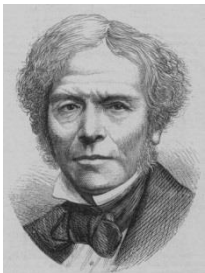


# A benzol, benzoesav felfedezése



- **izolálás olajgázból:** Michael Faraday (*Royal Inst.*) 1825,

- **előállítás benzoegyantából:** Eilhardt Mitscherlich (*Berlin*) 1834 : **benzol, benzoesav**

barnás gyanta +  $\text{Ca(OH)}_2$

$(\phi\text{-COO}^-)_2\text{Ca}^{2+}$

meszes vízzel főzte



+2HCl (savanyítás)

2  $\phi\text{-COOH}$  +  $\text{CaCl}_2$

**tapasztalat:** a benzoesav kicsapódik a vizes oldatból



## Benzol leírása és szerkezeti tulajdonságainak meghatározás:

*M. Faraday* (1825) olajgáz összenyomása: összegképlet

*Hoffman/Mansfield* (1845) kőszénkátrány,

1855: „aromás” rendszerek

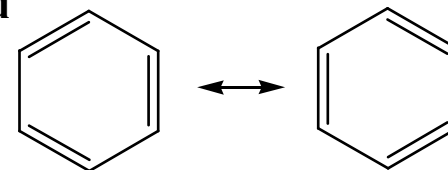
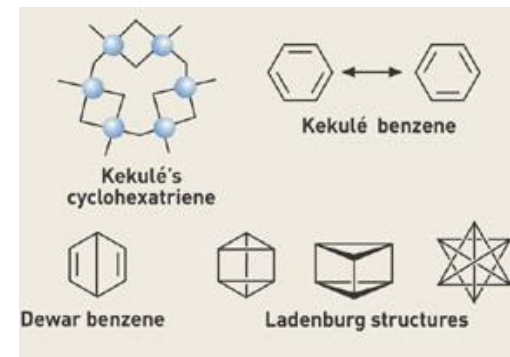
*August Friedrich Kekulé von Stradonitz* (1865) szerkezet:

„1,3,5-ciklohexatrién” ⚡

*Kathleen Lonsdale* (1929): röntgendiffrakció: lapos gyűrű

*Verner Schomaker* és *Linus Carl Pauling* (1939)

elektrondiffrakció → tökéletes hatszög →



azonos határszerkezetek



# A benzol szerkezete:

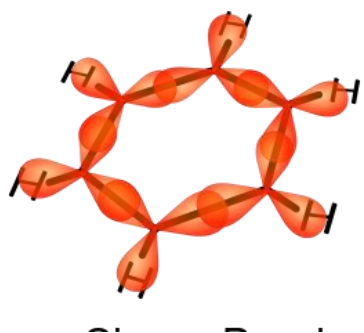
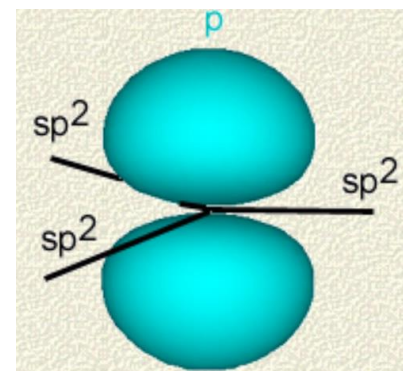
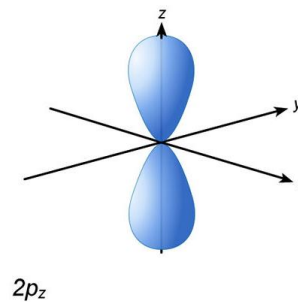
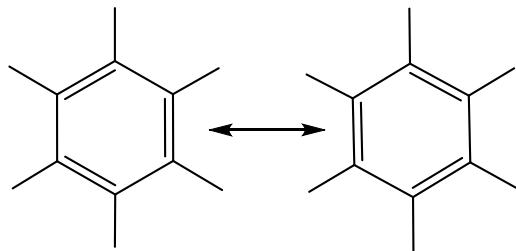
memo:  $d(\text{C}-\text{C})=1.48\text{\AA}$ ,  $d(\text{C}=\text{C})=1.34\text{\AA}$

$d(\text{C}-\text{H})=1.098\text{\AA}$

$d(\text{C}-\text{C})=1.397\text{\AA}$

$\alpha(\text{CCC}) = 120^\circ$

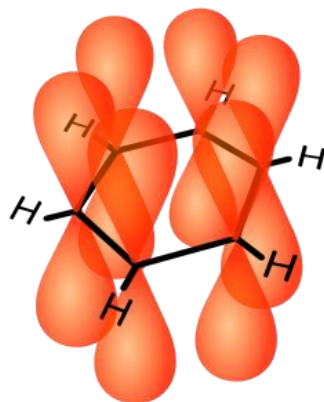
$\omega(\text{CCCC}) = 0^\circ$



$sp^2$  Hy

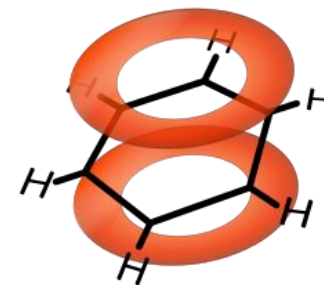
$sp^2$  hibridpályák  
alkotta  $\sigma$  váz

+



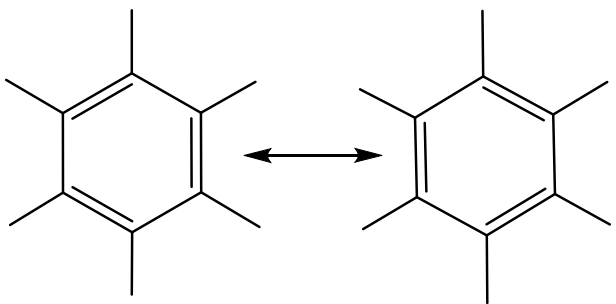
6  $p_z$  or atompályá

→



delokalizált  
elektron-szextett

# A benzol térszerkezete:



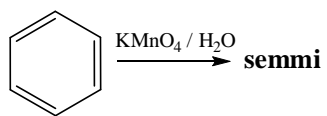
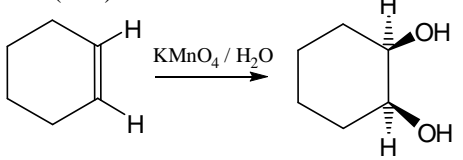
$d(\text{C-H})=1.098\text{\AA}$   
 $d(\text{C-C})=1.397\text{\AA}$   
 $\alpha(\text{CCC}) = 120^\circ$   
 $\omega(\text{CCCC}) = 0^\circ$

**memo:**  $d(\text{C-C})=1.48\text{\AA}$ ,  $d(\text{C=C})=1.34\text{\AA}$

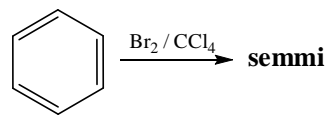
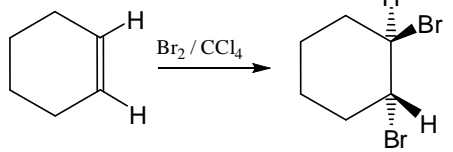
Benzol **hatfogású szimmetriatengellyel** rendelkező **síkalkatú** szimmetrikus **gyűrűs** molekula. Minden C-atomja  $sp^2$ -es hibridállapotú. A 6 db.  $p_z$  atom-pályából, 3 db  $\pi$  molekula pálya alakul ki: **aromás elektronszerkezetű** vegyület.

**„szokatlan”** hogy nem mutatják a alkének tipikus addíciós **reakciói**

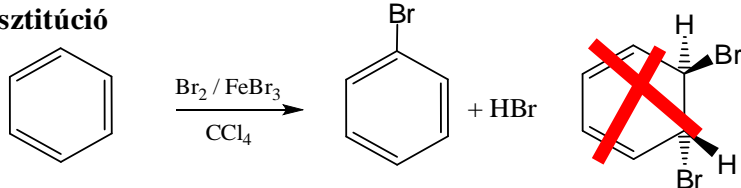
**Addíció (cisz)**



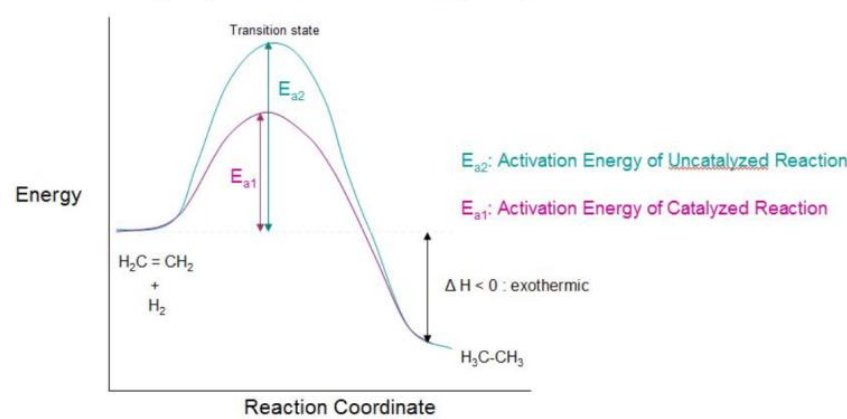
**Addíció (transz)**



**Substitúció**



Hydrogenation Reaction Energy Diagram

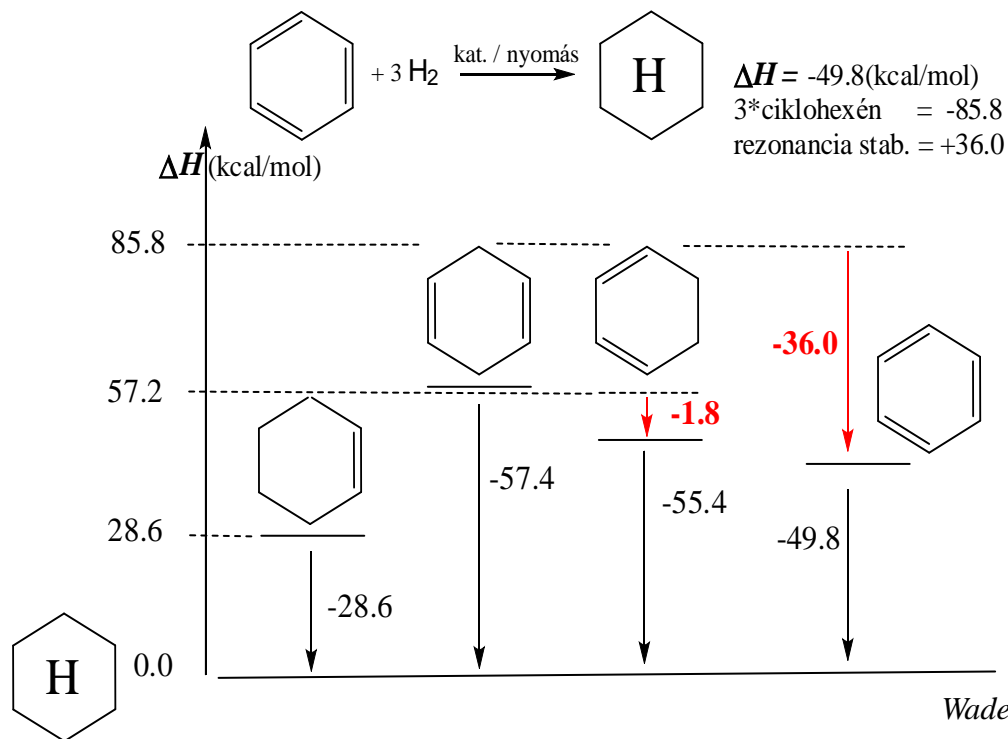


A catalyst lowers the activation energy needed for the reacting molecules to reach the transition state. The addition of a catalyst enables the hydrogenation reaction to occur, that otherwise, would not.

## „szokatlan” stabilitása:

A jóslat -28.6 kcal/mol, vagy ennek többszöröse  $\Delta H$ -hoz képest, a mért hidrogénezési „hő” jelentős stabilitásra utal: a **rezonancia energia jelentős (-36 kcal/mol)**.

A benzol tehát ugyancsak inert!



Hydrogenation of a double bond is a thermodynamically favorable, as it forms a more stable (lower energy) product. The energy of the product is lower than that of the reactant; thus it is exothermic (heat is released). The heat released is called the heat of hydrogenation, which is an **indicator of a molecule's stability**.

## aromás (Hückel) rendszerek:

• delokalizált  $\pi$ -rendszer (alternáló egyes és kettős kötések):

ha  $(4n+2)$  a  $\pi$ -elektronok száma akkor aromás

ha  $(4n)$  a  $\pi$ -elektronok száma akkor nem-aromás

• síkalkat

• gyűrűs

• „minden atom” részt vesz a delokalizációban

# VIII. Aromás szénhidrogének

**Homoaromás vegyületek:** benzol, benzolrészekből felépülő molekulák és azok származékai, amelyek lehetnek monociklusos, policiklusos és kondenzált ciklusos szénhidrogének.

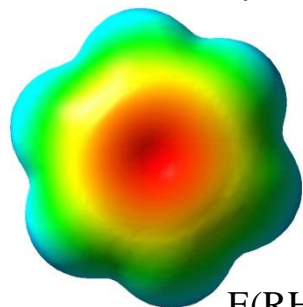
**Heteroaromás vegyületek:** aromás elektronszerkezet S, N, és O atomokkal.

## 1. Monociklusos aromás szénhidrogének

Két szubsztituens relatív helyzete: orto (1,2), meta (1,3) és para (1,4)

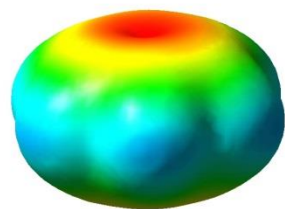
Három szubsztituens relatív helyzete: vicinális (1,2,3), aszimmetrikus (1,2,4), és szimmetrikus (1,3,5)

### A. Telített oldalláncú monociklusos aromás szénhidrogének



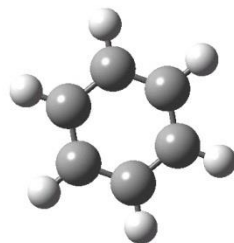
E(RHF/6-311++Gd,p)

piros      kék  
 $-0.03 \leq \text{töltés} \leq 0.03$

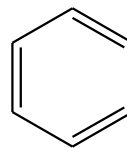


$\mu = 0$  Debye

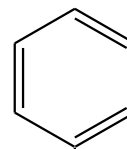
$\pi$ -elektronszextett



Típusnevek:



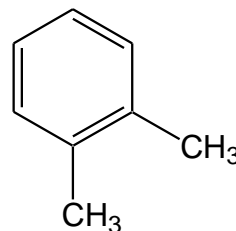
Benzene  
benzol



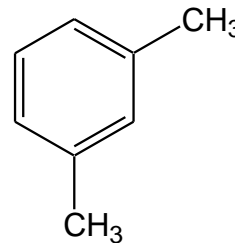
CH<sub>3</sub>

Toluene  
toluol  
(metilbenzol)

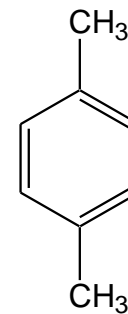
**karcinogén!!!**



1,2-dimetilbenzol  
(orto-xilol)  
*o*-Xylene

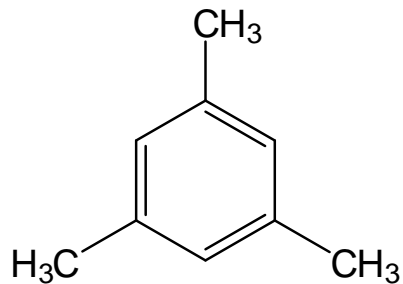


1,3-dimetilbenzol  
(meta-xilol)  
*m*-Xylene

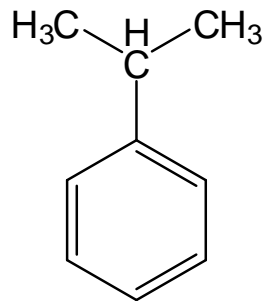


1,4-dimetilbenzol  
(para-xilol)  
*p*-Xylene

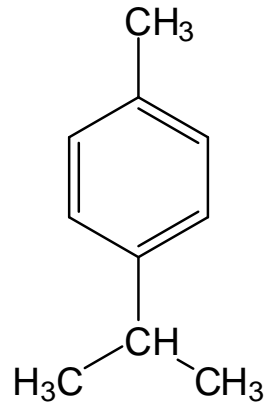
• *xylos* (görög): fa  
• *petrolkémia*



mezitilén  
1,3,5-trimetilbenzol  
mesitylene

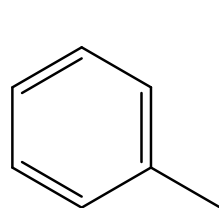


kumol  
izopropilbenzol  
Isopropylbenzene

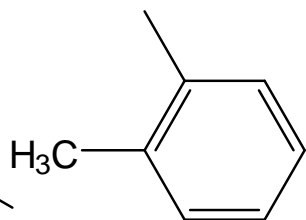


*para*-cimol  
1-metil-4-izopropilbenzol  
*p*-Cymene

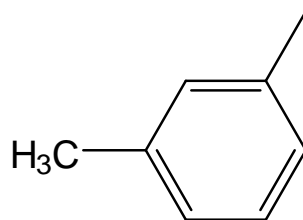
**Csoportnevek:**



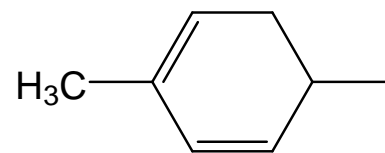
phenyl  
fenil-



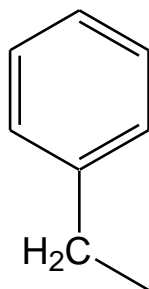
*o*-tolyl  
*o*-tolil-



*m*-tolyl  
*m*-tolil-

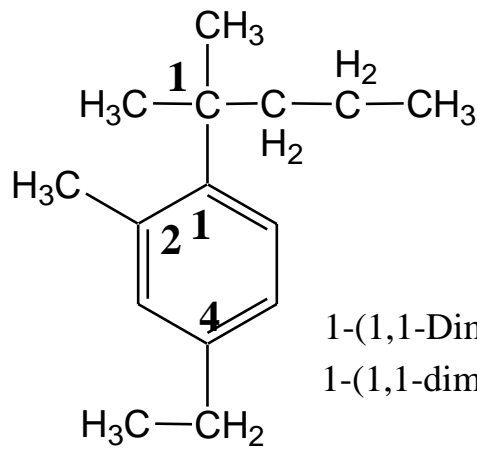


*p*-tolyl  
*p*-tolil-



benzil-

**nev. gyak**



1-(1,1-Dimethylbutyl)-4-ethyl-2-methylbenzene  
1-(1,1-dimetilbutil)-4-etil-2-metilbenzol

# ILLATOS AROMÁS VEGYÜLETEK

**Faj:**

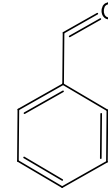
**Név:**

**Vegyület:**

Mandula (*Prunus amygdalus*)



keserűmandula

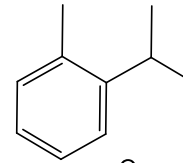


benzaldehyd

Kömény (*Cuminum cyminum*)



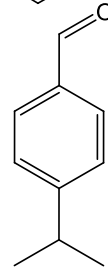
köményolaj



*o*-, *m*- és *p*- cimol

Kömény (*Cuminum cyminum*)

köményolaj

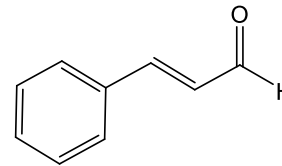


chuminaldehyd  
(illatos folyadék)

Fahéj (*Cinnamomum zeylanicum*)



fahéjaldehyd

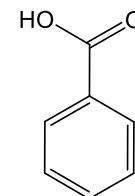


fahéjaldehyd

benzoefa gyantája (*Styrax benzoin*)  
trópusi fa

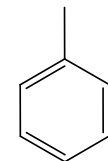


benzoegyanta  
XVI. sz. óta ismert



benzoesav

tolulbalzsam



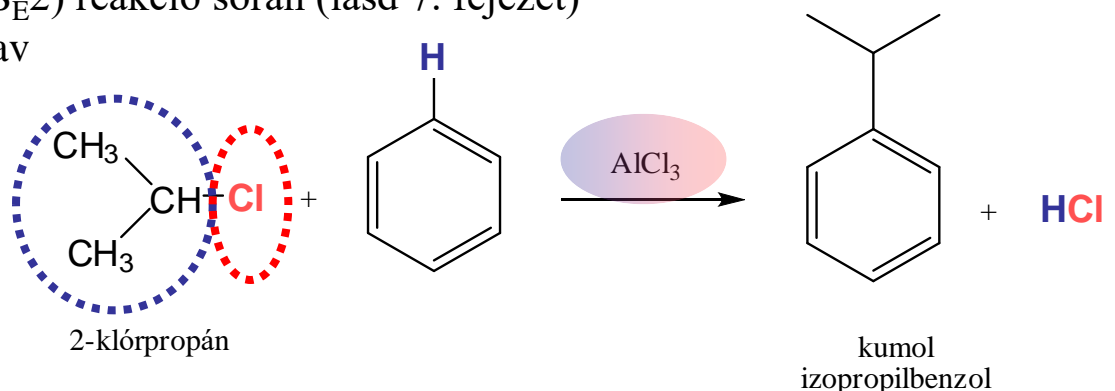
toluol



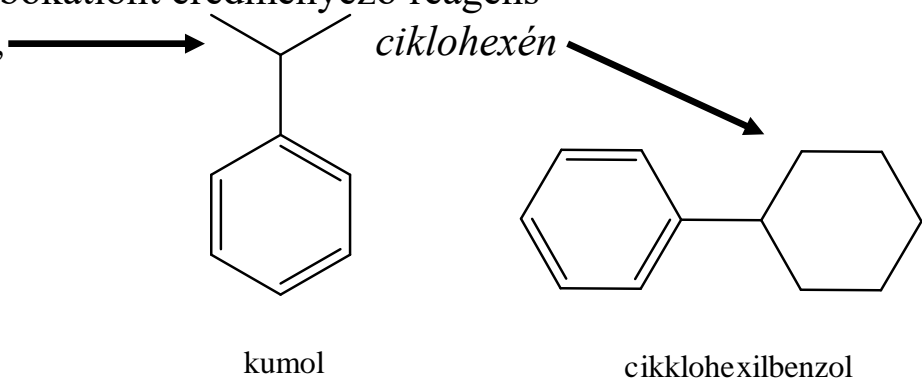
**kérdés:** helyettesíthetünk-e egy aromás hidrogént egy alkil csoporttal?

**válasz:** igen, Friedel–Crafts-alkilezési ( $S_E2$ ) reakció során (lásd 7. fejezet)

**megvalósítás:** pl. alkil-halogenid + Lewis-sav

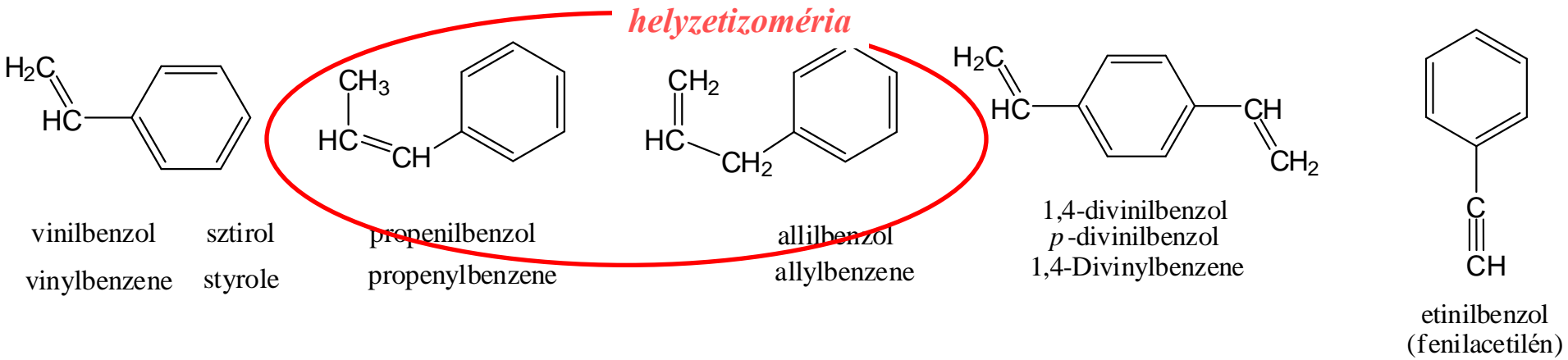


**általánosítás:** más potenciális karbokationt eredményező reagens is alkalmas, pl. propén,

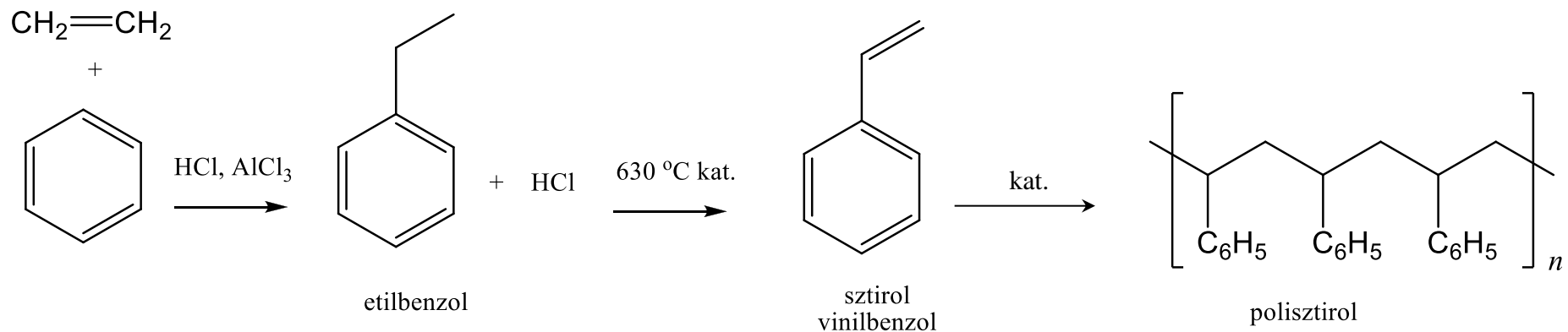


Solomons 670,  
Bruckner II-125

## B. Telítetlen oldalláncú monociklusos aromás szénhidrogének



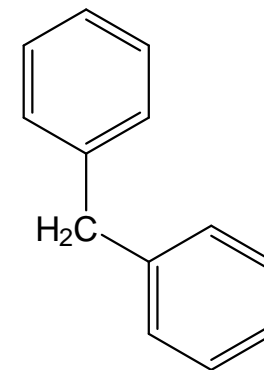
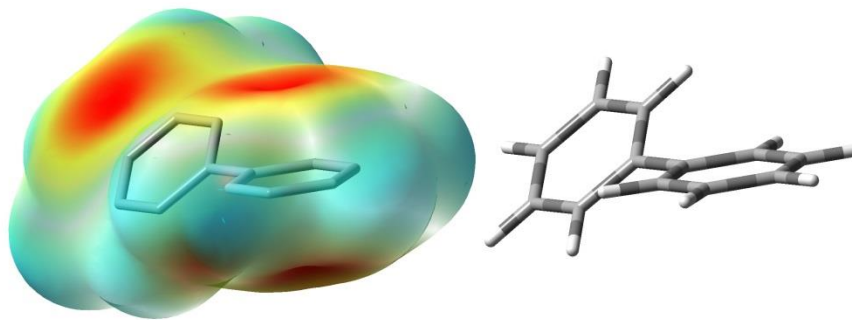
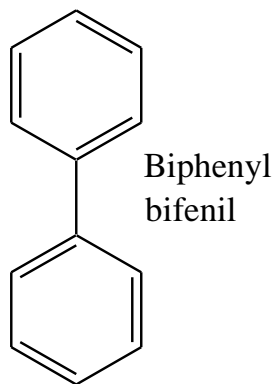




Solomons 693

>10 milliárd kg/év

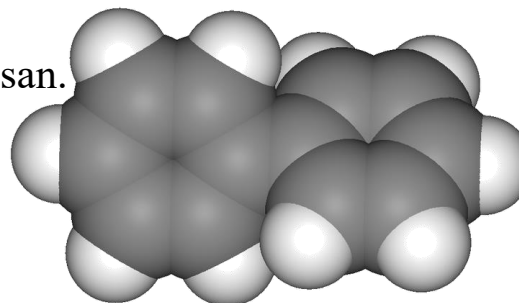
## 2. Izolált policiklusos aromás szénhidrogének



**megfigyelés:** a két aromás gyűrű se nem koplanáris se nem merőleges ( $\sim 40^\circ$ ).

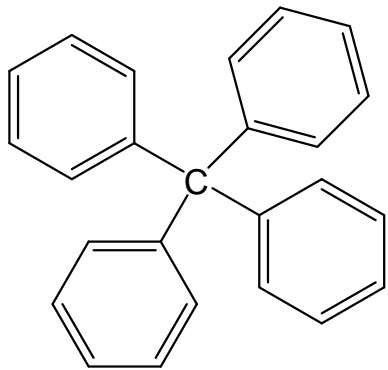
**kérdés:** mi lehet ennek a magyarázata?

