

Dr. Zalán Zita

egyetemi adjunktus

SZTE Gyógyszerésztudományi Kar

A szerves vegyületek általános jellemzői

**Bevezetés, csoportosítás, nevezéktan,
funkciós csoportok**



Szerves anyag

A vegyületek két nagy csoportra oszthatók:

- **szervetlen (anorganikus)** vegyületek pl: H_2O , NaCl , CaCO_3
- **szerves (organikus)** vegyületek

Jöns Jacob **Berzelius** (1779-1848)

az élő szervezetből kivont vegyületeket **szerves vegyületeknek** nevezte

1800-as évek eleje:

bizonyos vegyületeket nem lehet laboratóriumi körülmények között előállítani, csak az élő szervezetekben képződhetnek „életerő” (***vis vitalis***) segítségével.

Sokáig azt hitték, hogy ezekre a vegyületekre más természeti törvények vonatkoznak, mint a szervetlen anyagokra.



Organogén elemek



1																	18	
H																	He	
2	Li	Be											13	14	15	16	17	Ne
													B	C	N	O	F	
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
			3	4	5	6	7	8	9	10	11	12						
	K	Ca	Sc	Ti	V	Ch	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	xe
	Cs	Ba	La-Nu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
	Fr	Ra	Ac-Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	UUs	Uuo

Antoine **Lavoisier** (1743-1794)

organogén (szerves anyagot képző) elemek igazolása kísérletekkel

Wöhler munkássága

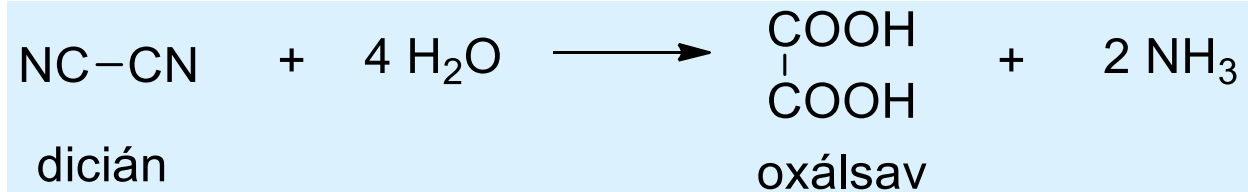


Friedrich **Wöhler**
(1800-1882)

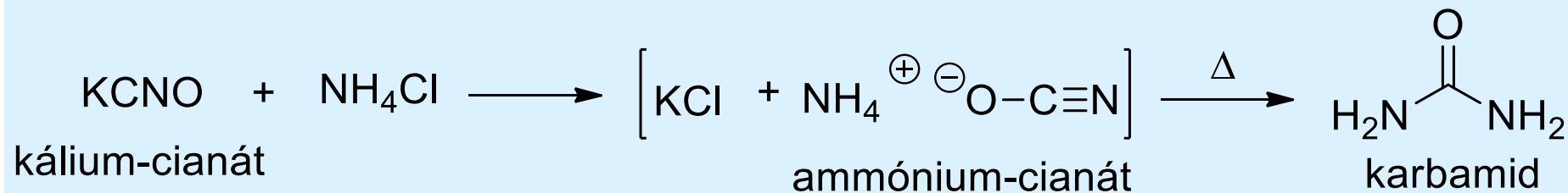
Vis vitalis-elv megdöntése

Először sikerült laboratóriumi körülmények között szervetlen anyagokból szerves anyagokat előállítani.

