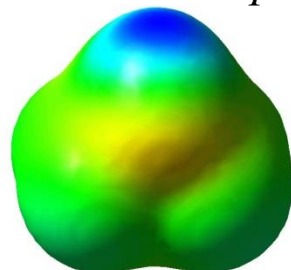
**64°**



*átmeneti állapot*

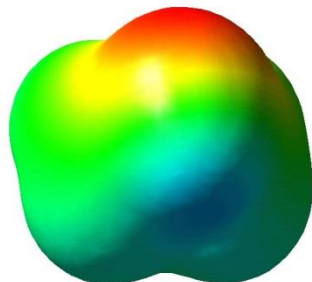


*minimum*



$\mu = 0.09$  Debye

$E(\text{RHF}/6-311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -133.04841154$  Hartree



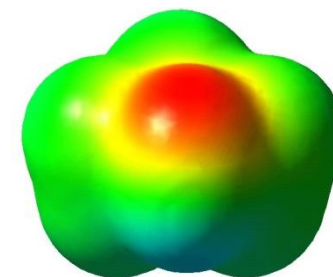
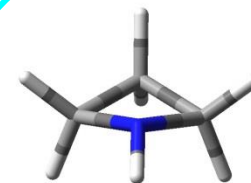
$\mu = 1.93$  Debye

$E(\text{RHF}/6-311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -133.07778787$  Hartree

piros

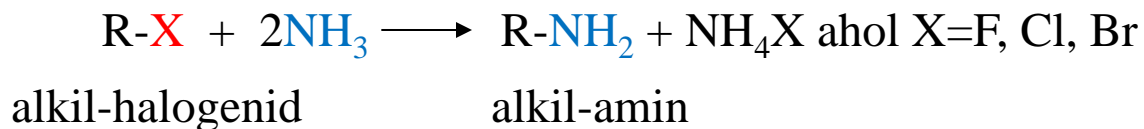
$-0.05 \leq \text{töltés} \leq 0.05$

kék



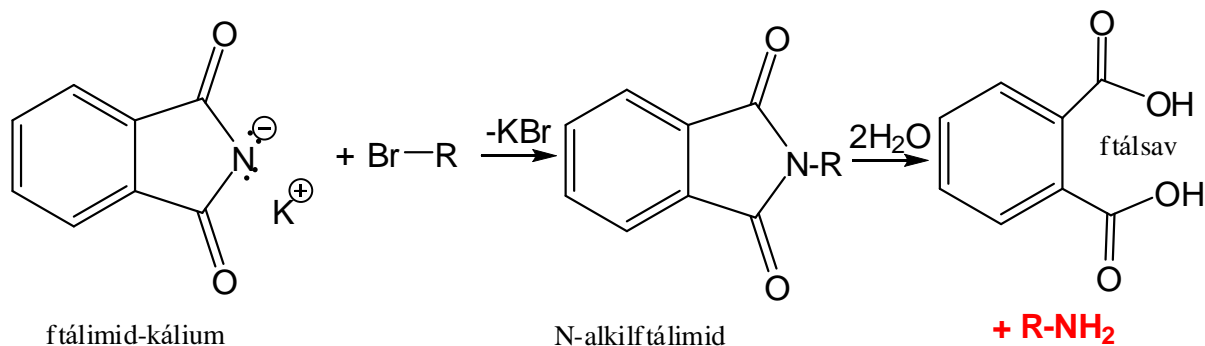
$\mu = 1.45$  Debye

$E(\text{RHF}/6-311++\text{G}(\text{d},\text{p})) = -172.12678252$  Hartree

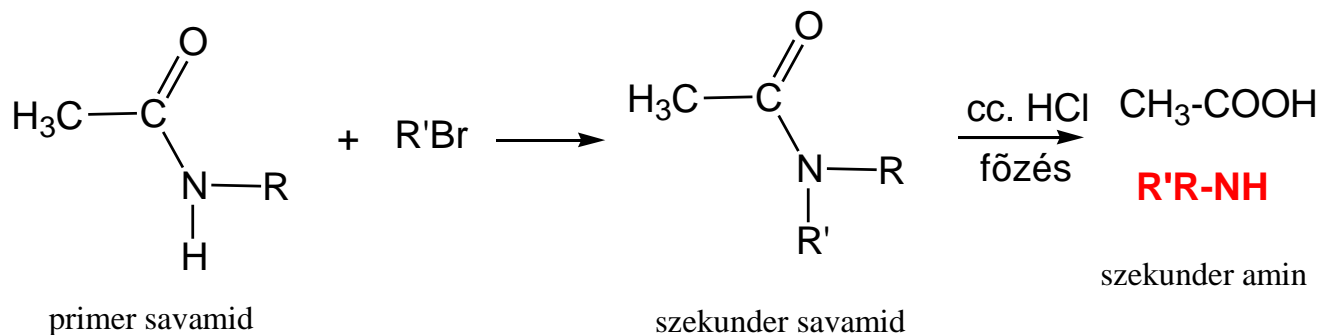


**gond:** keveréket kapunk  
( $R-NH_2$ ,  $R_2NH$ ,  $R_3N$  és  $R_4NX$ )  
„**túlalkileződés**” primer, szekunder,  
tercier, kvaterner aminok is képződnek

## 1. Primer aminok előállítása: (Gabriel-féle szint. 1887)



## 2. Szekunder aminok előállítása:

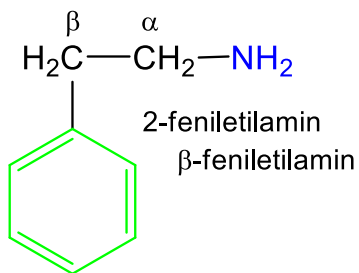
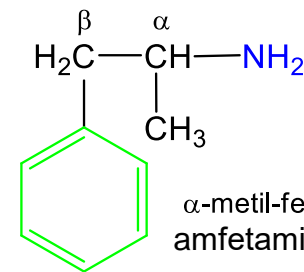


## 3. Tercier aminok előállítása: szekunder aminok reakciója alkil-halogenidekkel.



# A szerelem molekulái:

egy természetes **serkentőszer**: a feniletilamin



Egy *amfetamin* származék.

**Az elnevezés eredete:** **alfa-metil-feniletilamin** alapvegyülettől származik.

**Hatásmechanizmus:** az emlősök központi idegrendszerében transzmitter és neuro-modulátor szerepet tölt be. Emeli az energia- és az éberségi szintet mint más amfetamin (adrenalin és noradrenalin). A **stressz-reakció** (küzdelem vagy menekülés) is amfetaminok által „vezérelt”.

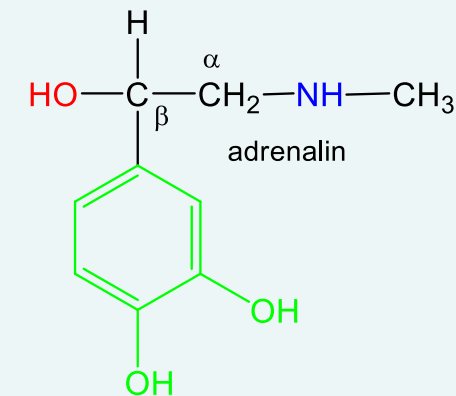
**A „csábítás” molekulái:**

- **feromonok** (körülöttünk vannak, bejutva endorfinokat pl.

**Met\_enkefalint** (Tyr-Gly-Gly-Phe-Met), **oxitocint** (magas a szintje a szülésnél, az orgazmus esetén (férfi agyalapi mirigy is termel oxitocint)), stb. szabadítanak fel,

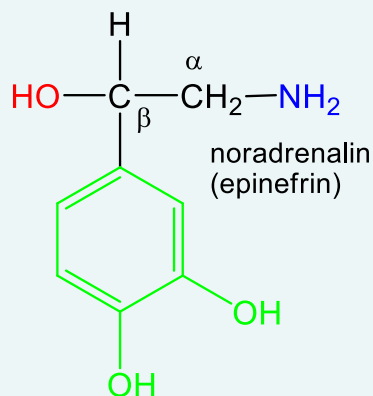
- **amfetaminok** (csokoládében is van, **de** ez az agyba nem jut el, mert már a belekben lebomlik)

biológiai felezési idő: 5-10 perc  
egyértékű primer **aralkil-amin**  
L-Phe-ből dekarboxileződéssel

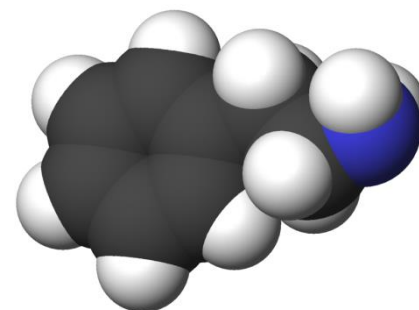


(R)-4-(1-hidroxi-2-(metilamino)etil)pirokatechin

biológiai felezési idő: 2 perc

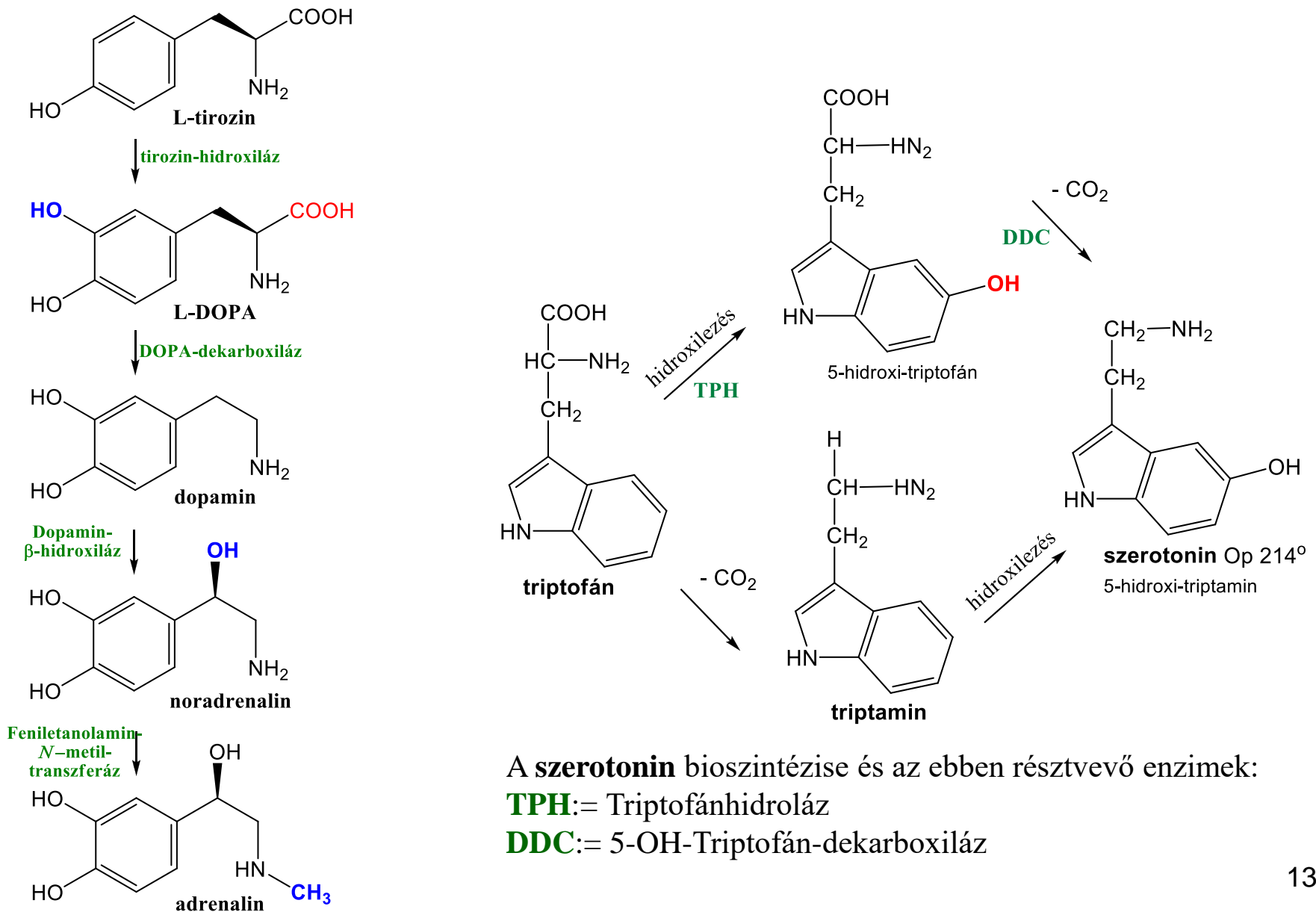


4-[(1R)-2-amino-1-hidroxietil]benzol-1,2-diol



**memo.** a szerelem csodálatos és komplex élmény, nincs egyetlen molekulába se „becsomagolva”.

# Hogyan „memorizáljunk összetettebb molekulákat?



A **szerotonin** bioszintézise és az ebben résztvevő enzimek:

**TPH**:= Triptofánhidroláz

**DDC**:= 5-OH-Triptofán-dekarboxiláz

## 4. Iminek ( $R^1R^2C=NH$ )

típusnév: alkánimin (Schiff-bázis)

N-szubsztituált imin

utótag  $\Rightarrow$  „imin”

előtag  $\Rightarrow$  „imino”

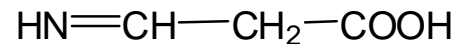


butan-1-imin

bután-1-imin (*Szn*)

Butylideneimine

butilidén-imin (*Csn*)



3-Iminopropanoic acid

3-iminopropánsav

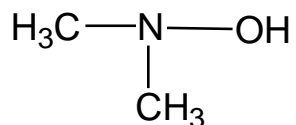
## 5. Hidroxilaminok ( $R^1R^2NOH$ )

hidroxilaminból ( $NH_2OH$ ) a hidrogént  $\Rightarrow$  -R helyettesíti



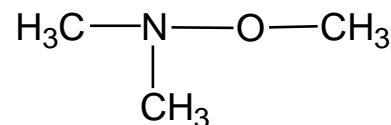
*N*-Methylhydroxylamine

*N*-metilhidroxilamin



*N,N*-Dimethylhydroxylamine

*N,N*-dimetilhidroxilamin



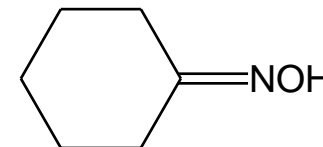
*O,N,N*-Trimethylhydroxylamine

*O,N,N*-trimetilhidroxilamin



Hexanal oxime

hexanal-oxim



Cyclohexanone oxime

ciklohexanon-oxim 14

**( $R^1R^2C=NOH$ ) oxim:**

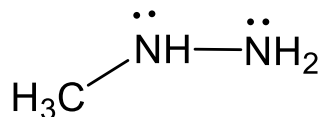
ha kétértékű csoporthoz kapcsolódik az N  
(ha van kettőskötés)

## 6. Hidrazinok ( $R^1R^2NH-NH_2$ )

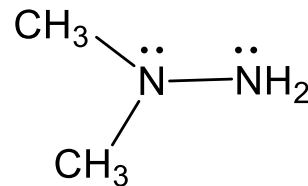
hidrazinból ( $NH_2NH_2$ ) a hidrogént  $\Rightarrow$  -R helyettesíti

utótag  $\Rightarrow$  „hidrazin”

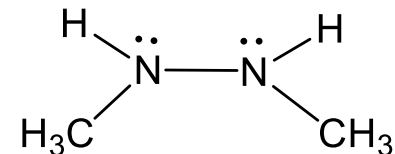
előtag  $\Rightarrow$  „hidrazino”



Methylhydrazine  
metilhidrazin



*N,N*-Dimethylhydrazine  
*N,N*-dimetilhidrazin



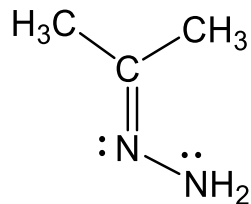
*N,N'*-Dimethylhydrazine  
*N,N'*-dimetilhidrazin

## ( $R^1R^2C=N-NH_2$ ) hidrazon:

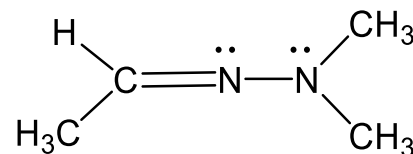
ha kétértékű csoporthoz kapcsolódik  
az N (ha van kettőskötés)

utótag  $\Rightarrow$  „hidrazon”

előtag  $\Rightarrow$  „hidrazono”

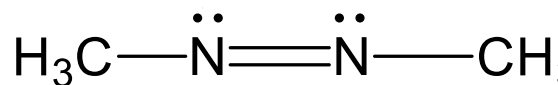


acetone hydrazone  
aceton-hidrazon



acetaldehyde(*N,N*-dimethylhydrazone)  
acetaldehyd-(*N,N*-dimetilhidrazon)

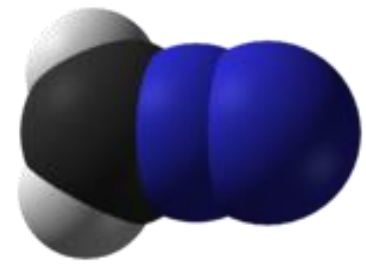
## 7. Azovegyületek ( $R^1N=NR^2$ )



Dimethyl-diazene  
azometán



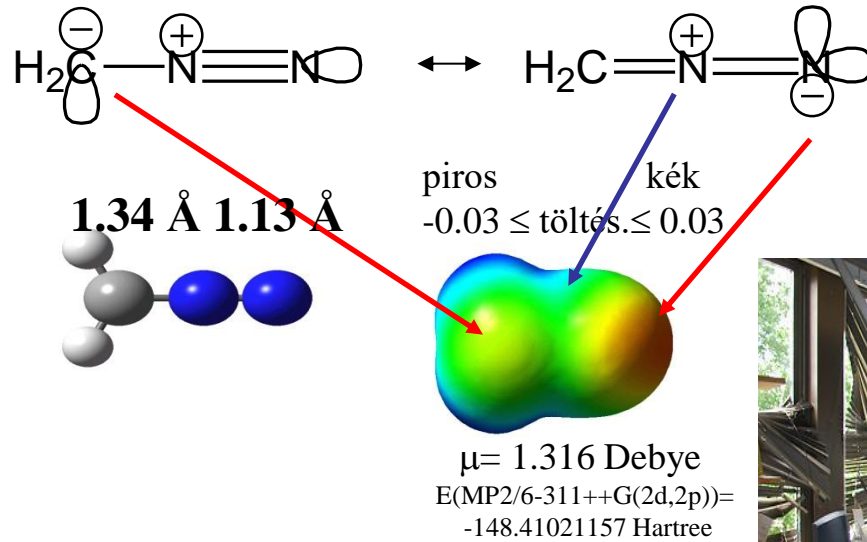
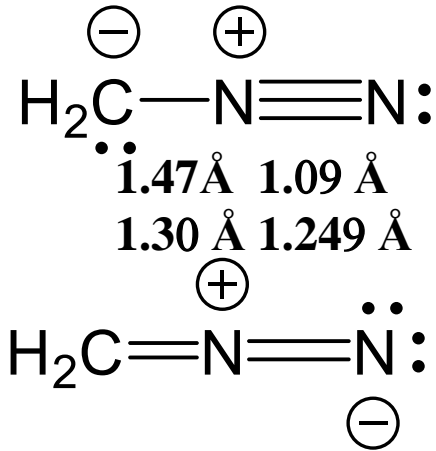
# 8. Diazovegyületek (R<sup>1</sup>N<sub>2</sub>)



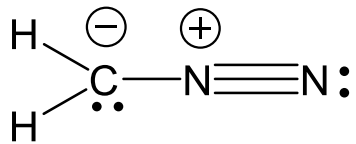
Diazomethane

diazometán

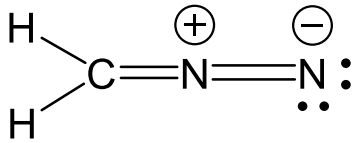
Határszerkezet:



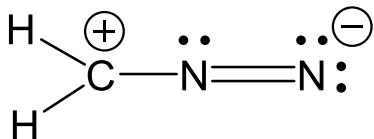
Határszerkezetek írása:  
a diazometán határszerkezetei:



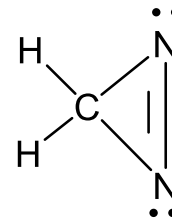
elektrodifrakciós adatok alapján a molekula lineáris szerkezetű; a C-N kötés 1,34Å, míg az N-N kötés 1,13Å



memo:  
a C-N egyszeres kötés: 1,47Å  
a C-N kétszeres kötés: 1,30Å  
valamint

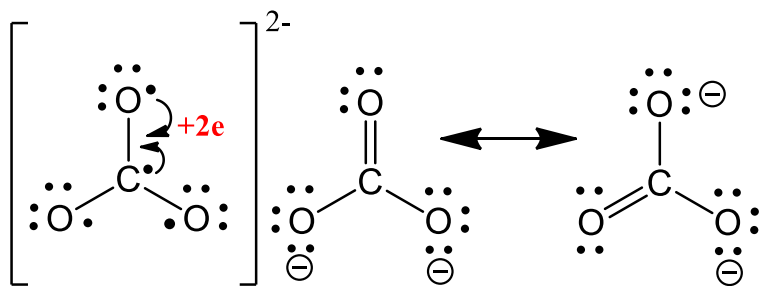


az N-N kétszeres kötés: 1,24Å  
az N-N háromszoros kötés: 1,09Å

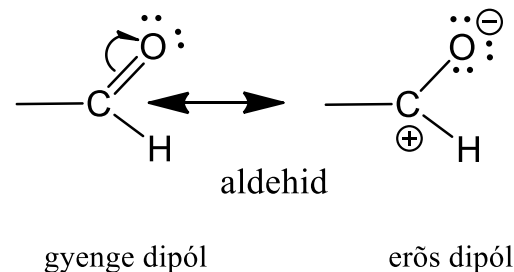
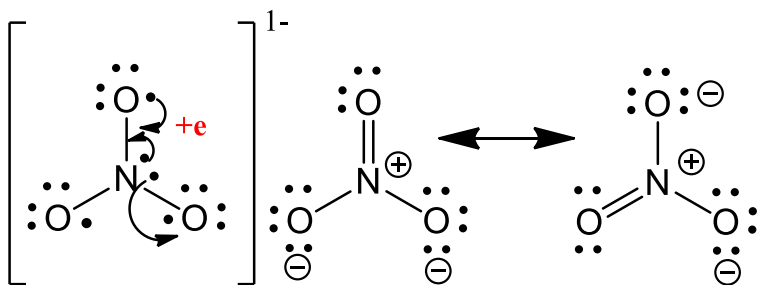
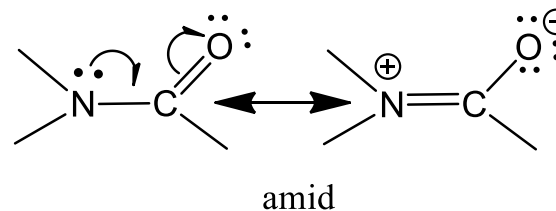


a kizárható gyűrűs határszerkezet

**szimmetrikus ekvivalens  
határszerkezetek:**



**nem ekvivalens  
határszerkezetek:**



## 9. Azidovegyületek (R<sup>1</sup>N<sub>3</sub>)

# VI. Oxovegyületek

alapszénhidrogén: nyílt ⇌ gyűrűs

alapszénhidrogén: telített ⇌ telítetlen

kapcsolódása szerint: láncvégi (aldehid) ⇌ láncközi (keton)

az oxo csoportok jellege és a kapcsolódása helye szerint:

dialdehid ⇌ ketonaldehid ⇌ diketon ⇌

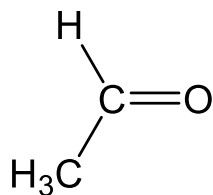
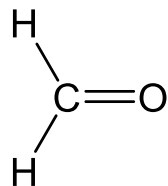
polioxo-vegyület