**válasz:** az „orto” hidrogének így férnek el ideálisan.

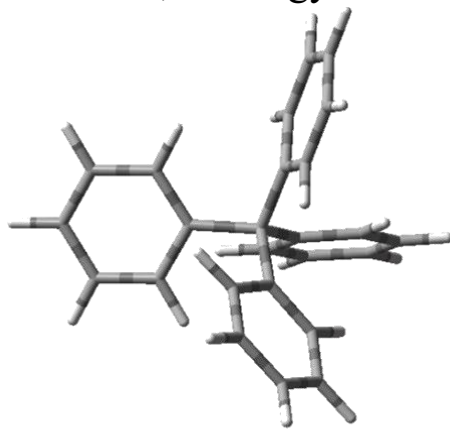


diphenylmethane  
difenilmetán

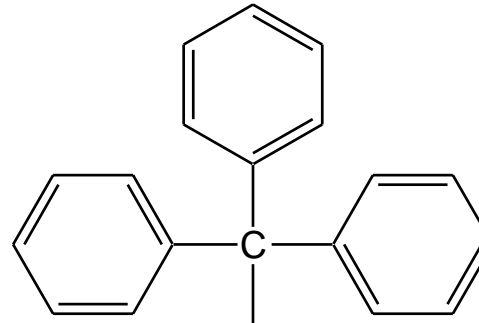
**megfigyelés:** az  $sp^3$ -as szénatom tetraéderezs szerkezetű, nem úgy mint a 24 többi  $sp^2$ -es C-atom.



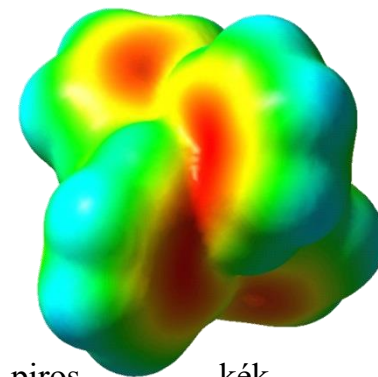
tetraphenylmethane  
tetrafenilmetán



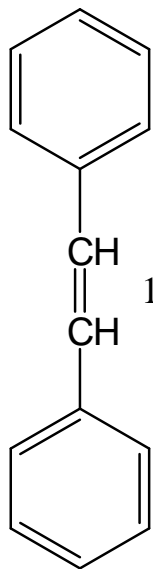
**Csoportnevek:**



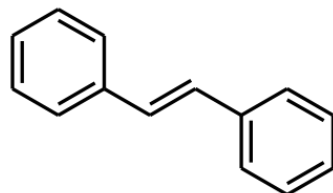
tritol-



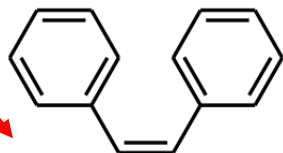
piros  $-0.033 \leq$  töltés  $\leq 0.033$  kék



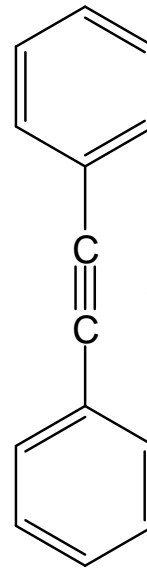
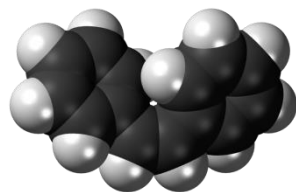
sztilbén  
1,2-diphenylethene  
1,2-difeniletén



**transz – op: 125°C**



**cisz – op: 5-6°C**



tolán  
diphenylacetylene  
difenilacetilén

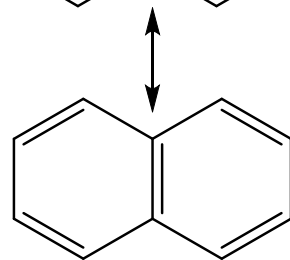
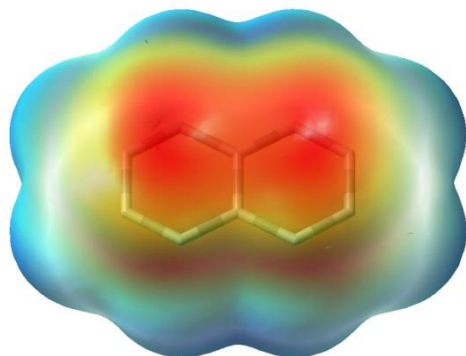
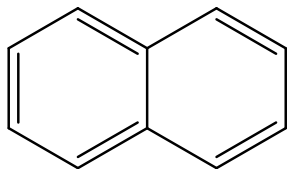
# 3. Kondenzált policiklusos szénhidrogének

**feltétel:** legalább két közös szénatom: - lineáris anelláció  
- anguláris anelláció

**memo:** a naftalin kivételével mindegyik név „én” végződésű **szolyirtó**

## kétgyűrűs rendszerek:

**naftalin** (*szintelen*) folytonosan konjugált (6+4  $\pi$ -elektr.)  
aromás ( $\mu=0D$ , 6- és 6-tagú gyűrűk)



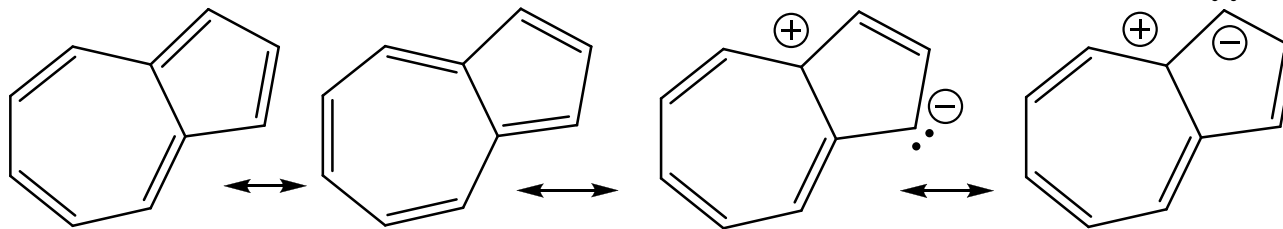
azonos

határszerkezetek

*Bruckner II 185*

**azulén** (*mélykék kristályos anyag*)

folytonosan konjugált (6+4  $\pi$ -elektron = 4\*2+2 ← aromás)  
szemiaromás ( $\mu=1.1D$ , töltés szepar., 7- és 5-tagú gyűrűk)

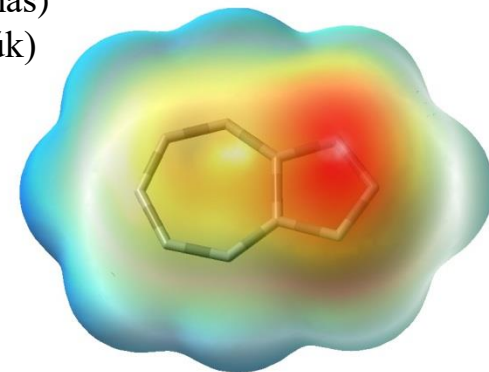


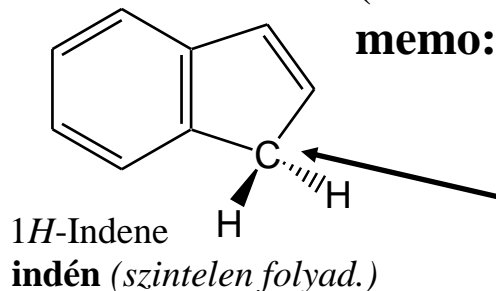
nem-azonos határszerkezetek

*Bruckner II 1*



magnólia

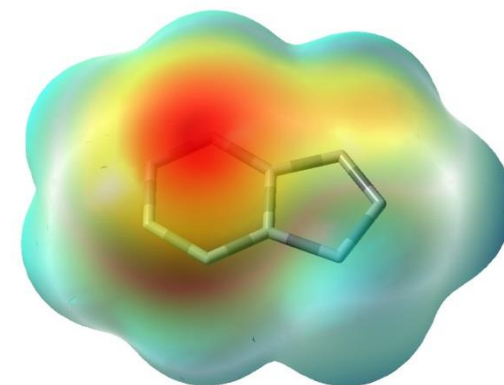
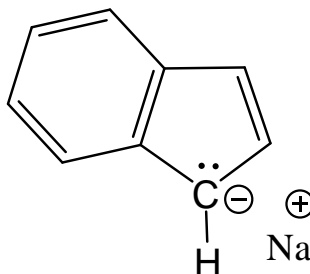
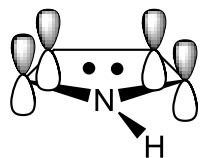
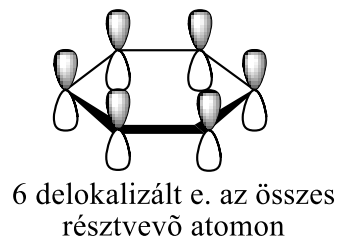


**nem-aromás rendszer**(6+2  $\pi$ -elektr.) ( dipol, 6- és 5-tagú gyűrűk)**memo:** az aromás gyűrűhöz kondenzált ciklopentadién fokozott reaktivitású

fokozott reaktivitású („savanyú”)

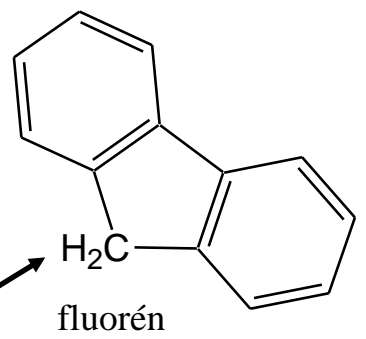
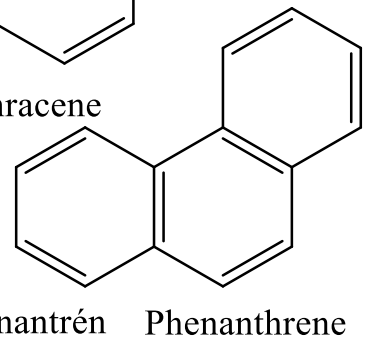
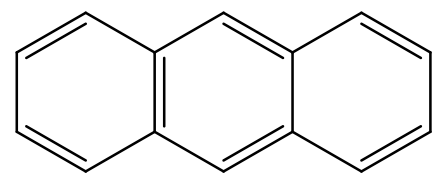
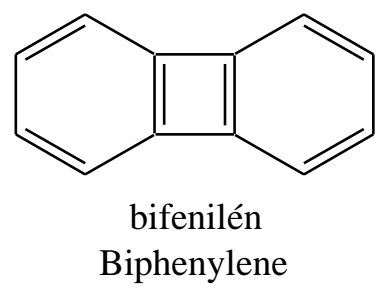
metilén csop. (pl. - indén + Na

- indén + aldehyd)

**10  $\pi$ -elektron = 4\*2 + 2 ← aromás****Huckel szabály**, mellyel megbecsülhetjük hogy egy síkalkatú, konjugált  $\pi$ -elektronrendszer aromás-e? (E. Hückel 1931).Ha a síkalkatú molekulában a cirkulárisan delokalizált  $\pi$ -elektronok száma  $4n+2$  (ahol  $n$  egész szám) és e delokalizáció kiterjed minden gyűrűs atomra, akkor a molekula aromás (lehet).Ismertebb példák:  $0 \leq n \leq 6$ .Az aromásvegyületek „extra stabilak” éppen mert a részvevő atomok  $p_z$ -atompályi és esetleg nem-kötő elektronpárjai ( $\pi$  MO-kat betöltve) megvalósítják a  $p_z$  elektronok delokalizációját. (A „extra” energianyereséget rezonancia energiának is szokták mondani).

**három gyűrűs rendszerek:**

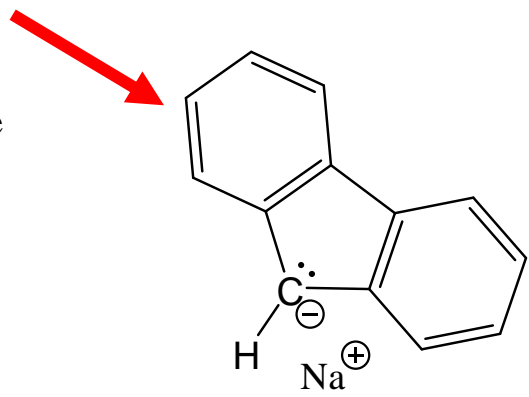
**12 π-elektron  
anti-aromás**



2-Methyl-3-vinyl-1H-indene  
kékesen fluoreszkáló  
szintelen tûkristály

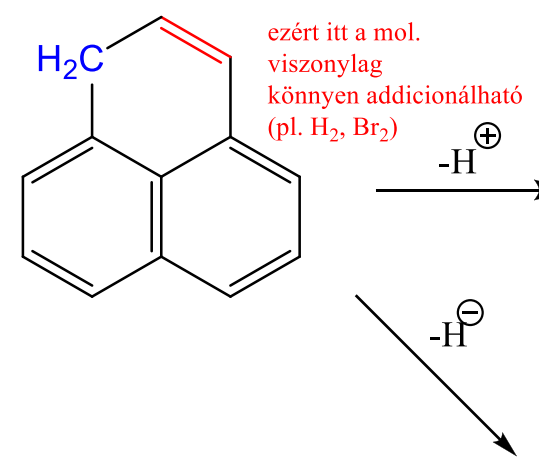
fokozott reaktivitású („savanyú”)  
metilén csoport (pl. – fluorén + Na)

**memo:** a kialakuló anion esetében  
az aromacitás ki tud terjedni a mol. egészére



**kérdések:** a naftalin benzológja aromás-e?  
aromásá (antiaromásá) alakítható-e?

1 db. sp<sup>3</sup>-as C és 12 π elektron

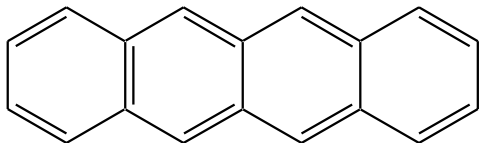


**14 π-elektron = 4\*3 + 2 ← aromás**

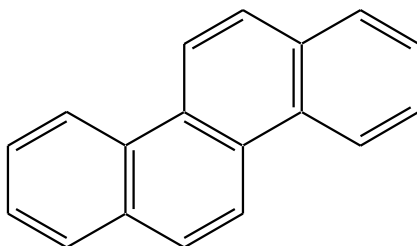
**memo:** A **naftalin** rezonancia energiája (-60 kcal/mol) amely alacsonyabb mint a benzol kétszereséé: -36kcal/mol\*2= -72kcal/mol.

Az **antracéné** -84kcal/mol, míg a **fenantréné** -91 kcal/mol (az elvárható: -108 helyett).

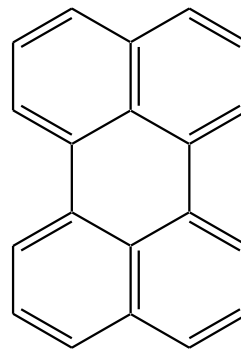
## négy és több gyűrűs rendszerek:



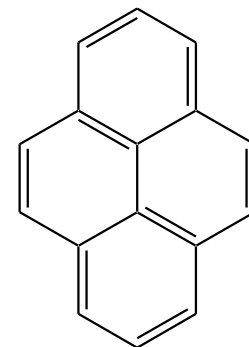
naftacén  
Naphthalene



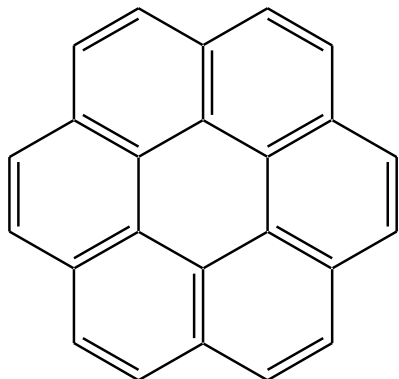
krizén  
Chrysene



perilén  
Perylene



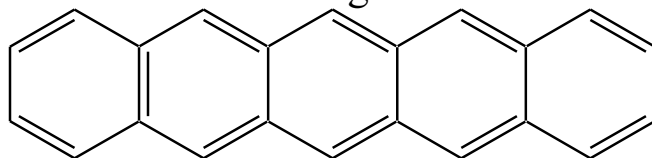
pirén  
Pyrene



koronén  
Coronene

### memo:

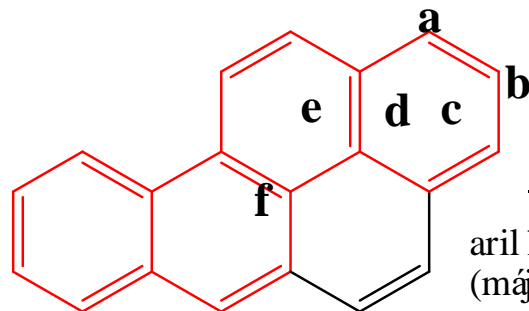
megtalálhatók a dohányfüstben, a diesel autók fekete füstjében,...



pentacén  
Pentacene

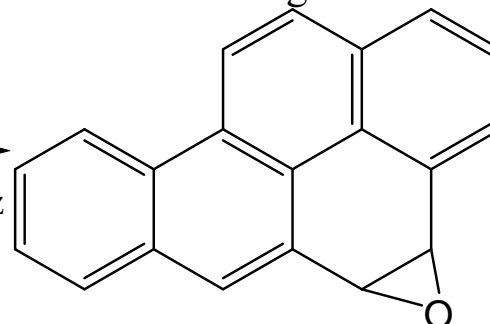


**Példa:** (a máj méregtelenítési stratégiája, reaktív intermedier, majd vízdoldhatóvá tétel glutationnal...)



benzo[def]krizén  
Benzo[def]chrysene

aryl hidroxiláz  
(májban)

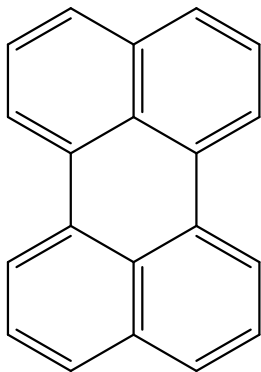


ez a ténylegesen karcinogén hatású vegyület



# Az teljes SCF elektronsűrűség alapján számított izo-felületek

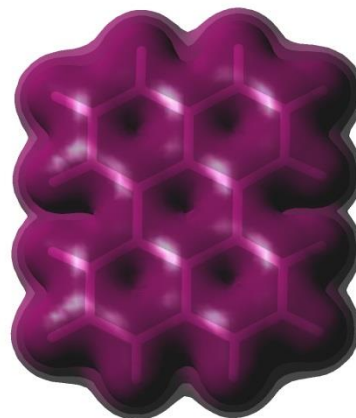
**perilén** *bronzsárga*  
krist. (op. 274°C)



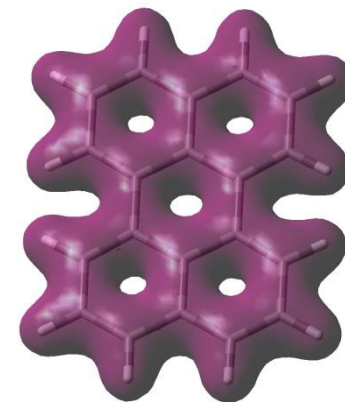
0.004



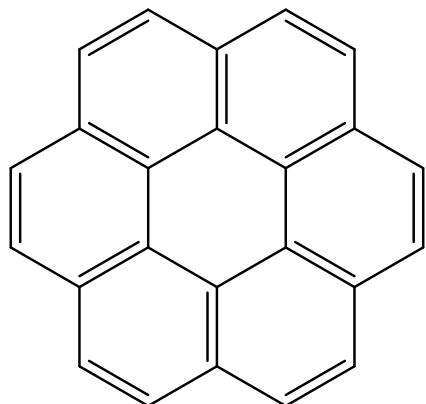
0.02



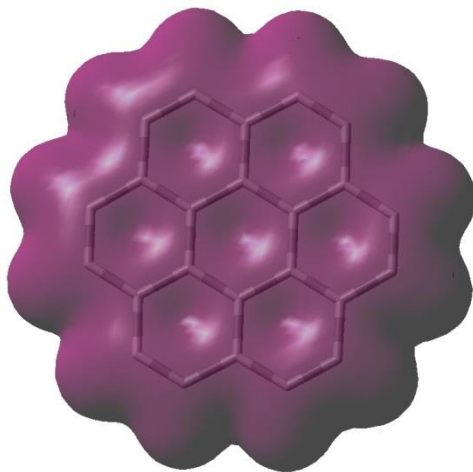
0.04



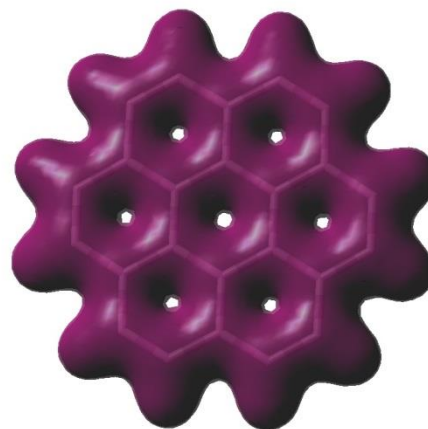
**memo:** 2 naftalin peri  
helyzetű összekapcsolódása



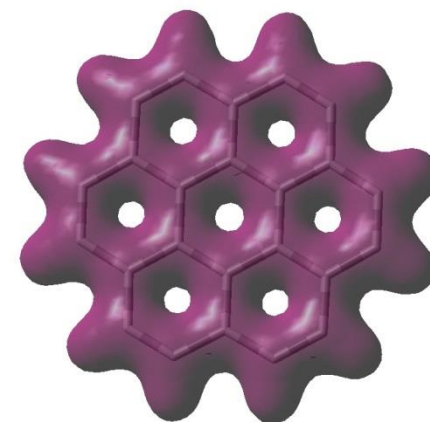
0.004



0.025



0.04



**koronén** *sárga*,  
krist. (op. 429°C)

hat benzolgyűrű körkörös anellációja,  
ciklikusan kondenzált gyűrűs aromás szénhidrogén

**aromaticitás – nem összefüggő  $\pi$  rendszerek**



# IX. Aromás halogénezett szénhidrogének

Egy vagy több hidrogént X-re cserélünk

halogénezés helye szerint: -magban szubsztituált (**aril-halogenid**),

-oldalláncban szubsztituált (**aral-kilhalogenid**)

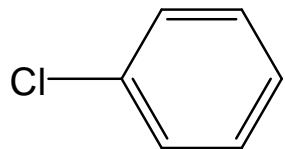
*Szn*: előző fejezet alapneveiből (pl. benzol, fenantrén) képezzük

(pl. jódbenzol, 9-brómfenantrén).

*Csn*: előző fejezet csoportneveihez (pl. fenil, fenantril) tesszük a funkció nevet (pl. klorid) és így kapjuk a

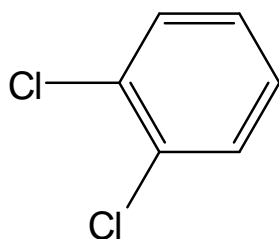
(pl. fenil-jodid, fenantril-bromid).

## monosubsztituált

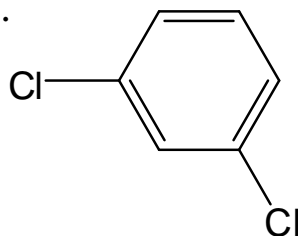


klórbenzol  
chlorobenzene

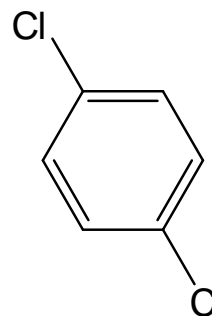
## disubsztituált



1,2-diklórbenzol  
(*o*-diklórbenzol)  
1,2-Dichlorobenzene

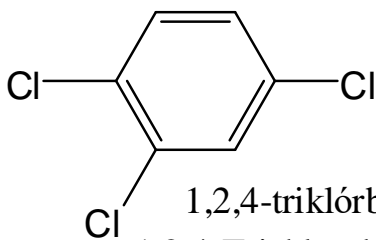


1,3-diklórbenzol  
(*m*-diklórbenzol)  
1,3-Dichlorobenzene

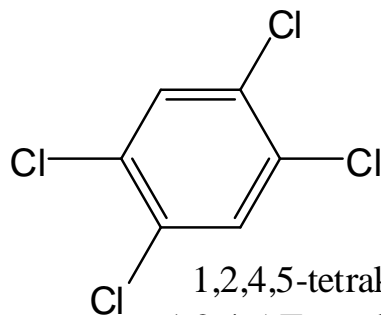


1,4-diklórbenzol  
(*p*-diklórbenzol)  
1,4-Dichlorobenzene

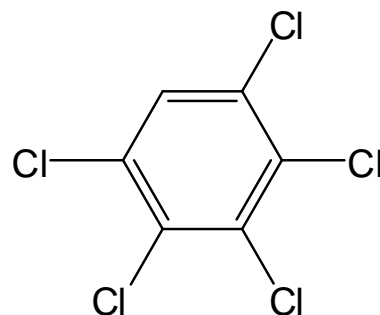
## tri-, terta-, penta-, hexasubsztituált



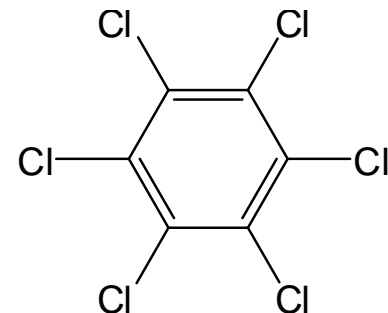
1,2,4-triklórbenzol  
1,2,4-Trichlorobenzene



1,2,4,5-tetraklórbenzol  
1,2,4,5-Tetrachlorobenzene



pentaklórbenzol  
Pentachlorobenzene



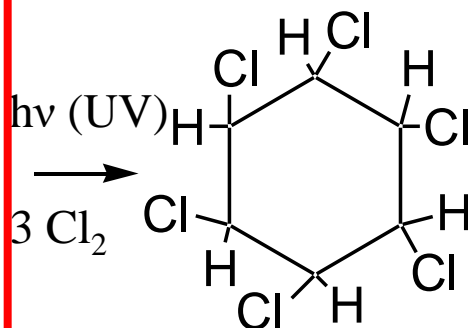
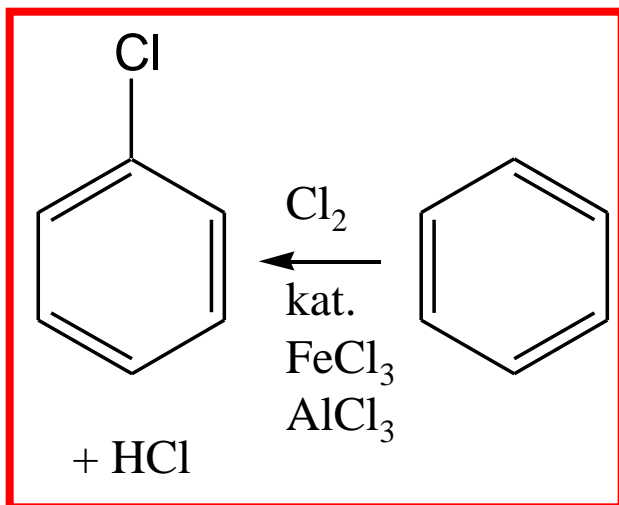
hexaklórbenzol  
Hexachlorobenzene