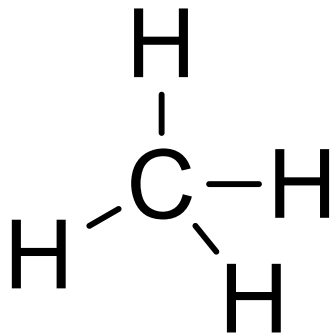
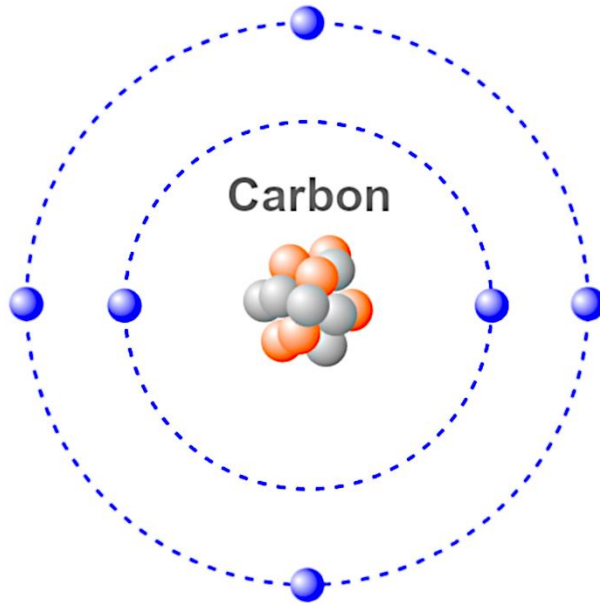
1824. **Oxálsav** előállítása



1828. **Karbamid** előállítása



A szénatom



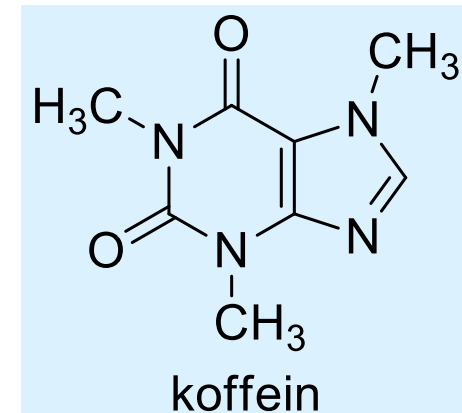
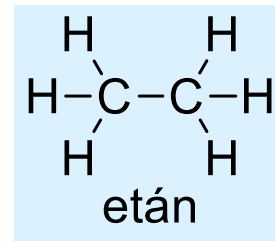
A szénatom:

- Külső elektronhéján **4 elektron** található
- **Négy erős kovalens kötés** kialakítására képes, melyek **tetraéderes** elrendeződésben találhatóak
- **Kis mérete** és viszonylag **nagy elektronegativitása** miatt **hosszú szénláncok** és **többszörös kovalens kötések** kialakítására is képes
- **Korlátlan számban** tudnak kapcsolódni egymáshoz, a létrejövő vegyületek **stabilak**
- Összekapcsolódásukkor **többféle molekulaalkat** jöhet létre, ez nagymértékben megnöveli a vegyületek számát
- Hidrogénnel **szénhidrogéneket** képez, melyek fontos ipari nyersanyagok
- Szénen és hidrogénen kívül más atomokkal is képes kapcsolódni, pl. O, N, P, Cl (**heteroatomok**)

Szerves vegyületek csoportosítása 1.

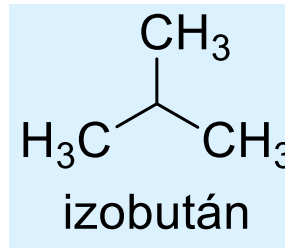
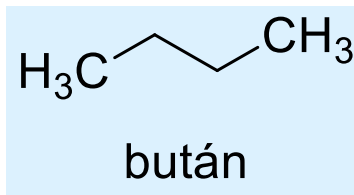
1. Az alkotó atomok szerint:

- **szénhidrogének:** csak C és H atomot tartalmaznak
- **heteroatomot tartalmazó vegyületek,** C és H atomon kívül egyéb (pl. O, N atomokat) is tartalmaznak



2. Szénlánc alakja szerint:

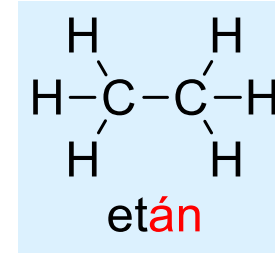
- **nyílt láncú** vegyületek
 - **normál** láncú vegyületek
 - **elágazó** láncú vegyületek
- **gyűrűs** vegyületek



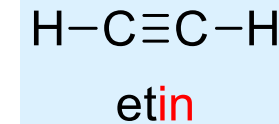
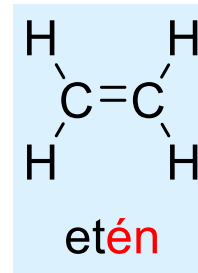
Szerves vegyületek csoportosítása 2.