# 1. Nyíltzénláncú, telített aldehidek (C<sub>n</sub>H<sub>2n</sub>O)

típusnév: **alkanal**

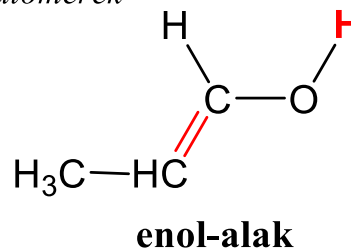
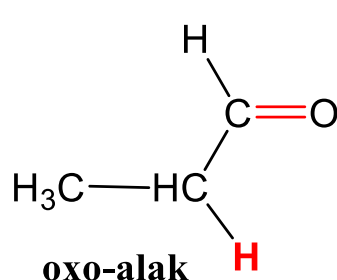
szubsztitúciós név: „al” utótag  
„oxo” előtag

*memo: az al utótagonál az 1-est nem kell kiírni*



Formaldehyde  
metanal  
formaldehid

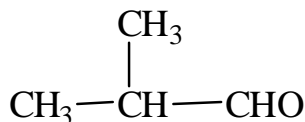
Acetaldehyde  
etanal  
acetaldehid



Propionaldehyde

propanal

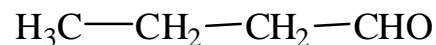
propionaldehid



2-Methylpropionaldehyde

2-metilpropanal

izobutiraldehid

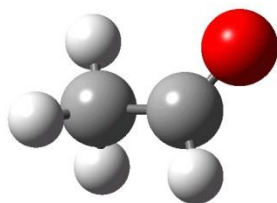


Butyraldehyde

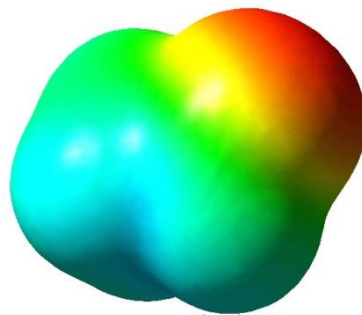
butanal

butiraldehid

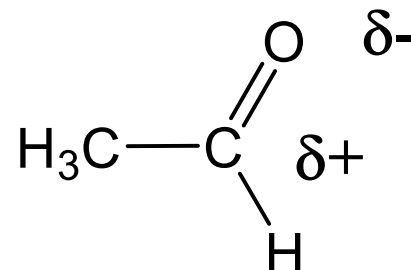
**Szerkezeti izoméria:**



$\mu = 3.19$  Debye  
E(RHF/6-311++G(d,p))



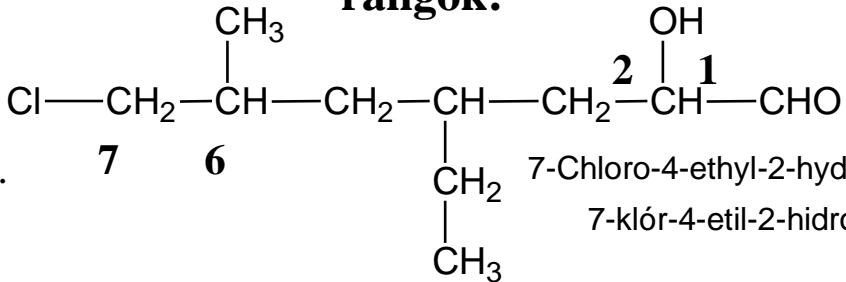
piros      kék  
 $-0.06 \leq \text{töltés} \leq 0.06$



# Szubsztitúciós nomenklatúra:

kiválasztjuk a leghosszabb szénláncot amely az oxocsoportot is tartalmazza (vagy a legrangosabb csoportot), a csoport száma a legkisebb legyen, szubsztituens sorrend az ABC szerint.

**nev.gyak.  
rangok!**

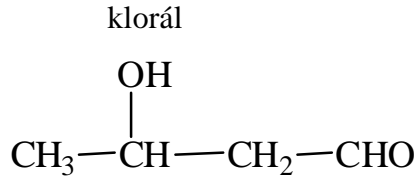


7-Chloro-4-ethyl-2-hydroxy-6-methylheptanal  
7-klór-4-etil-2-hidroxi-6-metilheptánal

(7-klór-2-hidroxi-6-metil-4-etilheptánal rossz ABC)

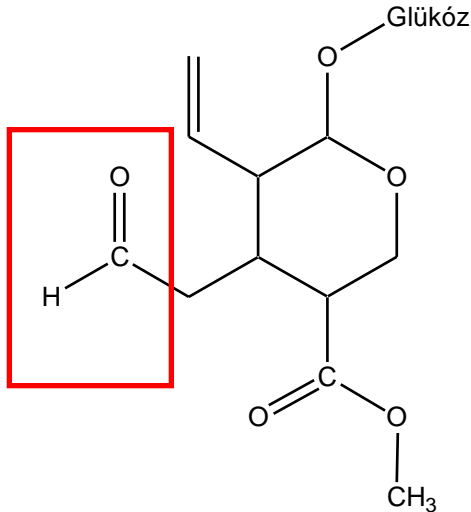
**Példa:**  $\text{Cl}_3\text{C}-\text{CHO}$

Trichloroacetaldehyde  
triklóracetaldehid



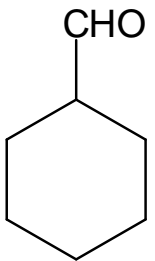
3-Hydroxybutanal  
3-hidroxibutanal

aldol

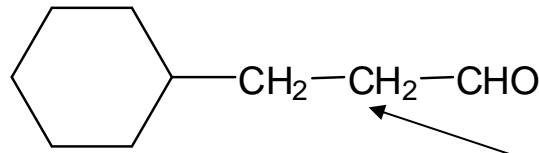


## 2. Gyűrűs, telített aldehidek típusnév: cikloalkánkarbaldehid

szubsztitúciós név: „oxo” előtag (formil)  
„al” utótag (karbaldehid)



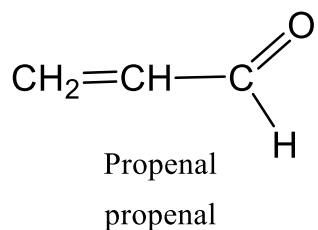
Cyclohexanecarbaldehyde  
ciklohexánkarbaldehid



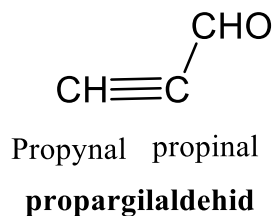
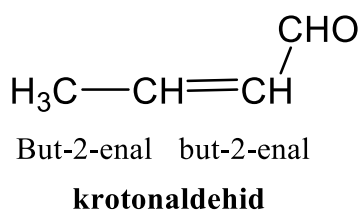
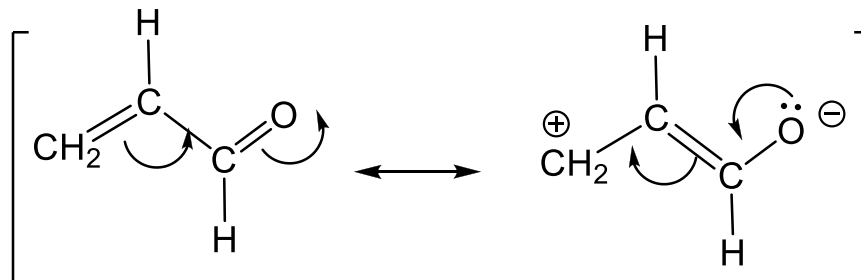
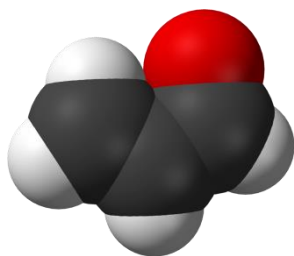
3-Cyclohexylpropanal  
3-ciklohexilpropanal

Bár tartalmaz cikloalkán részt **nem gyűrűs aldehidként** nevezzük el

### 3. Telítetlen aldehidek típusnév: alkenal, alkinal

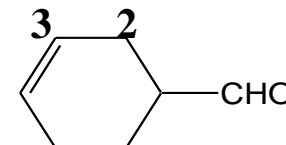


akrilaldehid vagy **akrolein**

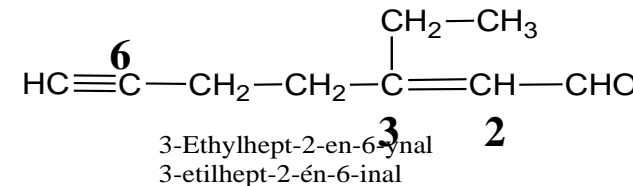


szubsztitúciós név:  
„enal” végződés (utótag)  
„oxo” előtag

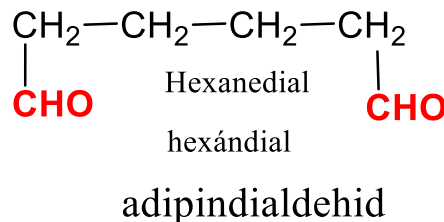
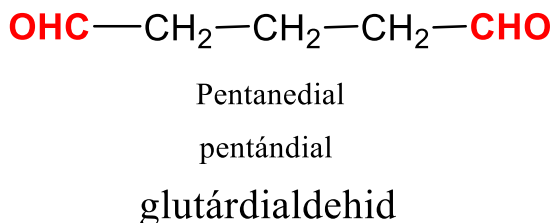
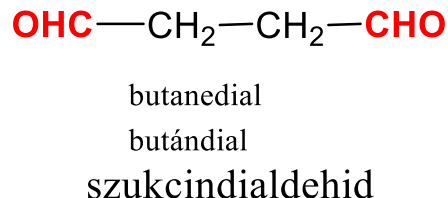
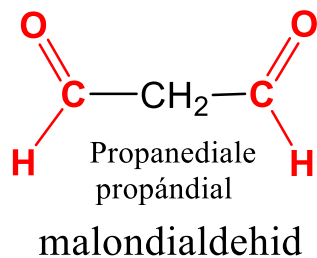
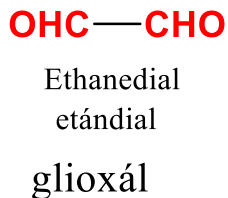
nev.gyak.:rangok!



Cyclohex-3-enecarbaldehyde  
ciklohex-3-énkarbaldehyd



### 4. Dialdehidek típusnév: alkándial



szubsztitúciós név: „oxo” előtag  
„dial” utótag

**kérdés:**

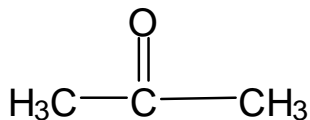
melyik stabilabb: malondialdehyd  
vagy tautomerje a hidroxil-  
akrolein?

**válasz:** az utóbbi  
a konjugáció miatt.

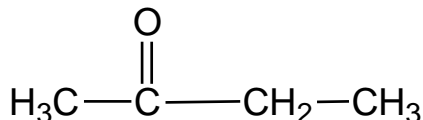
# 5. Nyíltszénláncú, telített ketonok (C<sub>n</sub>H<sub>2n</sub>O)

típusnév: alkanon

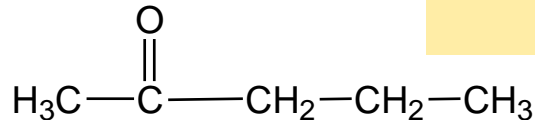
szubsztitúciós név: „on” utótag  
„oxo” előtag



Propan-2-one  
propan-2-on  
dimetil-keton  
aceton



Butan-2-one  
bután-2-on  
etil-metil-keton

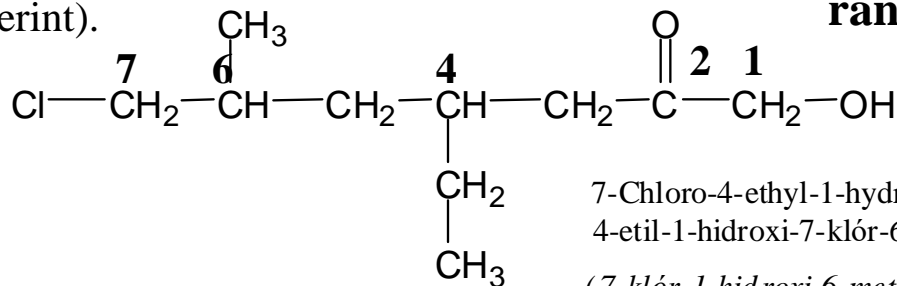


Pentan-2-one  
pentán-2-on

## Szubsztitúciós nomenklatúra:

kiválasztjuk a **leghosszabb** szénláncot amely az **oxocsoportot** is tartalmazza (vagy a még rangosabb csoportot), úgy hogy ezen rangos csoport száma a **legkisebb** legyen, (szubsztituens-sorrend az **ABC** szerint).

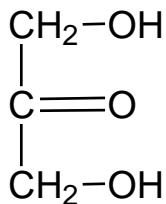
nev.gyak.  
rangok!



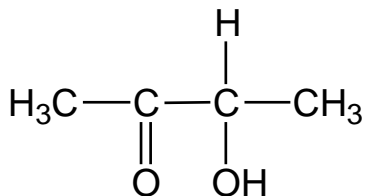
7-Chloro-4-ethyl-1-hydroxy-6-methylheptan-2-one  
4-etil-1-hidroxi-7-klór-6-metilheptán-2-on

(7-klór-1-hid roxi-6-metil-4-etil-2-heptanon rossz ABC sorrend)

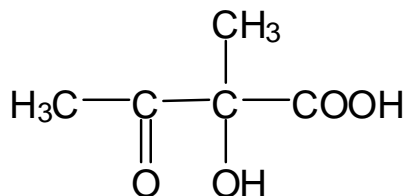
## Példák:



1,3-Dihydroxypropan-2-one  
1,3-dihidroxi-propán-2-on  
dihidroxiaceton



3-Hydroxybutan-2-one  
3-hidroxi-bután-2-on  
aceton

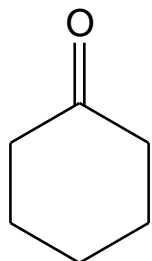


2-Hydroxy-2-methyl-3-oxobutyric acid  
2-hidroxi-2-metil-3-oxobutánsav

# 6. Gyűrűs, telített ketonok

típusnév: **ezociklusos** cikloalkanon  
**exociklusos** cikloalkilalkanon

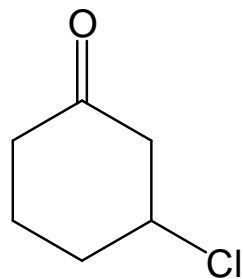
## eZociklusos



Cyclohexanone

ciklohexanon

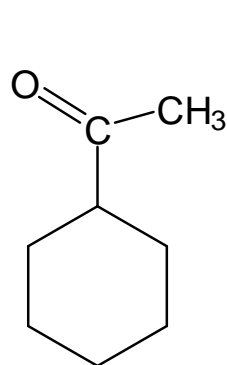
**nev.gyak.  
rangok!**



3-Chlorocyclohexan-1-one

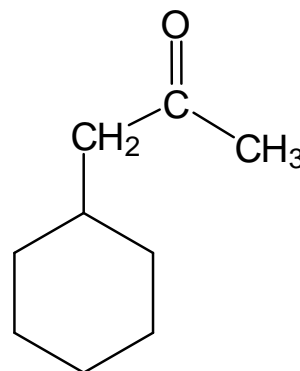
3-klórciklohexán-1-on

## eXociklusos



1-Cyclohexylethan-1-one

ciklohexil-metil-ke-ton



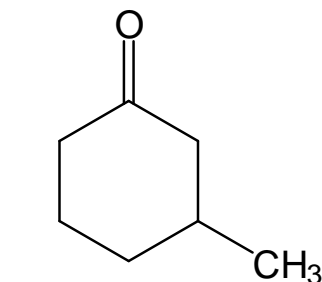
1-Cyclohexylpropan-2-one

ciklohexil-aceton

szubsztitúciós név: „on” utótag  
„oxo” előtag

*memo:*

*az „on” utótagnál az 1-est  
ki kell írni*



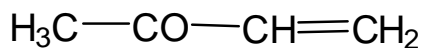
3-Methylcyclohexan-1-one

3-metilciklohexán-1-on



# 7. Telítetlen ketonok

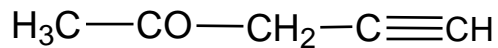
## típusnév: alkenon, alkinon



But-3-en-2-one

but-3-én-2-on

metil-vinil-ke-ton



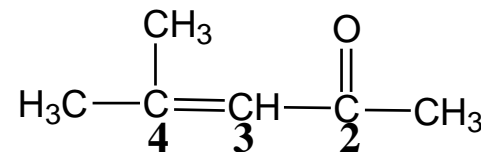
Pent-4-yn-2-one

pent-4-in-2-on

metil-propargil-ke-ton

szubsztitúciós név: „énon” végződés (utótag)  
„oxo” előtag

**nev.gyak.  
rangok!**



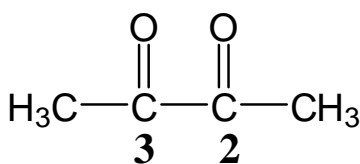
4-Methyl-pent-3-en-2-one

4-metil-3-pentén-2-on

mezitiloxid

# 8. Diketonok

## típusnév: alkándion

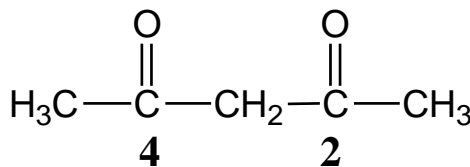


Butane-2,3-dione

bután-2,3-dion

biacetyl

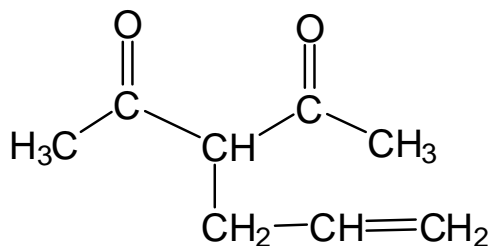
biacetil



Pentane-2,4-dione

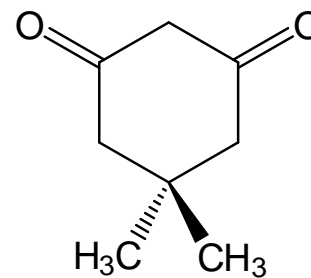
pentán-2,4-dion

**nev.gyak.  
rangok!**



3-Allylpentane-2,4-dione

3-allilpentán-2,4-dion

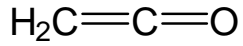


5,5-Dimethylcyclohexane-1,3-dione

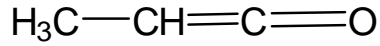
5,5-dimetilciklohexán-1,3-dion

# 9. Ketének C=C=O

Alkénből láncvégi hidrogének cseréjével  $H_2 \Rightarrow O$ -re  
 alapnév: „ketén”

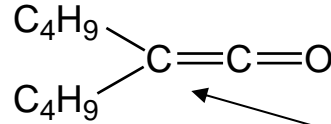


Ethenone  
 etenon  
 ketene  
 ketén



Prop-1-en-1-one  
 prop-1-én-1-on  
 methylketene  
 metilketén

aldoketén

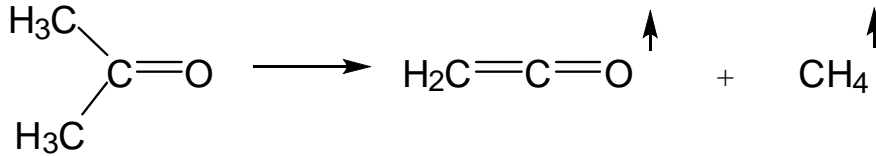


2-Butylhex-1-en-1-one  
 2-butilhex-1-én-1-on

ketoketén

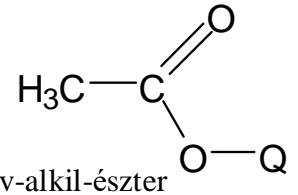
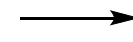
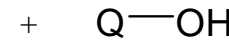
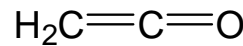
dibutylketén

Ketén előállítása:



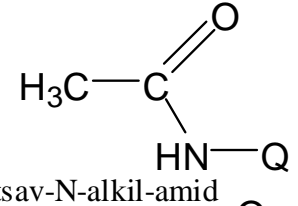
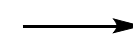
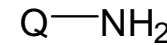
Ketén reakcióképessége:

(kumulált kettőskötés, fokozott reaktivitás)



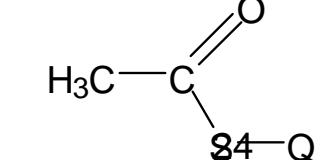
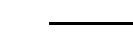
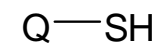
alkil-alkohol

ecetsav-alkil-észter



alkil-amin

ecetsav-N-alkil-amid

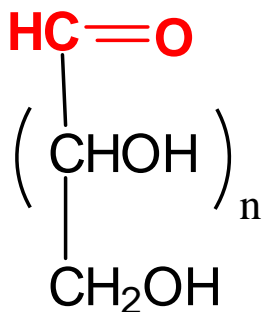


alkántiol

ecetsav-alkil-tioészter

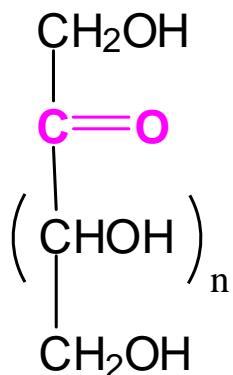
## 10. Polihidroxiovegyületek: monoszacharidok

- szénatomok száma (trióz, tetróz, pentóz, hexóz, heptóz)
- aldehid  $\longleftrightarrow$  keton



### Polihidroxialdehid

aldotetróz	n=2
<b>aldopentóz</b>	<b>n=3</b>
<b>aldohexóz</b>	<b>n=4</b>
aldoheptóz	n=5



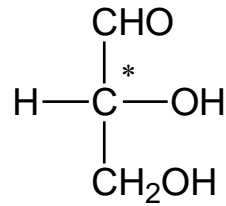
### Polihidroxiketon

ketotetróz	n=1
ketopentóz	n=2
<b>ketohehexóz</b>	<b>n=3</b>

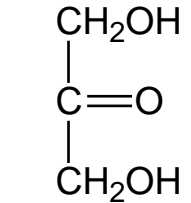
**kérdés:** Hány kiralitáscentrummal rendelkezik egy

- aldotetróz,
- ketopentóz,
- $n$ -atomos aldóz,
- $n$ -atomos ketóz ?