# aromás vegyületek tipikus és speciális reakciói:

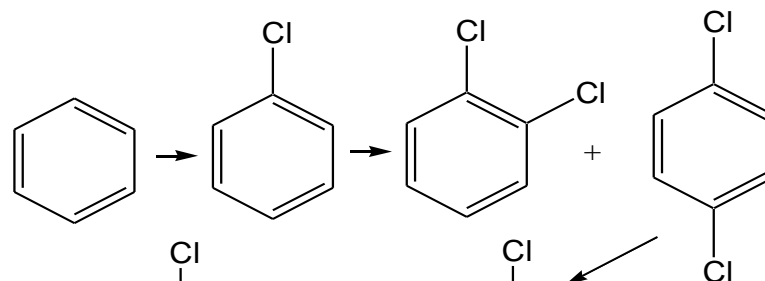
**tipikus:** szubsztitúció

**speciális:** addíció

Bruckner II/1 240



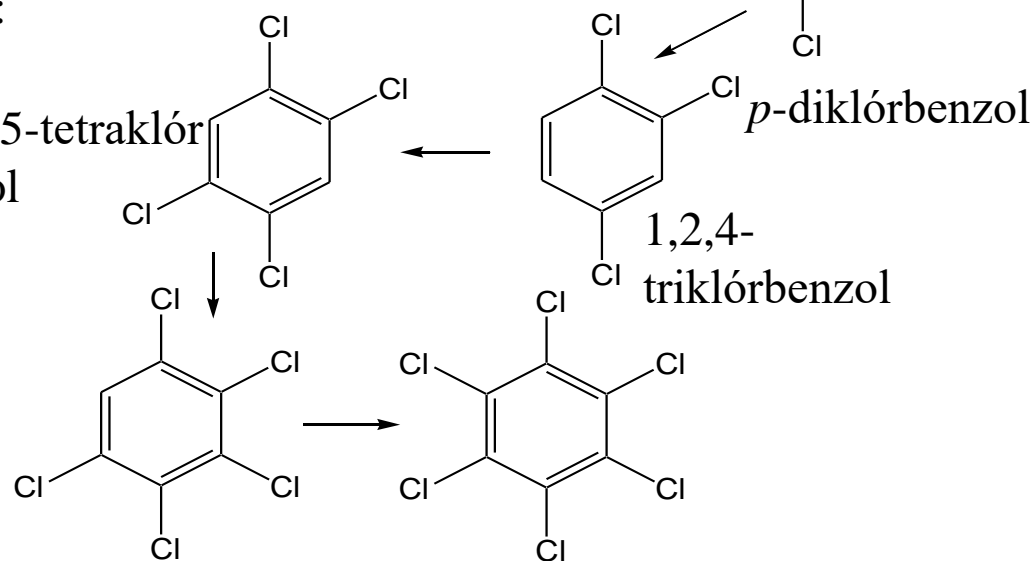
*o*-diklór benzol



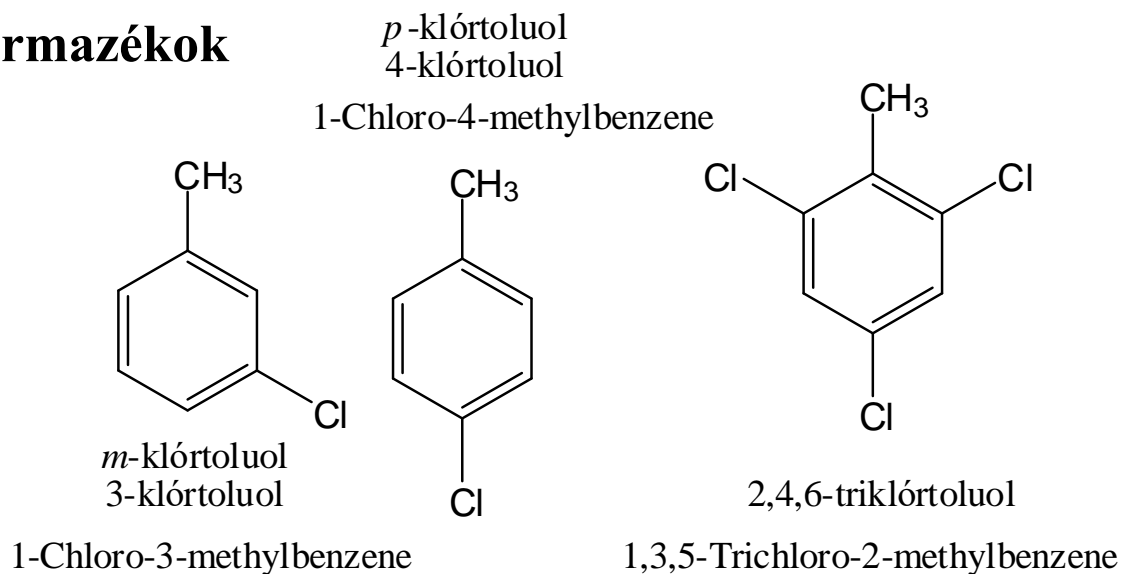
perhalogénezés (csak sok Cl<sub>2</sub> kell):

minden lépésben:  
+Cl<sub>2</sub> és -HCl

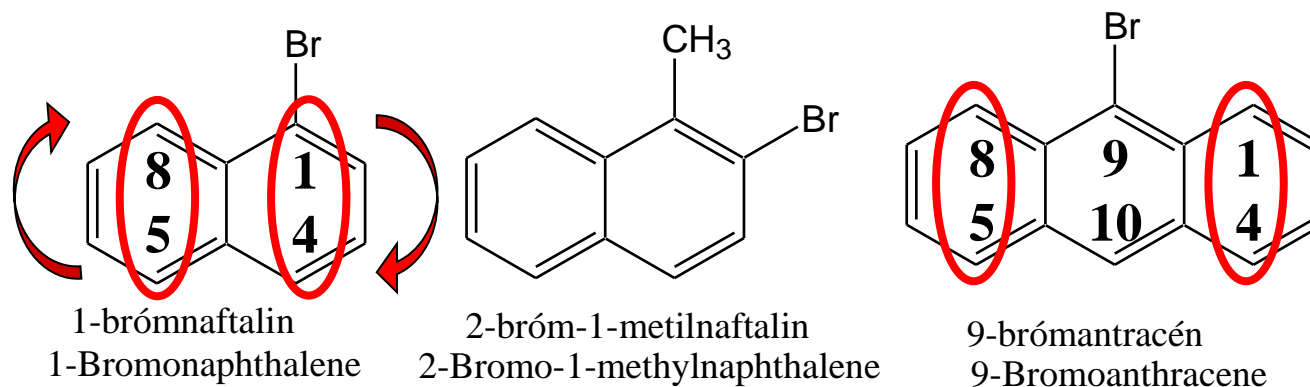
1,2,4,5-tetraklór  
benzol



# Toluolszármazékok



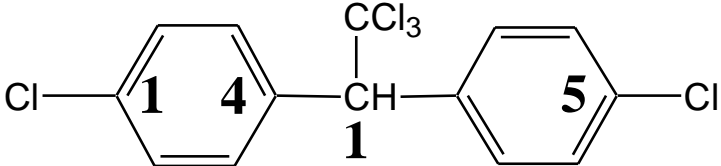
## Kondenzált policiklusos szénhidrogénszármazékok:



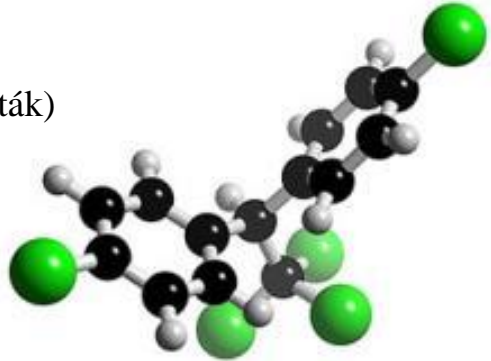
### Memo:

Szélső gyűrűvel kezdjük a számozást, majd középen az anellált C-atomokat számozzuk utoljára.

**Nev. gyak**



DDT  
rovarirtószer (betiltották)

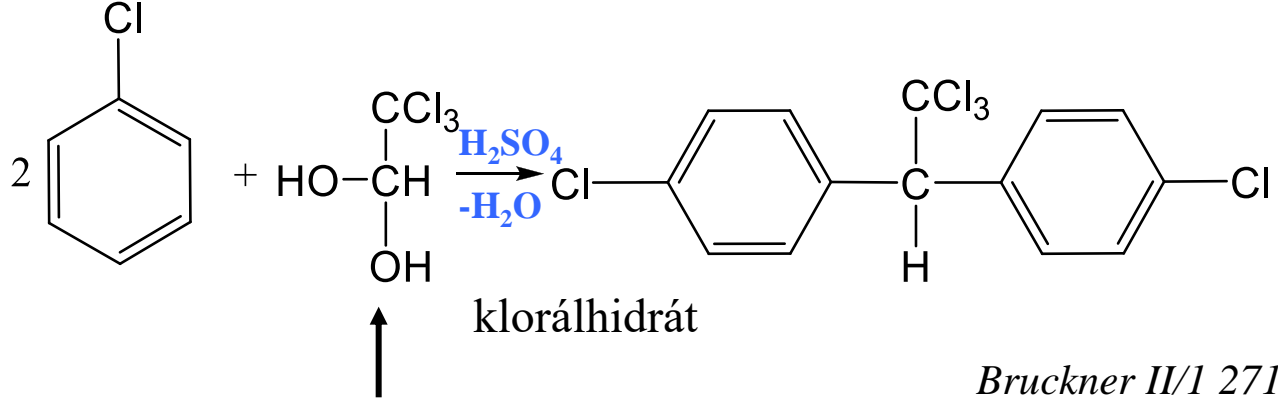


1-Chloro-4-(5-chloro-1-trichloromethyl-pent-3-enyl)-benzene  
1-klor-4-(5-klór-1-triklormetil-pent-3-enil)-benzol

1-bisz(4-klórfenil)-2,2,2-triklóretán

**DDT szintézise: (Zeidler, 1874)**

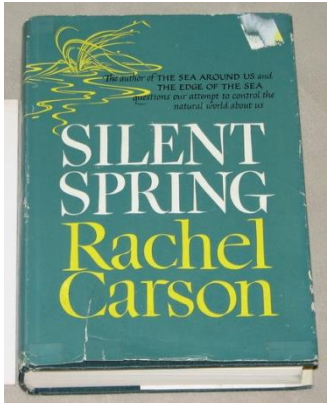
becenév: diklór-difenil-triklóretán



$Cl_3C-CH=O$  klorál (triklór-acetaldehid)  
+  $H_2O$

*Bruckner II/1 271*

1962



1. rovarirtó-szer → **kedvező hatás**
2. lerakódik algákban → pusztítja a halakat
3. idegrendszeri károsodást okoz → **káros hatás**

(feszültségfüggő Na<sup>+</sup>-csatornák nyitva maradnak, depolarizáció, ezért az akciós potenciál kialakulása zavart lesz)

# X. Aromás hidroxivegyületek és származékai

Egy vagy több hidrogént OH-ra cserélünk

Az -OH helye szerint: -magban szubsztituált (**fenol**),

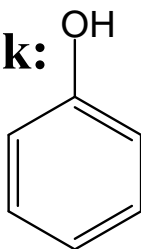
-oldalláncban szubsztituált (**aromás alkohol**)

**Alapnevek:** benzol  $\Rightarrow$  fenol, naftalin  $\Rightarrow$  naftol, fenantrén  $\Rightarrow$  fenantrol

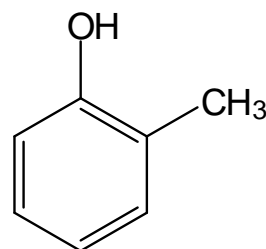
**Szn:** alapneveiből (pl. benzol, fenantrol) képezzük (pl. jódfenol, 5-brómfenantrol).

## 1. Fenol típusú hidroxivegyületek:

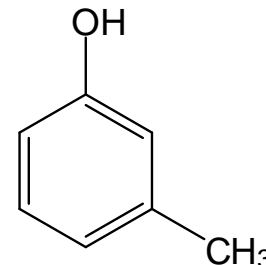
### Egyértékű fenolok:



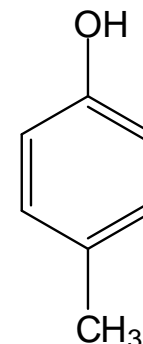
fenol  
Phenol



*o*-krezol  
*o*-cresol  
2-Methyl-phenol



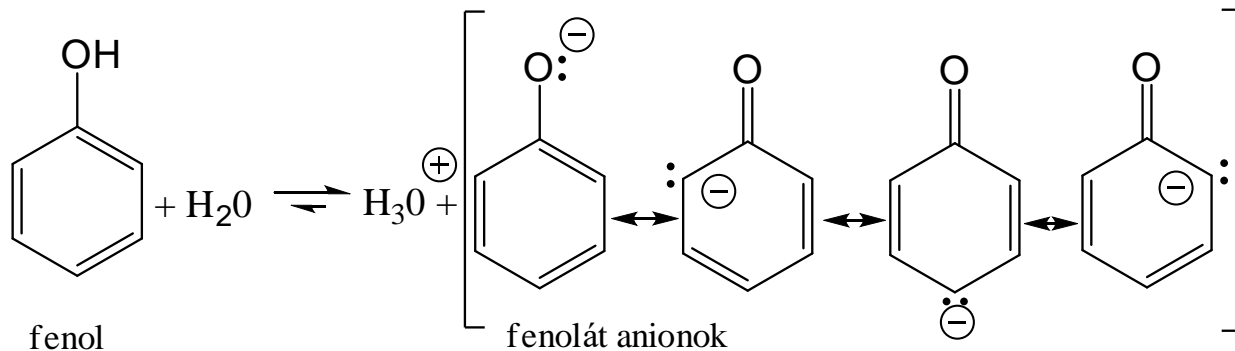
*m*-krezol  
*m*-cresol  
3-Methyl-phenol



*p*-krezol  
*p*-cresol  
4-Methyl-phenol

**kérdés:** miért savanyúbb a fenolok kémhatása mint az alifás alkoholoké?

**pK<sub>a</sub>** = **9.9** (fenol), **18** (ciklohexanol), 16 (etanol), 16 (víz), 4.8 (ecetsav)

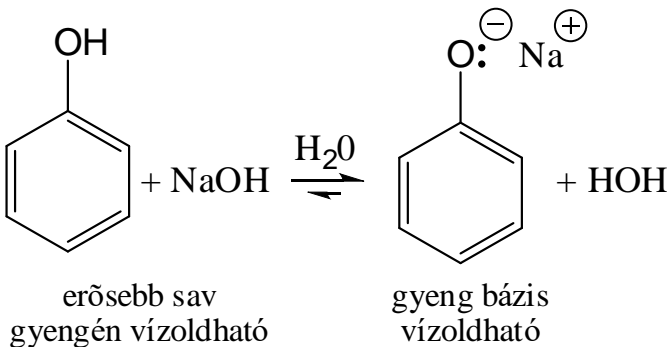
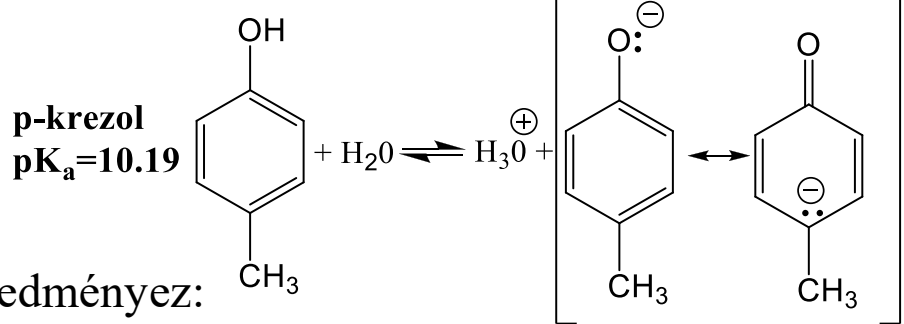
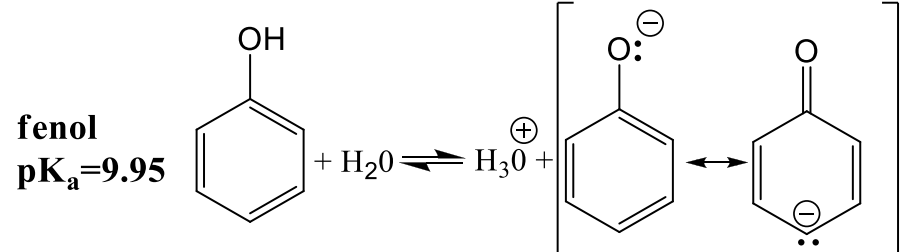
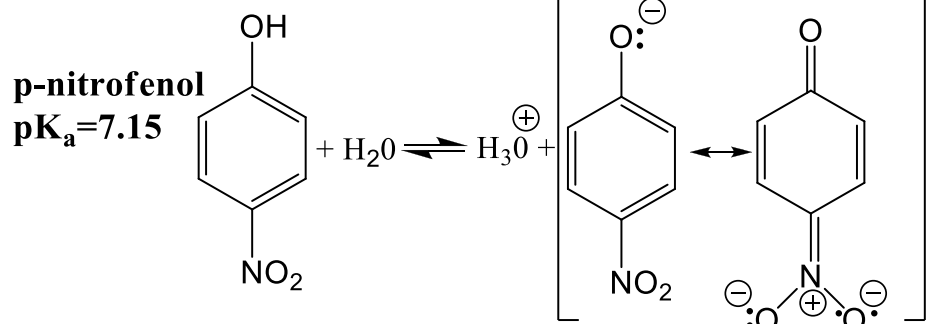


**válasz:** A keletkező fenolát anion konjugáció révén stabilizálódik, az egyensúly ezért ennek javára eltolódik

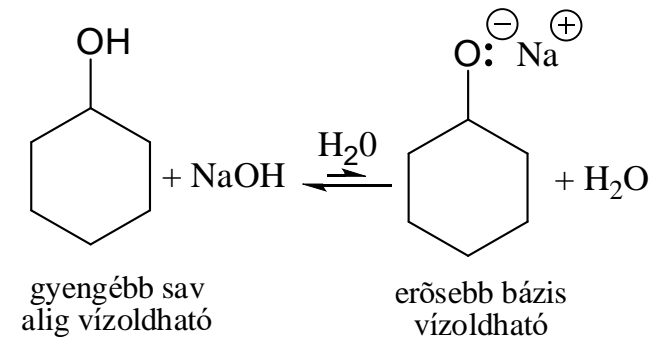
**kérdés:** hogyan befolyásolják a szubsztituensek a fenol kémhatását?

**memo:** a p-krezolban a konjugáció kb. annyira kiterjedt mint a fenolban, de a p-nitrofenolban viszont kiterjedtebb, ami tovább növeli a savas karaktert.

**memo:** az eltérő savasság eltérő vízoldhatóságot eredményez:  $pK_a = 9.9$  (fenol),  $16$  (víz),  $18$  (ciklohexanol)

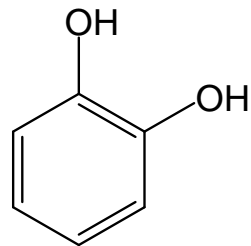


a fenolok disszociációja vízben 10.000-szerese a ciklohexanolénak → töltött részecskék megjelenése → megnövekedett oldhatóság

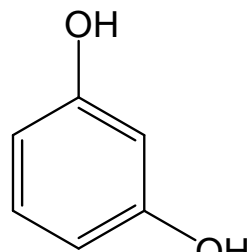


## kétértékű fenolok:

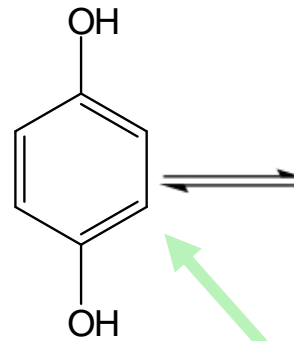
három  
különböző izomer



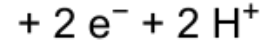
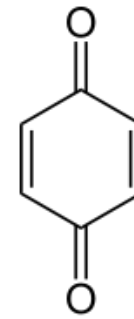
pirokatechin  
Benzene-1,2-diol



rezorcín  
Benzene-1,3-diol



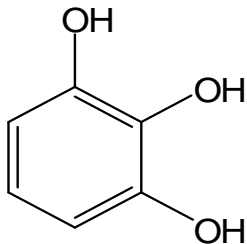
hidrokinon  
Benzene-1,4-diol



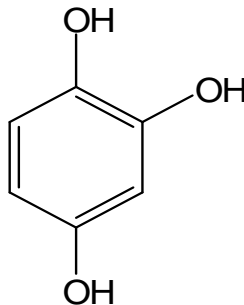
•redukáló-szer:  
AgNO<sub>3</sub> – fotó előhívás  
•„depigmentáció”

## háromértékű fenolok:

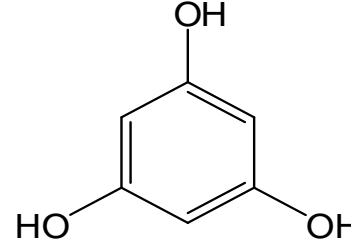
három  
különböző izomer



*pirogallol*  
Benzene-1,2,3-triol  
benzol-1,2,3-triol

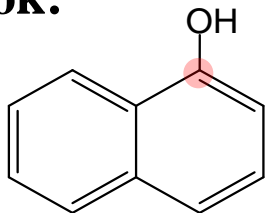


*oxihidrokinon*  
Benzene-1,2,4-triol  
benzol-1,2,4-triol

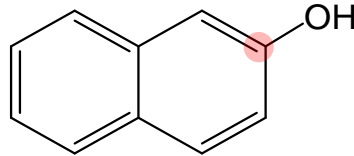


*floroglucin*  
Benzene-1,3,5-triol  
benzol-1,3,5-triol

## naftolok:



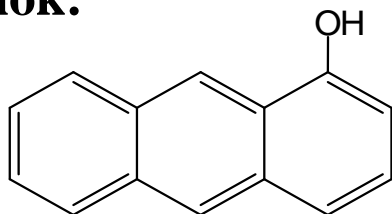
1-naftol  
( $\alpha$ -naftol)  
1-Naphthol



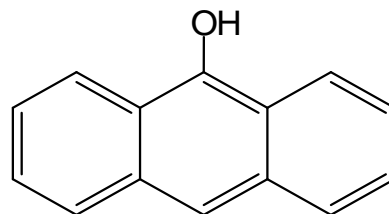
2-naftol  
( $\beta$ -naftol)  
2-Naphthol

**memo:** rendhagyó nevezéktan  
1-naftol és nem naft-1-ol  
1-antról és nem antr-1-ol

## antrolok:

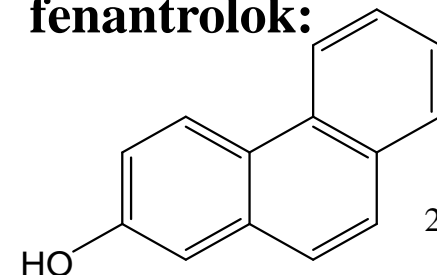


1-antról  
( $\alpha$ -antról)  
1-Anthrol



9-antról  
(antranol)  
9-Anthrol

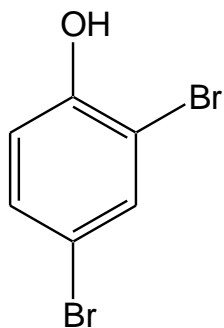
## fenantrolok:



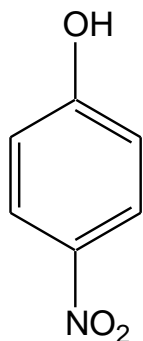
2-fenantrol  
2-Phenanthrol



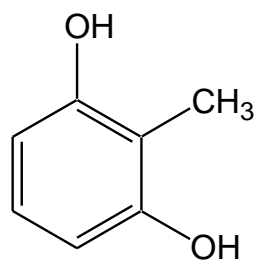
## Nev. gyak



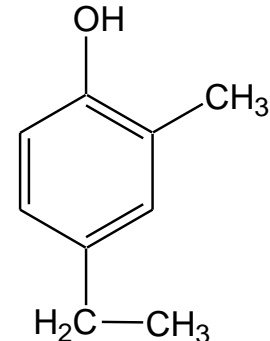
2,4-dibrómfenol  
2,4-Dibromophenol



4-nitrofenol  
(p-nitrofenol)  
4-Nitrophenol



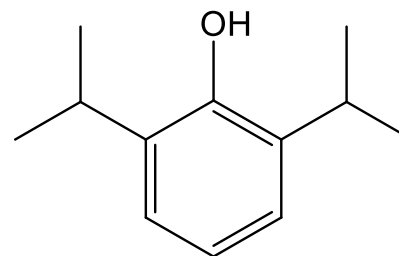
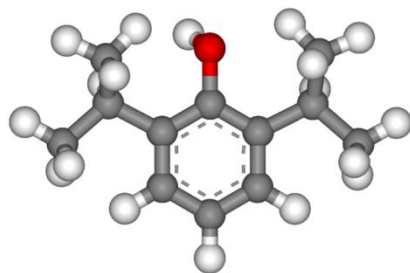
2-Methylbenzene-1,3-diol  
2-metilbenzol-1,3-diol



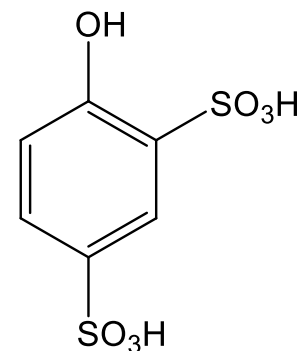
4-etil-2-metilfenol  
4-Ethyl-2-methylphenol

4-hidroxi-benzol-  
1,3-diszulfonsav

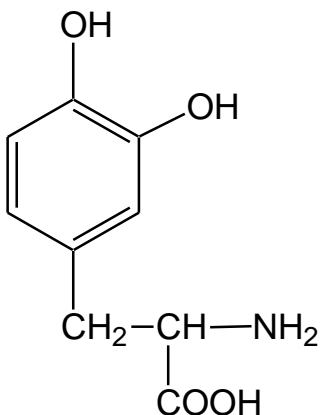
4-Hydroxybenzene-  
1,3-disulfonic acid



2,6-diisopropylphenol  
propofol: műtétknél használt intravénás  
altatószer (kb. 100 millió ember/év)

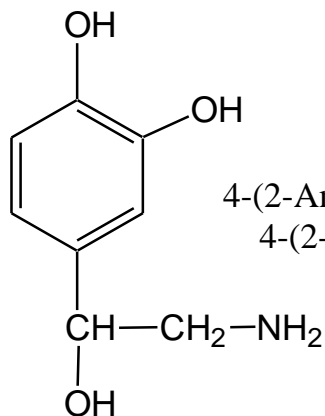


## Példa:



2-Amino-3-(3,4-dihydroxyphenyl)propionic acid  
2-amino-3-(3,4-dihidroxifenil)propionsav

DOPA 3,4-dihydroxyphenylalanine  
**neurotransmitter prekursor: dopamin, noradrenalin + Parkinson-kór kezelése**

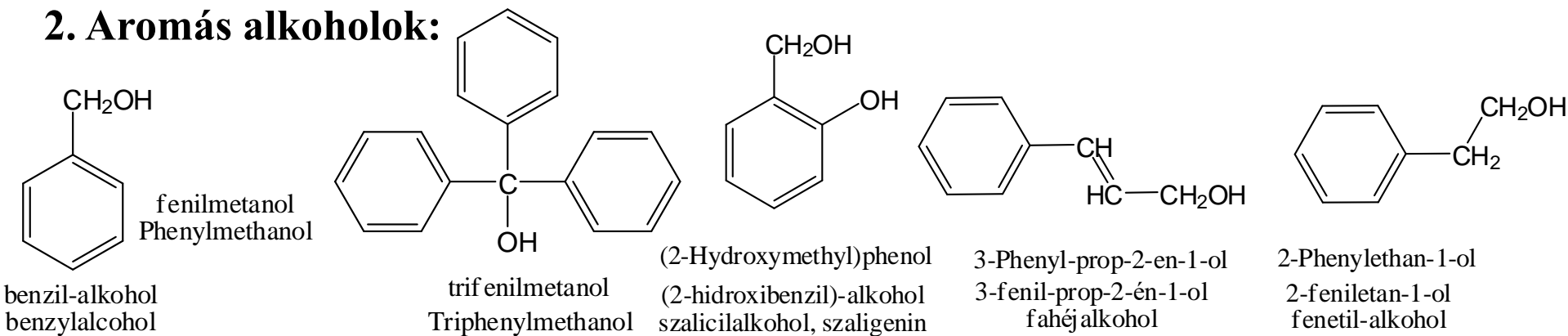


4-(2-Amino-1-hydroxyethyl)benzene-1,2-diol  
4-(2-amino-1-hidroxietil)benzol-1,2-diol