3. Telítettség (kötések) szerint:

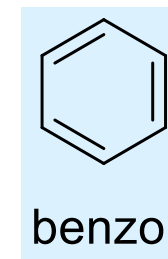
- **telített** vegyületek: a C atomok között egyszeres kötés található



- **telítetlen** vegyületek: legalább egy C-C többszörös kötést tartalmaznak



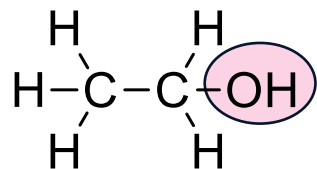
- **aromás** vegyületek: gyűrűs, telítetlen vegyületek



Szerves vegyületek csoportosítása 3.

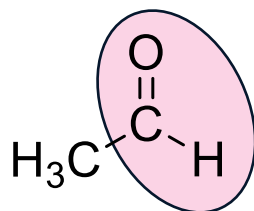
4. Funkciós csoportok szerint:

- **alkoholok**
hidroxilcsoport



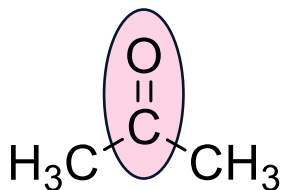
etan**ol**

- **aldehidek**
oxocsoport



etan**al**
(acetaldehyd)

- **ketonok**
oxocsoport



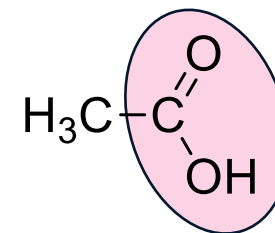
acet**on**

- **éterek**

étercsoport CCOC dimetil-**éter**

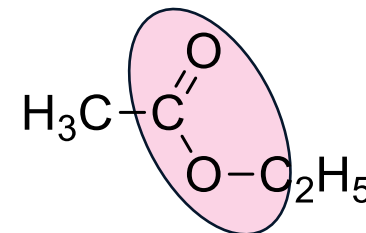
Funkciós csoport: a molekula egy körülhatárolt része, mely a molekulára jellemző tulajdonságokat alapvetően meghatározza.

- **karbonsavak**
karboxilcsoport



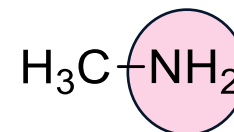
ecet**sav**

- **észterek**
észtercsoport



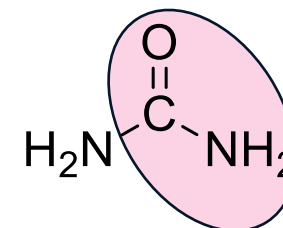
etil-acetát

- **aminok**
aminocsoport



metil-**amin**

- **amidok**
amidcsoport



karb**amid**

Izoméria

2

Képletek 1.

Tapasztalati képlet: ciklohexán – CH_2

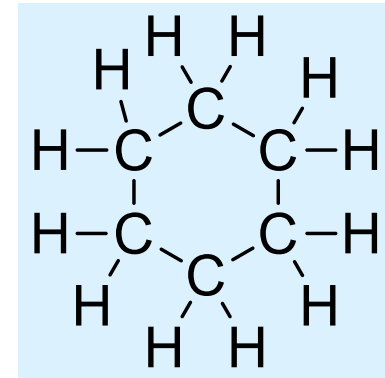
Kifejezi:

- a vegyületet alkotó atomok minőségét
- az alkotóelemek anyagmennyiség-arányát a legkisebb egész számok arányában

Összegképlet vagy molekulaképlet: ciklohexán - C_6H_{12}

Kifejezi:

- a vegyületet alkotó atomok minőségét
- az alkotóelemek anyagmennyiség-arányát
- a molekulában található atomok pontos számát