# Konfiguráció, kiralitás, D/L-konvenció



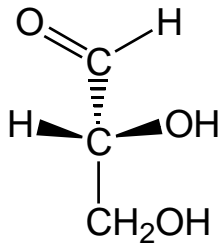
gliceraldehyd  
(egy aldotrióz)



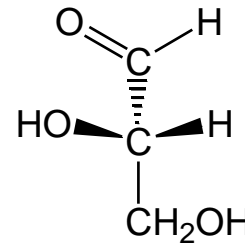
dihidroxi-aceton  
(egy ketotrióz)

**egy**  
**kiralitáscentrum**

**nincs**  
**kiralitáscentrum**



(+)-gliceraldehyd  
(*R*)-(+)-gliceraldehyd  
D-(+)-gliceraldehyd



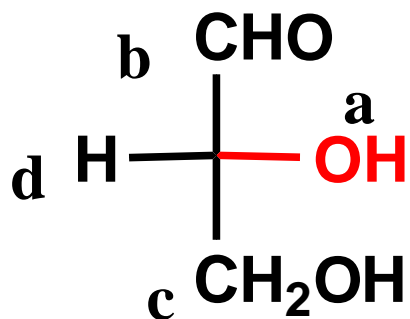
(-)-gliceraldehyd  
(*S*)-(-)-gliceraldehyd  
L-(-)-gliceraldehyd

D-cukor:

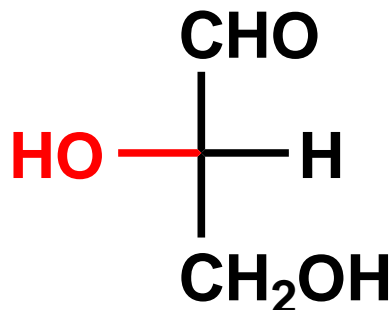
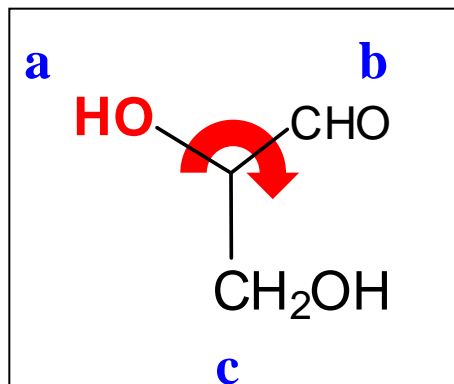
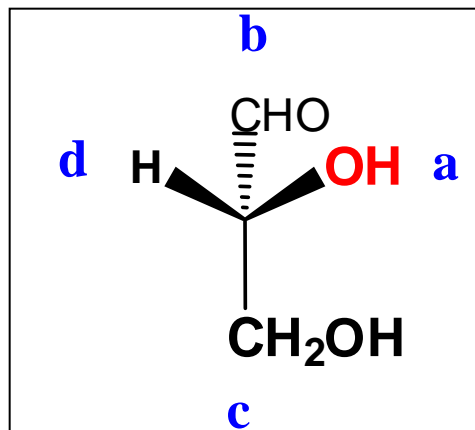
L-cukor

az a monoszacharid, amelyikben a legmagasabb sorszámú avagy a karbonil csoportól legtávolabbi kiralitáscentrum, (leggyakrabban az utolsó előtti szénatom) a D(+)-gliceraldehiddel vagy éppen a L(-)-gliceraldehiddel azonos konfigurációjú.

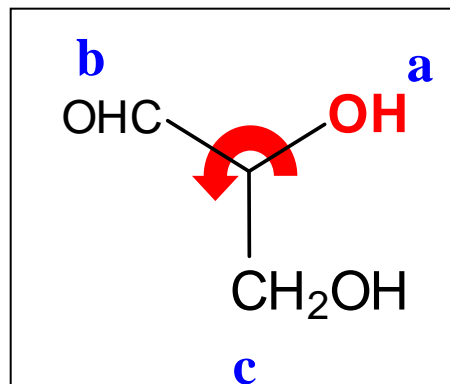
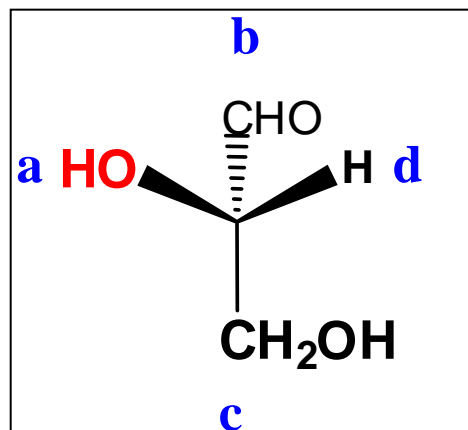
# Aldotrióz abszolút konfigurációjának meghatározása:



*(R)*-glicerinaldehid  
D-glicerinaldehid



*(S)*-glicerinaldehid  
L-glicerinaldehid

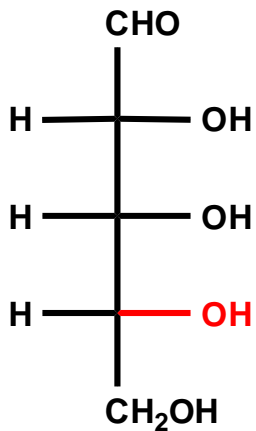


D- vagy L- ?

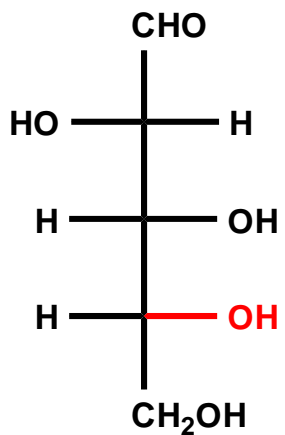
A legmagasabb sorszámú  
kiralitás- centrum és a  
glicerinaldehid  
konfigurációja

# Aldopentóz (3 királis C): 8 db diasztereomer térszerkezet

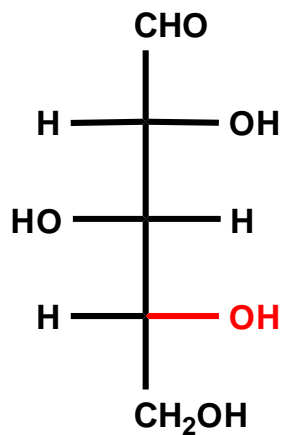
**D-ribóz**



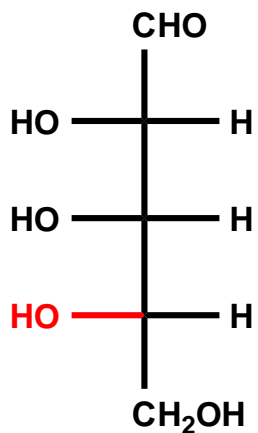
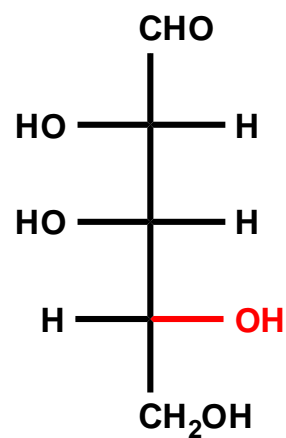
**D -arabinóz**



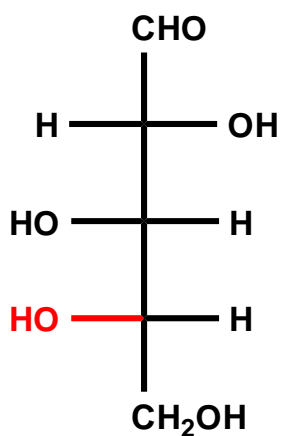
**D -xilóz**



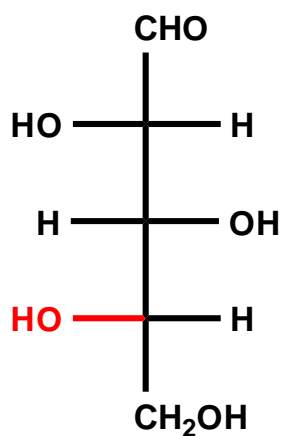
**D-lixóz**



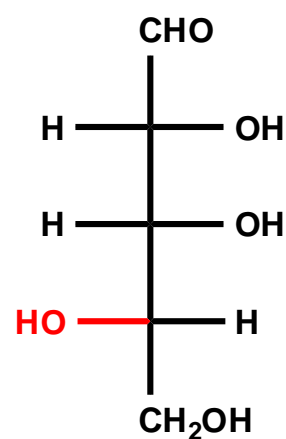
**L-ribóz**



**L -arabinóz**



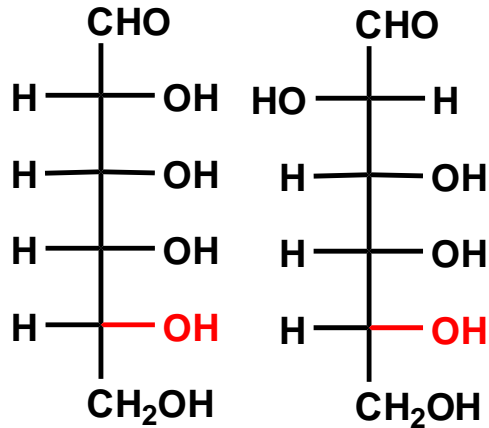
**L-xilóz**



**L -lixóz**

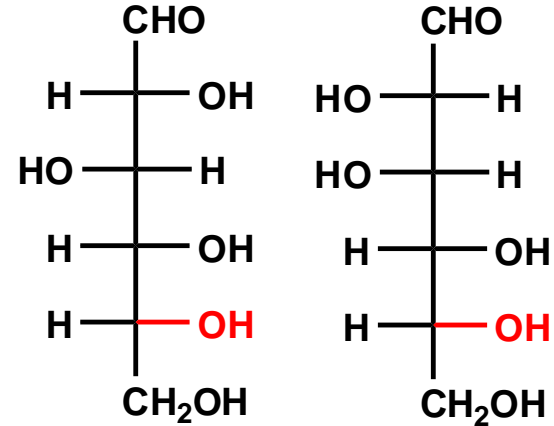
**kiemelt fontosságú cukor**

**Aldohexóz** (4 királis C): 16 diasztereomer térszerkezet  
 a 8 db D-sorozatbeli aldohexóz nyílt formája:



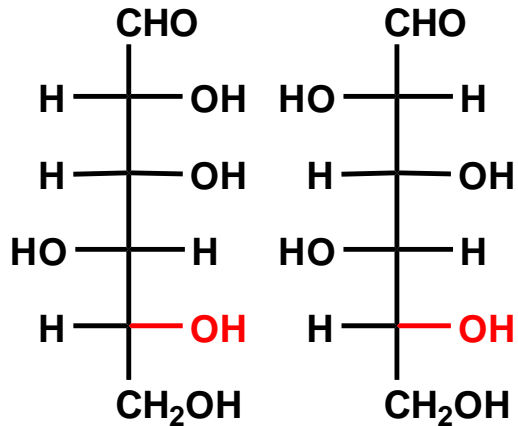
**D-allóz**

**D-altróz**



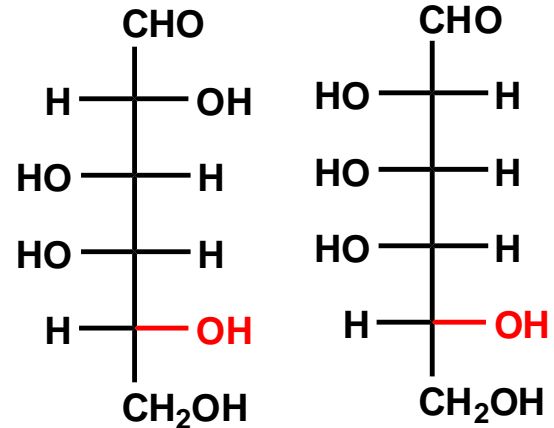
**D -glükóz**

**D -mannóz**



**D -gülóz**

**D -idóz**



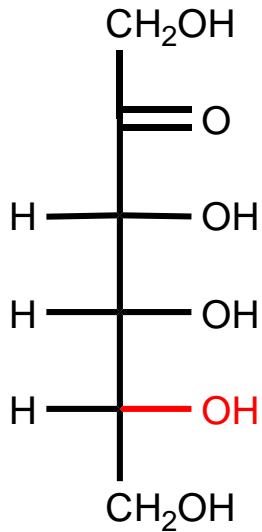
**D -galaktóz**

**D -talóz**

**kiemelt fontosságú cukor**

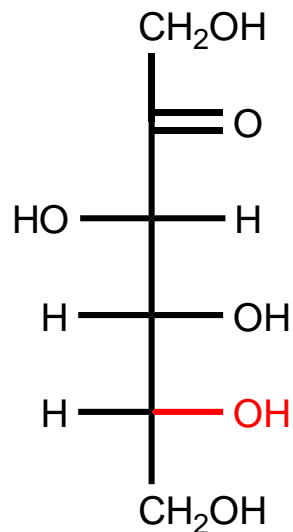


**Ketohexóz (3 királis C): 8 diasztereomer térszerkezet**  
a 4 db D-sorozatbeli **hexulóz** nyílt formája:



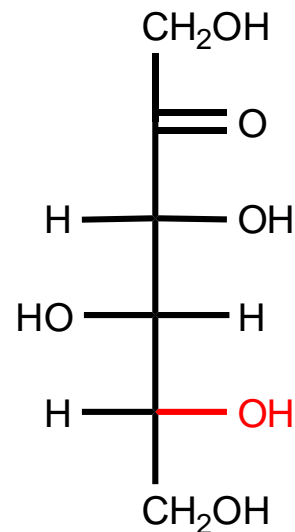
**D-pszikóz**

**ribohexulóz**



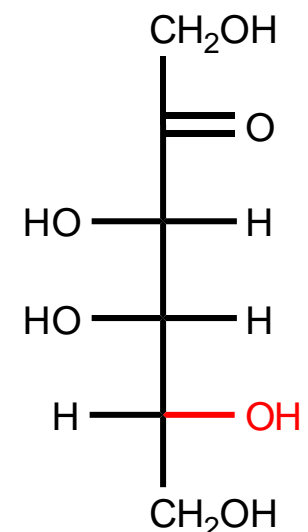
**D-fruktóz**

**arabinoxulóz**



**D-szorbóz**

**xilohexulóz**

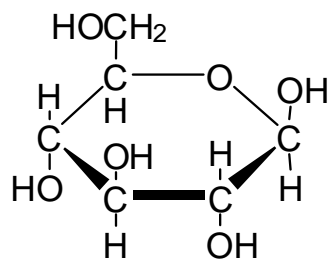
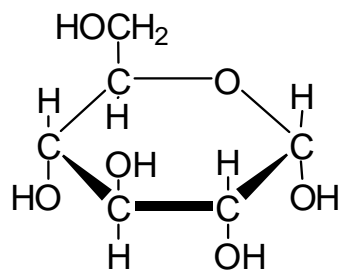
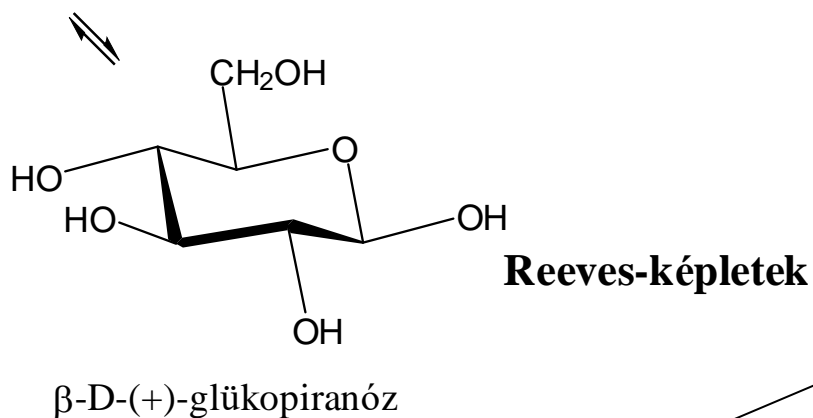
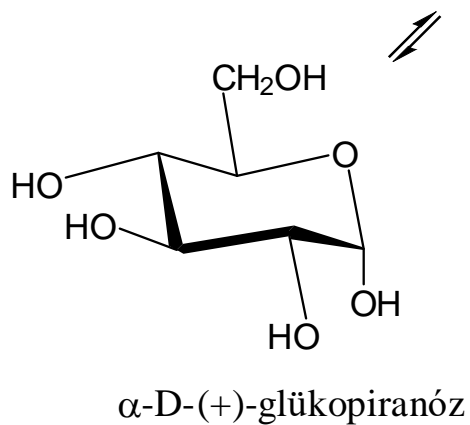
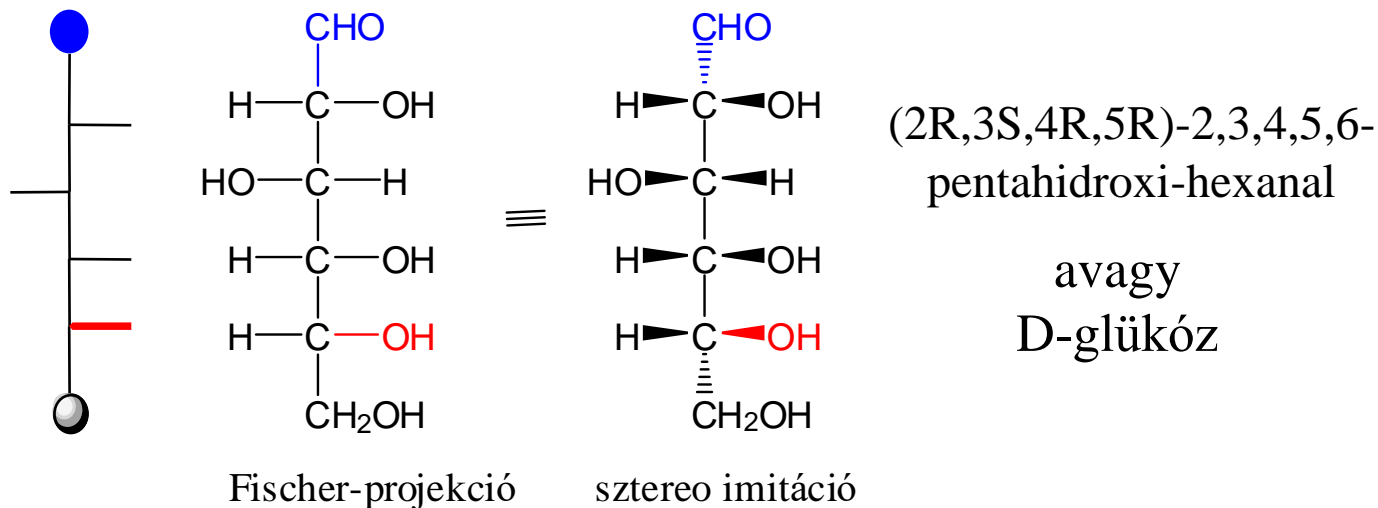


**D-tagatóz**

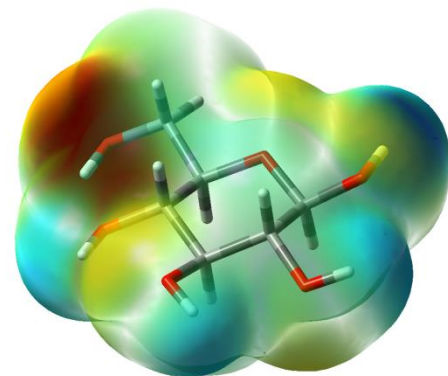
**lixohexulóz**

**kiemelt fontosságú cukor**

# Az aldohexózok tényleges téralkata: nem lineáris hanem ciklusos



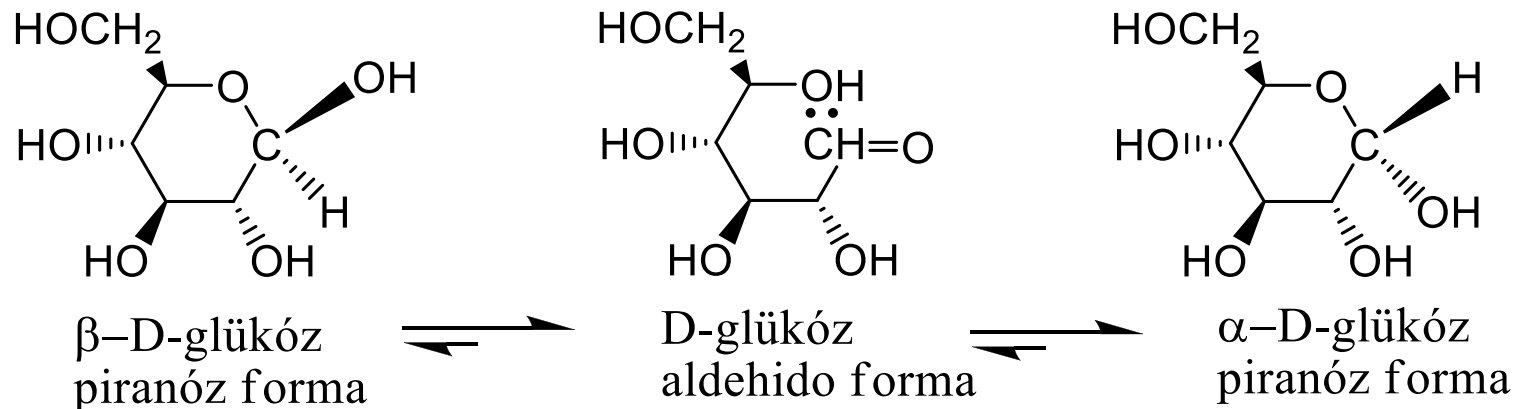
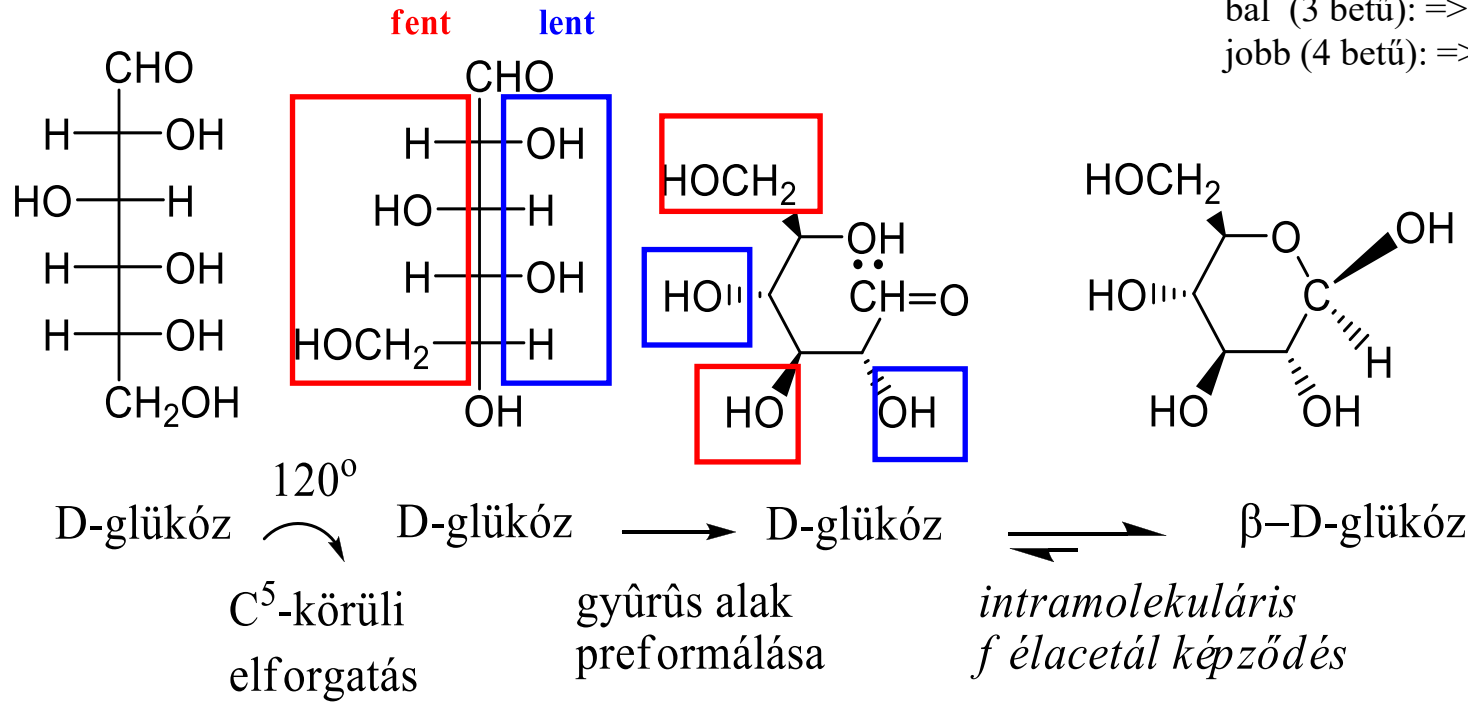
Haworth-képletek