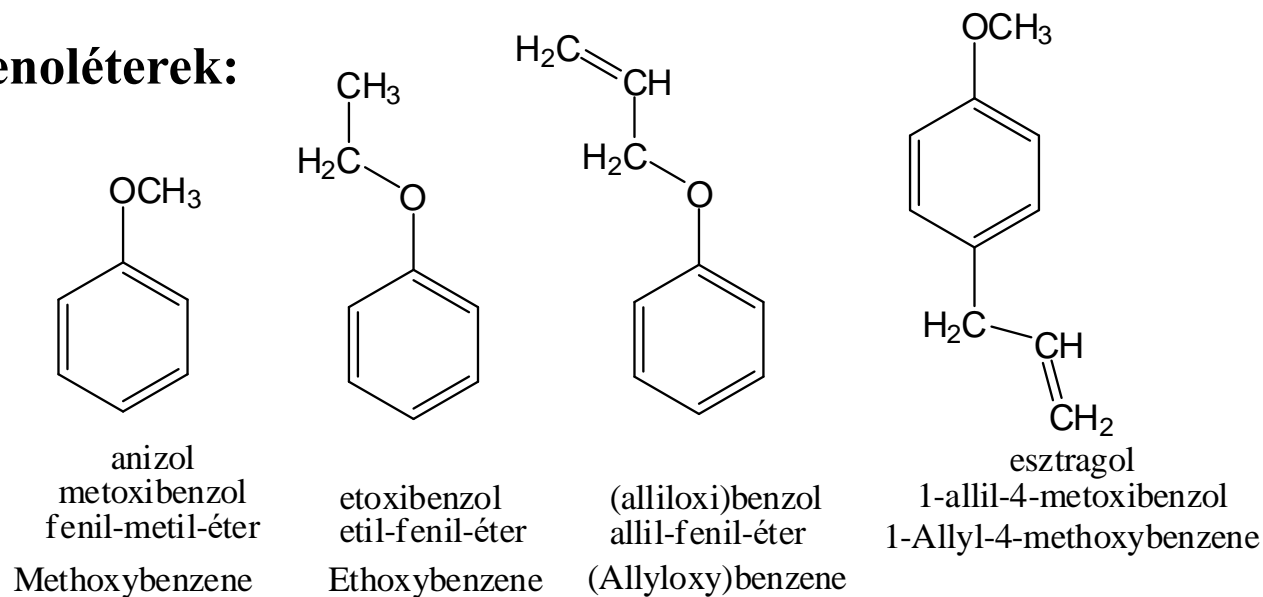
noradrenalin

**neurotransmitter, stressz hormon,  
gyógyszerként: vérnyomás emelő**

## 2. Aromás alkoholok:

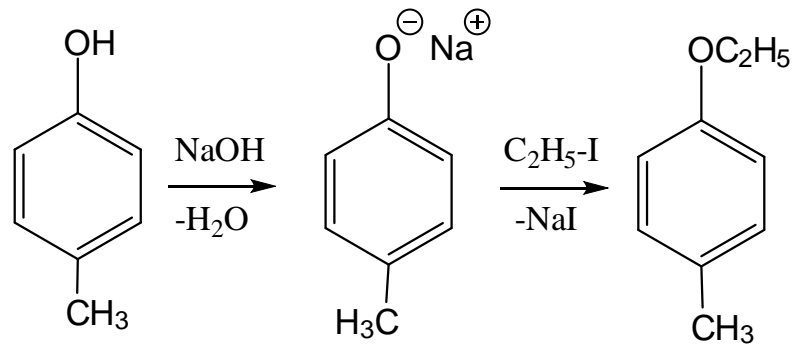


## 3. Fenoléterek:

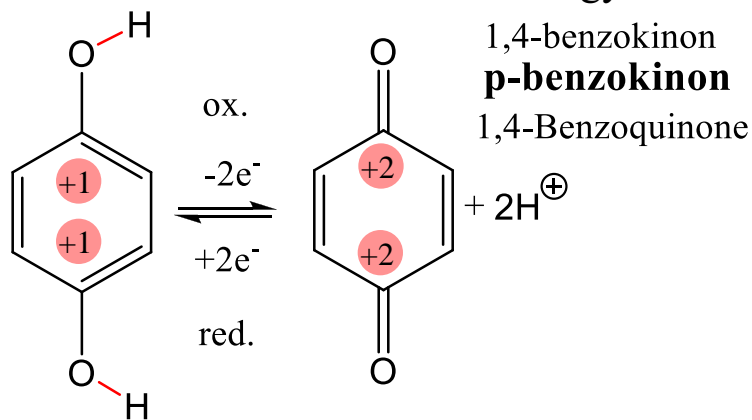


## Fenoléterek előállítása:

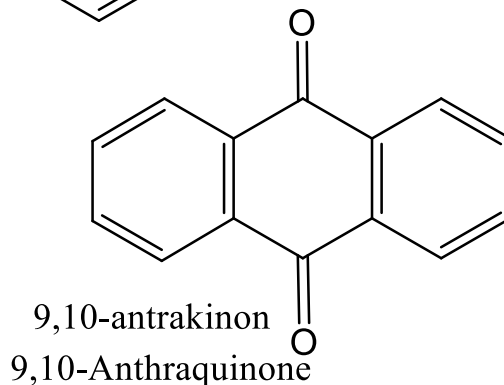
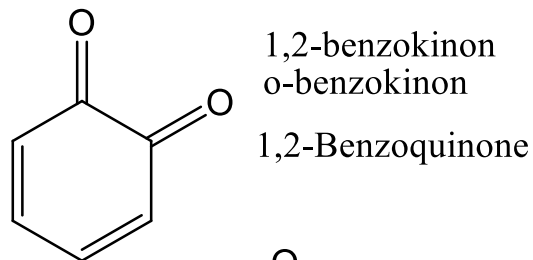
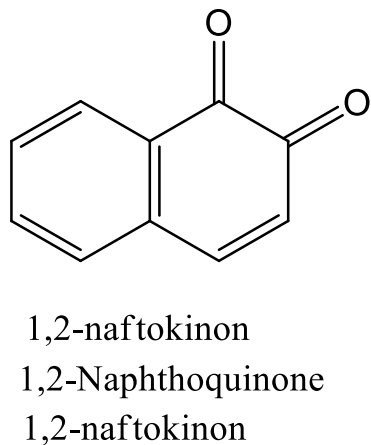
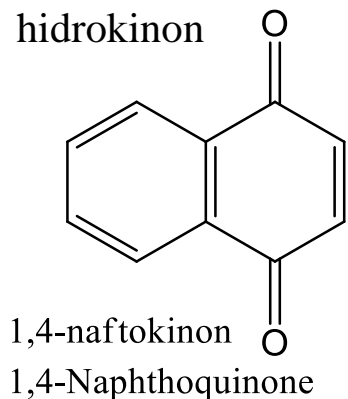
Savas jellegük miatt már NaOH-dal is fenolátot képeznek (Williamson szint.), míg az alkoholok csak fém Na-mal adnak alkoholátot!



#### 4. Kinonok: már nem aromás vegyületek



hidrokinon

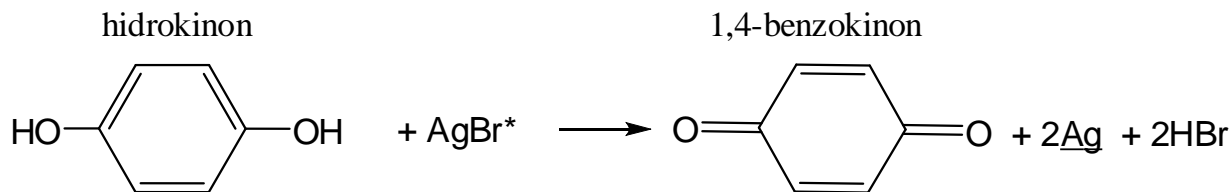


#### memo:

könnyen oxidálhatók a fenolok és redukálhatók a kinonok



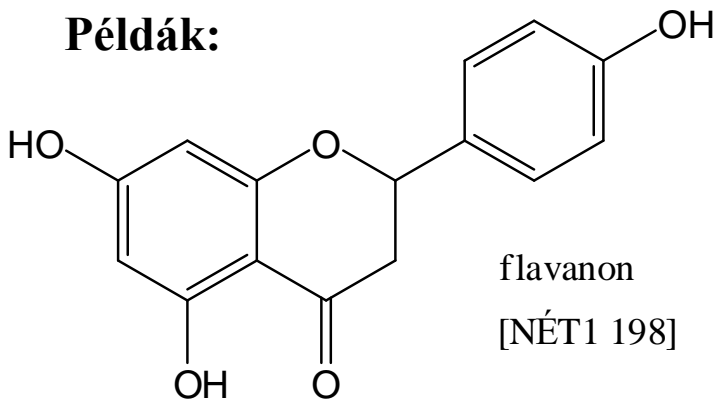
**memo:** A fekete-fehér fényképezés során a lemezre rétegzelt AgBr szemcséket fénnel aktiváljuk. Előhíváskor a hidrokinon redukálja az  $Ag^+$  fém Ag-é, ami fekete szemcséként rögzül a negatívon és ami a „negatív kép” sötét része.



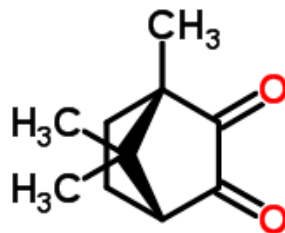
**memo:** neve kinon de nem kinoidális szerkezetű a molekula



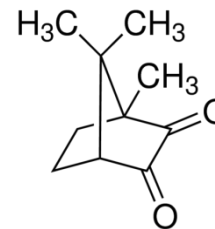
**Példák:**



flavanon  
[NÉT1 198]



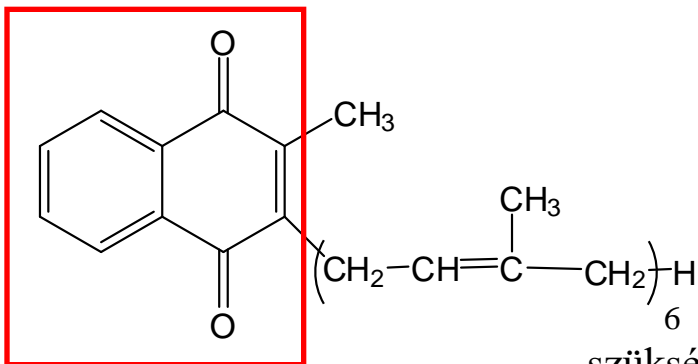
kámforkinon



1,7,7-Trimethylbicyclo[2.2.1]heptane-2,3-dione

5,7-Dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)chroman-4-one

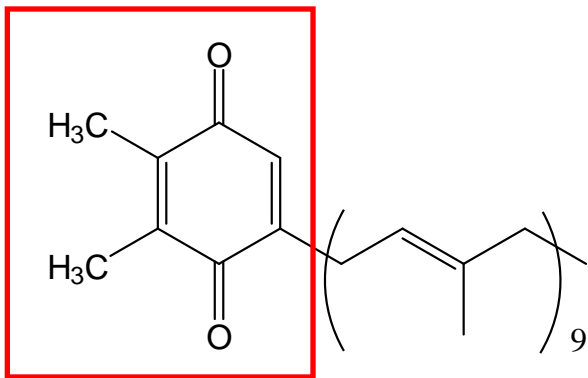
kámforkinon - fogtömések egyik komponense



2-Methyl-1,4-naphthoquinone

K<sub>2</sub> vitamin  
[Stryer 255]

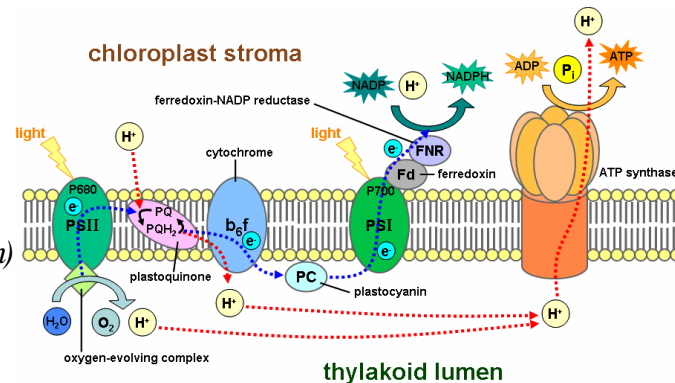
szükséges a protrombin és más kalciumkötő fehérjék szintézisének (vérkoagulációs hatás), gyermekkorban: egészséges csontfejlődés



2,3-Dimethyl-1,4-benzoquinone

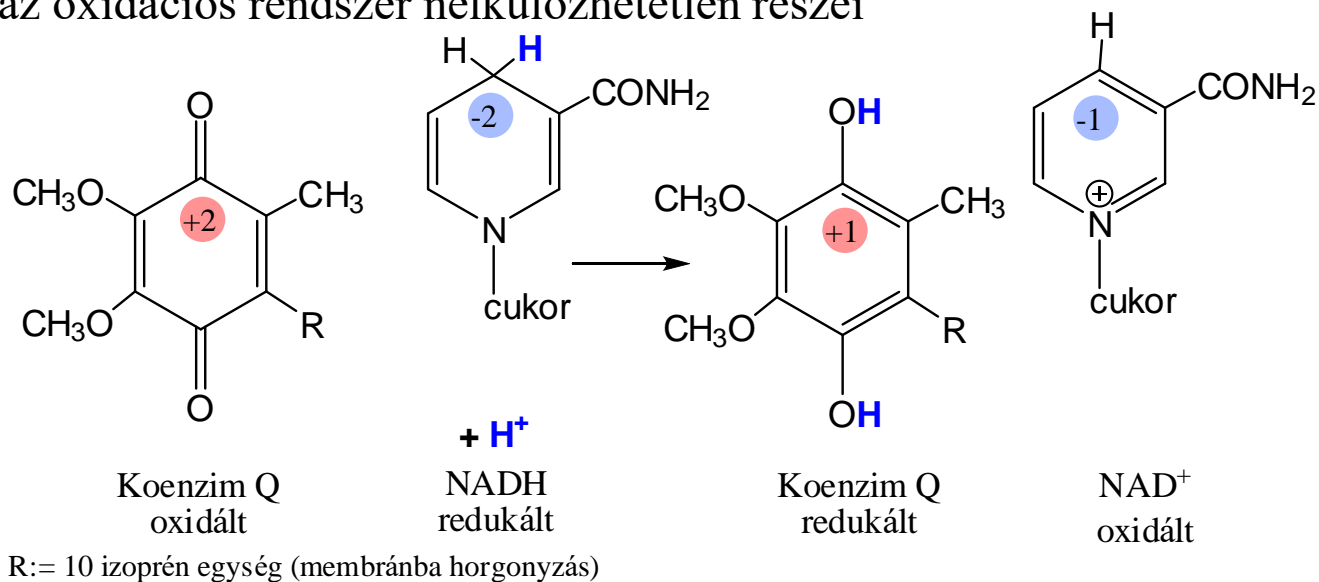
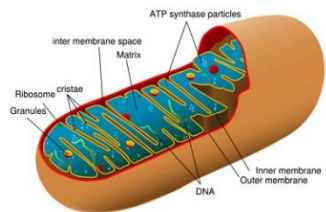
plasztokinon A oxidált forma  
(a redukáltforma a hidrokinon)  
[NÉT1 57], Stryer 659

fotoszintézis: fény hatására vízből O<sub>2</sub>-t fejlesztve redukálódik a plasztokinon A



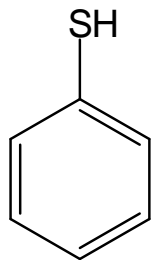
# A mitokondrium oxidáló szere:

## Koenzim Q és NADH az oxidációs rendszer nélkülözhetetlen részei

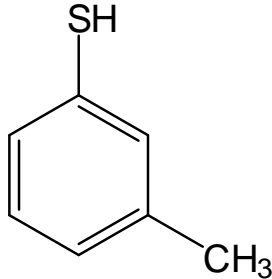


## XI. Aromás kénvegyületek

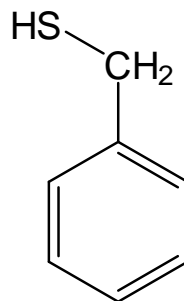
### 1. Tiolok



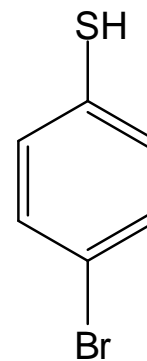
Benzenethiol  
benzoltiol  
tiofenol



3-Methylbenzene-1-thiol  
3-metilbenzol-1-tiol  
*m*-tiokrezol

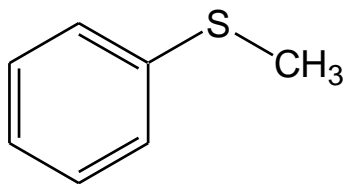


Phenylmethanethiol  
fenilmetántiol

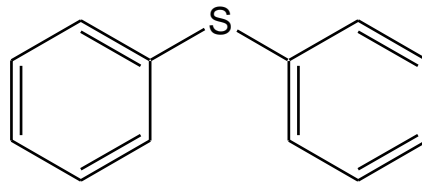


4-Bromobenzene-1-thiol  
4-bróm-benzol-1-tiol  
*p*-brómbenzol-1-tiol

## 2. Szulfidok

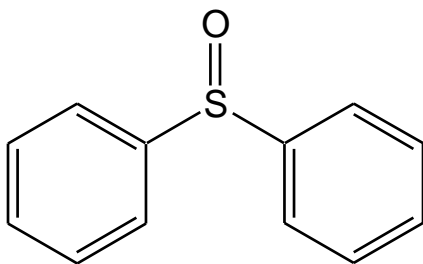


Methylsulfanylbenzene  
metil-fenil-szulfid  
methyl phenyl sulfide



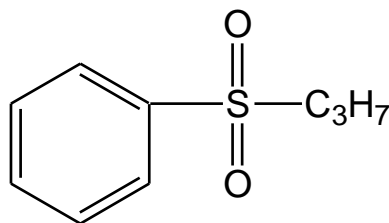
difenil-szulfid  
diphenyl sulfide

## 3. Szulfoxidok



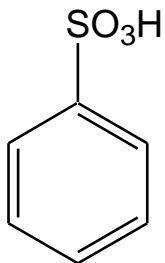
difenil-szulfoxid  
diphenyl sulfoxide

## 4. Szulfonok

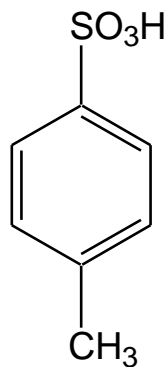


fenil-propil-szulfon  
phenyl propyl sulfone

## 5. Szulfonsavak

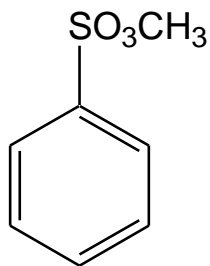


benzolszulfonsav  
Benzenesulfonic acid



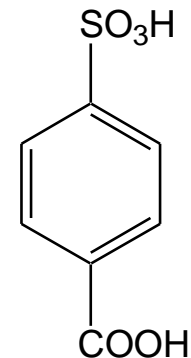
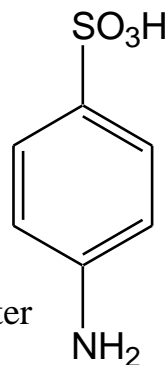
p-toluolszulfonsav  
Toluene-4-sulfonic acid

## 6. Szulfonsav-észterek



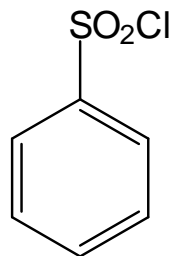
Methyl benzenesulfonate  
metil-benzolszulfonát  
Benzenesulfonic acid methyl ester  
benzolszulfonsav-metil-észter

4-aminobenzolszulfonsav  
4-Aminobenzenesulfonic acid



4-Sulfobenzoic acid  
4-szulfobenzoesav  
p-szulfobenzoesav

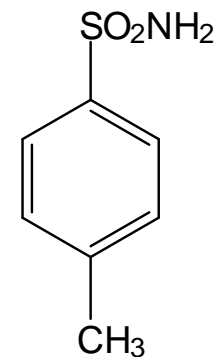
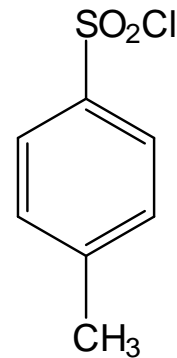
## 7. Szulfonsav-kloridok, szulfonsav-amidok



benzolszulfonil-klorid  
Benzenesulfonyl chloride

tozil-klorid  
p-toluolszulfonil-klorid

4-Methylbenzenesulfonyl chloride  
4-metilbenzolszulfonil-klorid



p-toluolszulfonamid  
Toluene-4-sulfonamide

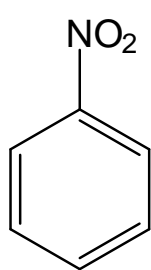


# XII. Aromás nitrogéntartalmú vegyületek

Előtag: nitro-, nitrozo-

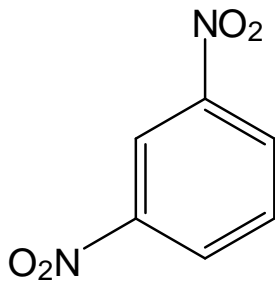
## 1. Aromás niro- és nitrozovegyületek

típusnév: nitro-arén, nitrozo-arén



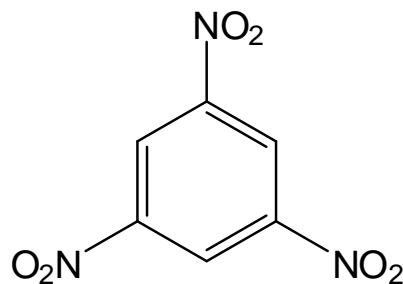
nitrobenzol

Nitrobenzene



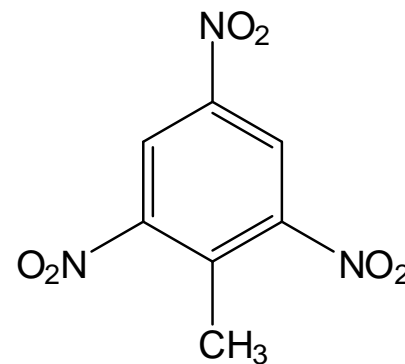
1,3-dinitrobenzol  
*m*-dinitrobenzol

1,3-Dinitrobenzene



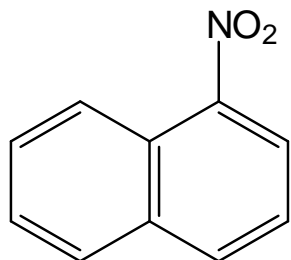
1,3,5-trinitrobenzol

1,3,5-Trinitrobenzene



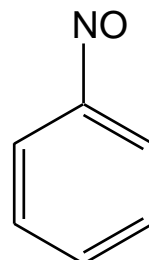
2,4,6-trinitrotoluol  
(TNT, trotil)

2,4,6-trinitrotoluene

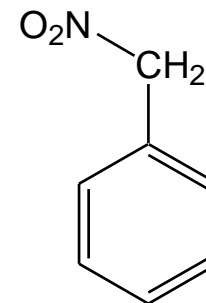


1-nitronaftalin  
( $\alpha$ -nitronaftalin)

1-Nitronaphthalene



nitrozobenzol  
Nitrosobenzene

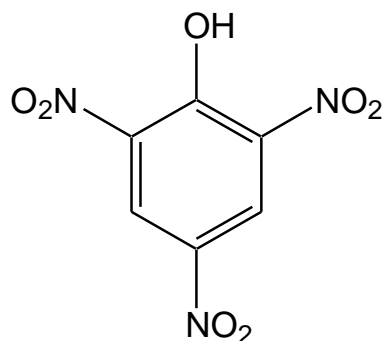
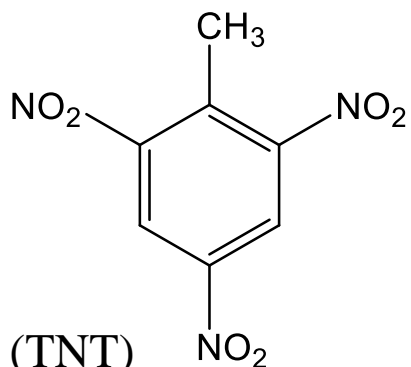


fenilnitrometán  
Phenylnitromethane

# Néhány „robbanékony” nitrobenzol származék:

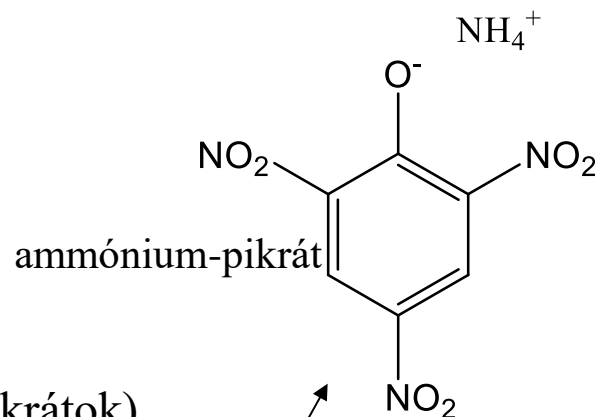


Trinitrotoluol (TNT)



Pikrinsav (sói a pikrátok)

kémcső kísérlet (max. 1g anyaggal)



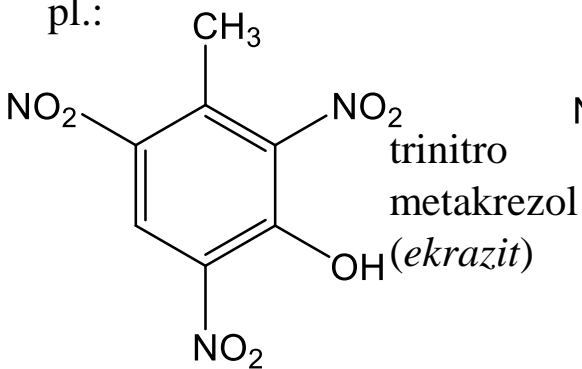
ammónium-pikrát

pl.

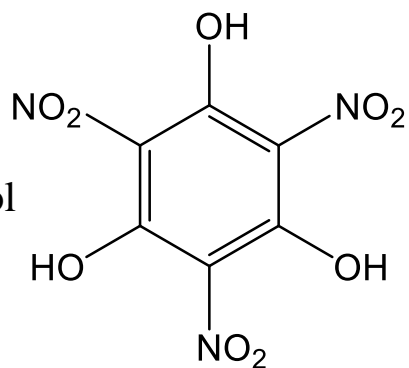
**memo:** fokozottan explozívok a TNT szubsztituált származékai

**memo:** tárolási, stabilitási okok miatt NH<sub>3</sub> sói formában használjuk

pl.:

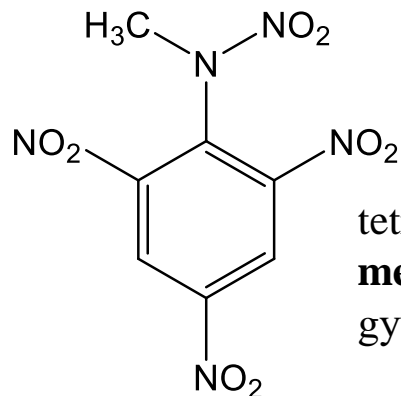


trinitro metakrezol (ekrazit)



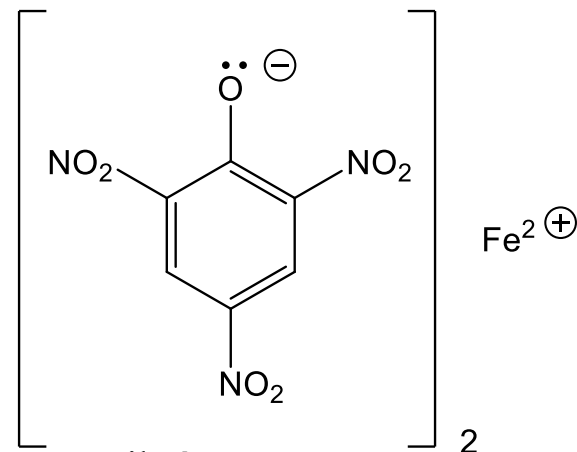
trinitrofluoroglucin (TNFG)

**memo:** hevesebb mint a TNT

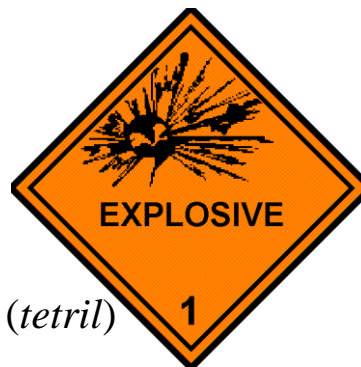


tetranitro-N-metilanilin (tetril)

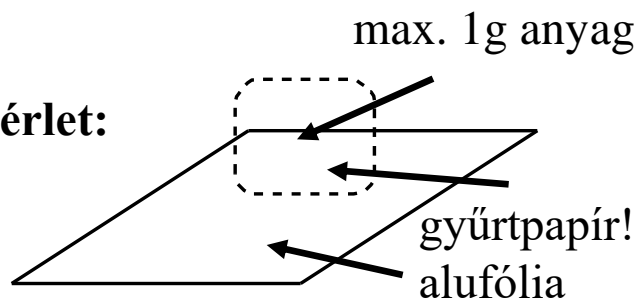
**memo:** még hevesebb gyutacsnak használták



vas-pikrát (igen explozív)  
**kémcsöves kísérlet TILOS!**

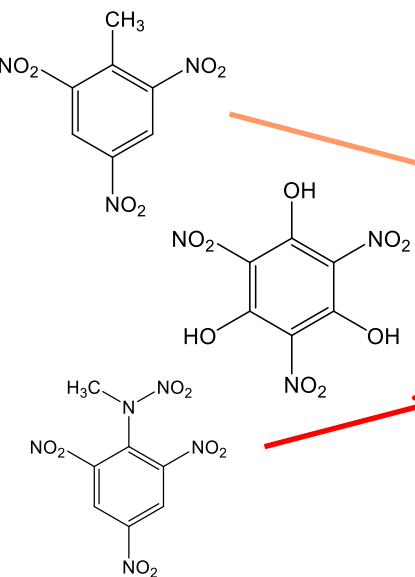
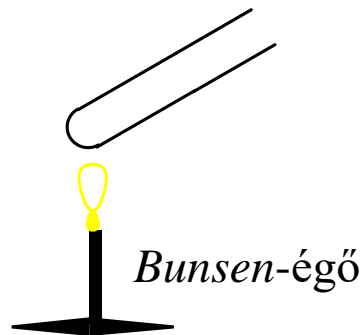


### 1. kísérlet:

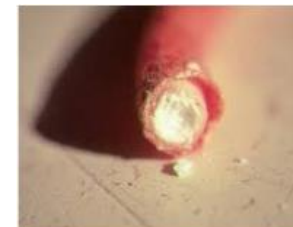


gyújtópálcával vagy  
gyufával a papírt meggyújtjuk

### 2. kísérlet: süvítve kilő



	1.	2.
TNT vagy pikrinsav	kormozó láng	kilő
TNFG	heves, sistereg	TILOS
„tetryl”	még fényesebb	TILOS



**TETRYL**

**fekete lőpor** (Kína XI. század tűzijáték):  
helyes aránya a szénpor (tüzelőanyag) +  
kén (tüzelőanyag) +  
salétrom ( $\text{KNO}_3$  oxidálószer) keverékének.