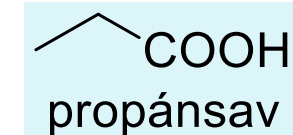
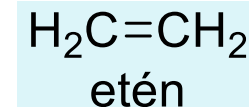
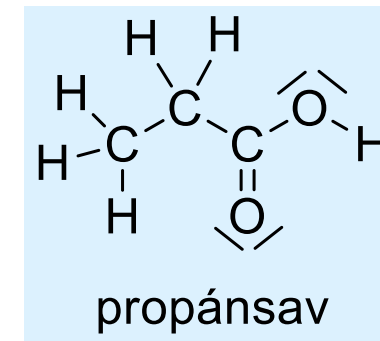
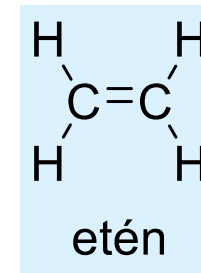
Képletek 2.

Szerkezeti képlet:

A molekula részletes szerkezetét szemlélteti

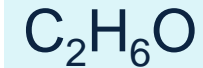
Fajtái:

- 1. Konstitúciós képlet:** feltünteti az atomok kapcsolódási sorrendjét, az összes kovalens kötést és a nem kötő elektronpárokat is
- 2. Atomcsoportos (félkonstitúciós) képlet:** a C-H kötések nem jelöli
- 3. Vonalszerkezeti képlet:** a töréspontokban szénatomok vannak a hidrogénnel együtt; külön jelöljük a funkciós csoportokat és a többszörös kötések

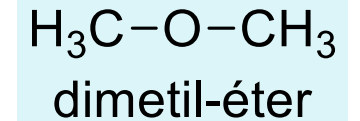
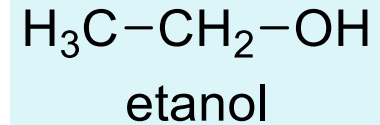


Izoméria – konstitúciós izomerek 1.

Azonos összegképlet – eltérő szerkezeti képlet



Eltérő szerkezeti képletképlet –
eltérő tulajdonság



Izomerek: azonos összegképletű,
de eltérő szerkezetű molekulák.

Konstitúció: az atomok kapcsolódási
sorrendje.

Konstitúciós izomerek: azonos összegképletű molekulák,
melyekben az atomok kapcsolódási sorrendje eltérő.

folyadék	halmazállapot szobahőmérsékleten	gáz
78,4 °C	forráspont	-23,7 °C
0,789 g/cm ³	sűrűség	0,735 g/cm ³

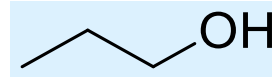
funkciós izomerek

Izoméria – konstitúciós izomerek 2.

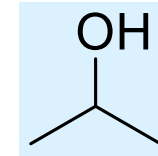
Konstitúciós izoméria egyéb fajtái:

Helyzetizoméria:

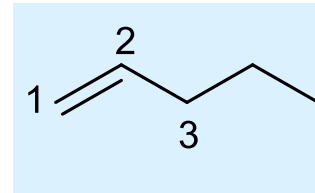
a funkciós csoport vagy kettős kötés helyzetében van különbség



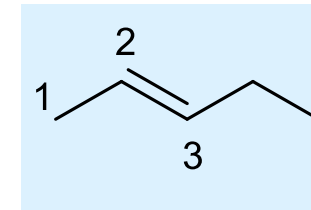
propanol



izopropanol



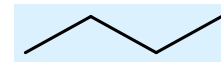
1-pentén



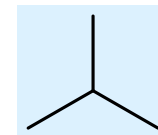
2-pentén

Vázizoméria:

normál láncú vagy elágazó láncú szénváz



normál bután

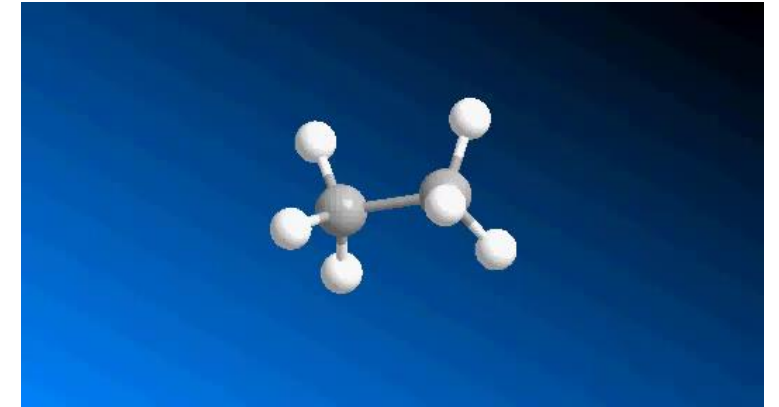


izobután
(2-metil-propán)

Izoméria – sztereoizomerek – konformáció 1.

Sztereoizomerek:

- azonos összegképlet
- azonos konstitúció
- különböző térszerkezet

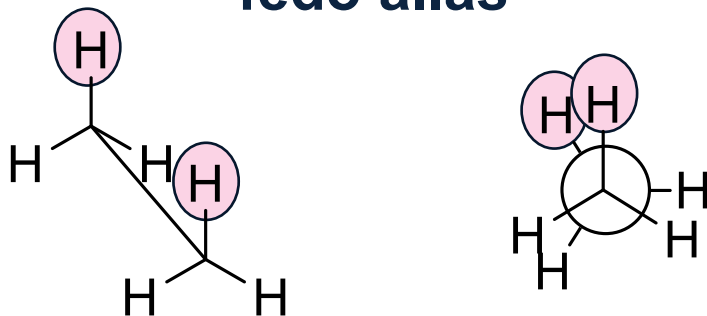


Konformáció:

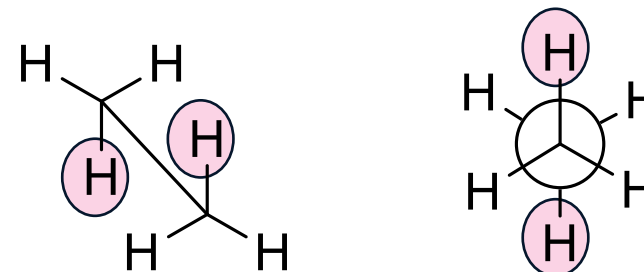
a molekula egymással nem kapcsolódó atomjainak, atomcsoportjainak térbeli elrendeződése

Az egyszeres kötés mentén történő elfordulással létrejövő szerkezeteket **konformereknek** nevezzük.

fedő állás



nyitott állás



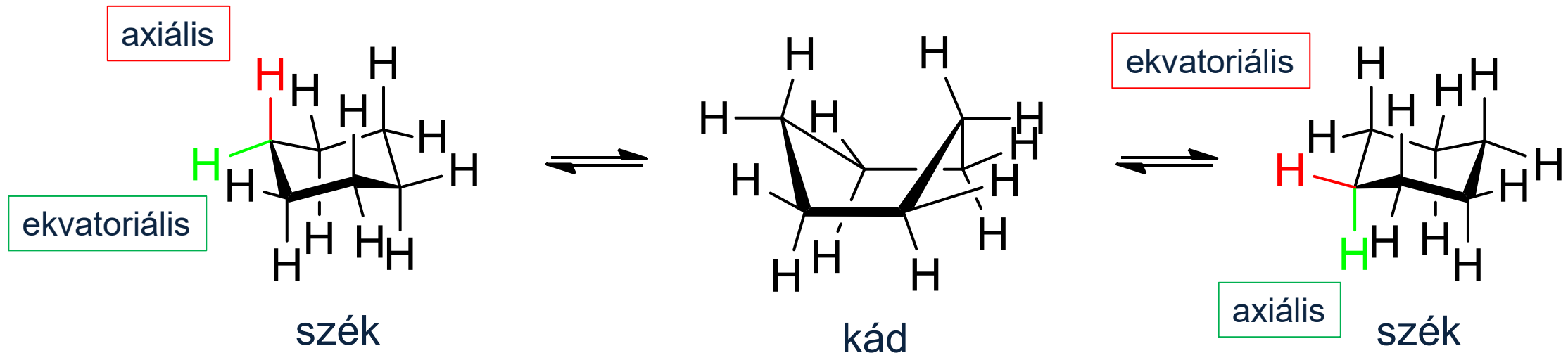
etán

Izoméria – sztereoizomerek – konformáció 2.