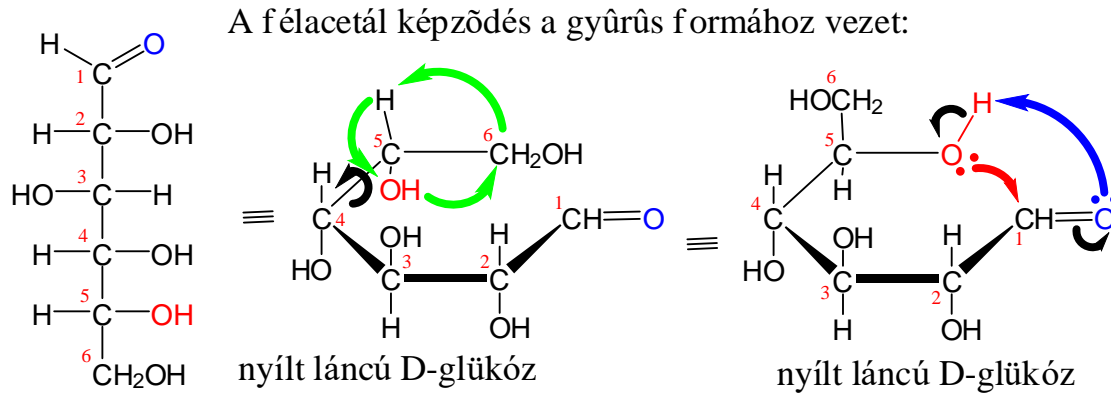
piros kék  
-0.08 ≤ töltés. ≤ +0.08

# A gyűrűs forma rajzolástechnikája:

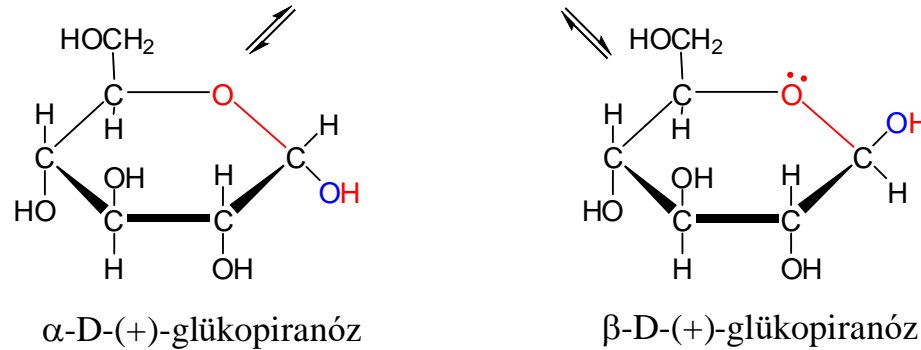
**memo:** átírási szójáték  
 bal (3 betű): => fel (3 betű)  
 jobb (4 betű): => lent (4 betű)



# Az aldohexózok tényleges szerkezete: nem lineáris hanem ciklusos



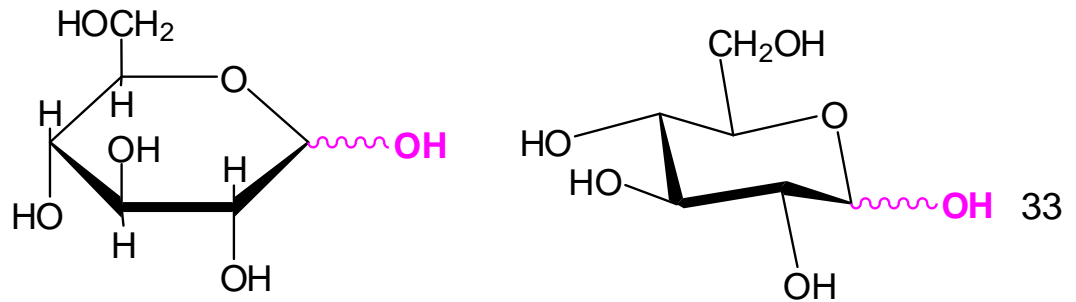
Ciklizálással félacetál képződik, kiralitáscentrummá válik a C1-atom (anomer szénatom)



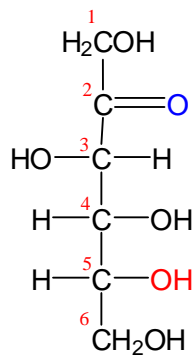
az így kialakuló diasztereomerek **anomerek**

**$\alpha$ -anomer ill.  $\beta$ -anomer**

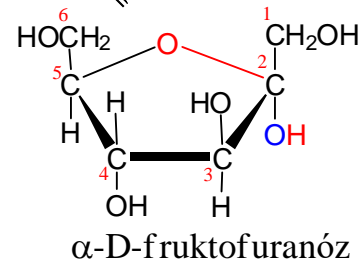
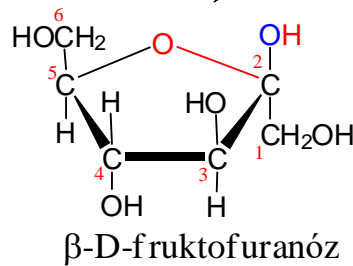
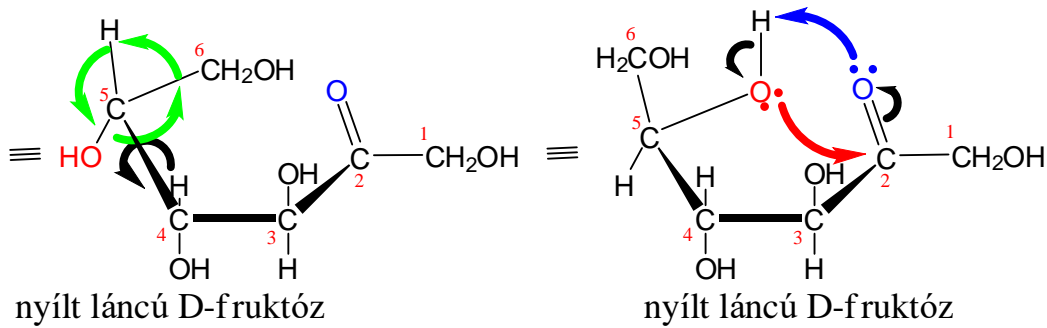
$\alpha/\beta$  -D-(+)-glükopiranoz: az anomer konfiguráció nem definiált



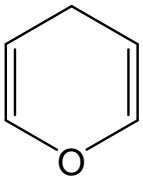
# Ciklusos félacetál képződése, avagy hogyan rajzoljuk a furánózokat:



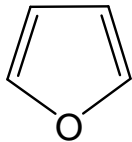
A nyílt láncú D-fruktóz különböző konformációi



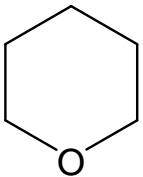
**memo:**



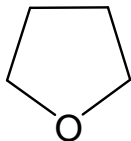
pirán



furán



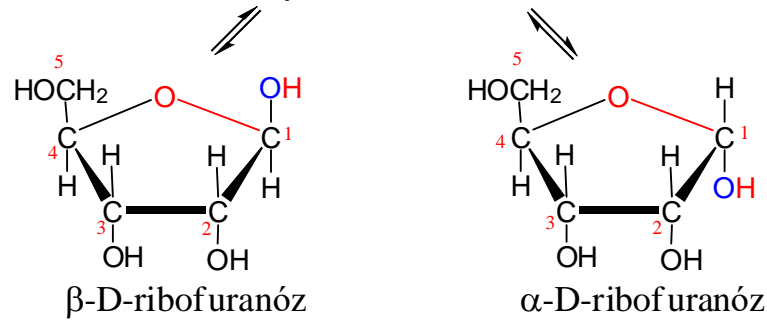
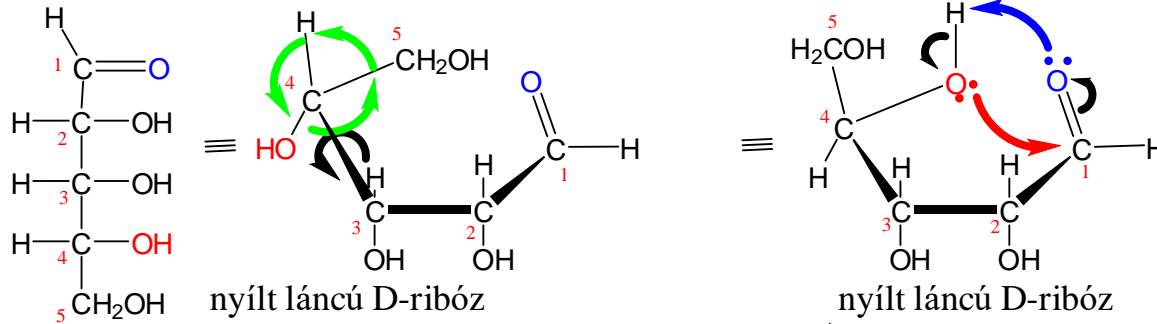
tetrahidro-2H-pirán



tetrahydrofurán

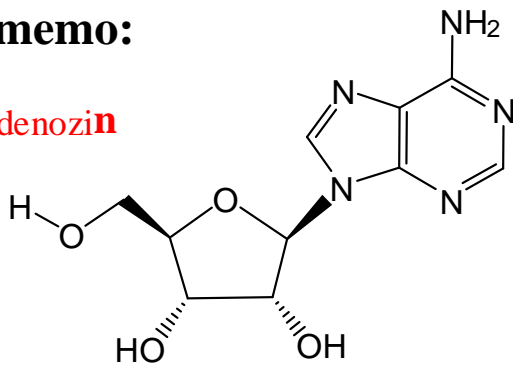
# Ciklusos félacetál képződése, avagy hogyan rajzoljuk a furanózokat:

A nyílt láncú D-fruktóz különböző konformációi



memo:

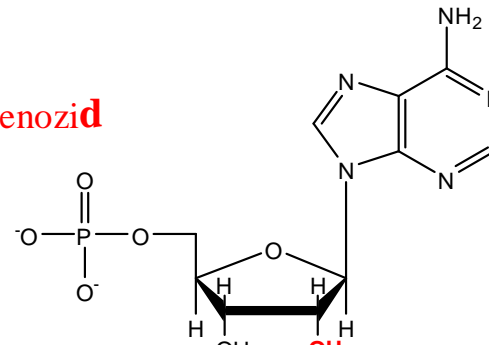
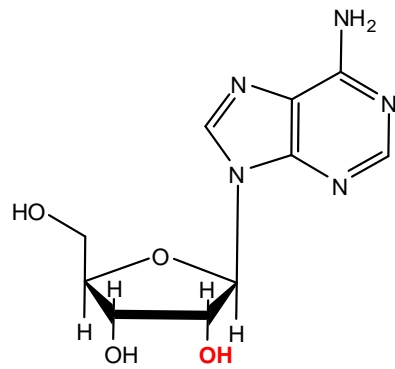
adenozin



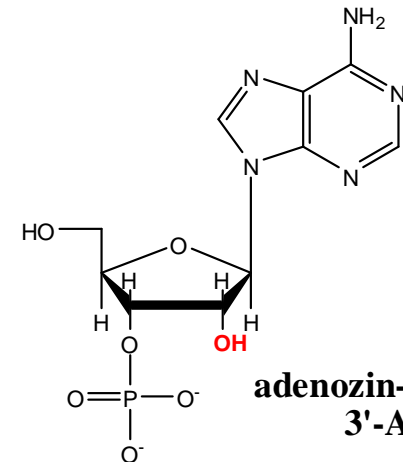
adenozin

9-( $\beta$ -D-ribofuranozil)-adenin op=235°C

adenozid

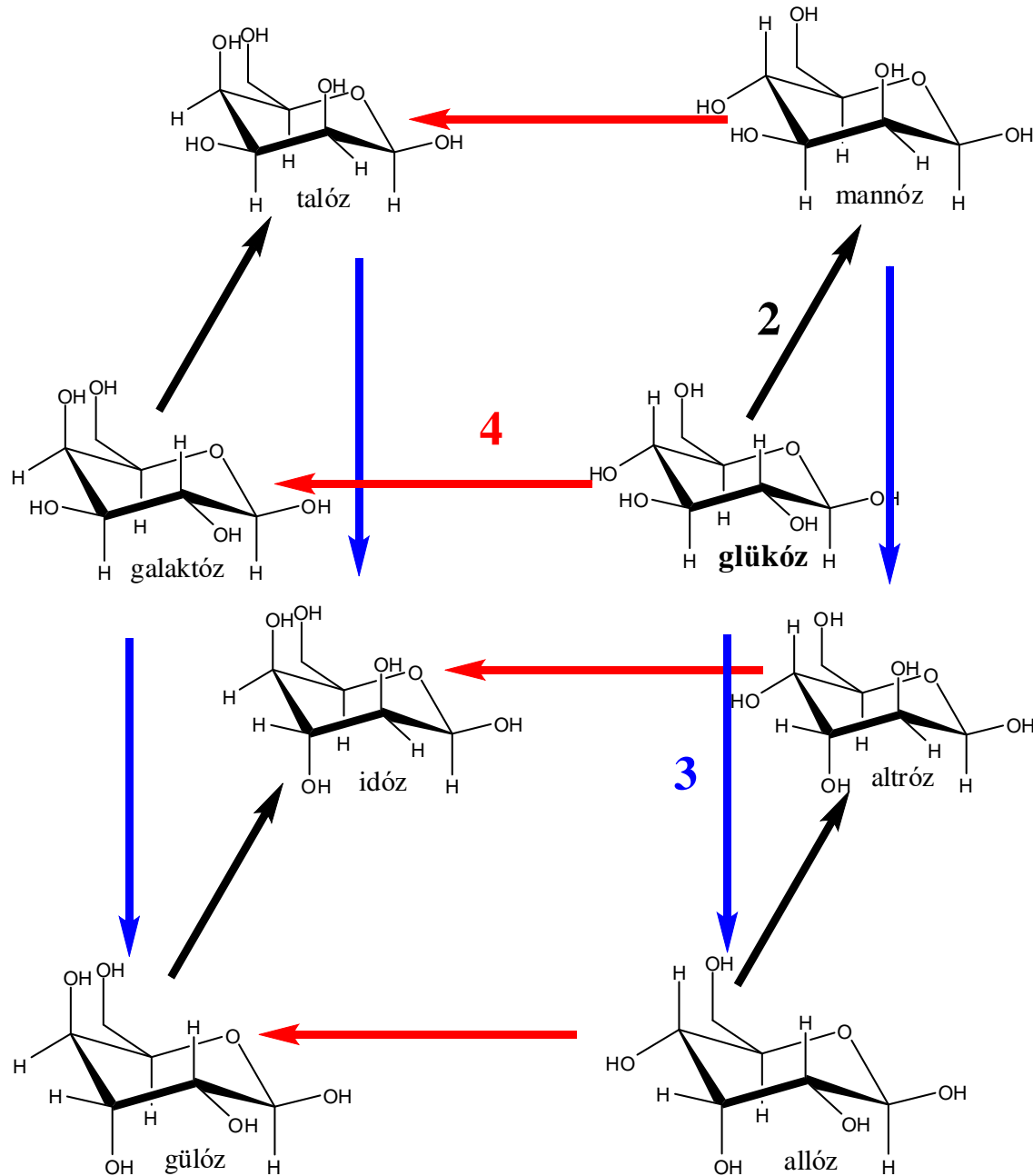


adenozin-5'-foszfát  
5'-AMP

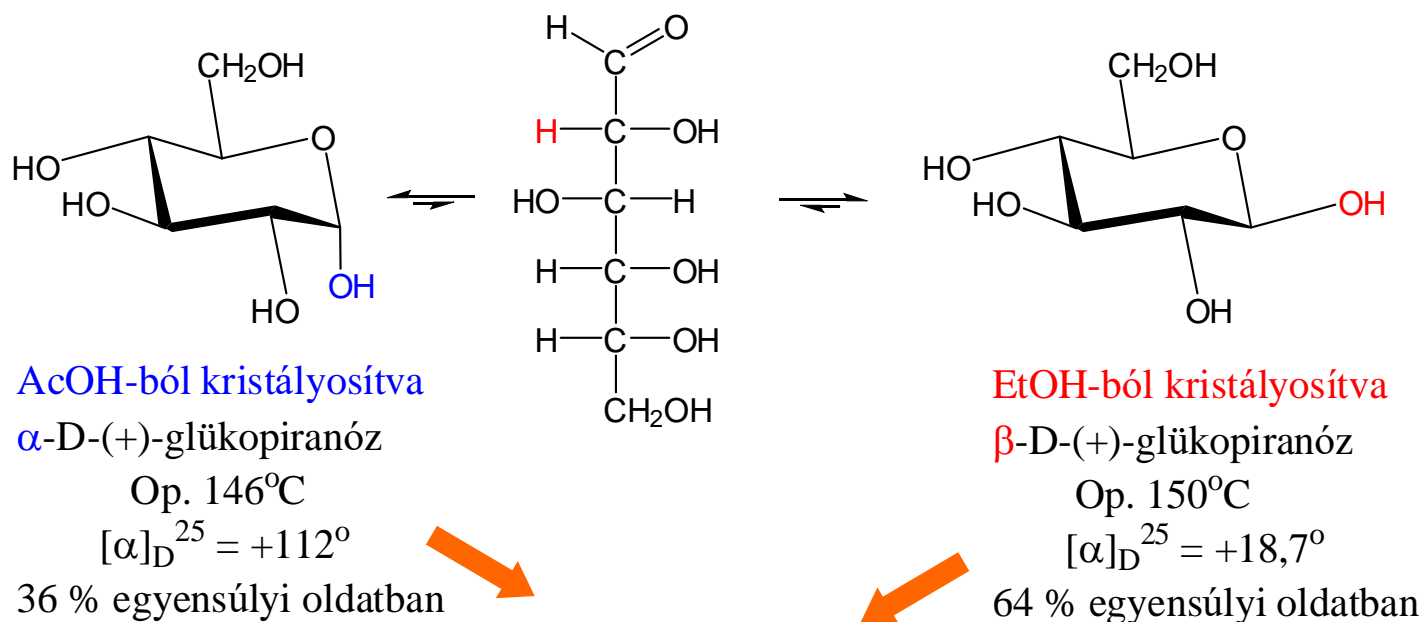


adenozin-3'-foszfát  
3'-AMP

# Kockacukor-cukorkocka



# A mutarotáció jelensége:



egy idő múlva beáll az egyensúlyi oldat,  
amely forgatása :  $+52,7^{\circ}$  ( $= 0,36 \cdot 112^{\circ} + 0,64 \cdot 18,7^{\circ}$ )

**kérdés:** miért stabilabb a  $\beta$ - mint az  $\alpha$ -anomer?

**válasz:** a nagyobb térigényű -OH (és nem a kisebb -H) van ekvatoriális pozícióban.

**kérdés:** van-e számottevő nyílt forma jelen az oldatban?

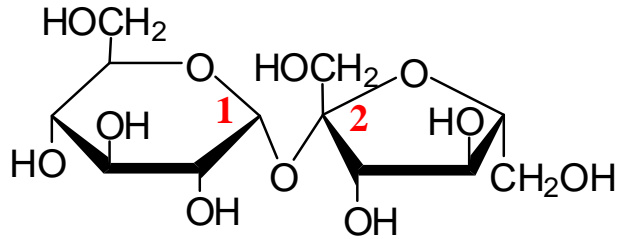
**válasz:** nincs, sem UV-ban sem IR-ben a C=O sávok nem azonosíthatók!