Robbanásszerű térfogatnövekedés (pl.  $\text{CO}_2$ ) biztosítja a tolóerőt.

memo: Stroncium-nitrát segítségével vörösre, bárium-nitrát révén zöldre, réz-karbonáttal pedig kékre lehet változtatni a robbanás színét.

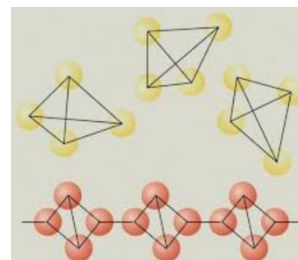
**füst nélküli lőpor:** cellulóz nitrát

**szilárd hajtóanyag:** Al és  $\text{NH}_4\text{ClO}_4$  (ammónium-perklorát) (űrtechnika)

**gyufafej:**  $\text{KClO}_3$  (kálium-klorát oxidálószer) + szénpor, kén és antimon-szulfidok ( $\text{Sb}_2\text{S}_3$  és  $\text{Sb}_2\text{S}_5$  narancssárga) (tüzelőanyagok) keveréke.

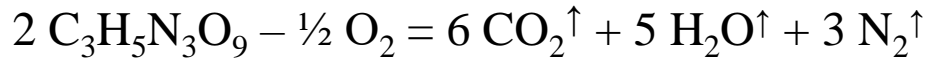
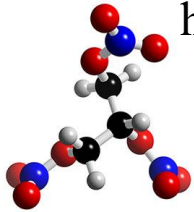
Égés során keletkező gázok: pl.  $\text{CO}_2$ ,  $\text{SbO}$ ,  $\text{SO}_2$

**memo:** a gyufásdoboz dörzsfelületén vörös foszfort ( $\text{P}_4$ ) van, ami a súrlódás hatására könnyen meggyullad, azaz iniciátor.



## Robbanószerek jellemzése, az oxigénmérleg:

kérdés: hány O<sub>2</sub> molekula kell egy szerves anyag elégetéséhez,  
ha azt feltételezzük, hogy CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O keletkezik?



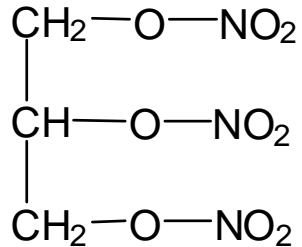
egy mol. belül van mind a NO<sub>2</sub> csop. (*oxidálószer*)  
mind a CH<sub>2</sub> és CH (*tüzelőanyag*).

Ezért igen hatékony!

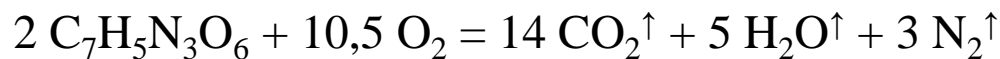
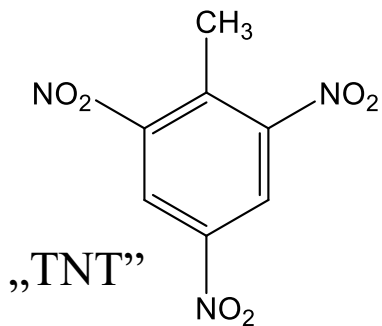
Összesen **14 mol** gáz és gőz keletkezik: kvázi nullszaldós oxigénmérleg

nitroglicerín (*színtelen foly.*)

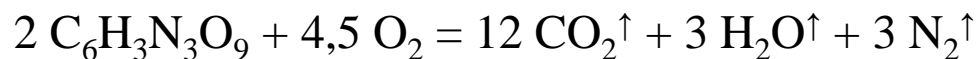
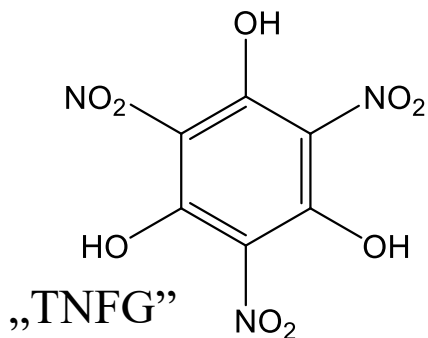
dinamit: diatomaföldbe (*kovaföld, üledékes kőzet*) felitatott nitroglicerín



**Alfred Nobel**  
**1833-1896**



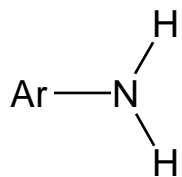
**22 mol** gáz és gőz keletkezik



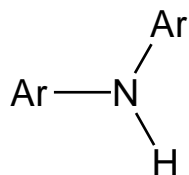
**18 mol** gáz és gőz keletkezik

## 2. Aromás aminok és iminek

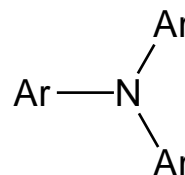
típusnév: arilamin , arilimin



primer aromás amin  
(aril-amin)

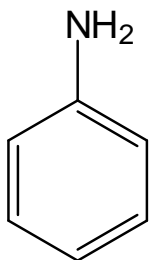


szekunder aromás amin  
(diaril-amin)

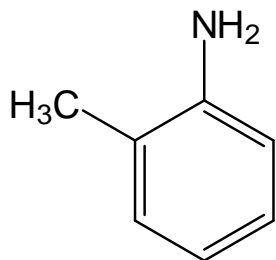


tercier aromás amin  
(triaril-amin)

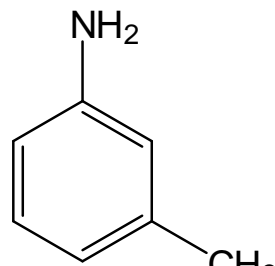
### A. Egyértékű primer aminok



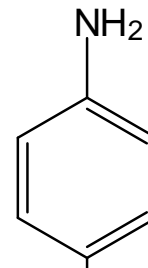
anilin



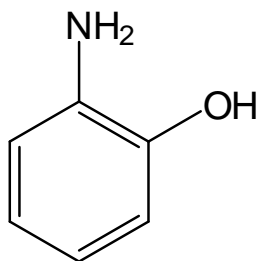
*o*-toluidin



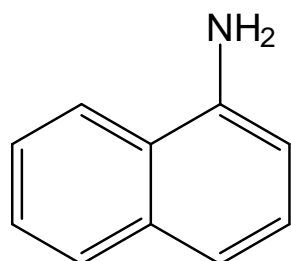
*m*-toluidin



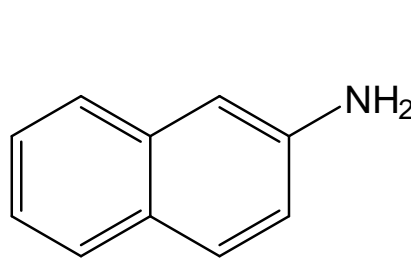
*p*-toluidin



2-aminofenol  
*o*-aminofenol

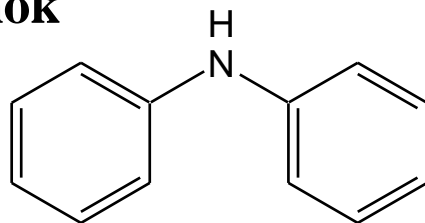


1-naftil-amin  
( $\alpha$ -naftil-amin)

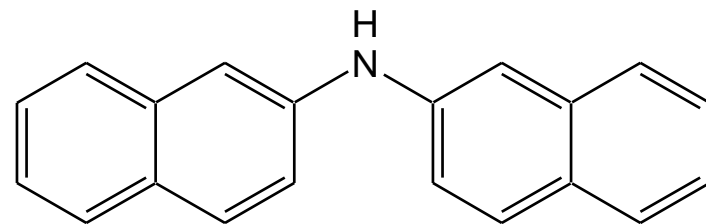


2-naftil-amin  
( $\beta$ -naftil-amin)

## B. Egyértékű szekunder aminok

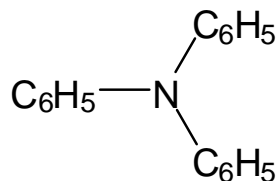


difenil-amin  
Diphenylamine

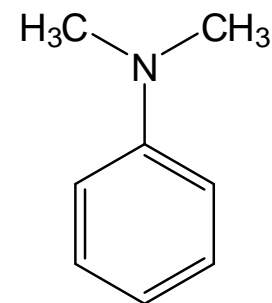


bisz(2-naftil)-amin  
Bis(2-naphthyl)amine

## C. Egyértékű terciér aminok

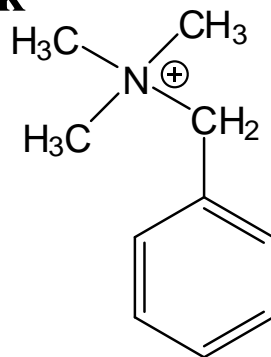


trifenil-amin  
Triphenylamine

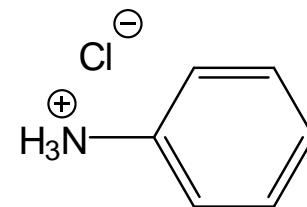


*N,N*-dimetilanilin  
*N,N*-Dimethylaniline

## D. Kvaterner ammóniumvegyületek



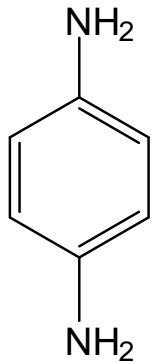
benzil-trimetil-ammónium-hidroxid  
Benzyltrimethylammonium hydroxide



anilinium-klorid  
anilinium chloride

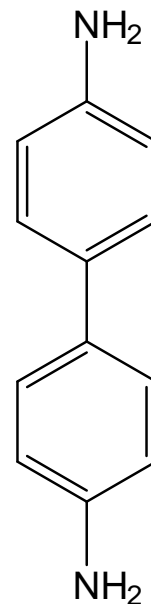
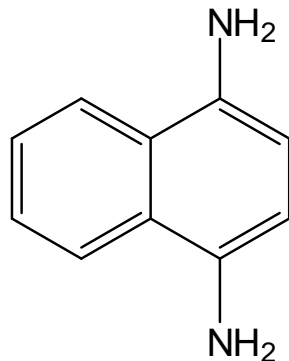


## E. Többértékű aminok



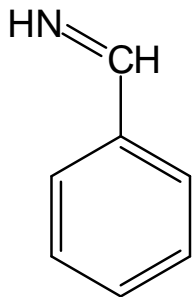
*p*-fenilén-diamin  
*p*-Phenylenediamine  
Benzene-1,4-diamine

naf talin-1,4-diamin  
Naphthalene-1,4-diamine

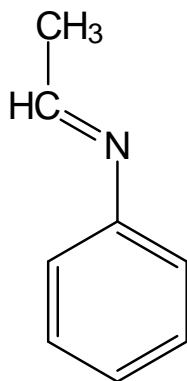


bifenil-4,4'-diamin  
Biphenyl-4,4'-diamine

## F. Aromás iminek



benzilidénimin  
Benzylideneimine



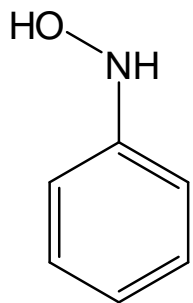
N-etilidénanilin  
N-Ethylideneaniline

### 3. Aromás hidroxilamin és hidrazinszármazékok

típusnév: aril-hidroxilamin

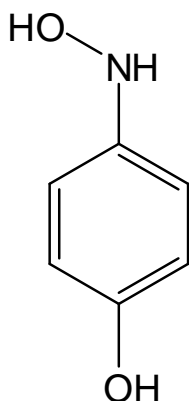
Utótag: hidroxilamin

Előtag: hidroxilamino



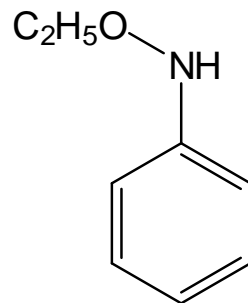
*N*-fenilhidroxilamin

*N*-Phenylhydroxylamine



4-(hidroxiamino)fenol

4-(Hydroxyamino)phenol



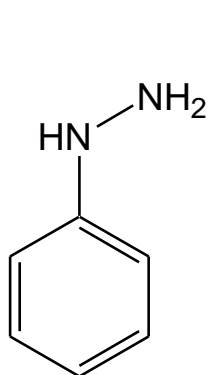
*O*-etil-*N*-fenilhidroxilamin

*O*-Ethyl-*N*-phenylhydroxylamine

típusnév: aril-hidrazin

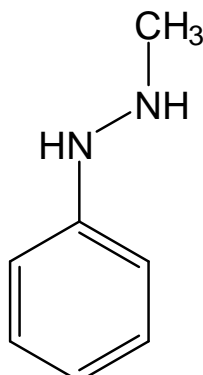
Utótag: hidrazin

Előtag: hidrazino



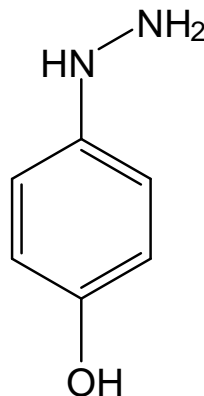
fenilhidrazin

Phenylhydrazine



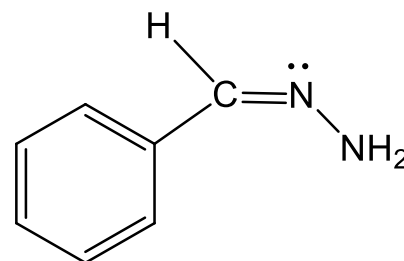
*N*-metil-*N'*-fenilhidrazin

*N*-Methyl-*N'*-phenylhydrazine



4-hidrazinofenol

4-Hydrazinophenol



benzaldehyd-hidrazon

benzilidén-hidrazin

Benzylidenehydrazine

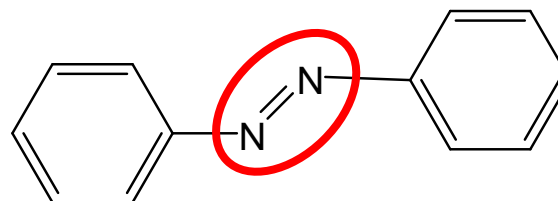
## 4. Aromás azo- és azoxivegyületek

típusnév: azoarén

Előtag: azo

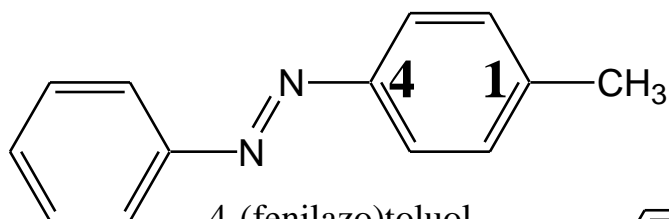
Utótag: diazén

### Szimmetrikus aromás azovegyület

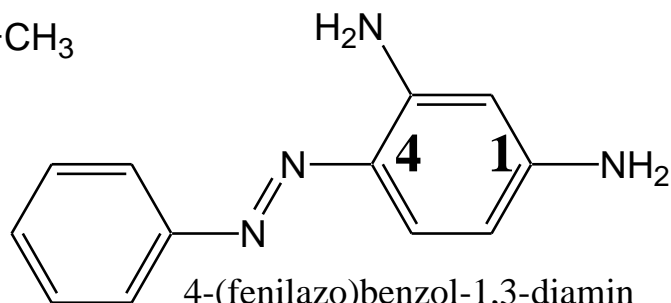


difenildiazén  
Diphenyldiazene  
azobenzol  
azobenzene

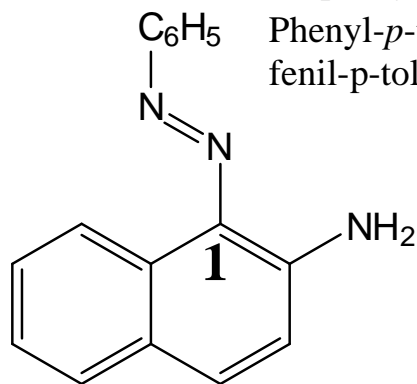
### Aszimmetrikus aromás azovegyület



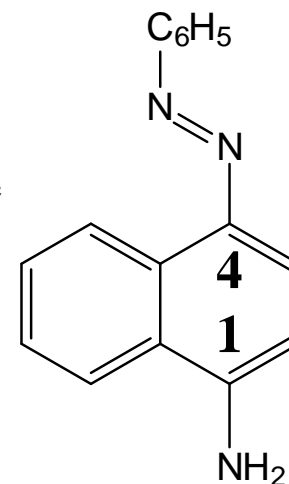
4-(fenilazo)toluol  
4-(phenylazo)toluene  
Phenyl-*p*-tolyl diazene  
fenil-*p*-tolildiazén



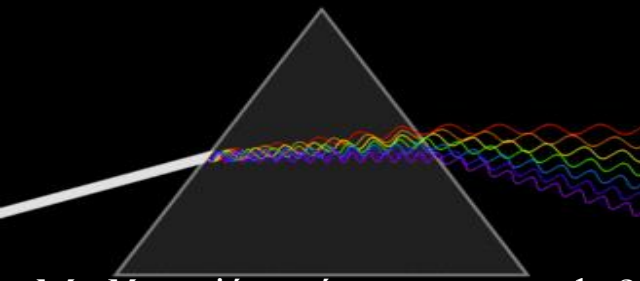
4-(fenilazo)benzol-1,3-diamin  
4-(Phenylazo)benzene-1,3-diamine  
(krizoidin)



1-(fenilazo)naftalin-2-amin  
1-(Phenylazo)naphthyl-2-amine



4-(fenilazo)naftalin-1-amin  
4-(Phenylazo)naphthyl-1-amine



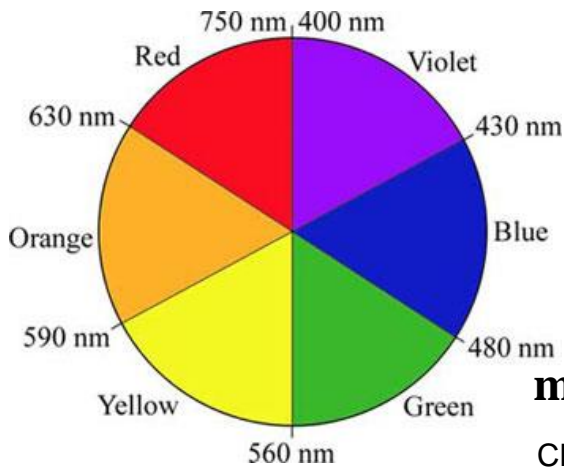
**kérdés: miért színes egy vegyület?**

A kivonó színkeverés elmélete:

**megfigyelés:**

a fehér fény (400-800 nm)

1. – teljes spektrumból szelektíven nyel el egy tartományt a kromofor molekula
2. – a megmaradó komponensek keverék színét érzékeljük

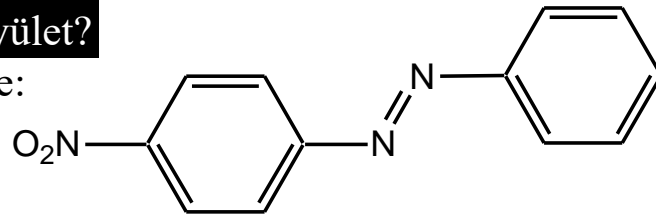


**kérdés: mi lehet a szín molekuláris oka?**

**válasz:** megfelelő kromofor csoport nyeli el a fényt - a finomhangolást a konjugáció kiterjedésének mértéke biztosítja

**memo:** *chroma* = szín, *phoros* = hordozó (görög)

**pl.:** itt most a konjugált kettős kötés rendszere

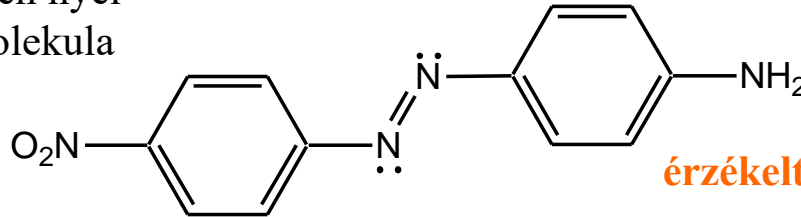


**sárga**

4-nitroazobenzol

**elnyelés: 420-430nm**

**érezelt szín: 580-590: a sárga**

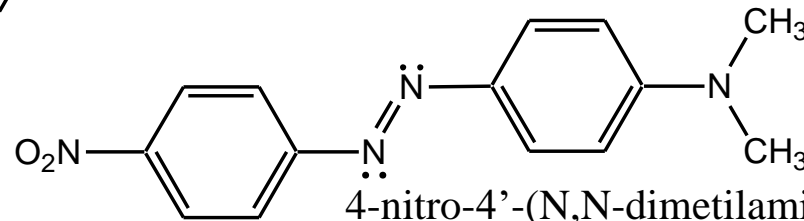


**sárgászörös**

4-nitro-4'-aminoazobenzol

**elnyelés: 460nm**

**érezelt szín: 650-610: a sötétvörös**



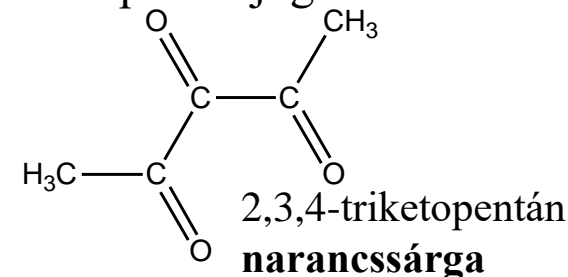
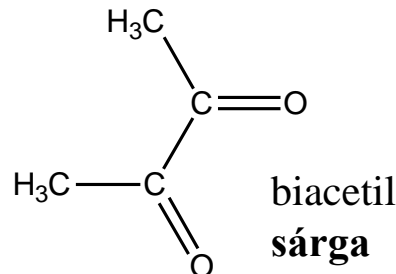
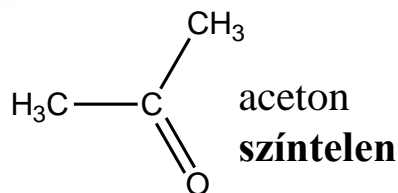
**sötétvörös**

4-nitro-4'-(N,N-dimetilamino)azobenzol

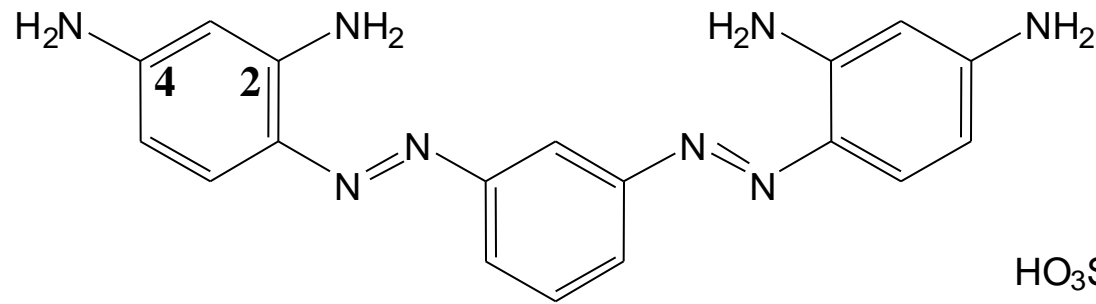
**elnyelés: 500-520nm**

**érezelt szín: 650-710: a sötétvörös**

**memo:** más kromofórok is finomhangolhatók pl. konjugált ketonok



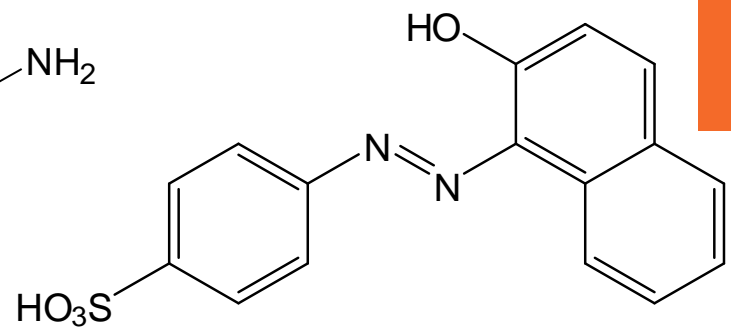
**Példa:**



1,3-bis[(2,4-diaminofenil)azo]-benzol  
(Bismarck-barna)



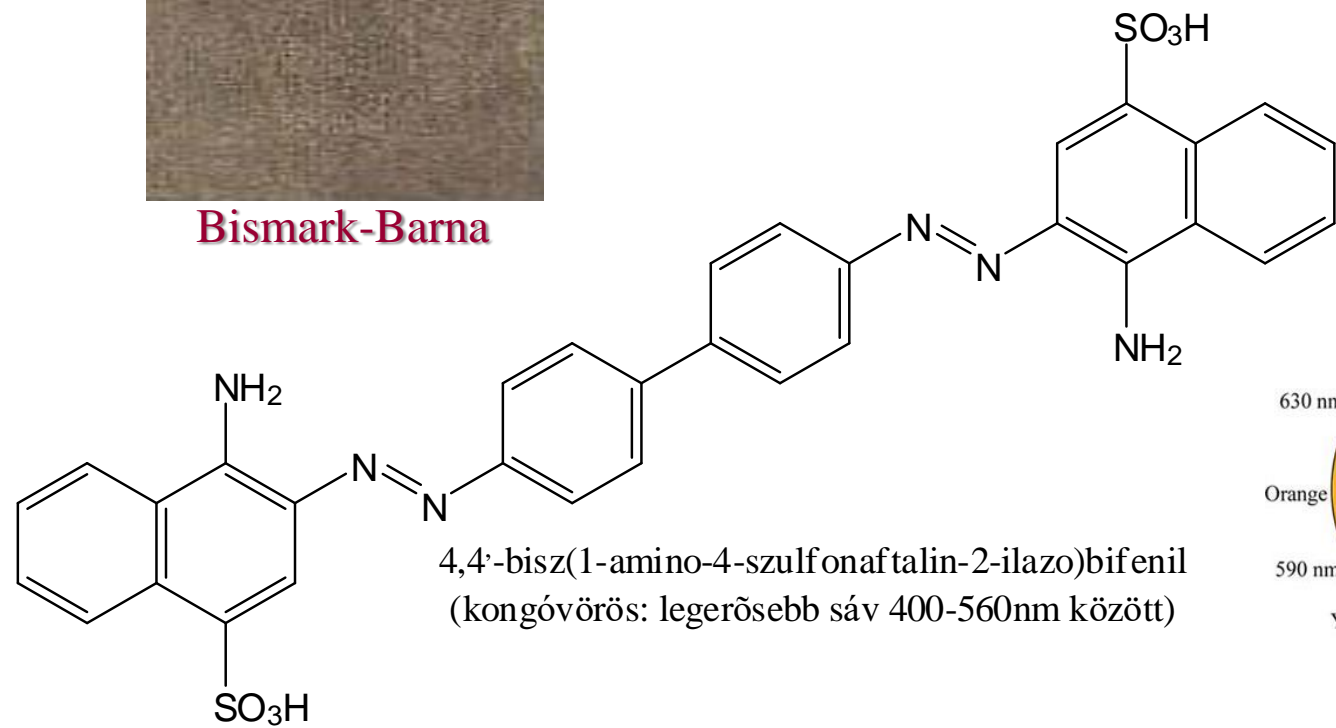
**Bismarck-Barna**



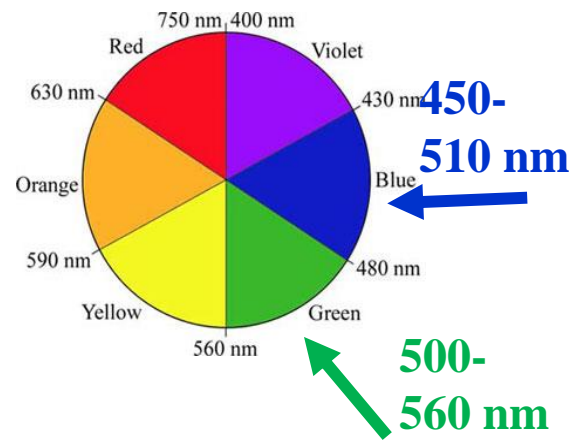
4-(2-hidroxinaf talin-1-ilazo)-benzolszulfonsav

4-(2-Hydroxynaphthalen-1-ylazo)-benzenesulfonic acid

(β-naftoloranzs 450-510nm)



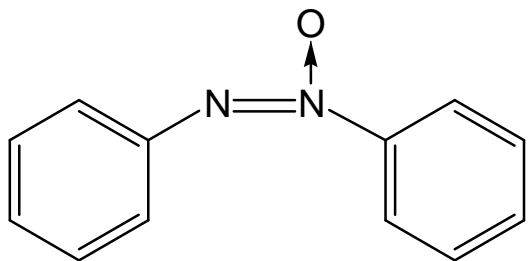
4,4'-bis(1-amino-4-szulfonaf talin-2-ilazo)bifenil  
(kongóvörös: legerősebb sáv 400-560nm között)



**Congo Red** has (a strong absorption band at 340nm: near-UV) and another at **500nm** (at blue-green transition region).