Ciklohexán konformerei:

Axiális: a gyűrű síkjára merőleges állású H

Ekvatoriális: a gyűrű síkjával közel párhuzamos állású H

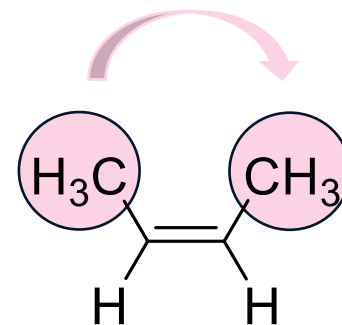


- a gyűrű szénatomjai nem egy síkban helyezkednek el
- minden szénatom körül tetraéderes elrendeződésben helyezkednek el a szomszédos atomok
- minden C-C kötés mentén nyitott állású a konformáció
- a konformerek egymásba alakulhatnak (energetikai különbség)

Geometriai izoméria - Cisz-transz izoméria

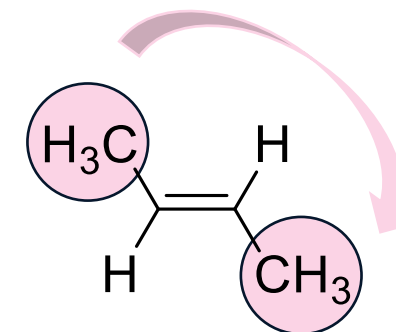
- A molekula két része a kettős kötés mentén nem tud elcsavarodni
- A kettős kötésű szénatompárhoz kapcsolódó atomok, atomcsoportok helyzete rögzített
- A két különböző izomer eltérő fizikai-kémiai tulajdonságokkal rendelkezik

A nagyobb csoportok közel vannak: *cisz* izomer
A nagyobb csoportok távol vannak: *transz* izomer



cisz-but-2-én

Z-but-2-én

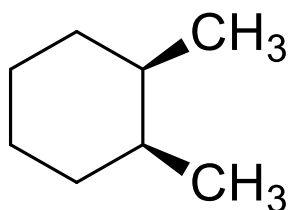


transz-but-2-én

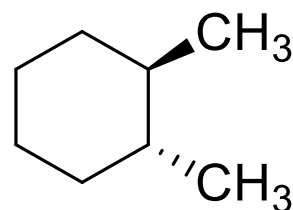
E-but-2-én

Z (zusammen = együtt)

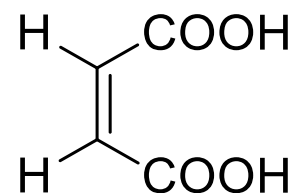
E (entgegen = ellen, ellenére)



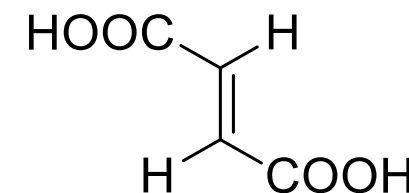
cisz-1,2-dimetil-
ciklohexán



transz-1,2-dimetil-
ciklohexán



maleinsav



fumársav

Konfiguráció – optikai izoméria

Konfiguráció: egy adott szénatomhoz közvetlenül kapcsolódó atomok, ill. atomcsoportok térbeli elrendeződése.