# Néhány fontos diszacharid:

## a szacharóz

(nádcukor, répacukor)

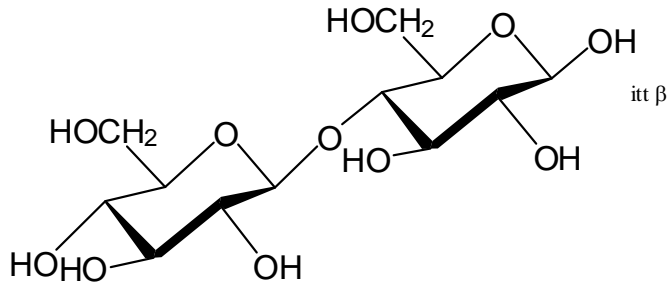


**szacharóz**

$\alpha$ -D-glükopiranozil- $\beta$ -D-fruktofuranozid

## a cellobióz

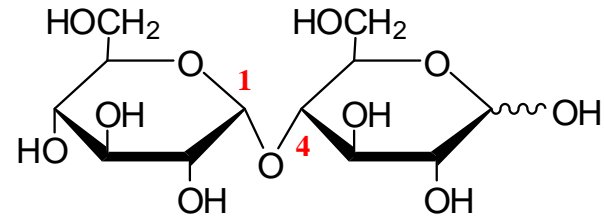
a cellulóz részleges hidrolízise során



**cellobióz**

4-O-( $\beta$ -D-glükopiranozil)-D-glükopiranóz

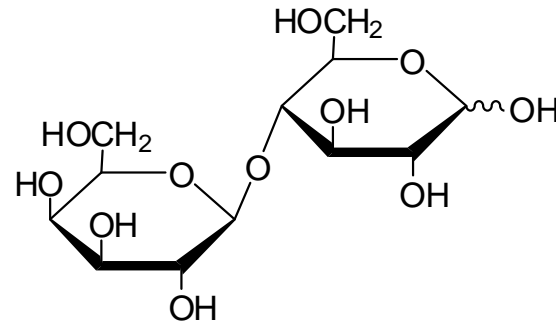
a maltóz (malátacukor), keményítő részleges hidrolízise során



**maltóz**

4-O-( $\alpha$ -D-glükopiranozil)-D-glükopiranóz

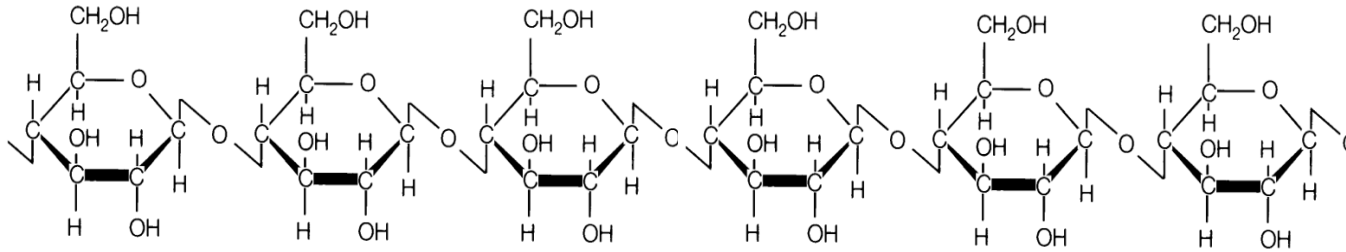
a laktóz vagy tejcukor



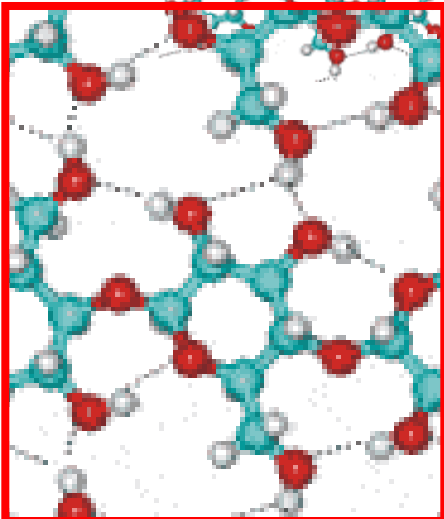
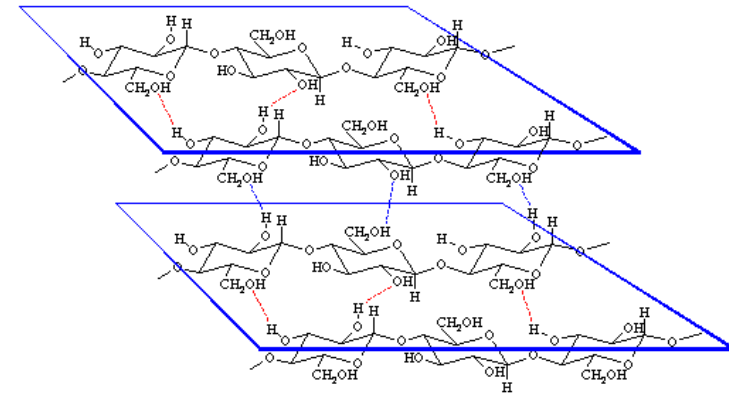
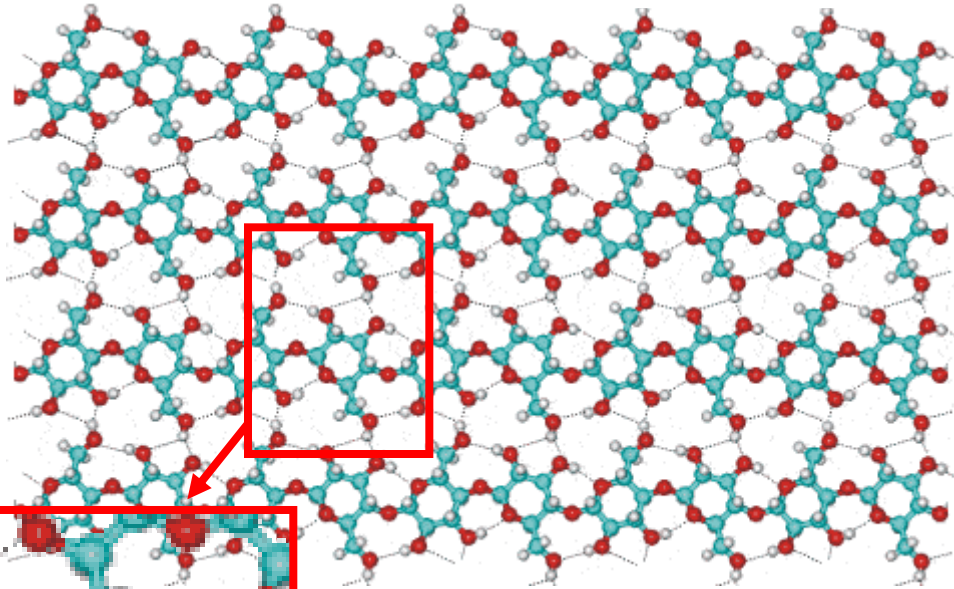
**laktóz**

4-O-( $\beta$ -D-galaktopiranozil)-D-glükopiranóz

# A vízoldhatatlanság titka: vízoldható di- és oligomer, de vízoldhatatlan polimer



$[\beta\text{-D-glükózil}\langle 1,5\rangle]_n$



vízoldhatatlan cellulóz réteg

# VII. Karbonsavak és származékaik

alkán láncvégi hidrogénjeit cseréljük

2 db H-t  $\Rightarrow$  O-re

1 db H-t  $\Rightarrow$  OH-re

alapszénhidrogén: nyílt  $\Leftrightarrow$  gyűrűs

alapszénhidrogén: telített  $\Leftrightarrow$  telítetlen

karboxicsoportok száma szerint: egy-, két-, három- és több-bázisú sav

## 1. Nyíltszénláncú, telített monokarbonsavak ( $C_nH_{2n+1}COOH$ )

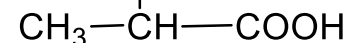
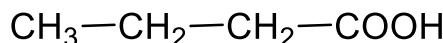
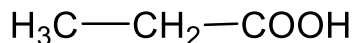
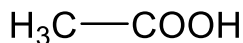
típusnév: alkánsav

előtag: „karboxi” utótag: „sav”

$pK_a=3.75$

$pK_a=4.76$

$pK_a=4.87$



Formic acid

Acetic acid

Propionic acid

Butyric acid butánsav

izovajsav

2-methylpropanoic acid

metánsav

etánsav

propánsav

vajsav

Isobutyric acid

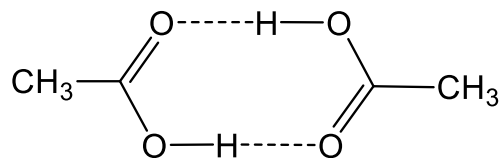
2-metilpropánsav

hangyasav

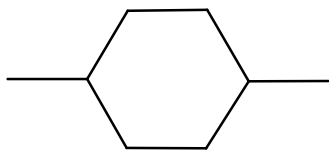
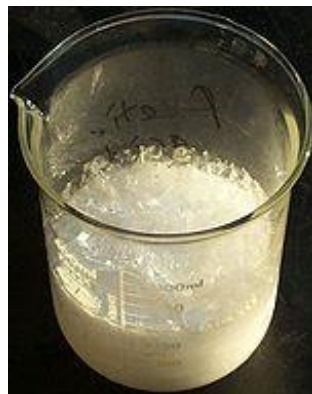
ecetsav

propionsav

2 izomer



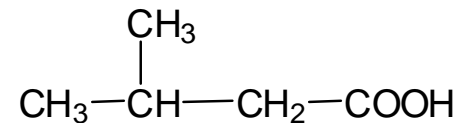
jégecet  $fp=118^\circ C$



1,4-dimetilciklohexán

$fp=126^\circ C$

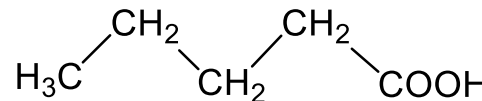
Szerkezeti izoméria



3-Methylbutanoic acid

3-metilbutánsav

izovaleriánsav régi név



Pentanoic acid

pentánsav

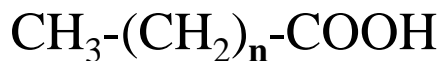
valeriánsav

**kérdés:**

melyik a 3. izomer ?

A vízmentes ecetsav (a *jégecet*) színtelen folyadék, vizet köt meg,  $16,7^\circ C$  alatt megfagy és színtelen kristályt képez.

## homológ sor:



$n > 7$  : szobahőm.: kristályos

$n=10$

$n=14$

$n=16$

-CO

**acilsoport**

lauroil

palmitoil

sztearoil

-COO

**savmaradék**

laurát

palmitát

sztearát

-COOH

**sav**

laurinsav

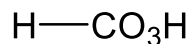
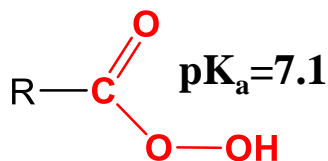
palmitinsav

sztearinsav



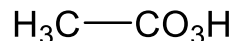
babérolaj,  
anyatej

## Peroxisavak:



Peroxyformic acid  
performic acid

peroxihangyasav  
perhangyasav



Peroxyacetic acid  
peractetic acid

peroxiecetsav  
perecetsav

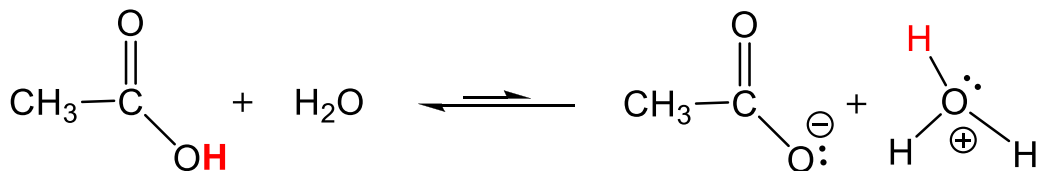


Peroxypropionic acid

peroxipropionsav

## Savak és bázisok erőssége: $K_a$ és $\text{p}K_a$

A HCl vagy  $\text{H}_2\text{SO}_4$ -tól eltérően a szerves karbonsavak gyenge savak



az egyensúlyi reakció jellemzése:  $K_a$  egyensúlyi együttható

$$K_{\text{eq}} = \frac{[\text{CH}_3-\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3-\text{COOH}][\text{H}_2\text{O}]} \Rightarrow K_a = K_{\text{eq}}[\text{H}_2\text{O}] = \frac{[\text{CH}_3-\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3-\text{COOH}]}$$

Mivel a víz koncentrációja kb. állandó, 55,5M, ezért célszerű  $K_a$ -t - a savi egyensúlyi együtthatót - bevezetni.

Pl: hangyasav;  $K_a(\text{HCOOH}) = 1,77 \cdot 10^{-4}$ , ecetsav;  $K_a(\text{CH}_3\text{COOH}) = 1,76 \cdot 10^{-5}$

(memo: ha  $K_a$  számértéke **nagy** akkor **erős**, ha  $K_a$  számértéke **kicsi** akkor **gyenge** a sav)

$$K_{\text{eq}} = \frac{[\text{CH}_3\text{-COO}^\ominus] [\text{H}_3\text{O}^\oplus]}{[\text{CH}_3\text{-COOH}] [\text{H}_2\text{O}]} \Rightarrow K_a = K_{\text{eq}}[\text{H}_2\text{O}] = \frac{[\text{CH}_3\text{-COO}^\ominus] [\text{H}_3\text{O}^\oplus]}{[\text{CH}_3\text{-COOH}]}$$

**kérdés:** mekkora a hidroxóniumion ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ) és mekkora a  $\text{CH}_3\text{CO}_2^-$  ionok koncentrációja az ecetsav **0,1M**-os vizes oldatában ( $K_a = 1,76 \cdot 10^{-5}$ )? Az ecetsav hány százaléka ionizált ekkor?

Ha a  $[\text{H}_3\text{O}^+]$  és az  $[\text{CH}_3\text{CO}_2^-]$  ionok koncentrációja  $x$  (M), akkor **(0,1-x)** a  $[\text{CH}_3\text{COOH}]$ .  
Mivel  $K_a$  kis szám ezért  $x$  értéke is kicsi szám és így  $(0,1-x) \sim 0,1$

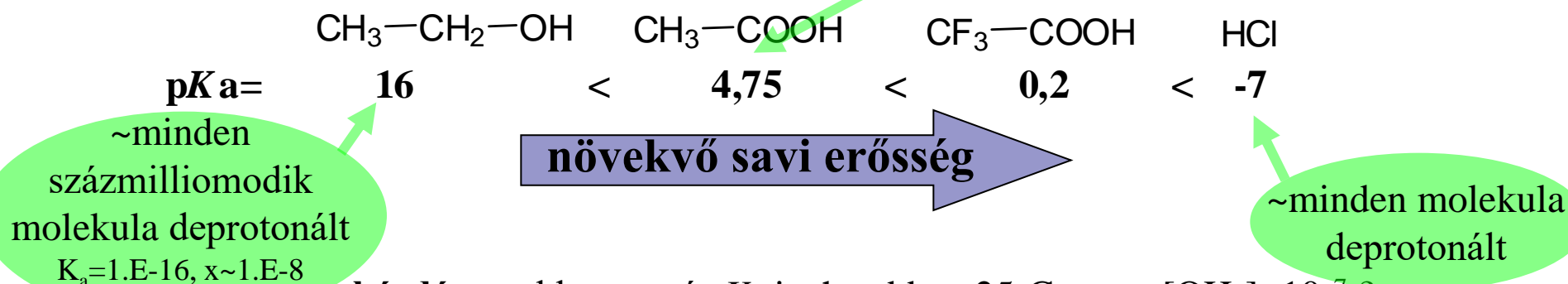
$$K_a = \frac{x^2}{(0,1-x)} \sim \frac{x^2}{0,1} = 1,76 \text{ E-5}$$

$$x^2 = 1,76 \text{ E-6} \Rightarrow x = 1,33 \text{ E-3 M} \Rightarrow x = 1,33 \text{ mM}$$

**Az ionizáció mértéke (%)** =  $[\text{Ac}^-]/[\text{AcOH}] = 1,33\text{mM}/100\text{mM} * 100 = 1\%$

**Praktikusabb a  $\text{p}K_a = -\log K_a$  értéket megadni**

Néhány  $\text{p}K_a$  érték:  $-1,4$  ( $\text{HNO}_3$ ),  $0,2$  ( $\text{CF}_3\text{COOH}$ ),  $3,75$  ( $\text{H}_2\text{CO}_3$ ),  
 $4,76$  ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ),  $9,9$  (fenol),  $38$  ( $\text{NH}_3$ ) és  $50$  (etán)



**kérdés:** mekkora a víz  $K_a$ -ja, ha abban  $25^\circ\text{C}$ -on az  $[\text{OH}^-]=10^{-7}$  ?

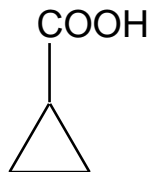
**válasz:**  $K_a=(10^{-7})*(10^{-7})/55,5 = 1,8 \cdot 10^{-16}$  tehát a **pKa = 15.7**

## 2. Ciklusos, telített monokarbonsavak ( $C_nH_{2n-1}COOH$ )

típusnév: cikloalkánsav

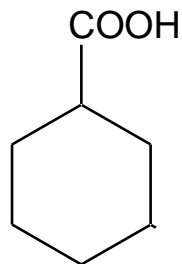
előtag: „karboxi”

utótag: „karbonsav”



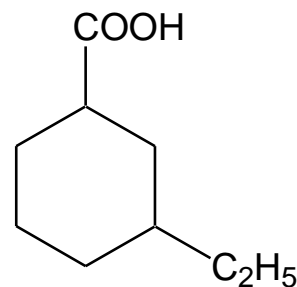
Cyclopropanecarboxylic acid

ciklopropánkarbonsav



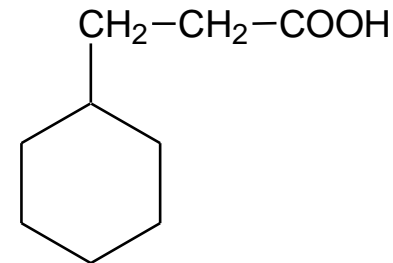
Cyclohexanecarboxylic acid

ciklohexánkarbonsav



3-Ethylcyclohexane-1-carboxylic acid

3-etilciklohexán-1-karbonsav

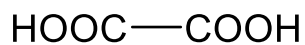


3-Cyclohexylpropanoic acid

3-ciklohexilpropánsav

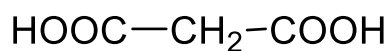
## 3. Nyílt szénláncú telített dikarbonsavak ( $C_nH_{2n}(COOH)_2$ )

típusnév: alkándisav utótag: „disav” előtag: „dikarboxi”



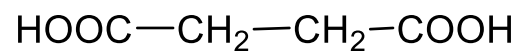
Oxalic acid

oxálsav



Malonic acid

malonsav



Succinic acid

borostyánkősav

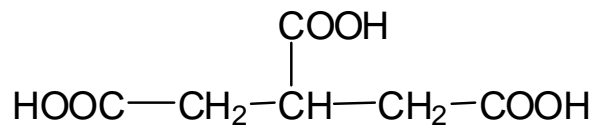


borostyánkő  
hevítésével  
1550 Agricola



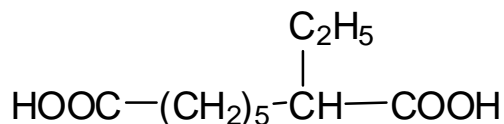
	-COOH	-CO-	-COO-		
	<b>disav</b>	<b>acilsoport</b>	<b>savmaradék</b>	<b>pK<sub>a</sub>1</b>	<b>pK<sub>a</sub>2</b>
n=0	oxálsav	oxalil	oxalát	1.23	4.19
n=1	malonsav	malonil	malonát	2.83	5.69
n=2	borostyánkősav	szukcinil	szukcinát	4.16	5.61
n=3	glutársav	glutaroil	glutarát	4.31	5.41
n=4	adipinsav	adipoil	adipát	4.43	5.41

**nev.gyak.**



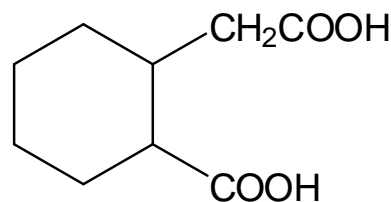
3-Carboxypentanedioic acid

3-karboxipentándisav



2-Ethyl-octanedioic acid

2-etiloktándisav



2-(Carboxymethyl)cyclohexane-1-carboxylic acid

2-(karboximetil)ciklohexán-1-karbonsav

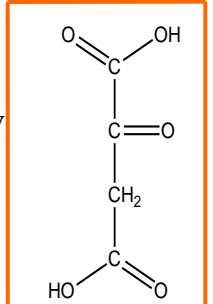
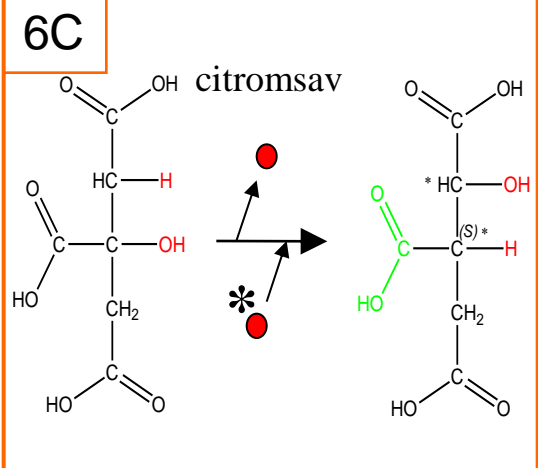
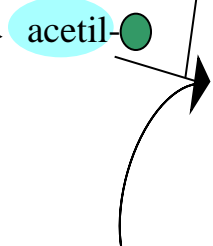
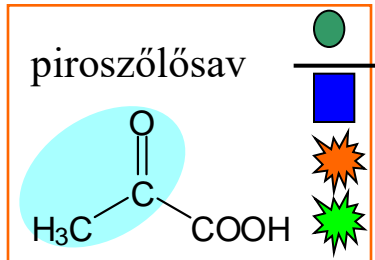


# Citromsav/Szentgyörgyi-Krebs ciklus:

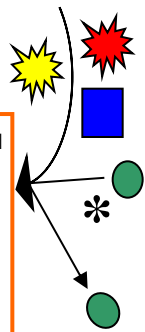
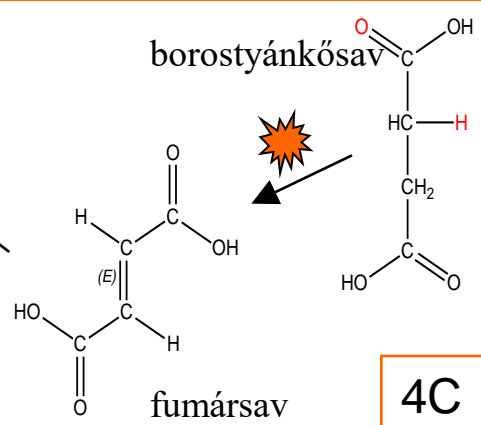
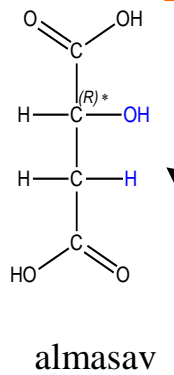
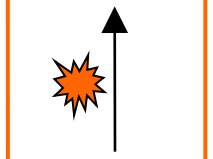
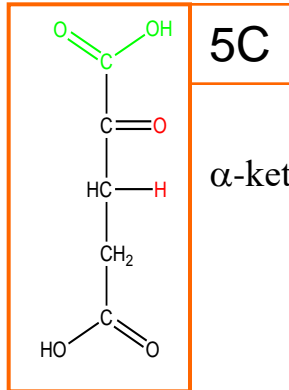
cukrok, zsírok, fehérjék

minden O<sub>2</sub>-t használó (*aerob*) organizmusban ez az anyagcsere-ciklus **termeli** a szénhidrátok, zsírok és fehérjék bontása során az **energiát** (plusz CO<sub>2</sub>-t és H<sub>2</sub>O-t).

Az ATP-termelés 4 anyagcsere „lépésben” valósul meg: a glikolízis, a piruvátoxidáció, a **citrát-ciklus** és a légzési lánc.