This dye transmits red wavelengths **above 560** nm and thus, appears red to the eye.

## azoxivegyületek

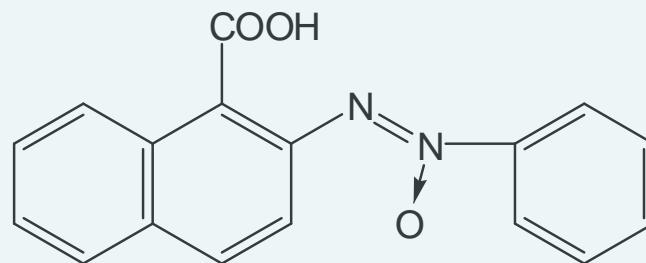


*N,N'*-Diphenyldiazene *N*-oxide

*N,N'*-difenildiazin-*N*-oxid

*azoxibenzol*

## példa

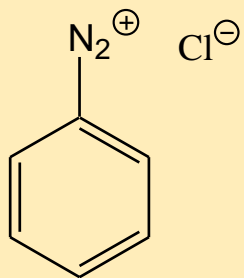


2-(Phenyl-*O,N,N*-azoxy)naphthalene-1-carboxylic acid

2-(fenil-*O,N,N*-azoxi)-1-naftalin-1-karbonsav

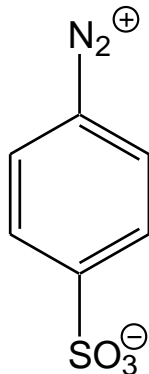
## 5. Aromás diazónium vegyületek

típusnév: aréndiazónium



benzoldiazonium-klorid

Benzenediazonium chloride



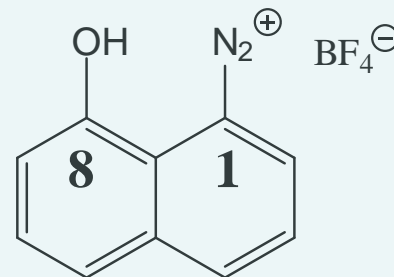
4-diazoniobenzol-1-szulfonát

4-Diazoniobenzene-1-sulfonate

Előtag: diazónio

Utótag: diazónium

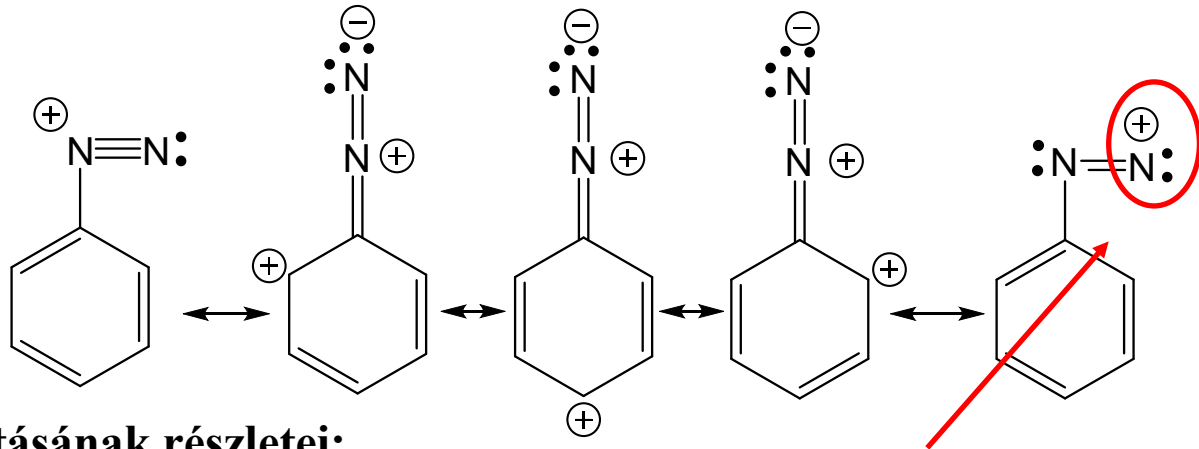
## példa



8-hidroxinaftalin-1-diazonium tetrafluoroborát

8-Hydroxynaphthalene-1-diazonium tetrafluoroborate

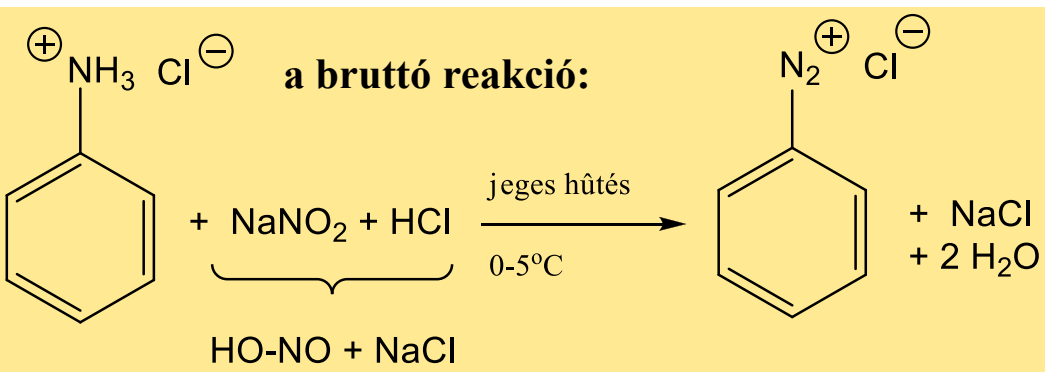
# A diazónium kation fontos poláris határszerkezetei:



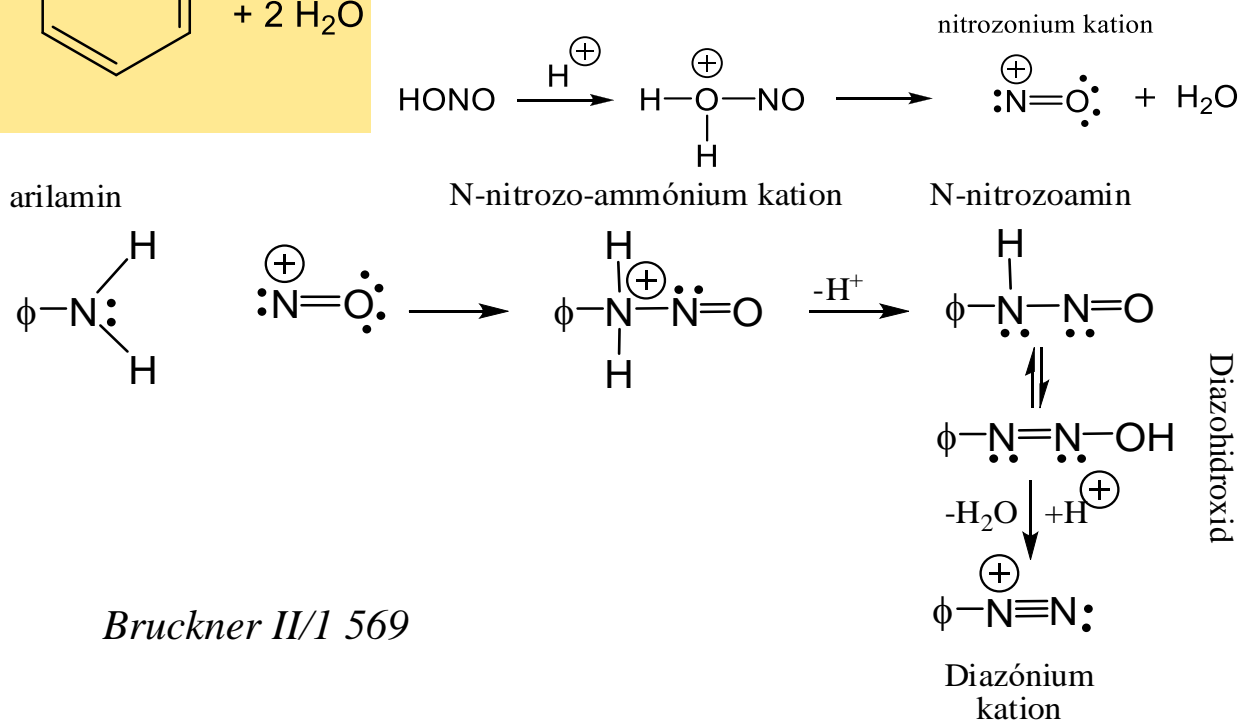
Ezen a N-atomon nincs meg az elektron oktett, s ezért potens elektrofil

Bruckner II/1 565

# A benzoldiazónium-klorid előállításának részletei:



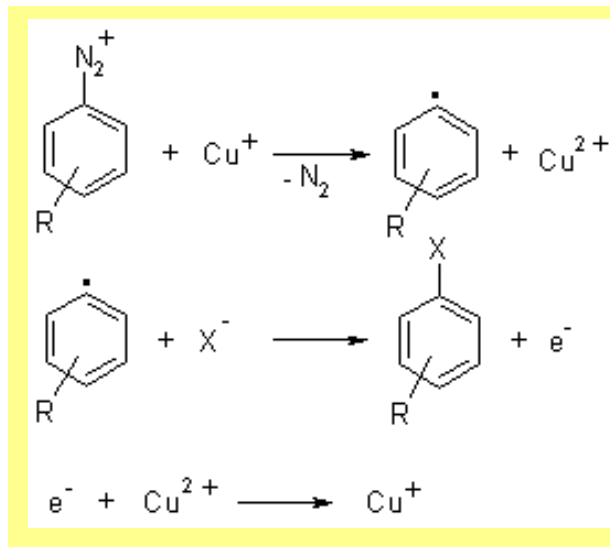
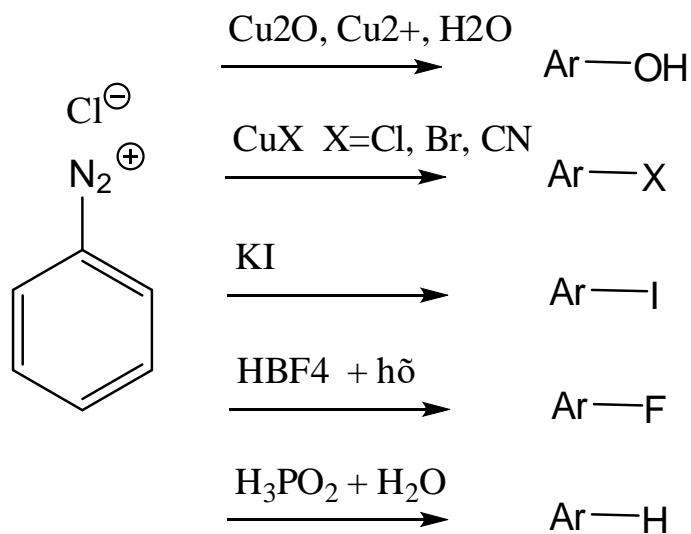
## néhány részlet:



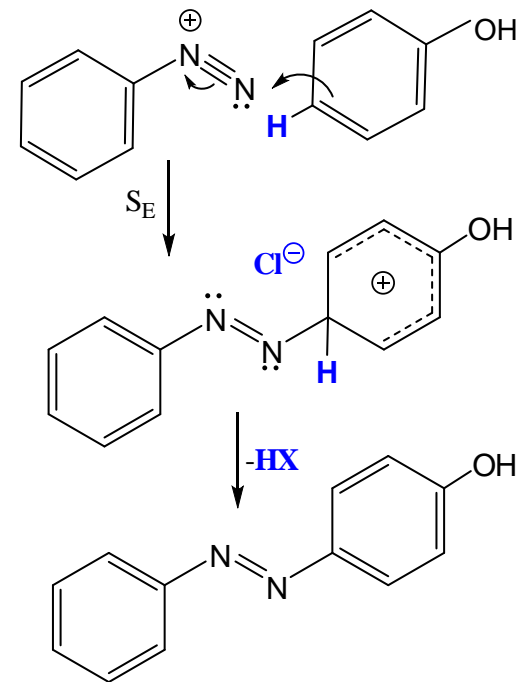
Bruckner II/1 569

## Aromás diazónium vegyületek **tipikus reakciói:**

gyökös Sandmeyer- szerű reakciók:



„azokapcsolás” :  $\text{Cl}^-$



azobenzol származékok  
(színezékek)

**elektrofil szubsztitúció**

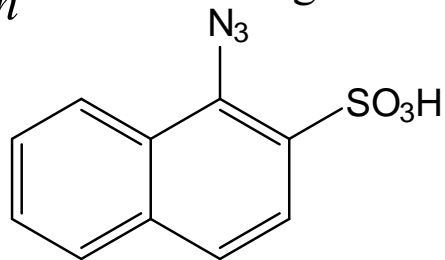
## 6. Aromás azidovegyületek

típusnév: azidoarén és aril-azid

Előtag: azido

Utótag: nincs

*Csn*

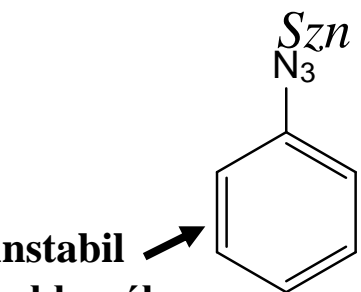
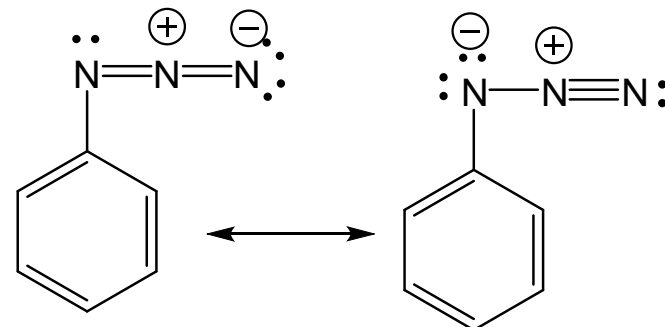


1-azidonaftalin-2-szulfonsav

1-Azidonaphthalene-2-sulfonic acid

**példa**

Az azidobenzol két poláris határszerkezete:



instabil  
robbanékony

f enil-azid

Azidobenzene  
azidobenzol



# XIII. Aromás oxovegyületek

## 1. Aromás aldehidek - típusnév: arilaldehid

Képzés: az arilkarbonsav nevének megfelelő csonkított acilnévből az aldehid utótaggal képezzük pl.: ftáloil  $\Rightarrow$  ftálaldehid,

naftoil  $\Rightarrow$  naftaldehid

Triviális savnév esetén csonkított acilnév + aldehid

pl.: benzoil +aldehid  $\Rightarrow$  benzaldehid

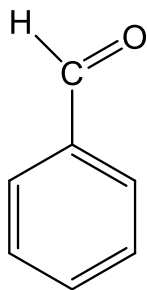
A gyűrűhöz közvetlenül csatlakozó aldehideket karbaldehideknek hívjuk

pl.: naftalinkarbaldehid.

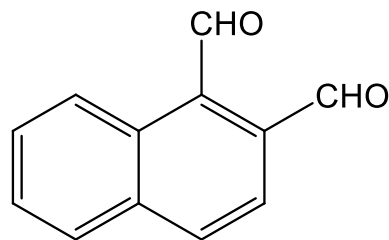
Előtag: formil

Utótag :karbaldehid

### A) Karbaldehidek

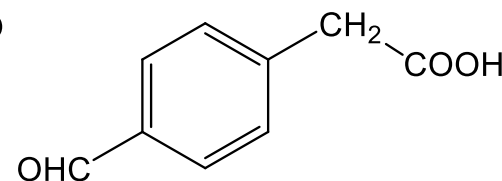


benzaldehyd  
Benzaldehyde

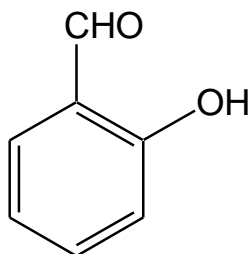


naftalin-1,2-dikarbaldehyd  
Naphthalene-1,2-dicarbaldehyde

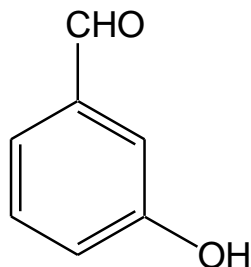
### példa



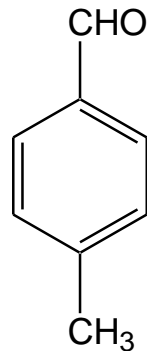
(4-formilfenil)ecetsav  
(4-Formylphenyl)acetic acid



2-hidroxibenzaldehid  
2-Hydroxybenzaldehyde

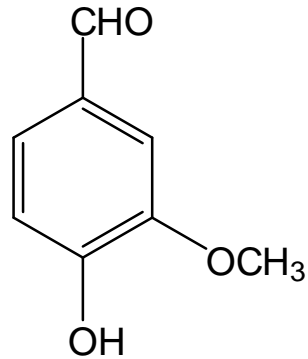


3-hidroxibenzaldehid  
3-Hydroxybenzaldehyde



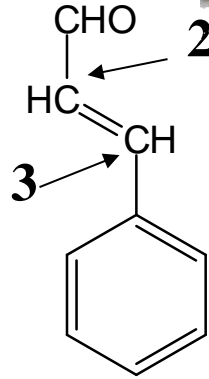
4-metilbenzaldehyd  
4-Methylbenzaldehyde

**Példa:**



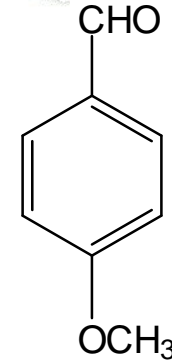
4-hidroxi-3-metoxibenzaldehid  
vanillin

4-Hydroxy-3-methoxybenzaldehyde



3-fenilakrilaldehid  
fahéjaldehyd

3-Phenylprop-2-enal

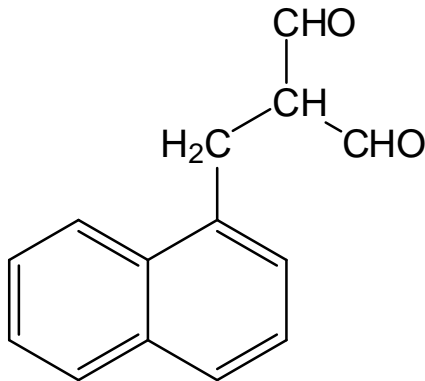


4-metoxibenzaldehid  
ánizsaldehyd

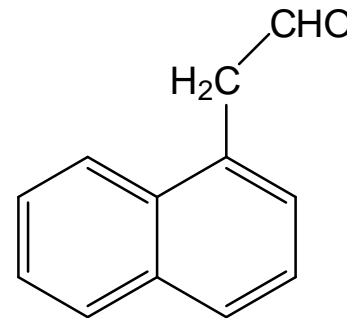
4-Methoxybenzaldehyde



## B) Alifás oldalláncú aromásaldehydek



[(1-naftil)metil]-malonaldehyd



(1-naftil)acetaldehyd

## 2. Aromás ketonok

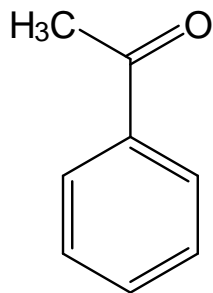
típusnév: alkanon

*Szn.*: előtag: oxo

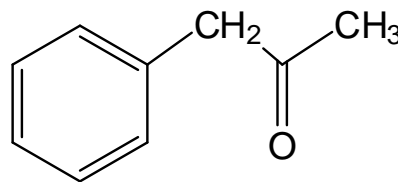
utótag: on

*Csn.*: keton

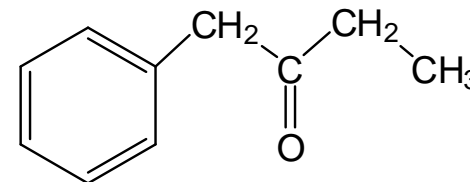
### A) az alifás oldallánc része az karbonilcsoport oxocsoport



1-Phenylethan-1-one  
1-feniletan-1-on  
*acetfenon*  
fenil-metil-keton  
methyl-phenyl keton

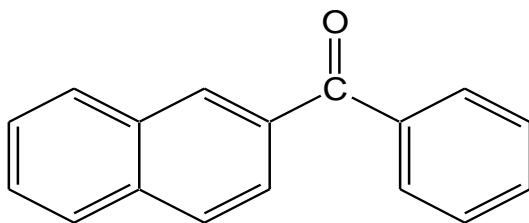


1-Phenylpropan-2-one  
1-fenilpropán-2-on  
*f enilaceton*  
benzil-metil-keton



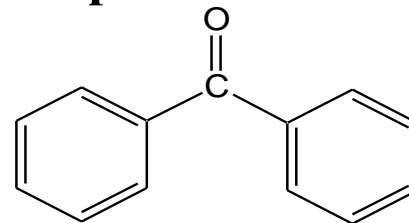
*Szn.* 1-Phenylbutan-2-one  
1-fenilbután-2-on  
*Csn.* *1 fenilbutan-2-on*  
benzil-etil-keton

### B) Az karbonilcsoport két aromás gyűrűhöz kapcsolódik



fenil-(2-naftil)-keton

Naphthalen-2-yl-phenyl-methanone



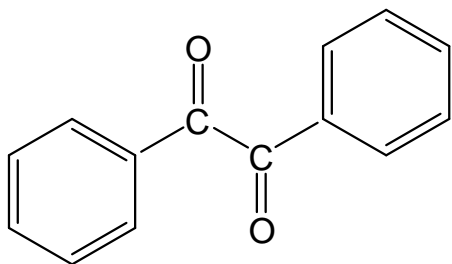
*Csn.*

benzofenon  
difenil-keton

*Szn.*

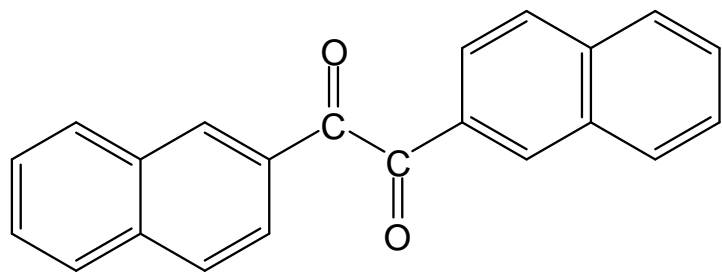
difenilmetanon  
Diphenylmethanone

### C) Aromás di-, tri- és poliketonok



*difenil-diketon*

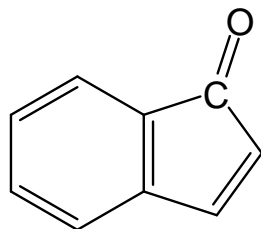
1,2-Diphenylethane-1,2-dione  
1,2-difeniletán-1,2-dion



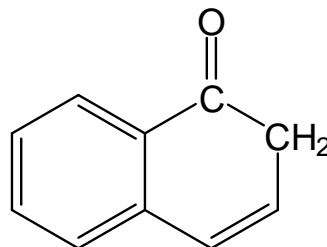
*Csn.* *bisz(2-naftil)-diketon*

*Szn.* Di(2-naphthyl)ethane-1,2-dione  
di(2-naftil)etán-1,2-dion

### D) Aromás rendszerekhez integrálódott ketonok

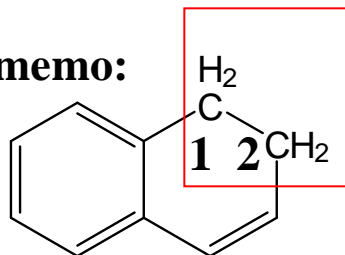


inden-1-on  
Inden-1-one

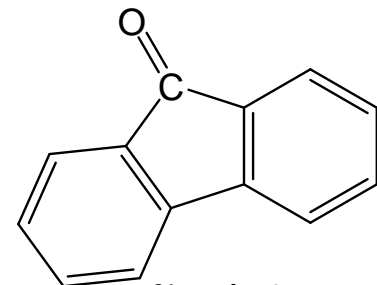


1,2-dihidronaftalin-1-on  
1,2,-Dihydronaphthalen-1-one

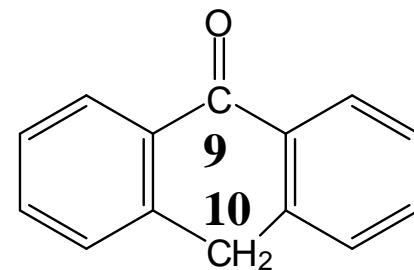
**memo:**



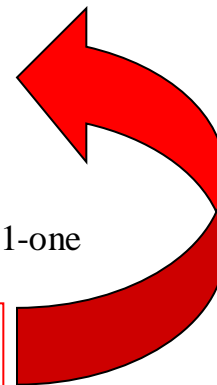
1,2-Dihydronaphthalene  
1,2-dihidronaftalin



fluorén-9-on  
Fluoren-9-one



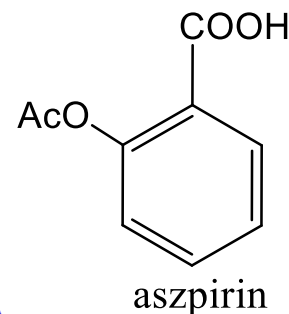
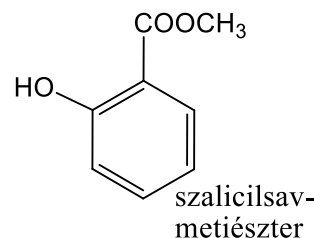
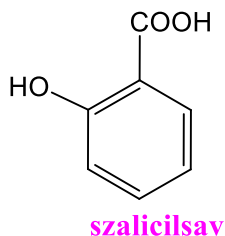
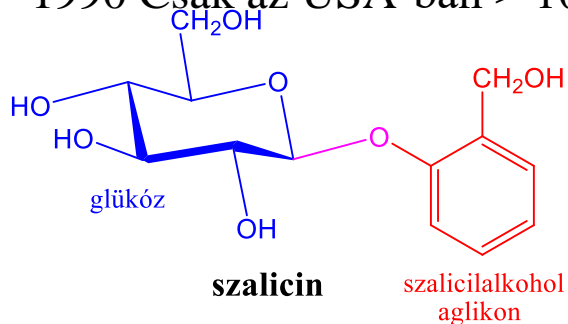
antron  
9,10-dihydroanthracen-9-one  
9,10-dihidroantracén-9-on



# Egy híres glikozid: az **aszpirin** rövid története

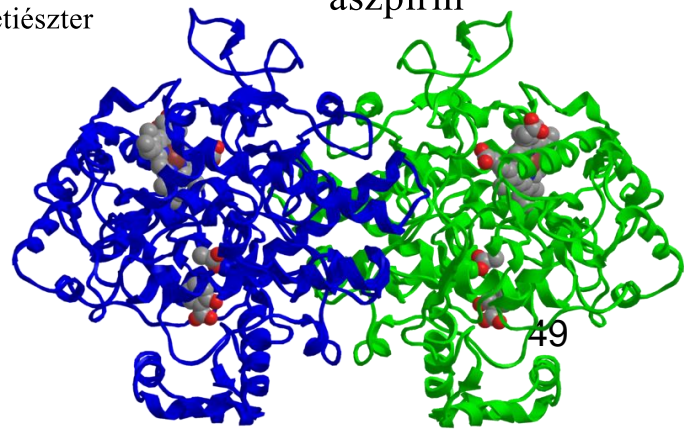


- A fűzfakéreg az ókori Ázsiában is használják (2400 éve) láz és fájdalomcsillapításra,
- 1830-tól a fűzfakéreg extraktumát használják hasonló célból,
- 1840 azonosítják a kivonat aktív komponensét a **szalicint** (*salix* [latin] fűzfa)
- 1870 Nencki (Bázel) kimutatja hogy a szervezetben szalicilsavvá alakul át a **szalicin**  
(A **szalicilsav** is fájdalom és lázcsillapító, de égeti a nyelvcsövet, gyomrot)
- 1875 Patikusok elkészítik a **Na<sup>+</sup> sóját**, „működik”, de borzasztó az íze, **hánytat**
- 1890 Félix Hoffmann (a Bayernél) elkészíti az **aszpirint**, ami jól hat és **elfogadható ízű**.  
„**a**” acetilt, „**spir**” spirea-t (Gyöngyvessző melyből szalicilsavmetilészter izolálható)
- 1898 Az aszpirin klinikai kiprobálása és üzemi gyártása (Bayer)
- 1990 Csak az USA-ban > 10 millió kg-t gyártnak évente



Hatásmechanizmus: az aszpirin, mint acetilezőszer a ciklooxygenáz (COX) inhibitora, gátolja a prosztaglandin szintézist)