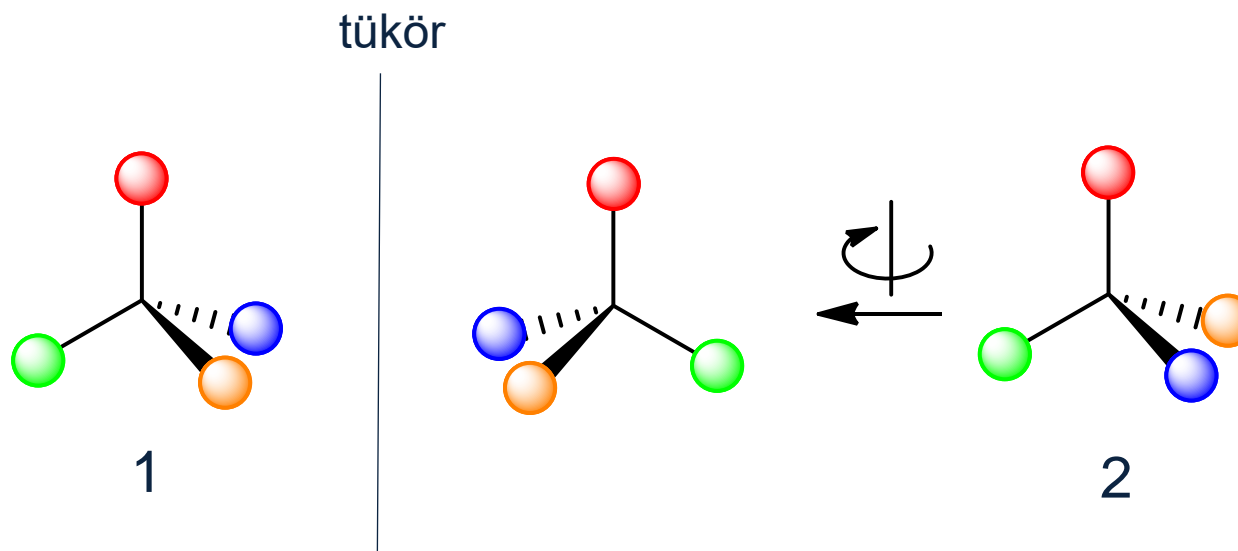
Ha egy szénatomhoz négy különböző atom vagy atomcsoport kapcsolódik, akkor kétféle térszerkezetű molekula lehetséges, amelyek egymás tükörképei, de egymással fedésbe nem hozhatók.

Királis: nem azonos a tükörképével

Akirális: azonos a tükörképével

Kiralitáscentrum: az az atom, amelyhez négy különböző ligandum kapcsolódik.

Enantiomerek: olyan molekulák, melyek egymás tükörképei, de egymással nem azonosak.

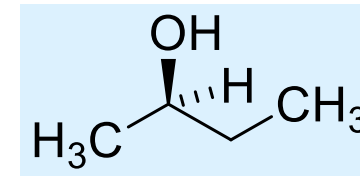


Enantiomerek

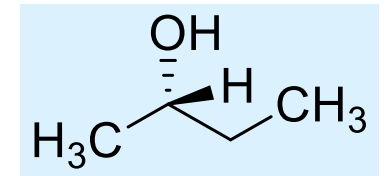
Királis vegyületek, azaz van legalább egy kiralitáscentrumuk.
Az enantiomerpárok fizikai és kémiai tulajdonságai egyezők.

Különböznek:

- a síkban polarizált fényt ellentétes irányba forgatják
- eltérő biológiai hatásuk lehet

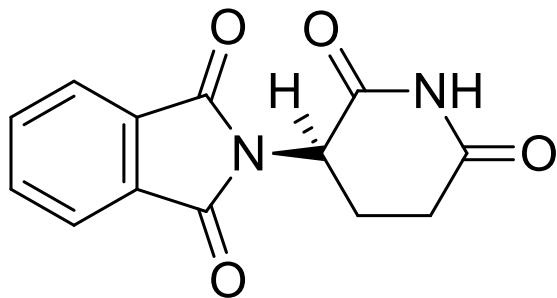


(-)-2-butanol

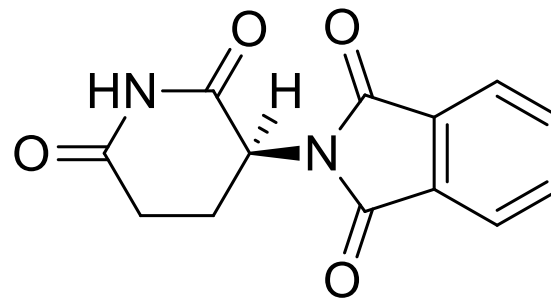


(+)-2-butanol

A polarizált fény síkját elforgató vegyületek: **optikailag aktív vegyületek.**



(+)-talidomid
nyugtató hatású



(-)-talidomid
magzatkárosító

1957-1961 között
Contergan[®] néven volt
forgalomban.
Végtaghiányos babák.
Csontvelőrák és lepra
kezelésére ma is
használják.