- ADP + Pi = ATP
- NAD + 2H<sup>+</sup> = NADH<sup>+</sup> + H<sup>+</sup>
- FAD + 2H<sup>+</sup> = FADH<sup>2+</sup>
- GDP + P<sub>i</sub> = GTP
- CoA
- víz
- CO<sub>2</sub>



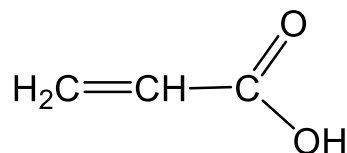
\* többlépéses folyamat



# 4. Nyílt szénlácú telítetlen monokarbonsavak ( $C_nH_{2n-1-x}COOH$ )

típusnév: alkénsav

alkinsav

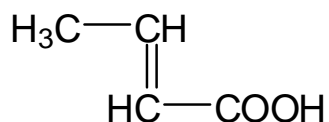


Acrylic acid propénsav

akrilsav

$pK_a$  4.4

**cisz-transz izoméria**

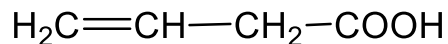
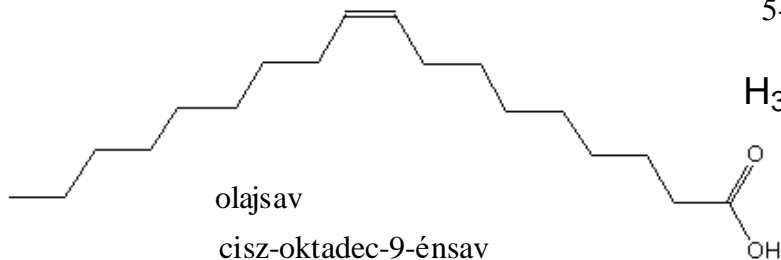


trans-But-2-enoic acid  
transz-but-2-énsav

*krotonsav*

$pK_a$  4.7 Op: 72°C

**Példa:**

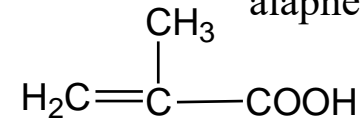


But-3-enoic acid but-3-énsav

*vinil-ecetsav*

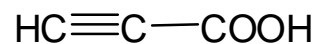
végződés: „énsav” „insav”

Nem  
szubsztituálható  
alapsav

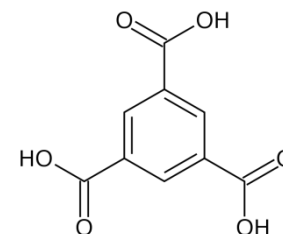


Methacrylic acid

metakrilsav

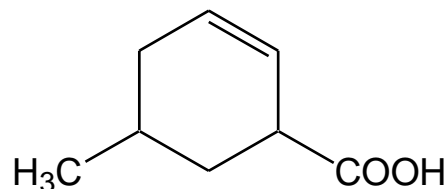


Propynoic acid  
propiolsav  
propinsav



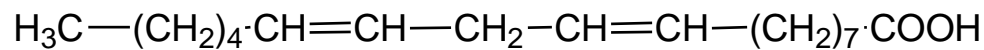
trimezinsav

**nev.gyak.**



5-Methylcyclohex-2-ene-1-carboxylic acid

5-metilciklohex-2-én-1-karbonsav



oktadeka-9,12-diénsav

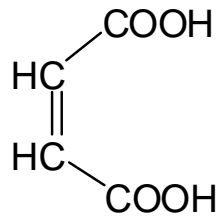
linolsav

# 5. Nyílt szénláncú telítetlen dikarbonsavak (C<sub>n</sub>H<sub>n\*</sub>(COOH)<sub>2</sub>)

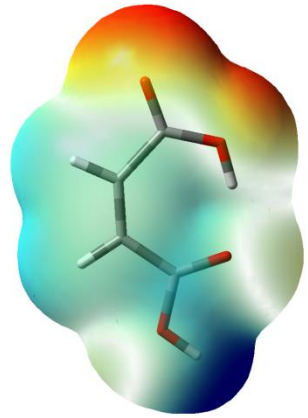
típusnév: alkéndisav  
alkindisav

végződés: „éndisav” „indisav”

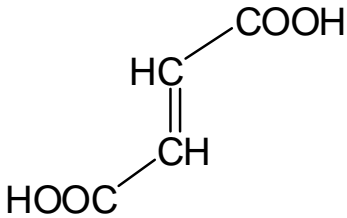
## cisz-transz izoméria



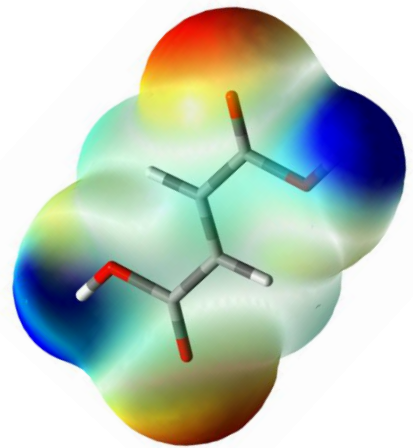
maleinic acid  
maleinsav  
cisz-buténdisav



Op.: 130°C

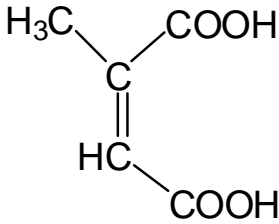


fumaric acid  
fumársav  
transz-buténdisav

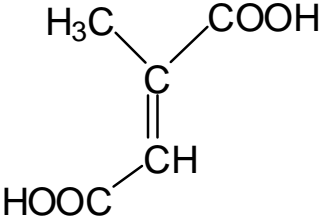


Op.: 287°C

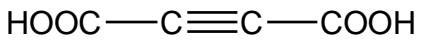
## Példa:



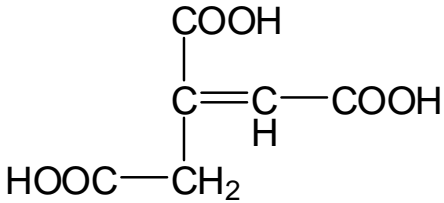
cisz-2-metilbuténdisav  
citrakonsav



transz-2-metilbuténdisav  
mezakonsav



butindisav  
(acetiléndikarbonsav)



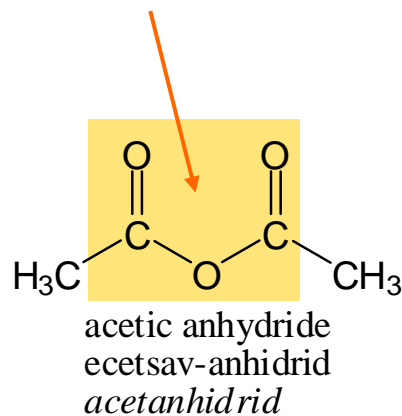
nev.gyak.

propén-1,2,3-trikarbonsav  
akonitsav

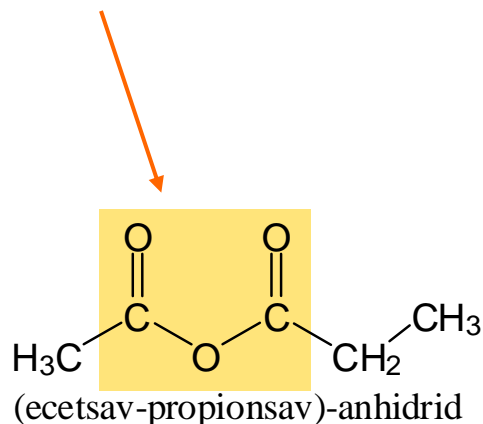
# 6. Karbonsav-anhidridek: vízvesztés (hevítés hatására)

egybázisú savak esetében → intermolekuláris

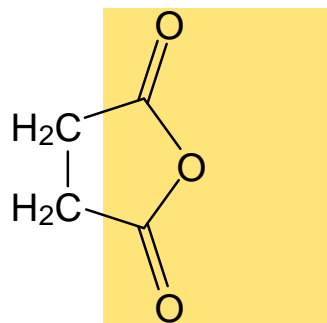
azonos molekulákból  
szimmetrikus típus



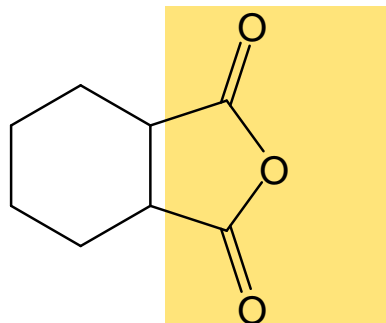
különböző molekulákból  
vegyes anhidridet kapunk



kétbázisú savak esetében → intramolekuláris



borostyánkősav-anhidrid  
(szukcinanhidrid)



ciklohexán-1,2-dikarbonsav-  
anhidrid

# 7. Karbonsav-észterek (RCOOQ)

típusnév: alkil-savmaradék (pl. etil-acetát) karbonsav-alkil-észter (pl. ecetsav-etil-észter)

## A) R , Q telített

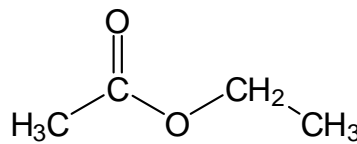


methyl formate (*Csn*)

metil-formiát

Formic acid methyl ester

hangyasav-metil-észter

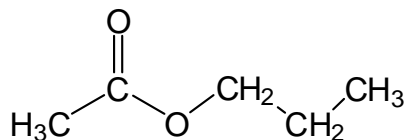


ethyl acetate (*Csn*)

etil-acetát

Acetic acid ethyl ester

ecetsav-metil-észter

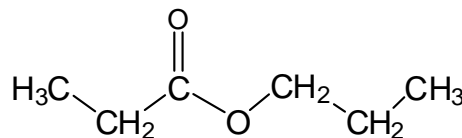


propyl acetate

propil-acetát

Acetic acid propyl ester

ecetsav-propil-észter



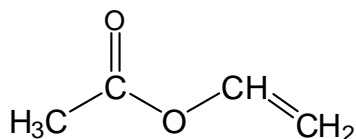
propyl-propionate

propil-propionát

Propionic acid propyl ester

propionsav-propil-észter

## B) R vagy Q telítetlen

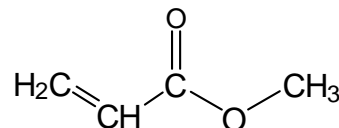


vinyl acetate

vinil-acetát

Acetic acid vinyl ester

ecetsav-vinil-észter



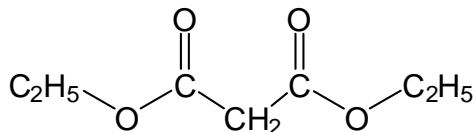
methyl acrylate

metil-akrilát

Acrylic acid methyl ester

acriksav-metil-észter

## C) R kétbázisú

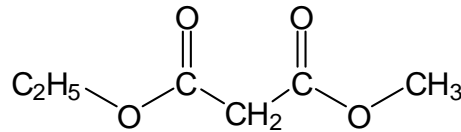


diethyl malonate

dietil-malonát

Malonic acid diethyl ester

malonsav-dietil-észter



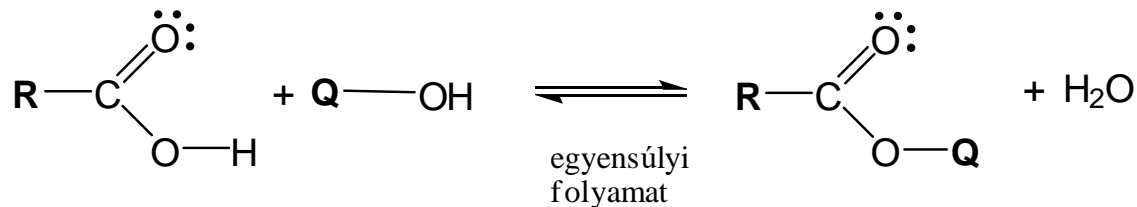
ethyl methyl malonate

etil-metil-malonát

Malonic acid ethyl methyl ester

malonsav-etil-metil-észter

# Karbonsav-észterek előállítása:



## memo:

A karbonsav↔észter egyensúly **néhány nap** alatt áll be szobahőmérsékleten:

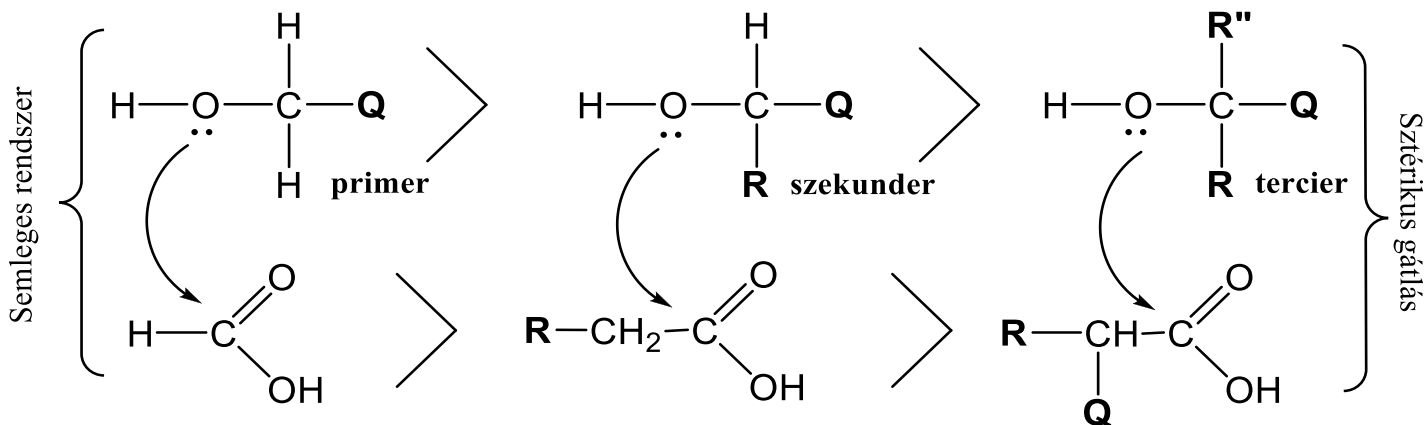
- de 3% ásványi sav jelenlétében már **néhány óra** alatt (*E. Fischer 1895*),
- az olcsó alkohol nagy feleslegével az **egyensúly eltolható**,
- az egyensúly eltolható, ha a terméket folyamatosan eltávolítjuk.

(pl. benzol hozzáadása után azeotropos desztilláció)

*Bruckner I-1/567*

## Mensutkin szabály (1879):

rendűség növekedésével (mind az alkohol mind a karbonsav esetében)  
csökken a reakció sebessége



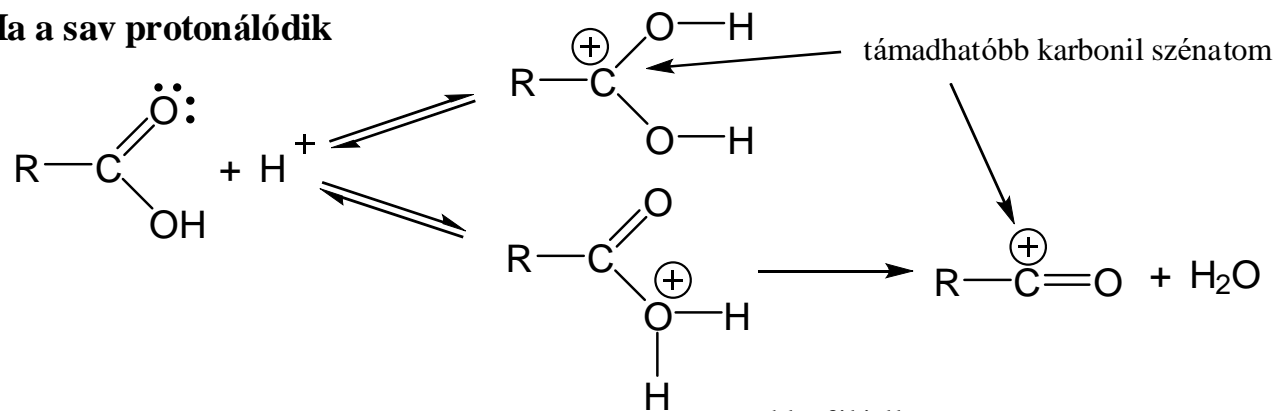
\* A rendűséggel nő egy „parányit” a bázicitás (nukleofilicitás) de a **szterikus gátlás** sokkal jobban nő !!

## További tapasztalat:

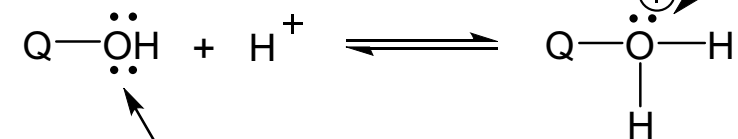
az észterezés során alkalmazott **savkoncentrációnak optimuma** van

## magyarázat:

### Ha a sav protonálódik



### Alkohol protonálódása

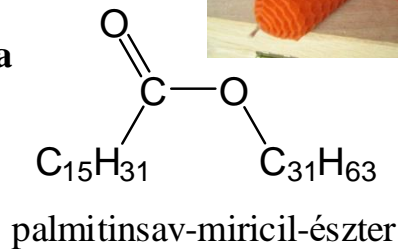


nukleofil jellegű  
és bázisos

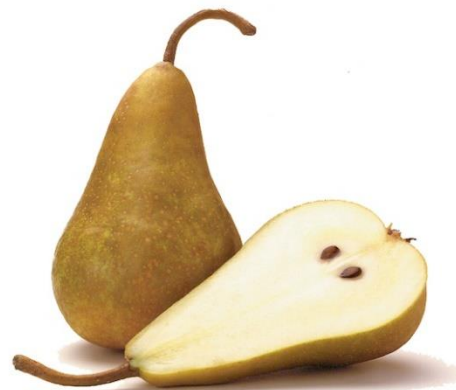
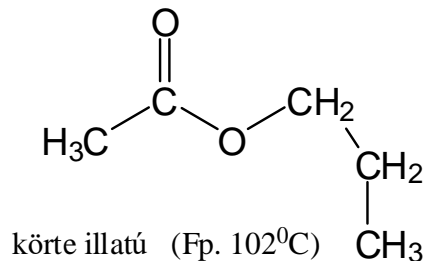
## Érdekes észterek:



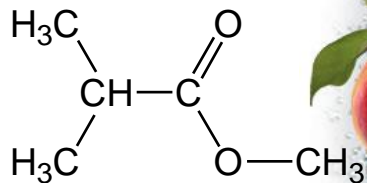
**Viaszok:**  
méhviasz 80%-a



## Propil-acetát

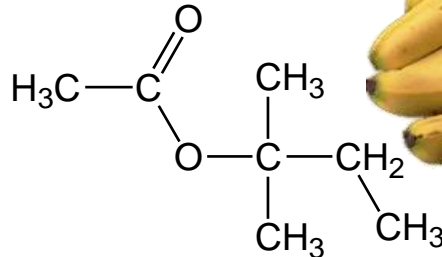


## Izovajsav-metilészter



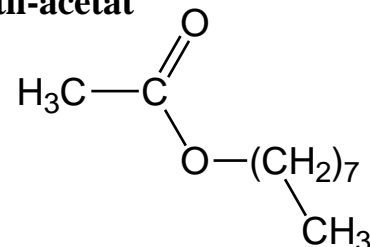
sárgabarack illatú (Fp. 91,5<sup>0</sup>C)

## Izoamil-acetát



banán illatú (Fp. 142<sup>0</sup>C)

## Oktil-acetát

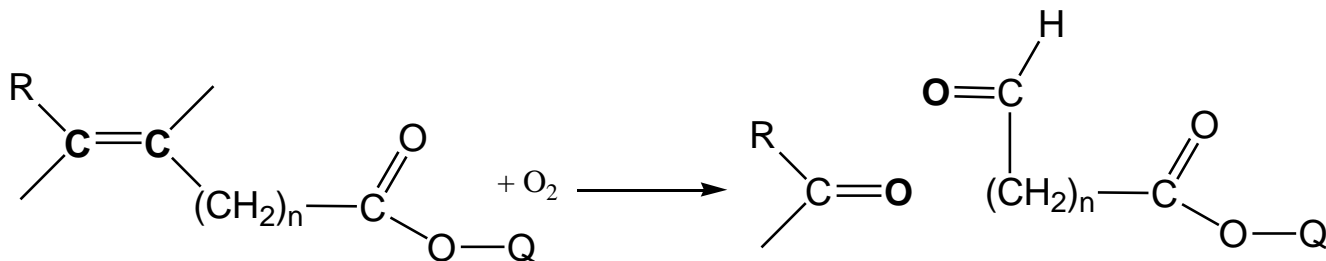


narancs illatú (Fp. 211<sup>0</sup>C)



....szőlő, eper málna, ananász, méz, .....körömlakklemosó, ragasztó...