- gyulladáscsökkentő,
- a köszvény és reuma hatásos gyógyszere,

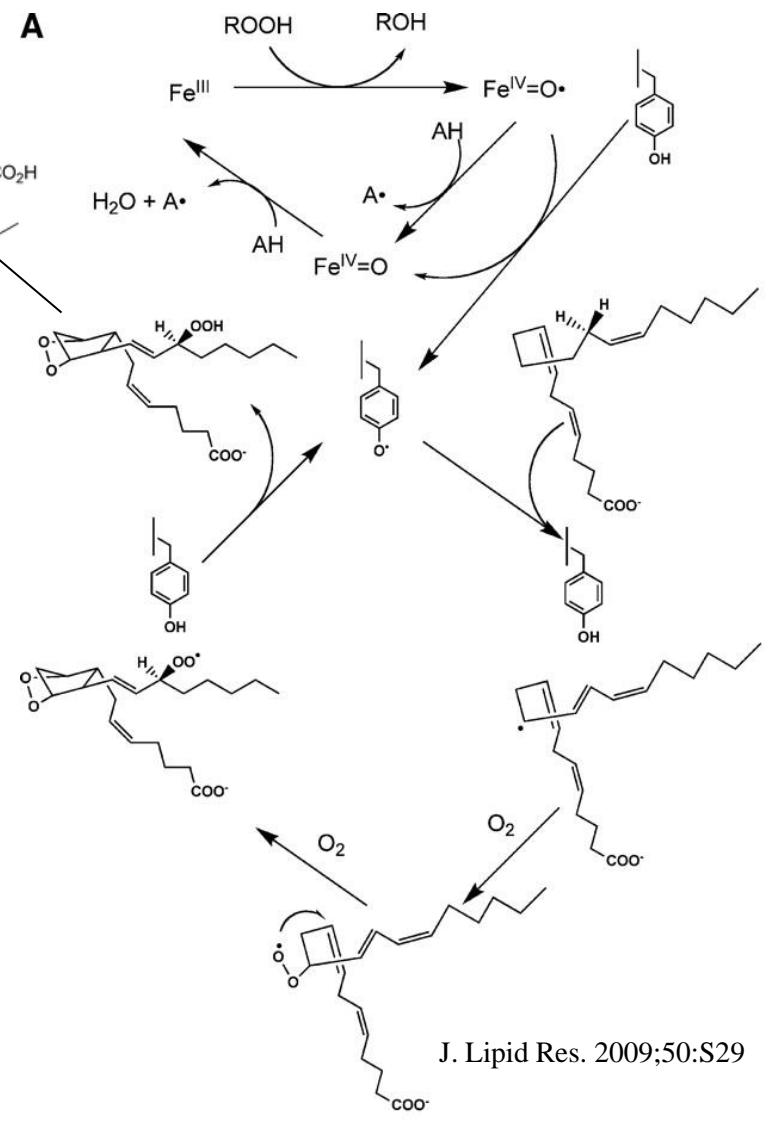
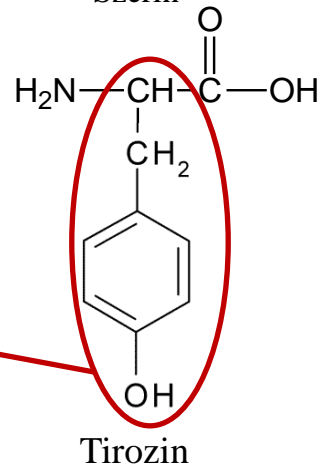
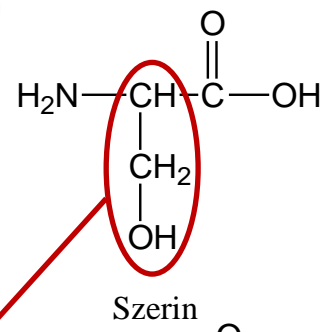
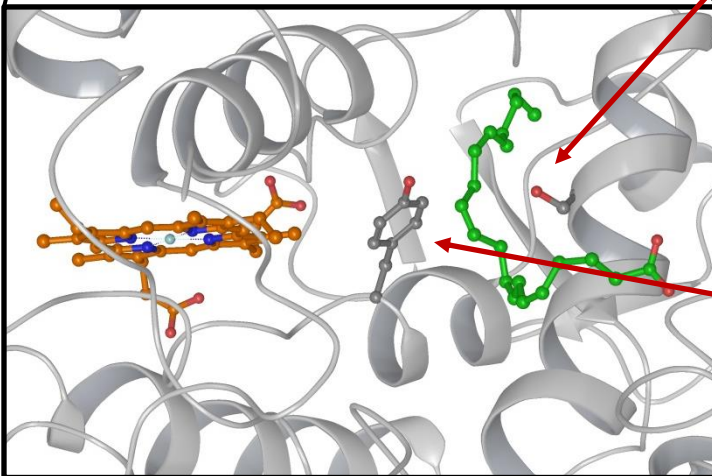
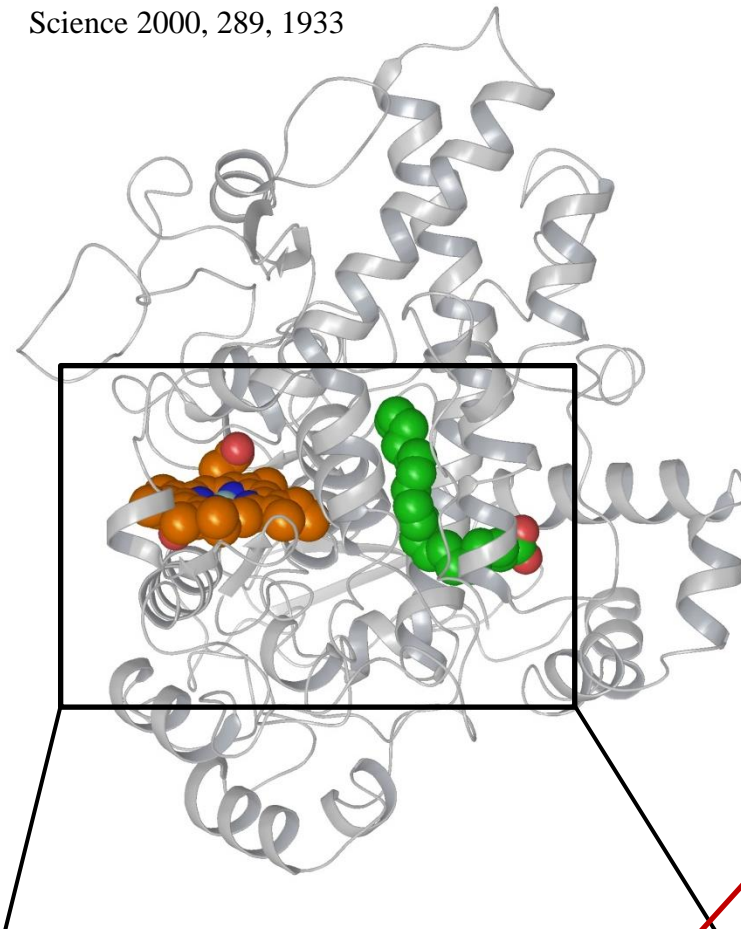


1975: az aszpirin acetilezi a COX1-t

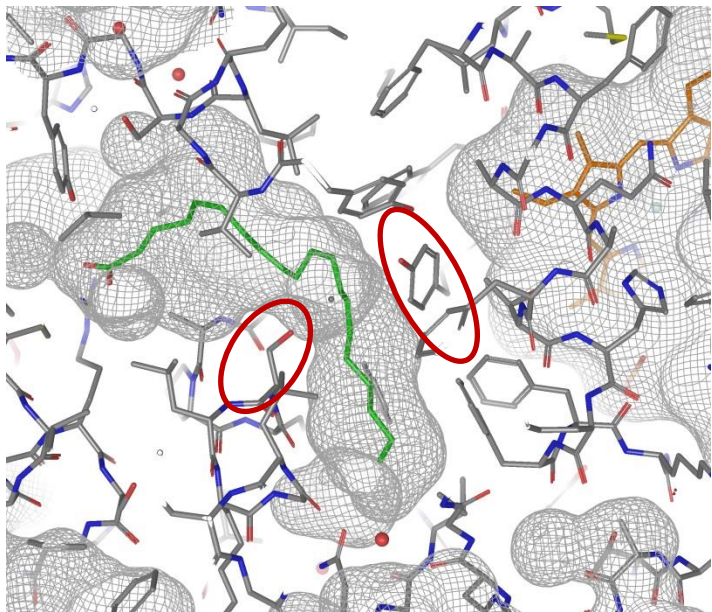
1983: az aszpirin a COX-1 egy Ser oldalláncát acetilezi

1988: az aszpirin a COX-1 **Ser530**-t acetilezi

1995: COX-1 kristályszerkezete

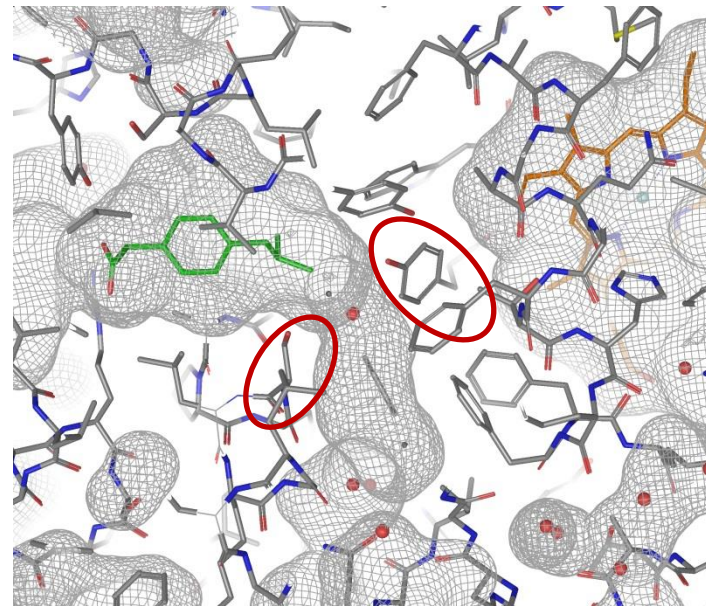






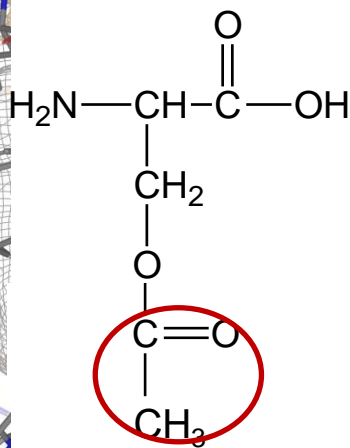
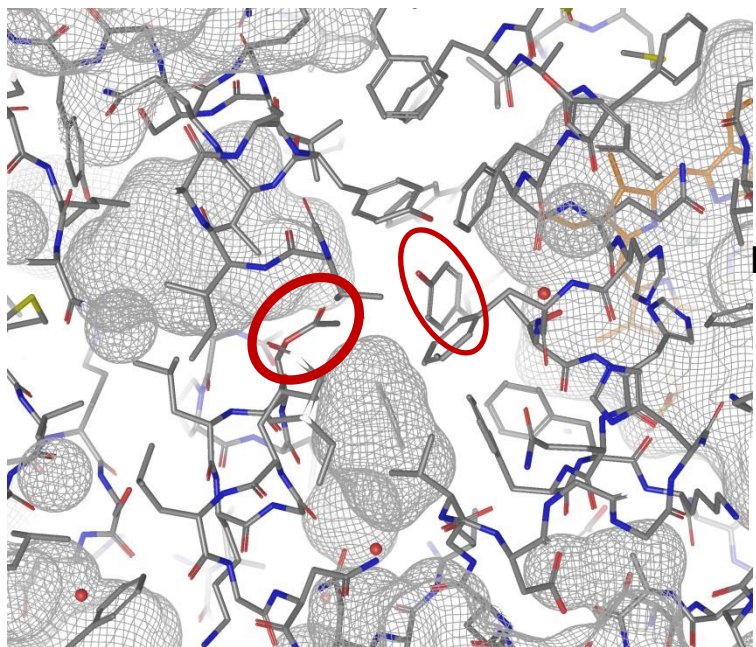
Science 2000, 289, 1933

COX1-**arachidonsav** komplex

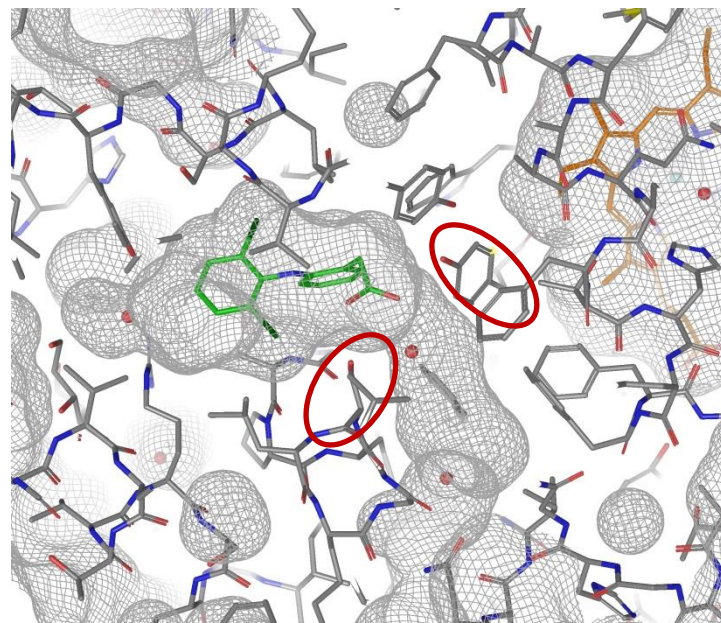


Biochemistry 2001, 40, 5172

COX1-**ibuprofen** komplex



Szerin-OAc



Biochemistry 2010, 49, 7069

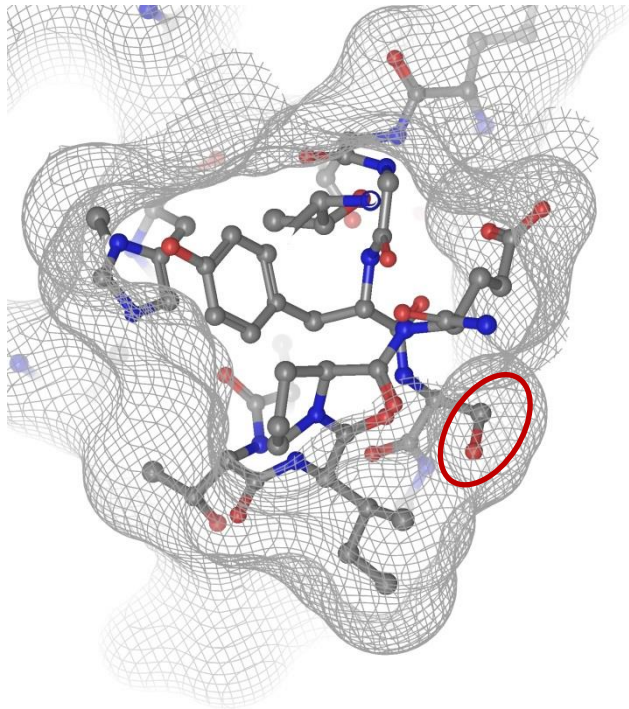
COX1-**diklofenac** komplex



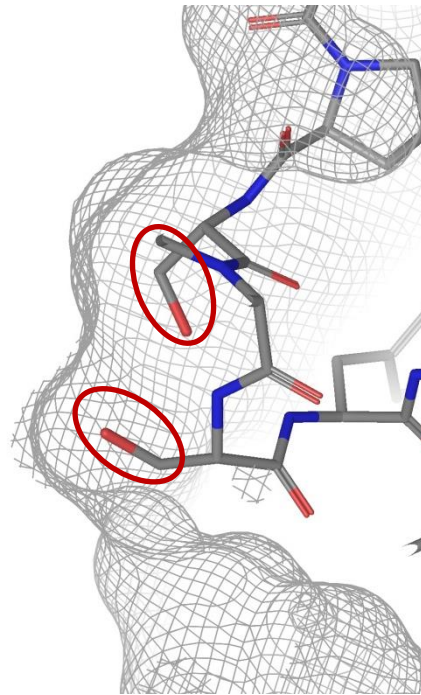
## A többi szerint miért nem acetilezi az aszpirin?

- nagyobb koncentrációban acetilezi
- kis koncentráció mellett ritkán teljesülnek az ideális reakciókörülmények:

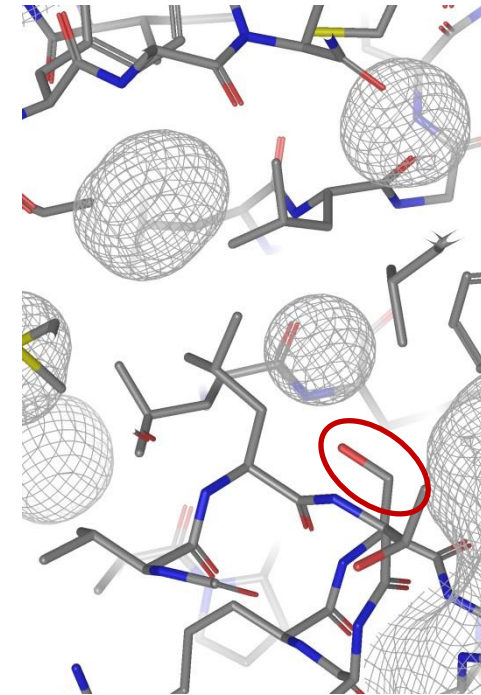
**memo:** gyomorban nem,  
bélben hidrolizál  
(ecetsav + szalicilsav)



felszín-közeli Ser:  
túl rövid kölcsönhatási idő

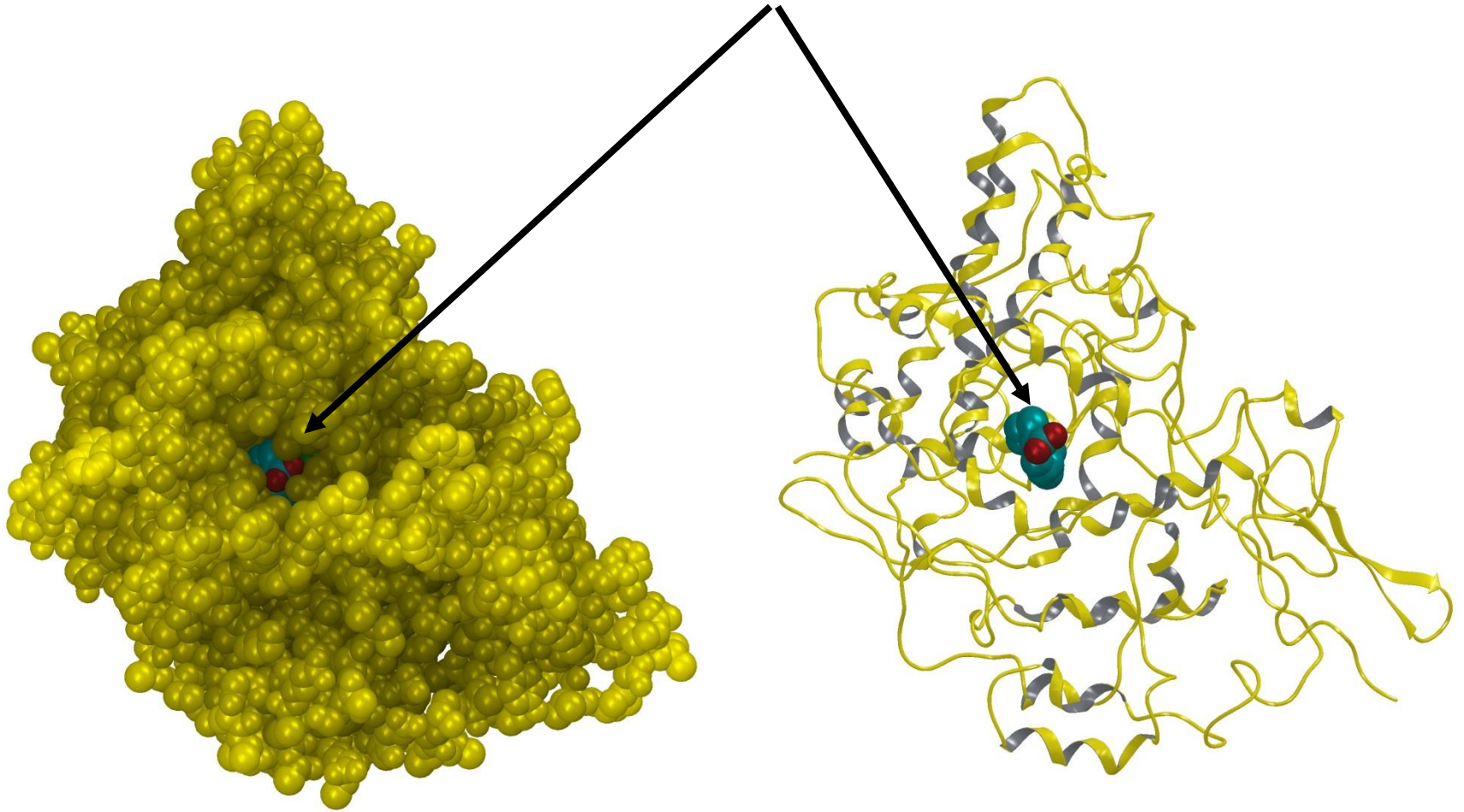


kölcsönhatásban lévő (H-híd), szorosan-pakolódott Ser:  
túl kevés hely





## Ciklooxigenáz-arahidonsav komplex



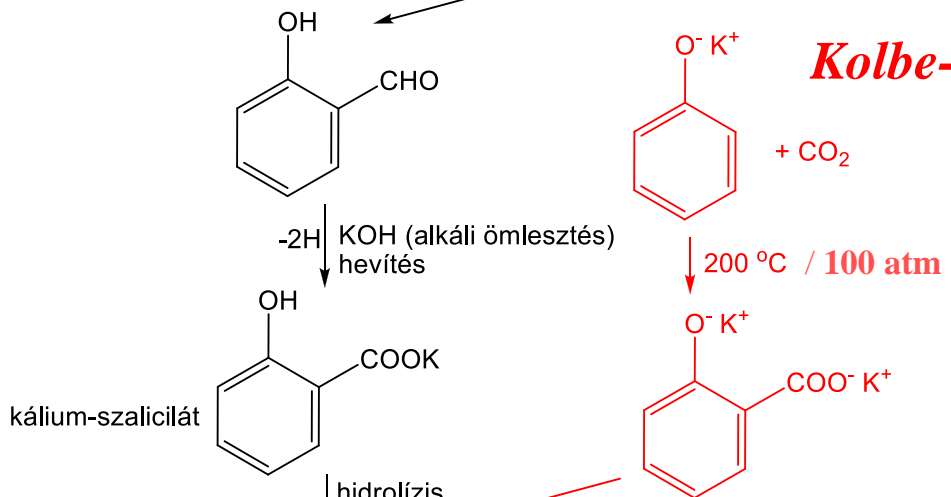
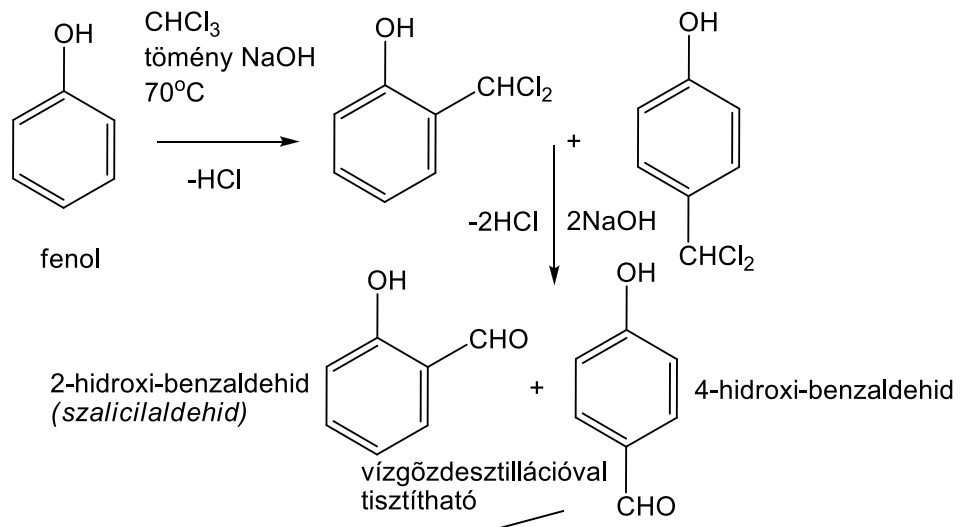
Loll, P.J., Picot, D., Garavito, R.M. (1995) *Nat.Struct.Biol.* 2: 637-643

Harman, C.A., Rieke, C.J., Garavito, R.M., Smith, W.L. (2004) *J.Biol.Chem.* 279: 42929-42935

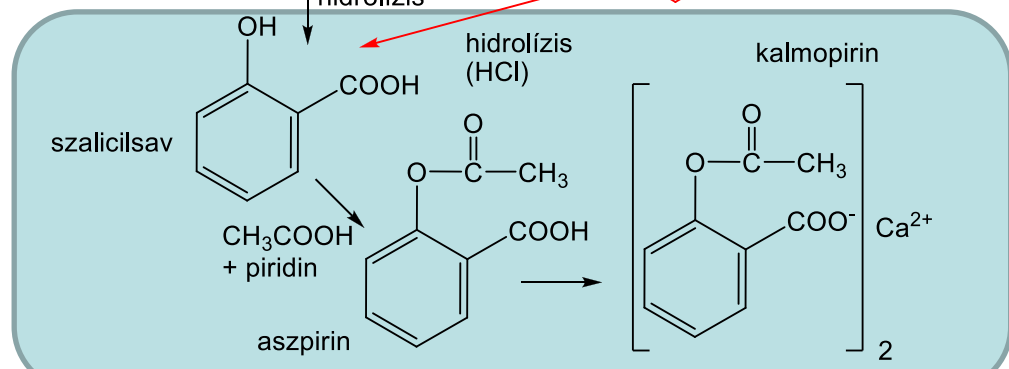
# Szintézis tervezet: a fenolból aszpirin

Bruckner:  
II/703  
II/726  
II/860

kőszén, petróleum



**memo:** az aszpirin a gyomorban nem, de a bélben hidrolizál: ecetsav + szalicilsav lesz belőle



# XIV. Aromás karbonsavak

Az aromás gyűrűhöz kapcsolódó vagy annak oldalláncában a láncvégi metilcsoport hidrogénjeit cseréljük:  
2 db H-t  $\Rightarrow$  O-ra; 1 db H-t  $\Rightarrow$  OH-ra

karboxilcsoport kapcsolódása szerint: arénkarbonsav  $\Leftrightarrow$  arilezett alifás karbonsav

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

szénhidrogén oldallánc: telített  $\Leftrightarrow$  telítetlen

Előtag: karboxi

Utótag :karbonsav

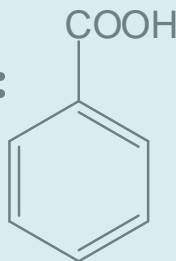


Nostradamus  
(1556)

## 1. Arénkarbonsavak

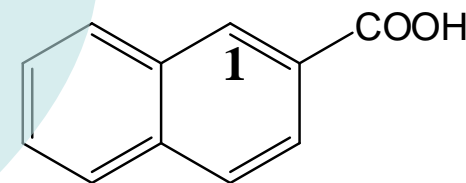
típusnév: arénkarbonsav

### A. Egyértékű savak:

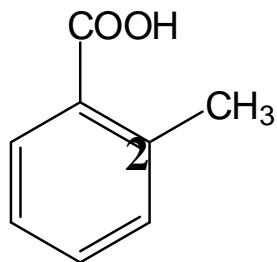


benzolkarbonsav  
benzoesav  
Benzoic acid

tartósítószer  
(gombák, baktériumok  
szaporodását gátolja):  
E210, E211, E212, E213

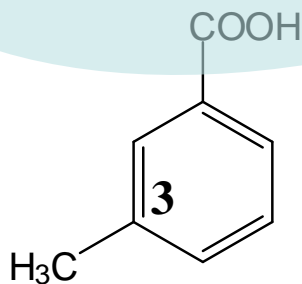


2-naf toesav  
2-naphtoic acid



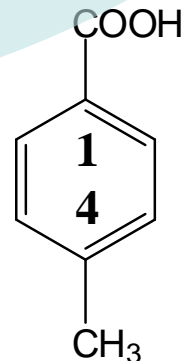
2-metilbenzoesav  
*o*-toluilsav

2-Methylbenzoic acid



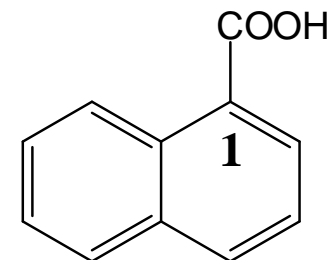
3-metilbenzoesav  
*m*-toluilsav

3-Methylbenzoic acid



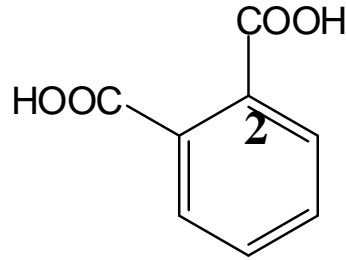
4-metilbenzesav  
*p*-toluilsav

4-Methylbenzoic acid

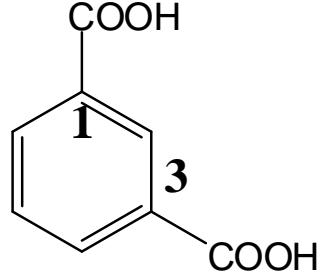


1-naf toesav  
1-naphtoic acid

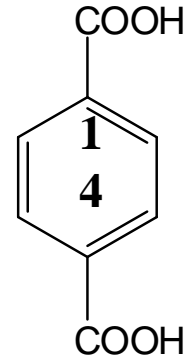
## B. Kétértékű savak:



benzol-1,2-dikarbonsav  
benzene-1,2-dicarboxylic acid  
ftálsav **op=231°**  
Phthalic acid



benzol-1,3-dikarbonsav  
benzene-1,3-dicarboxylic acid  
izof tálsav **op=348°**  
Isophthalic acid