Diasztereomerek

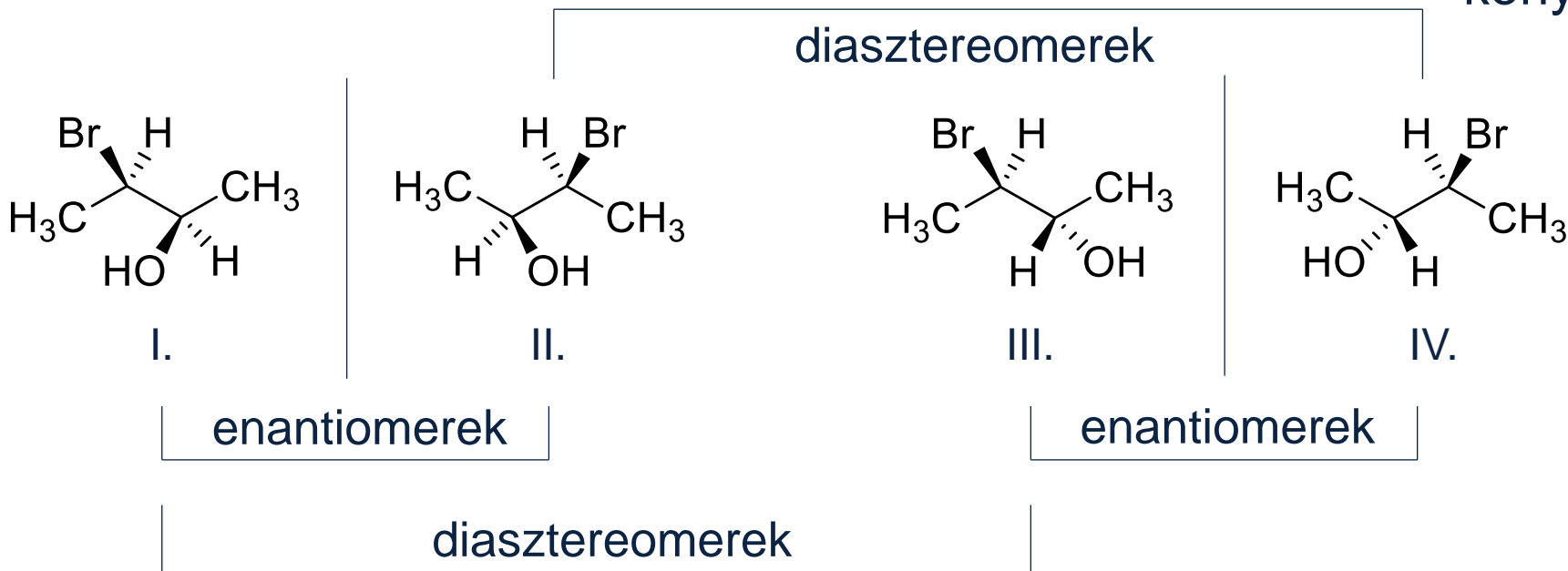
Több kiralitáscentrum \longrightarrow Több lehetséges izomer

1 kiralitáscentrum : 2 izomer

2 kiralitáscentrum: 4 izomer

n kiralitáscentrum: 2^n izomer

3-bróm-2-butanol lehetséges izomerei:



Diasztereomerek:

- nem enantiomerpárok
- nem azonosak
- egyik kiralitáscentrumuk körül azonos, másik körül eltérő a ligandumok elrendeződése
- fizikai tulajdonságaik (pl. oldékonyság) eltérőek lehetnek

További diasztereomerpárok: I. és IV.; II. és III.

Összegzés