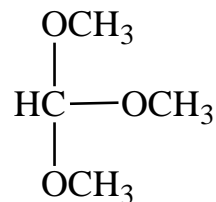
## Zsírok avasodása:



## D) Ortokarbonsav-észterek

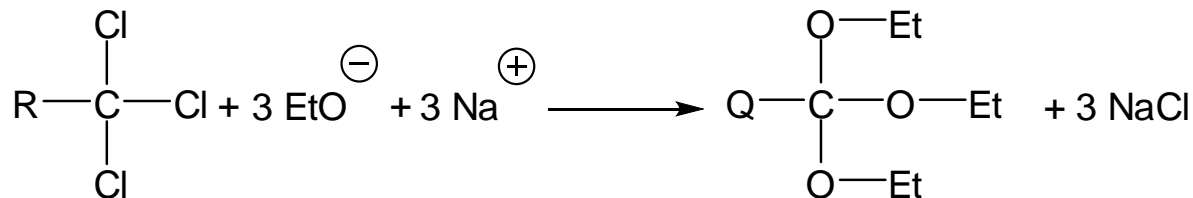


trimethyl orthoformate  
trimetil-ortoformiát



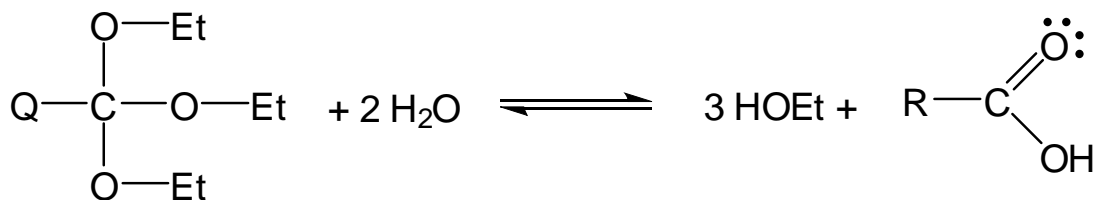
*Bruckner I-1/586*

### Ortokarbonsav-észterek



főleg a hangyasav (R=H) ortoészter előállítására jó ez az eljárás

### Könnyen hirdolizál

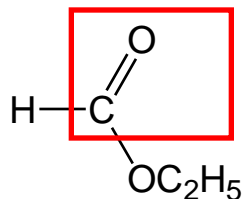




## E) Iminoéterek R-C(OQ)NH

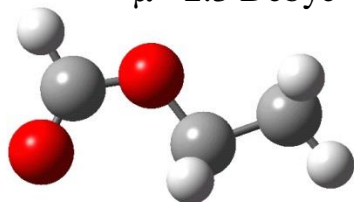
az R-C(OH)NH (alkánimidsavak) észterei  
„-imidátok”

**karbonil**

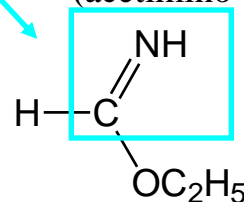


Formic acid ethyl ester  
etil-formiát

$\mu = 2.3$  Debye

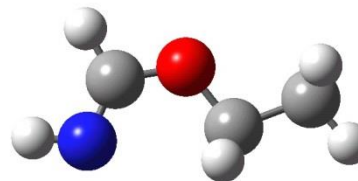


**imino**

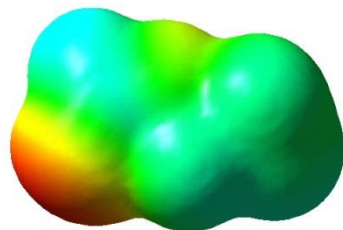


Formimidic acid ethyl ester  
etil-formimidát  
(formimino-etil-éter)

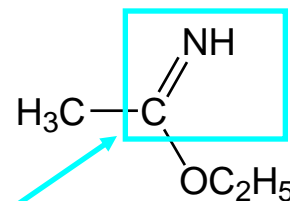
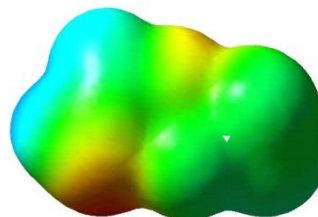
$\mu = 0.89$  Debye



E(RHF/6-311++Gd,p)



piros                      kék  
 $-0.05 \leq \text{töltés} \leq 0.05$



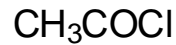
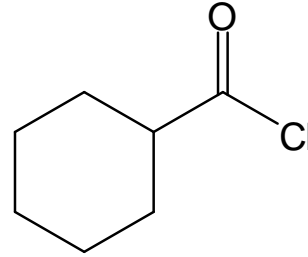
Acetimidic acid ethyl ester  
etil-acetimidát  
(acetimino-etil-éter)

# 8. Karbonsav-halogenidek (RCOX : X = F, Cl, Br, I)

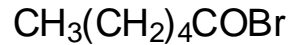
típusnév: savgyök halogenidje (pl. acetyl-klorid)

karbonsav-halogenidje (pl. ecetsav-klorid)

## A) egybázisú



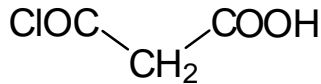
Acetyl chloride  
acetyl-klorid



Hexanoyl bromide  
hexanoil-bromid

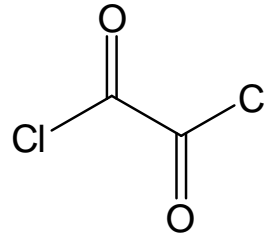
Cyclohexanecarbonyl chloride  
ciklohexánkarbonil-klorid

## B) R kétbázisú: részlegesen

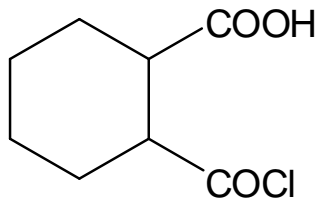


Chloroacetyl chloride  
klórkarbonilecetsav

## teljesen

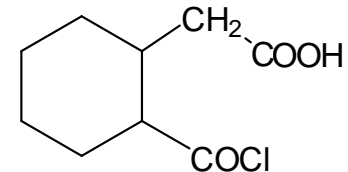


Oxalyl dichloride  
oxalil-diklorid



2-(Chloroacetyl)cyclohexanecarboxylic acid  
2-(**klórkarbonil**)ciklohexánkarbonsav

## nev.gyak.



2-(Chloroacetyl)-cyclohexylacetic acid  
2-(klórkarbonil)ciklohexilecetsav

# 9. Karbonsav-amidok (RCONHQ)

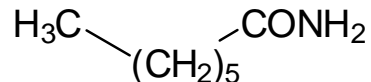
típusnév: karbonsav-amid (pl. ecetsav-amid)  
alkánamid (pl. etánamid)

## A) Primer savamidok(RCONH<sub>2</sub>)

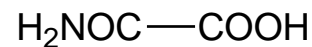
- A megfelelő sav nevéből elhagyjuk a „sav” ill. „karbonsav” utótagot és helyére az „amid” ill. „karboxamid” utótagot teszünk: propionsav ⇒ propionamid
- A triviális alapnevű savak esetén az acilcsoport szótövéhez adjuk az amid utótagot: hangyasav formil ⇒ form + amid = formamid,  
ecetsav acetil ⇒ acet + amid = acetamid.  
a sav nevéhez kötőjellel illesztjük az „amid” utótagot (ecetsav-amid).



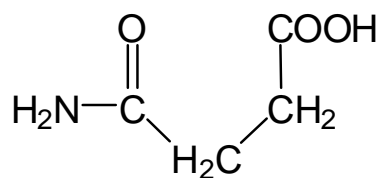
Acetamide  
acetamid  
ecetsav-amid



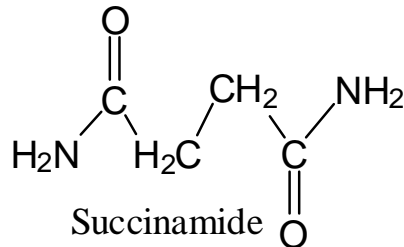
heptanamide  
heptánamid  
heptánsav-amid



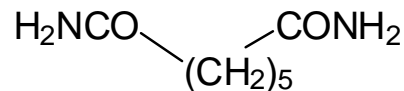
Oxalamide  
oxálamid



Succinamic acid  
szukcinamidsav  
borostyánkősav-amid

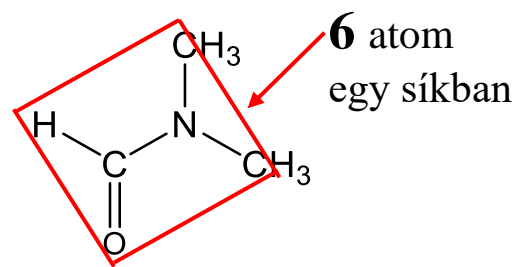


Succinamide  
szukcinamid  
borostyánkősav-diamid

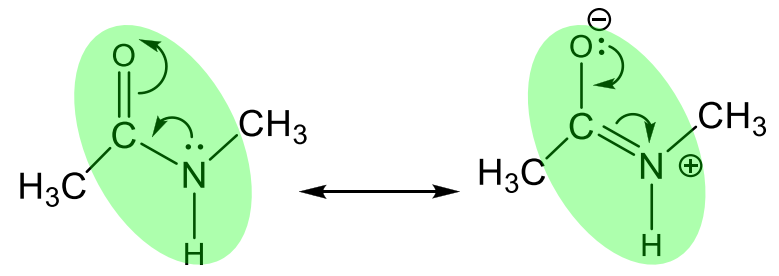


heptandiamide  
heptándiamid  
heptánsav-diamid

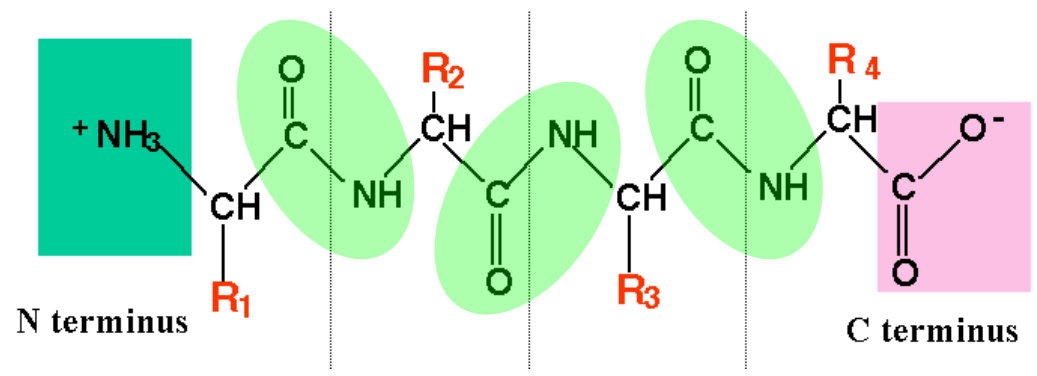
# B) N-szubsztituált szekunder és tercier savamidok (RCONHQ és RCONQ<sup>1</sup>Q<sup>2</sup>)



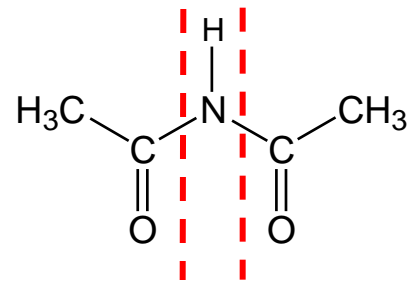
*N,N*-Dimethylformamide  
*N,N*-dimetilformamid



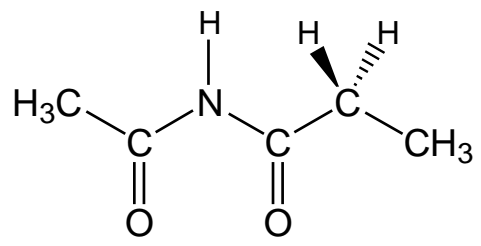
*N*-metilacetamid 2 határszerkezete



# C) Lineáris diacil-aminok (RCO)<sub>2</sub>NH = imidek



*N*-Acetylacetamide  
*N*-acetilacetamid  
diacetil-amin



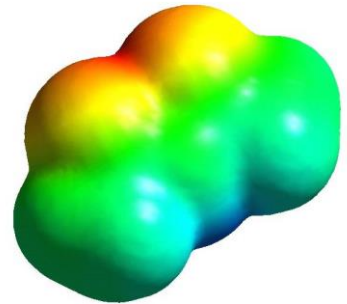
*N*-Acetylpropionamide  
*N*-acetilpropionamid  
acetil-propionil-amin

**Kérdés:** hány atom van egy síkban ?

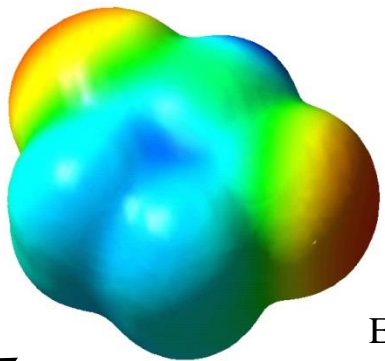
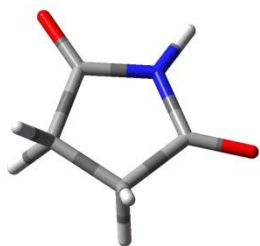
**8 atom  
egy síkban**



piros  
-0.09 ≤ töltés. ≤ 0.09  
kék



μ= 6.83 Debye

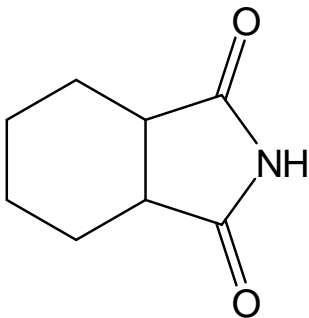


μ= 2.56 Debye

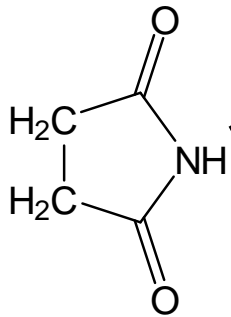
piros  
-0.06 ≤ töltés. ≤ 0.06  
kék

E(RHF/6-311++Gd,p)

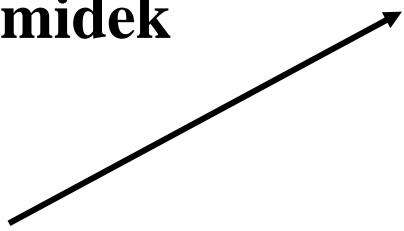
**D) Ciklusos diacyl-aminok = imidek**



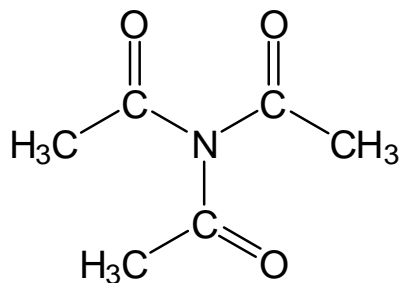
cyclohexane-1,2-carboxamide  
ciklohexán-1,2-karboxamid



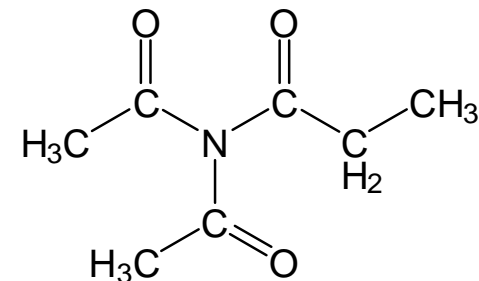
succinamide  
szukcinimid  
borostyánkősav-imid



## E) Triacil-aminok (RCO)<sub>3</sub>N



*N,N*-Diacetylacetamide  
*N,N*-diacetylacetamid  
triacetil-amin  
triacetamid



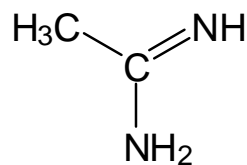
*N,N*-diacetylpropionamide  
*N,N*-diacetylpropionamid

## 10. Karbonsav sav-amidinek (RCNH<sub>2</sub>=NH)

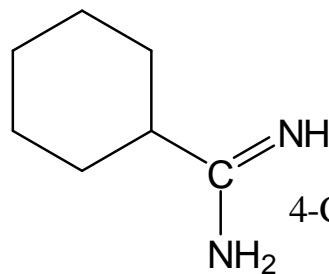
utótag: „amidin” előtag „amidino”

- A megfelelő sav nevéből elhagyjuk a „sav” ill. „karbonsav” utótagot és helyére az „amidin” ill. „karboxamidin” utótagot teszünk:

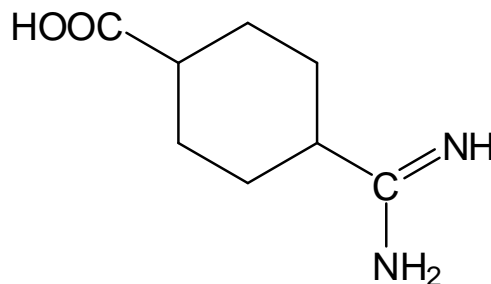
propionsav ⇒ propion**amidin**



Acetamide  
acetamidin  
ecetsav-amidin



Cyclohexanecarboxamide  
ciklohexánkarboxamidin



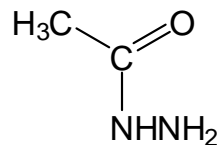
4-Carbamidoyl-cyclohexanecarboxylic acid  
4-amidino-1-ciklohexánkarbonsav

# 11. Karbonsav-hidrazidok $RC(NHNH_2)O$

utótag: „hidrazid” előtag „acilhidrazino”

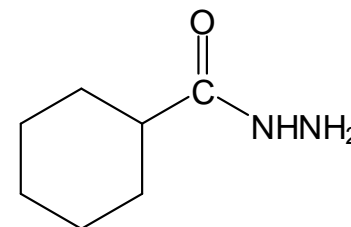
- A megfelelő „sav” ill. „karbonsav” nevéből elhagyjuk a „sav” utótagot és helyére a „hidrazid” ill. „karbohidrazid” utótagot teszünk:

propionsav  $\Rightarrow$  propion**hidrazid**



Acetohydrazide  
acetohidrazid

Acetic acid hydrazide  
ecetsav-hidrazid

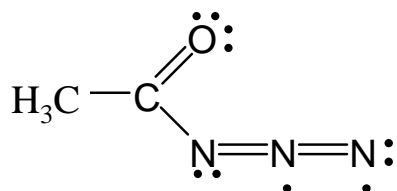


Cyclohexanecarbohydrazide  
ciklohexánkarbohidrazid

Cyclohexane carboxylic acid hydrazide  
ciklohexán-karbonsav-hidrazid

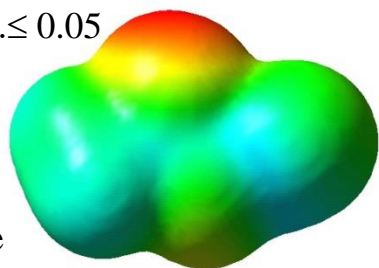
# 12. Karbonsavazidok $RCON_3$

Az acilcsoport nevéhez adjuk az azid szót (*Csn*):

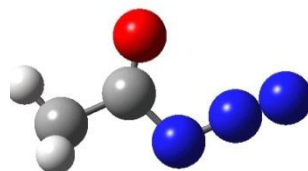


piros  
 $-0.05 \leq \text{töltés} \leq 0.05$

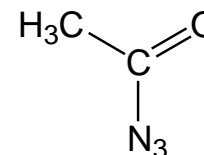
kék



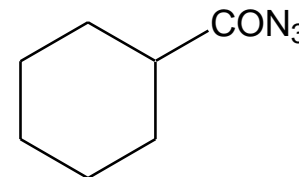
$\mu = 1.9$  Debye



E(RHF/6-311++Gd,p)

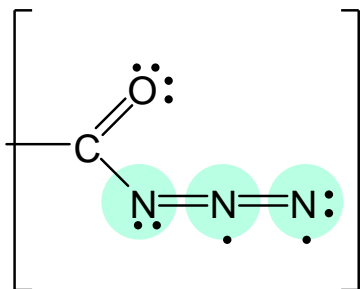


Acetyl azide  
acetyl-azid



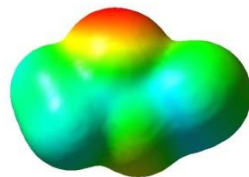
Cyclohexanecarbonyl azide  
ciklohexánkarbonil-azid

## Hatászerkezetek:

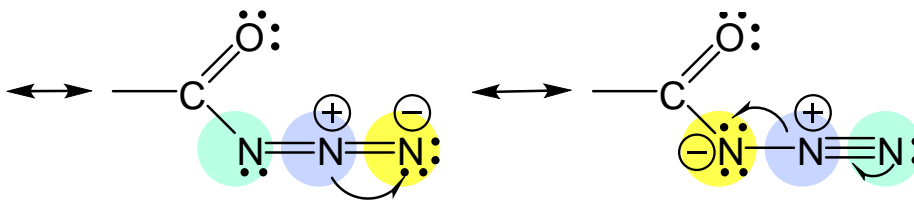


hipotetikus szerkezet

számított elektronsűrűség:

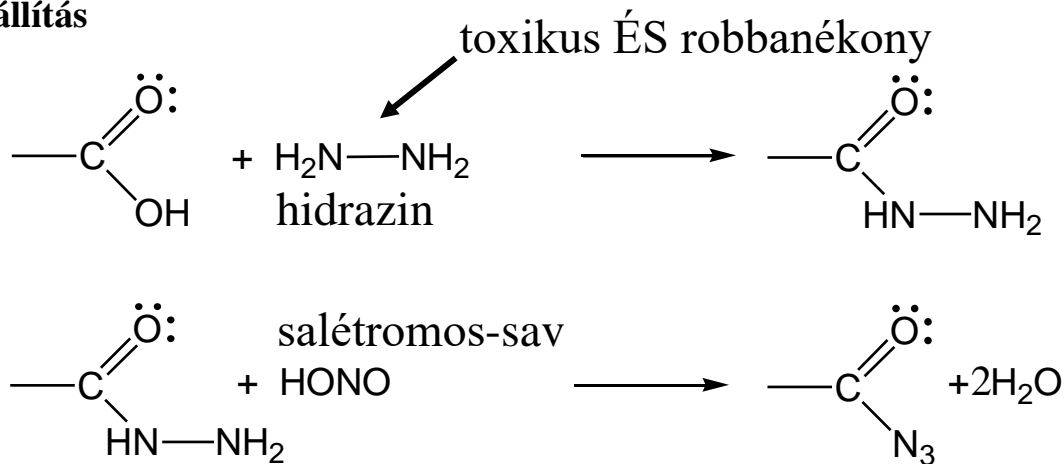


piros  $-0.05 \leq \text{töltés} \leq 0.05$   
kék

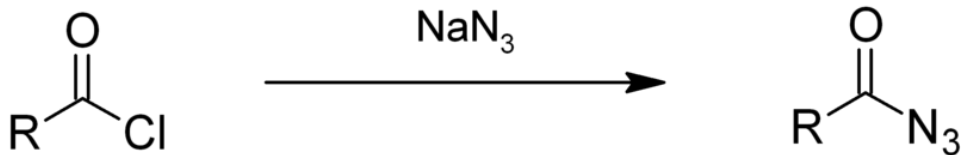


tényleges határszerkezetek

## Előállítás



vagy:

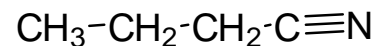




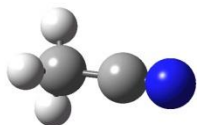
# 13. Karbonsav-nitrilek (RCN)

típusnév: karbonsav-nitril (*Szn*) pl. ecetsav-nitril  
alkil-cianid (*Csn*) pl. metil-cianid

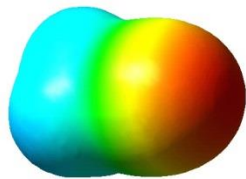
- A megfelelő sav nevéből elhagyjuk a „sav” utótagot és helyére az „nitril” utótagot teszünk: propionsav  $\Rightarrow$  propion**nitril**



Butyronitrile  
butironitril  
Propyl-cyanide  
propil-cianid

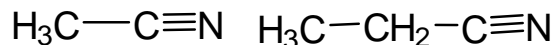


E(RHF/6-311++Gd,p)



$\mu = 4.2$  Debye

piros                      kék  
 $-0.06 \leq \text{töltés} \leq 0.06$



Acetonitrile  
acetonitril  
Methyl-cyanide  
metil-cianid

Propionitrile  
propionitril  
Ethyl cyanide  
etil-cianid

↑  
poláris, aprotikus oldószer

# 14. Halogénezett karbonsavak

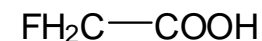
típusnév: halogénkarbonsav (*Szn*) pl. klórecetsav

karbonsav: telített  $\Leftrightarrow$  telítetlen

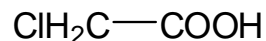
karboxilcsoportok száma szerint: egy-, két-, három- és több-bázisú sav

a halogénatom jellege és száma szerint

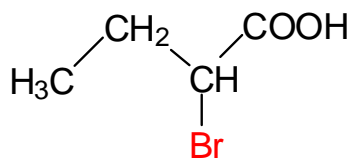
a karboxilcsoport és a halogénatom relatív helyzete szerint:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ...,  $\omega$



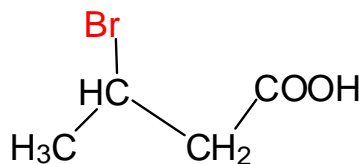
Fluoroacetic acid  
fluorecetsav



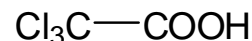
Chloroacetic acid  
klórecetsav



2-Bromobutenoic acid  
2-brómbutánsav  
( $\alpha$ -brómvajsav)

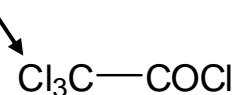


3-Bromobutenoic acid  
3-brómbutánsav  
( $\beta$ -brómvajsav)