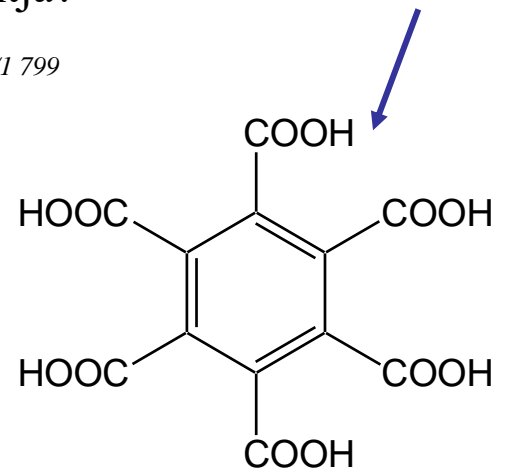
1,4-benzoldikarbonsav  
benzene-1,4-dicarboxylic acid  
tereftálsav **op=425°**  
Terephthalic acid

**kérdés:** miért ennyire eltérő a három szerkezeti izomer olvadáspontja?

**memo:** intermolekuláris H-hidak

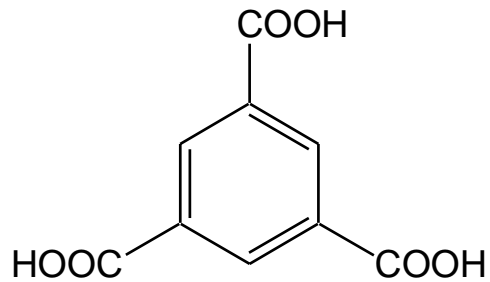
grafit szerkezetigazoló oxidációja

Bruckner II/1 799

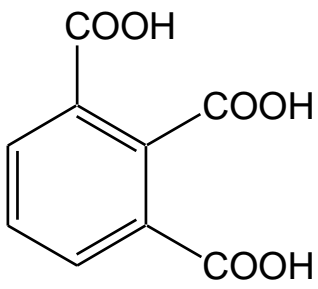


benzol-1,2,3,4,5,6-hexakarbonsav  
(mellitsav)  
Benzene-1,2,3,4,5,6-hexacarboxylic acid

## C. Többértékű savak:

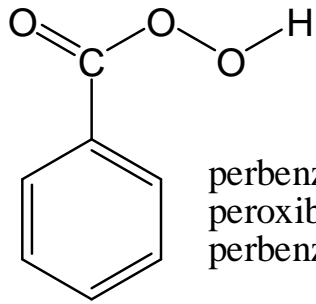


benzol-1,3,5-trikarbonsav  
(trimezinsav)  
Benzene-1,3,5-tricarboxylic acid

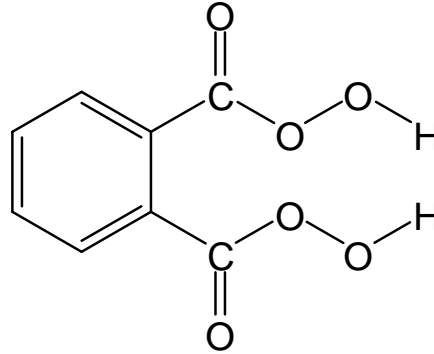


benzol-1,2,3-trikarbonsav  
(hemimellitsav)  
Benzene-1,2,3-tricarboxylic acid

## D. peroxisavak:



**ROSSZ** a benzolperoxikarbonsav mert  
a benzolkarbonsav név  
sem használható a benzoesav helyett



diperoxi-ftálsav

**ROSSZ** a benzol-1,2-diperoxikarbonsav  
mert a ftálsav helyett nem mondhatjuk  
hogy benzol-1,2-karbonsav

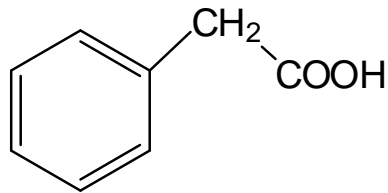
## 2. Arilezett alifás karbonsavak

Előtag: karboxi

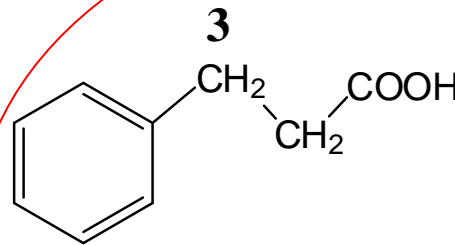
Utótag :sav

típusnév: arilalkánsav

### A. Telített oldalláncú:

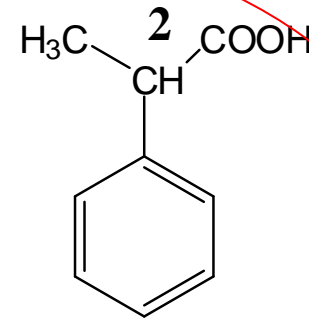


fenilecetsav  
Phenylacetic acid



3-fenilpropánsav  
hidratropisav

3-Phenyl-propanoic acid

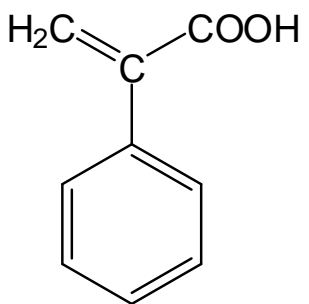


2-fenilpropánsav  
hidratropasav

2-Phenyl-propanoic acid

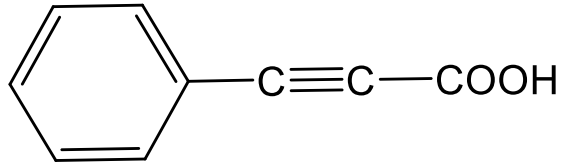
**konstitúciós izomerek**

**B. Telítetlen oldalláncú:**



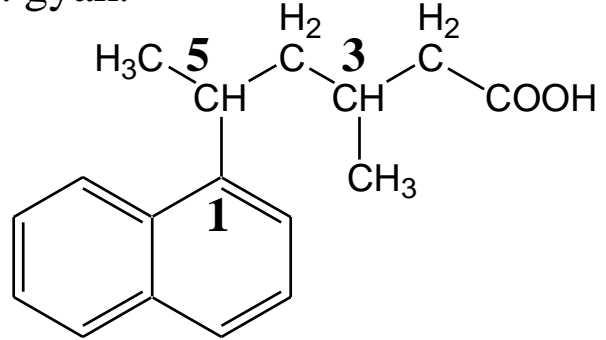
2-fenilakrilsav  
(atropasav)

2-Phenylacrylic acid

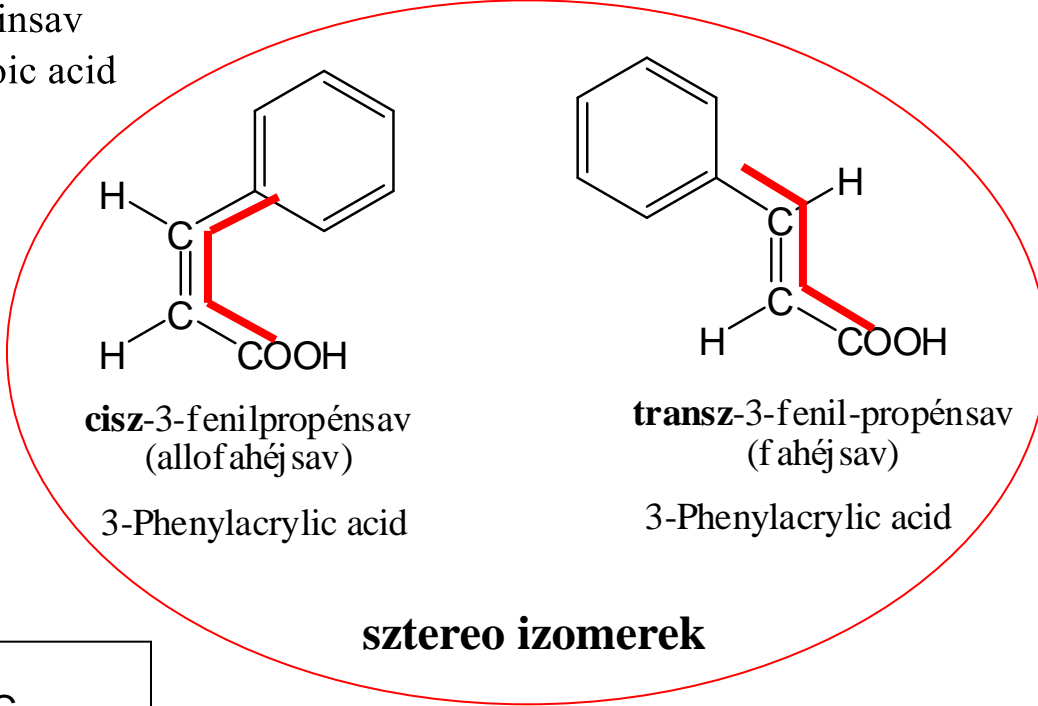


3-fenilpropinsav  
3-Phenylpropynoic acid

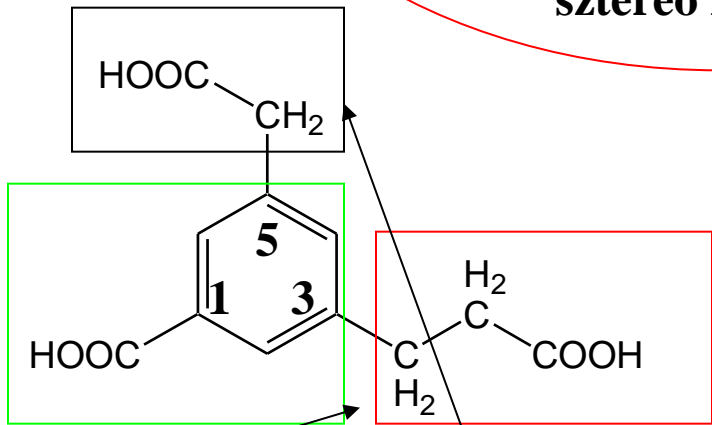
nev. gyak.



3-metil-5-(1-naftil)hexánsav  
3-Methyl-5-(1-naphthyl)hexanoic acid



**sztereo izomerek**



3-(2-karboxietil)-5-(karboximetil)benzoesav

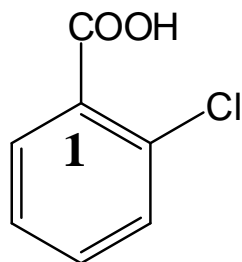
3-(2-Carboxyethyl)-5-(carboxymethyl)benzoic acid

### 3. Magban szubsztituált arénkarbonsavak

típusnév: arilkarbonsav

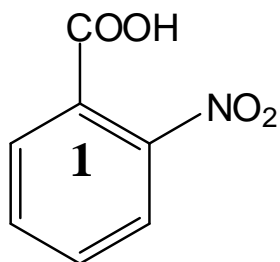
Előtag: karboxi

Utótag :karbonsav



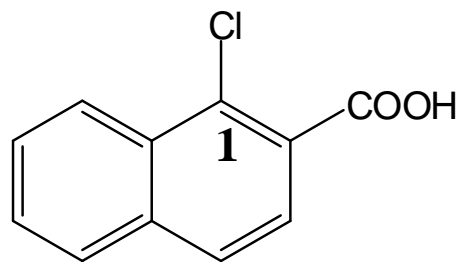
2-klórbenzoesav  
*o*-klórbenzoesav

2-Chlorobenzoic acid



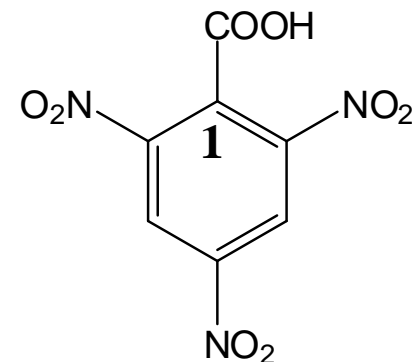
2-nitrobenzoesav  
*o*-nitrobenzoesav

2-Nitrobenzoic acid



1-klórnaftalin-2-karbonsav

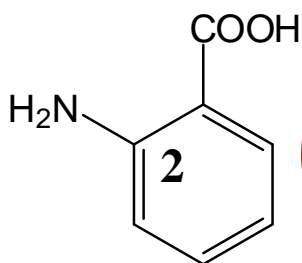
1-Chloronaphthalene-  
2-carboxylic  
acid



2,4,6-trinitrobenzoesav

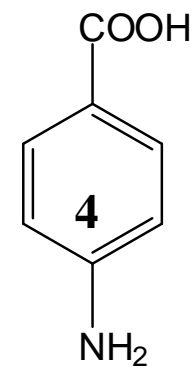
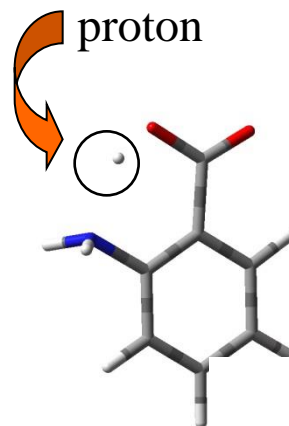
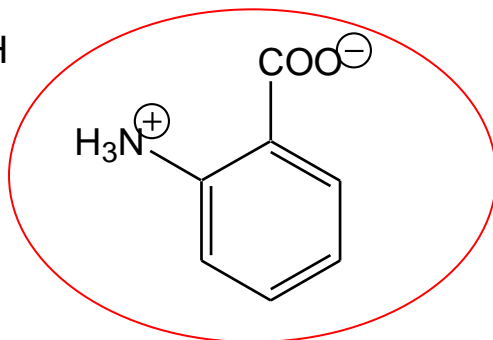
2,4,6-Trinitrobenzoic acid

Ikerionos szerkezet:



2-aminobenzoesav  
*o*-aminobenzoesav  
(antranilsav)

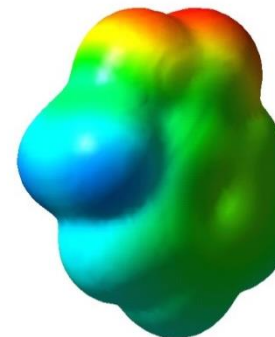
2-Aminobenzoic acid



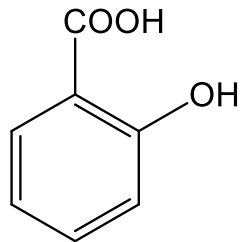
4-aminobenzoesav  
*p*-aminobenzoesav

4-Aminobenzoic acid

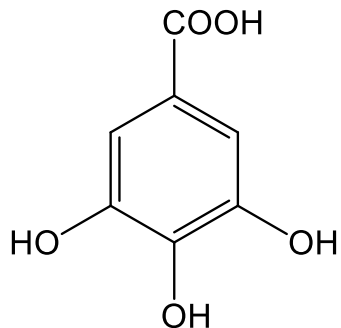
$\mu=7.58$  Debye



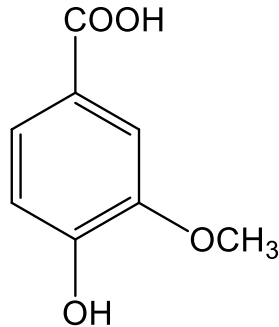




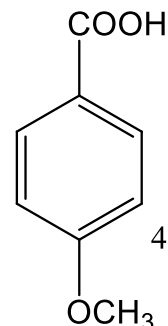
2-hidroxibenzoészav  
o-hidroxibenzoészav  
(szalicilsav)  
-Hydroxybenzoic acid



3,4,5-trihidroxibenzoészav  
(galluszsav)  
3,4,5-Trihydroxybenzoic acid



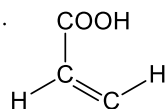
4-hidroxí-3-metoxi-  
benzoészav  
(vanillinsav)  
4-Hydroxy-3-methoxy-  
benzoic acid



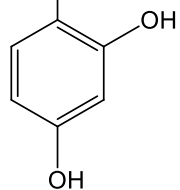
4-metoxibenzoészav  
p-metoxibenzoészav  
(ánizssav)  
4-Methoxybenzoic acid

## 4. Arilezett alifás karbonsavak szubsztituált származékai

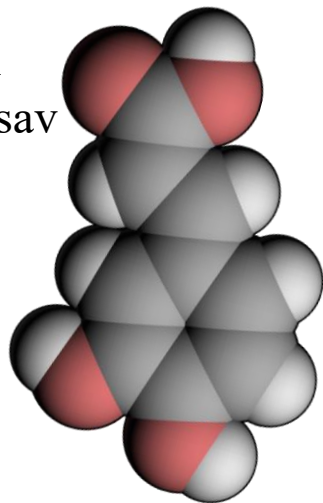
típusnév: aralkilsav (pl. akrilsav szárm. :  $\text{CH}_2=\text{CHCOOH}$ )



Előtag: karboxi  
Utótag: karbonsav



3-(2,4-dihidroxifenil)akrilsav  
(kávészav) *transz*  
3-(2,4-Dihydroxyphenyl)-  
acrylic acid



- lignin bioszint. köztterméke
- antioxidáns:  
hidrokinon ↔ kinon

*D-Glc, D-Gal, D-Man szárazanyagtraktalom közel 10% Pörköléskor elbomlanak*

2-metil-valeriánsav  
csokoládé íz

nikotinsav (niacin)  
közel 1%

fahéjsav

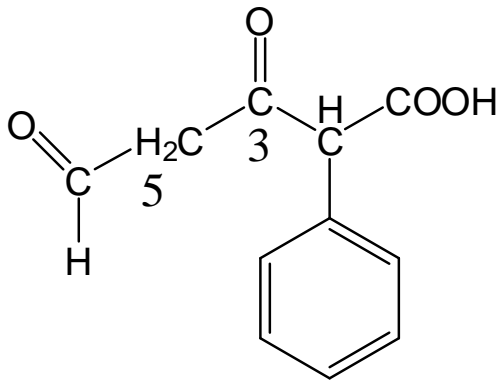
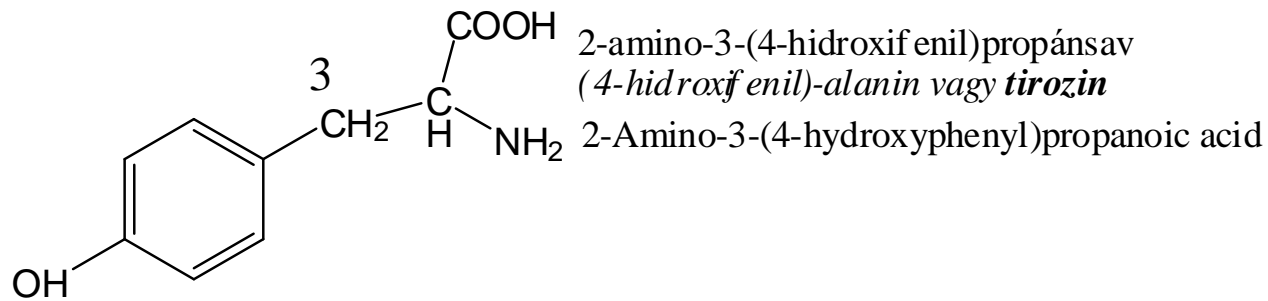
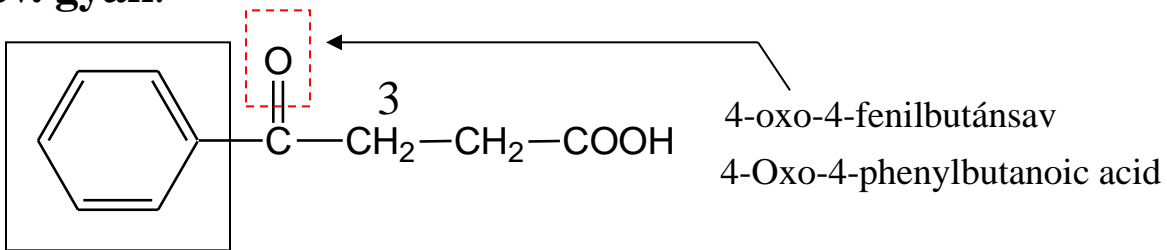
piroszőlészav  
karamelles íz

Illóolajok:  
vanilin

koffein 1-4%

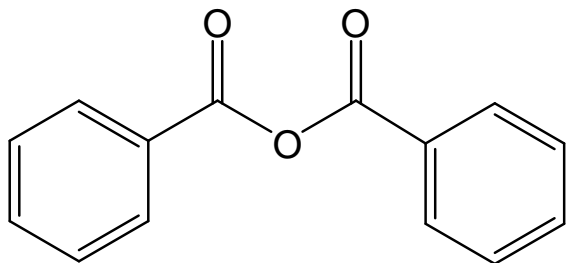


nev. gyak.

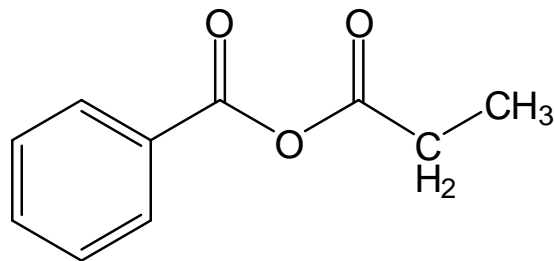


## 5. Aromáskarbonsavak funkcionális származékai

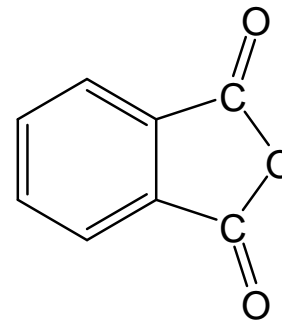
### A. Karbonsavanhidridek:



benzoesav-anhidrid



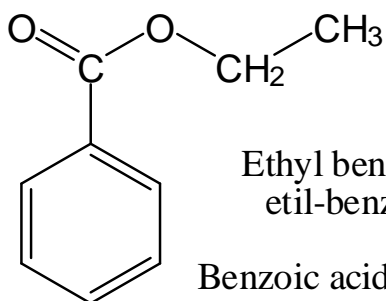
benzoesav-propionsav-anhidrid



ftálsav-anhidrid

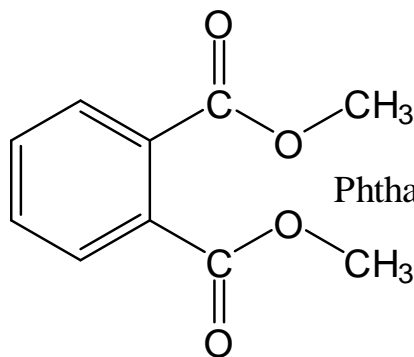
1,3-dihydrobenzofurán-1,3-dion

### B. Karbonsavészterek:



Ethyl benzoate  
etil-benzoát

Benzoic acid ethyl ester  
benzoesav-etil-észter

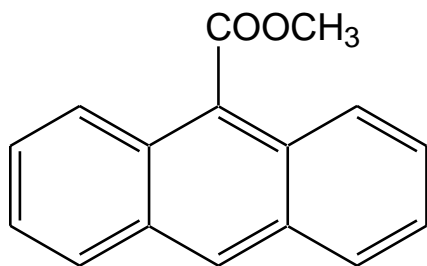


dimetil-ftalát  
dimethyl phthalate

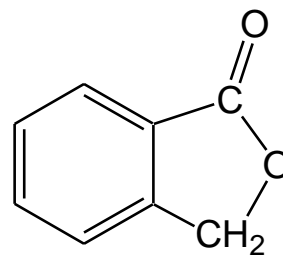
Phthalic acid dimethyl ester

(ftálsavból hevítésre könnyen képződik)  
(o-dikarbonsav)

*Csn*



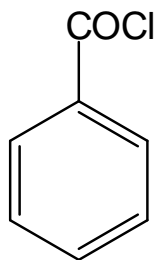
antracén-9-karbonsav-metil-észter  
Anthracene-9-carboxylic acid methyl ester



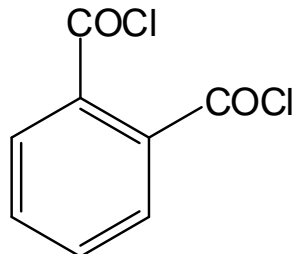
ftalid

3*H*-Isobenzofuran-1-one

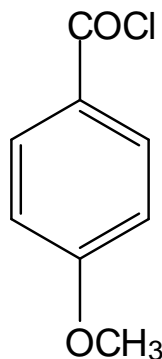
## C. Karbonsavhalogenidek:



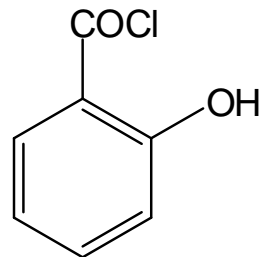
benzoyl-klorid  
Benzoyl chloride



ftaloil-diklorid  
Phthaloyl dichloride



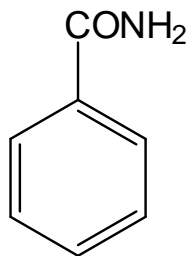
(4-Methoxy)benzoyl chloride  
(4-metoxi)benzoyl-klorid  
*ánizssav-klorid*



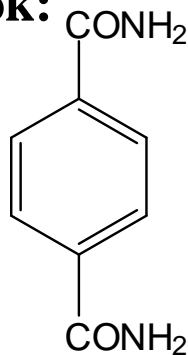
(2-Hydroxybenzoyl)  
chloride  
(2-hidroxibenzoil)-klorid

*szalicilsav-klorid*

## D. Karbonsavamidok:

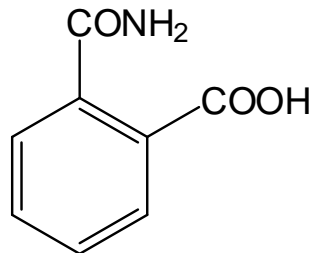


benzoesav-amid  
benzamid  
Benzamide

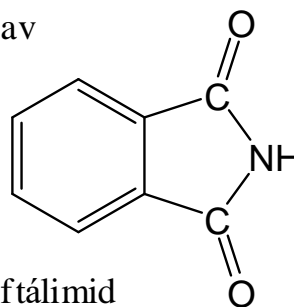


tereftálsav-amid  
tereftálamid  
Terephthalamide

Phtalamic acid

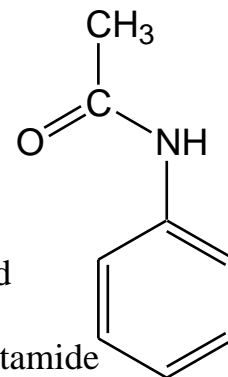


ftálamidsav

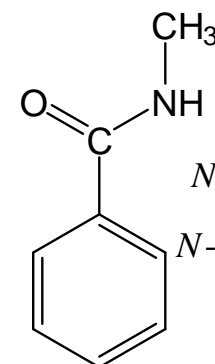


ftálimid

Isoindole-1,3-dione

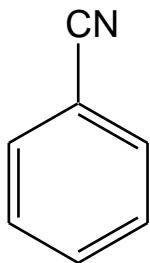


acetanilid  
N-Phenylacetamide

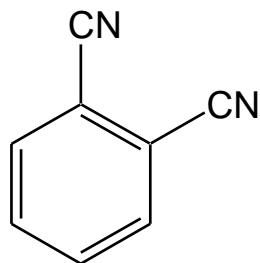


N-metilbenzamid  
N-Methylbenzamide

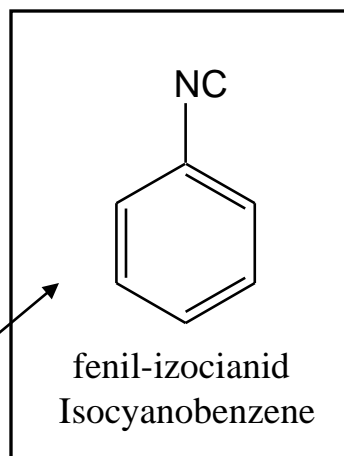
## E. Karbonsavnitrilek:



benzonitril  
Benzonitrile  
benzoesavnitril



ftalonitril  
Phthalonitrile  
ftálsav-dinitril



fenil-izocianid  
Isocyanobenzene

**memo:** ez nem nitril hanem izocianid

# Összefoglaló (fontosabb fogalmak)

- aromás rendszerek és a konjugáció
- aromaticitás (Hückel szabály) és anti-aromaticitás
- kondenzált policiklusos szénhidrogének aromás jellege (naftalin, azulén, indén,..)
- aromaticitás és nem összefüggő  $\pi$  rendszerek
- fenol típusú hidroxivegyületek „extrém” savasságának elektronszerkezeti oka
- A kivonó színkeverés elméletének elektronszerkezeti háttere
- határszerkezetek (pl. diazónium kation, azidovegyületek)
- az aszpirin története, hatásának magyarázata
- aromás ikerionok