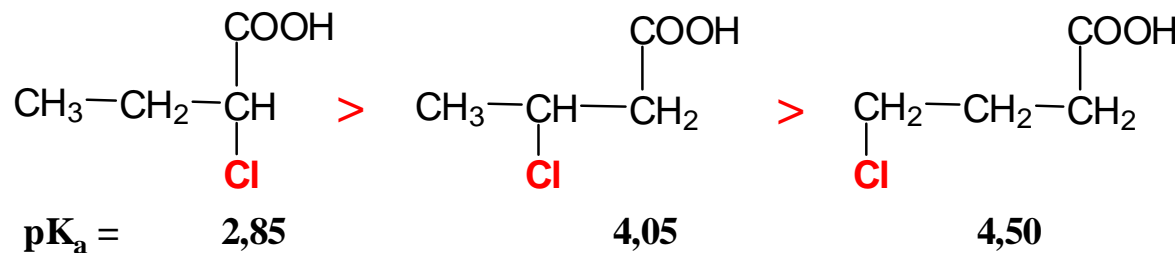
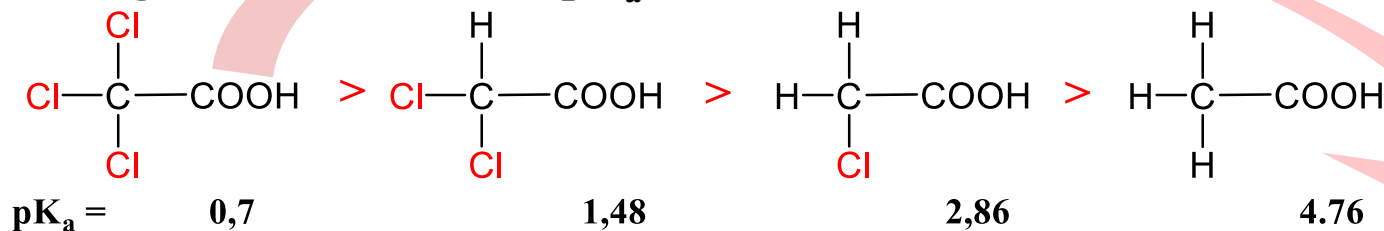
Trichloroacetic acid  
triklórecetsav

halogénezett  
karbonsav-halogenid



Trichloroacetyl chloride  
triklóracetil-klorid

## Halogénezett karbonsavak $\text{pK}_a$ -ja:



tetoválás,  
szemölcsök  
eltüntetése

# 15. Hidroxikarbonsavak

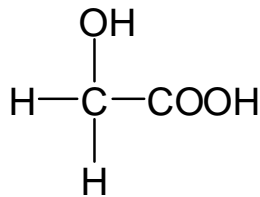
**típusnév:** hidroxikarbonsav (*Szn*) pl. hidroxi-ecetsav

karbonsav: telített ⇔ telítetlen

karboxilcsoportok száma szerint: egy-, két-, három- és több-bázisú sav

a hidroxilcsoport száma szerint

a karboxilcsoport és a hidroxilcsoport relatív helyzete szerint: α, β, γ, ..., ω

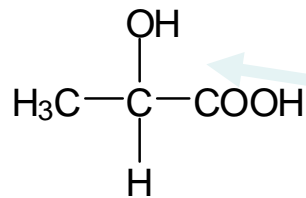


glikolsav

Hydroxyacetic acid

hidroxi-ecetsav

*érettlen szőlőben*

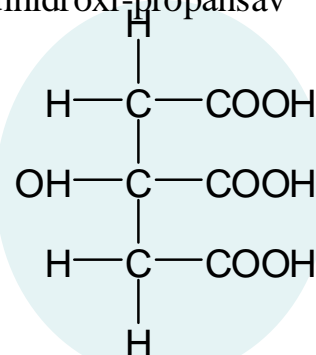
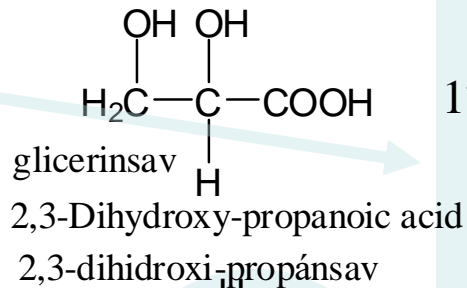


tejsav

2-Hydroxypropanoic acid

2-hidroxi-propánsav

*cukrok erjedése során*



citromsav

2-hydroxypropane-1,2,3-

-tricarboxic acid

2-hidroxi-propán-1,2,3-

trikarbonsav

*érettlen citromban*



almasav

2-Hydroxysuccinic acid

hidroxi-borostyánkősav

*érettlen almában, szőlőben  
egresben, stb.*



1780: Carl Wilhelm Scheele –  
aludttejből

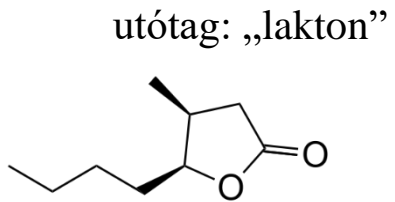
-----  
cukrok hirtelen, anaerob  
bontása tejsavig

↓  
izomláz



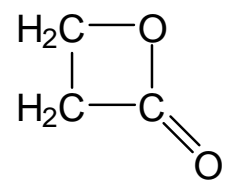
Louis Pasteur, 1848

**Laktonok:** intramolekuláris gyűrűzáródás: észter



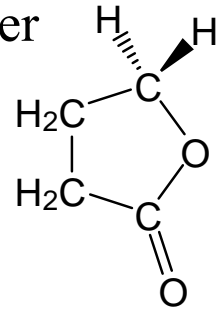
whisky-lakton  
(tölgyfa-hordó)

3-metil-oktano-4-lakton



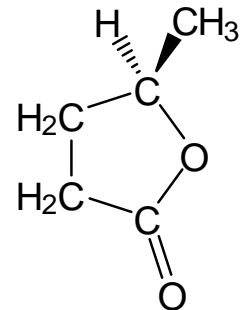
Oxetan-2-one  
oxetán-2-on

propano-3-lakton  
(β-propiolakton)



Tetrahydrofuran-2-one  
tetrahidrofurán-2-on

Butane-4-lactone  
butano-4-lakton



5-Methyl-tetrahydro-furan-2-one  
5-metil-tetrahidrofurán-2-on

Pentane-4-lactone  
pentano-4-lakton

# 16. Oxokarbonsavak

**típusnév:** oxokarbonsav (*Szn*) pl. oxoecetsav

előtag: „formil”

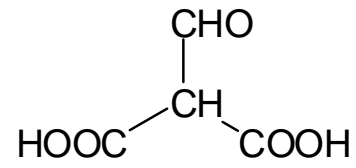
karbonsav: telített ⇔ telítetlen

karboxilcsoportok száma szerint: egy-, két-, három- és több-bázisú sav  
az oxocsoport száma szerint

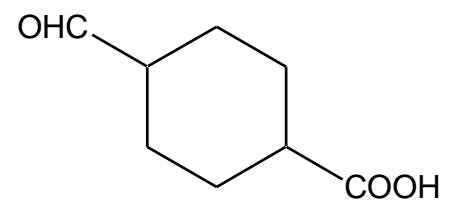
a karboxilcsoport és a oxocsoport relatív helyzete szerint: α, β, γ, ..., ω

**Aldokarbonsavak:**

OHC—COOH  
glioxilsav  
Oxoacetic acid  
oxoecetsav  
*ormil-hangyasav ( régi név)*

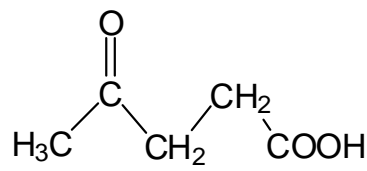


2-Formylmalonic acid  
2-formilmalonsav



4-Formyl-1-cyclohexanecarboxylic acid  
4-formil-1-ciklohexánkarbonsav

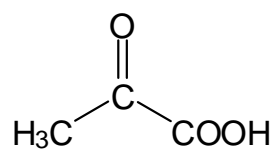
## Ketokarbonsavak:



levulinsav

4-Oxopentanoic acid

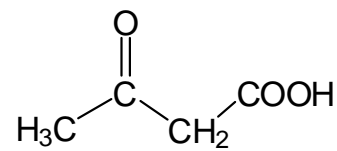
4-oxopentánsav



piroszlósav

2-Oxopropanoic acid

2-oxopropánsav



acetecetsav

3-Oxobutanoic acid

3-oxobutánsav

# 17. Aminokarbonsavak

**típusnév:** aminokarbonsav (*Szn*) pl. aminoecetsav

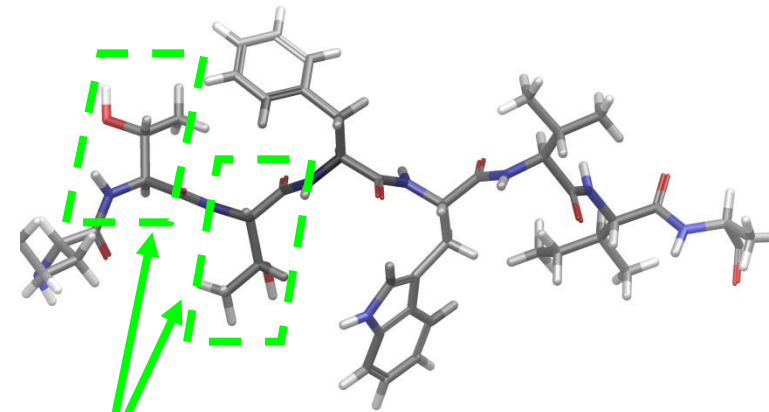
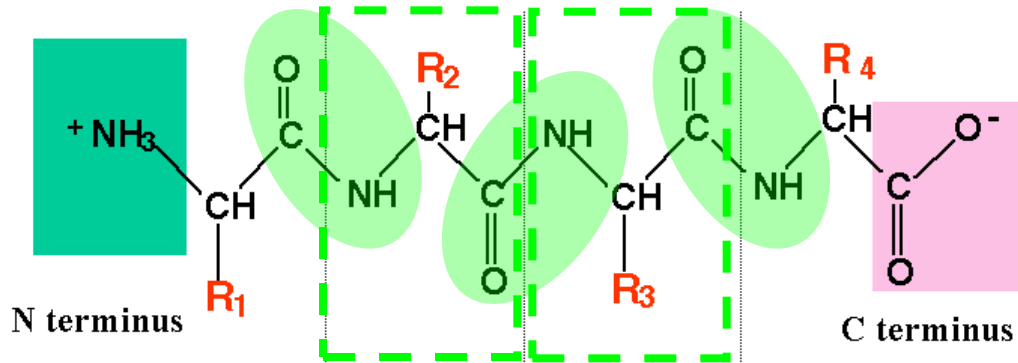
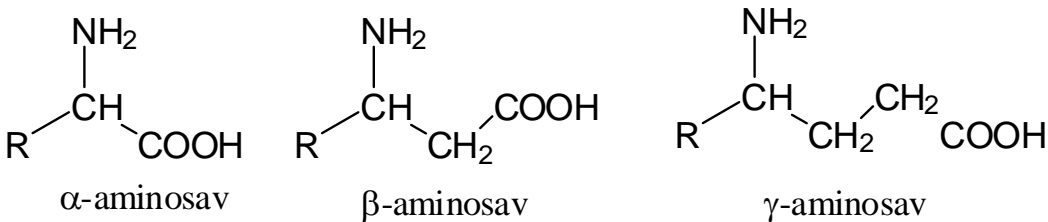
előtag: „amino”

karbonsav: telített  $\Leftrightarrow$  telítetlen

karboxilcsoportok száma szerint: egy-, két-, három- és több-bázisú sav

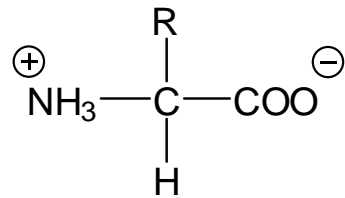
az aminocsoport száma szerint

a karboxilcsoport és az aminocsoport relatív helyzete szerint:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , ...,  $\omega$



Aminosavak (21 féle)

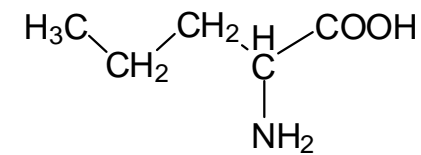
## Monoamino-monokarbonsavak:



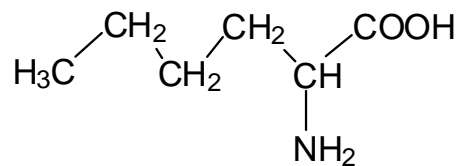
## Monoamino-dikarbonsavak és származékaik:

## Több bázisos csoportot tartalmazó monokarbonsavak:

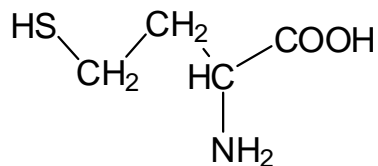
R=	H	glicin
	CH <sub>3</sub>	alanin
	CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	valin
	CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	leucin
	CH(CH <sub>3</sub> )(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )	izoleucin
R=	CH <sub>2</sub> COOH	aszparaginsav
	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> COOH	glutaminsav
	CH <sub>2</sub> CONH <sub>2</sub>	aszparagin
	CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> CONH <sub>2</sub>	glutamin
R=	(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	ornitin
	(CH <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> NH <sub>2</sub>	lizin
	(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> NH-C(=NH)-NH <sub>2</sub>	arginin



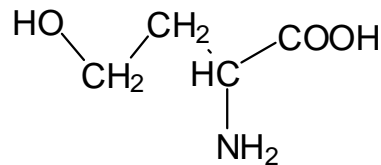
2-Aminopentanoic acid  
2-aminopentánsav  
norvalin



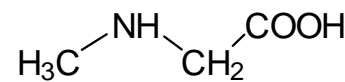
2-Aminohexanoic acid  
2-aminohexánsav  
norleucin



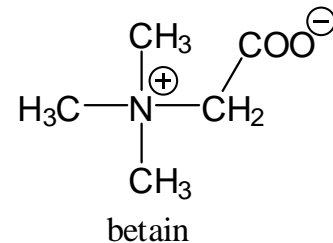
2-Amino-4-mercaptobutanoic acid  
2-amino-4-merkaptobutánsav  
homocisztein



2-Amino-4-hydroxybutanoic acid  
2-amino-4-hidroxibutánsav  
homoszerin

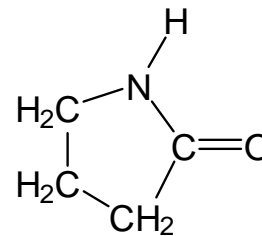


szarkozin



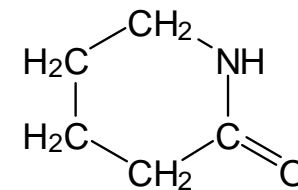
betain

## Laktámok: intramolekuláris gyűrűs amidok utótag: „laktám”



Pyrrolidin-2-one  
pirrolidin-2-on

butano-4-laktám



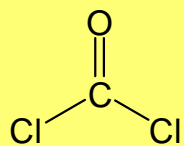
Piperidin-2-one  
piperidin-2-on

hexano-5-laktám  
(ε-kaprolaktám)

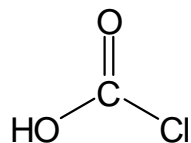
## 18. Szénsavszármazékok



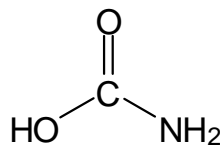
John Davy,  
1812



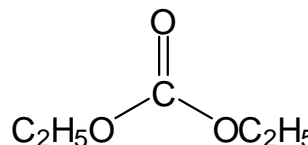
fosgén



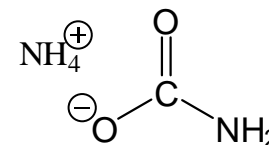
chloroformic acid  
klór-hangyasav



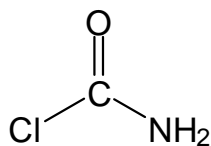
Carbamic acid  
karbamidsav



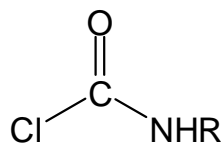
Diethyl carbonate  
dietil-karbonát



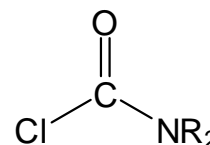
ammónium-karbamát



karbamoil-klorid



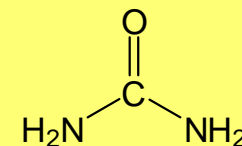
N-alkilkarbamoil-klorid



N,N-dialkilkarbamoil-klorid



Herman Boerhaave,  
1727



karbamid  
úrea

+ jön, jön, jön!!!! : AROMÁS KARBONSÁVAK

# Összefoglaló (fontosabb fogalmak)

- ikerionos szerkezet
- polaritás és bázicitás
- összetettebb molekulákat „memorizálása”
- határszerkezetek (pl. diazometán,
- konfiguráció, kiralitás, D/L-konvenció
- monoszacharidok gyűrűs formájának rajzolástechnikája nyíltláncú alapján
- a mutarotáció jelensége
- savak és bázisok erőssége:  $K_a$  és  $pK_a$



# Függelék

## A víz molaritása:

$$\text{Képlettel: } c = \frac{n}{V} = \frac{m/M}{V} = \frac{V^* \rho / M}{V} = \frac{\rho}{M}$$

$$\text{molaritás (mol/dm}^3\text{)} = \frac{\text{anyagmennyiség (mol)}}{\text{térfogat (dm}^3\text{)}} =$$

$$= \frac{\text{tömeg (g)} / \text{moláris tömeg (g/mol)}}{\text{térfogat (dm}^3\text{)}}$$

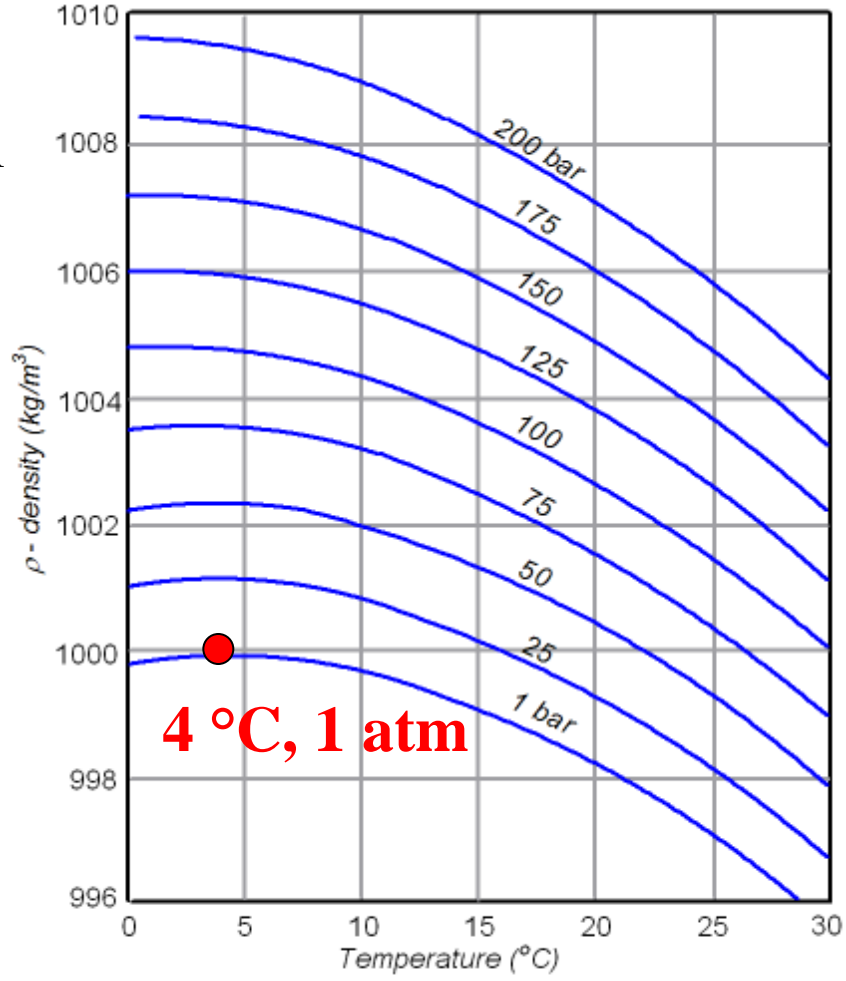
$$= \frac{\text{térfogat (dm}^3\text{)} * \text{sűrűség (g/ dm}^3\text{)} / \text{moláris tömeg (g/mol)}}{\text{térfogat (dm}^3\text{)}}$$

$$= \frac{\text{sűrűség (g/ dm}^3\text{)}}{\text{moláris tömeg (g/mol)}} = \frac{1000 \text{ g/ dm}^3}{18 \text{ g/mol}} = 55,55 \text{ mol / dm}^3$$

# A víz molaritása:

$$\text{molaritás (mol/ dm}^3\text{)} = \frac{\text{sűrűség (g/ dm}^3\text{)}}{\text{moláris tömeg (g/mol)}} = \frac{\rho}{M}$$

Sűrűség: függ a hőmérséklettől és a nyomástól



sav	konc (mM)	pK <sub>a</sub>	K <sub>a</sub>	ion konc (mM)	ionizáció (%)
HCOOH	100	3,75	1,77 E-4	4,2	4
AcOH	100	4,76	1,76 E-5	1,33	1
Propionsav	100	4,87	1,32 E-6	0,4	0,4

# Híg savas oldat pH-ja,

avagy mikor nem hanyagolható már el a víz öndisszociációja?

**kérdés:** mekkora a 0.1 M-os HCl oldat pH-ja?    **válasz:** 1

**kérdés:** mekkora a 0.01 M-os HCl oldat pH-ja?    **válasz:** 2

**kérdés:** mekkora a  $10^{-8}$  M-os HCl oldat pH-ja?    **válasz:** nyilván nem 8, de akkor mekkora?

**megoldás:** Híg oldatokban, ha a sav koncentrációja összemérhető a víz egyensúlyi  $[H^+]$ -koncentrációjával, akkor a sav  $H^+$ -ai mellett, az autó disszociációból keletkező  $H^+$ -kat is figyelembe kell venni.

**Tehát:**

$$c_{HCl} = 10^{-8} M$$

$$x = [H^+]_{\text{ö.d.}} = [OH^-]_{\text{ö.d.}}$$

tehát:

$$[H^+]_{\text{összes}} = c_{HCl} + [H^+]_{\text{ö.d.}} = c_{HCl} + x$$

**Mivel a vízionszorzat az egy konstans:**

standard hőmérsékleten és nyomáson

éppen  $1,0 \cdot 10^{-14}$

$$[H^+]_{\text{összes}} \times [OH^-] = 10^{-14}$$

**Az utóbbi egyenletbe behelyettesítve:**

$$(c_{HCl} + x) \times x = 10^{-14}$$

*Megoldva:*

$$x = 9.5 \times 10^{-8} M$$

$$[H^+]_{\text{összes}} = 10^{-8} + 9.5 \times 10^{-8} = 1.05 \times 10^{-7} M$$

Tehát a  $10^{-8}$  M-os HCl híg vizes oldatának pH-ja:

$$pH = -\lg[H^+]_{\text{összes}} = -\lg 1.05 \times 10^{-7} = 6.98 \quad !$$