

7.

seminář LC

© Biochemický ústav LF MU (V.P.) 2011

„HLAVNÍ ŘETĚZ“

(acyklická sloučenina)

nasycená

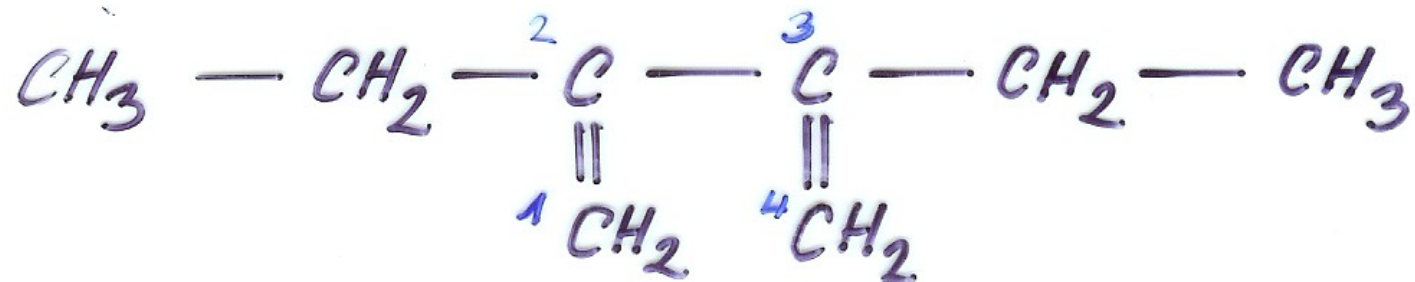
„největší počet uhlíkových atomů“

nenasycená

„největší počet násobných vazeb“
(= mají přednost před \equiv)

při stejné délce a stejném stupni nasycení

→ „hlavní řetězec je ten, který má největší počet substituentů“

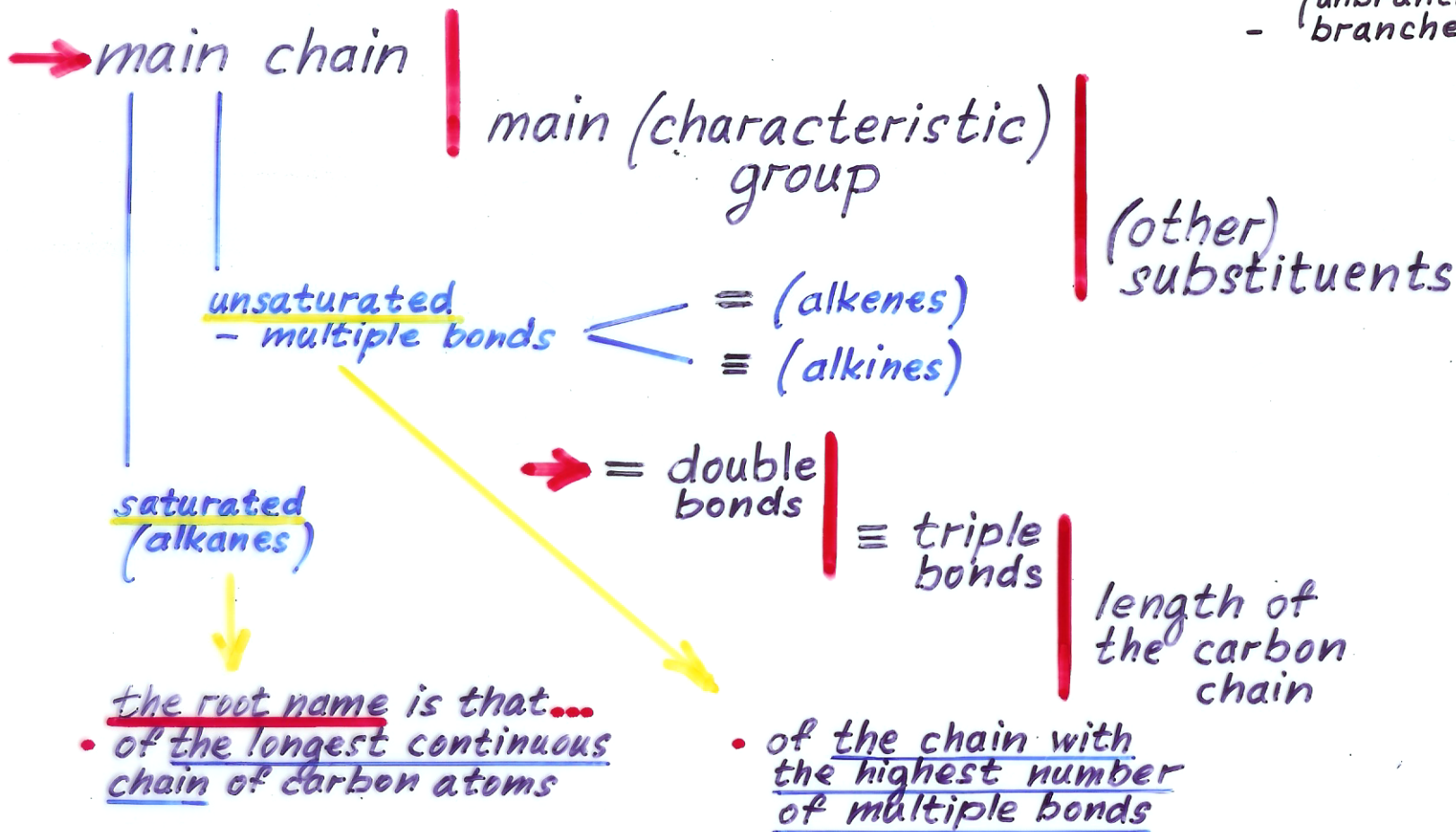


2,3-diethyl-1,3-butadien

ACYCLIC COMPOUNDS (HYDROCARBONS)

NAMING PRIORITIES:

carbon chain
- continuous
 (unbranched)
- branched

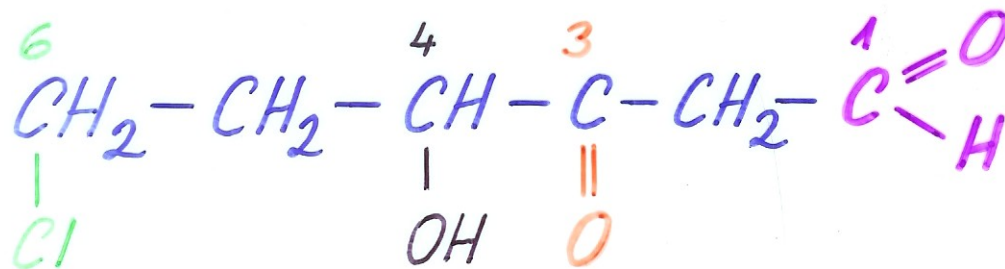


SUBSTITUENTS

↳ groups attached to the main chain

"the lowest possible numbers"

→ substituents in alphabetical order, regardless of position number



4-hydroxy-6-chlor-3-oxo-hexanal

↓
hlavní skupina

1. Oniové kationty
2. Karboxylové kyseliny, sulfonové kyseliny
3. Anhydridy kyselin
4. Estery
5. Halogenidy kyselin
6. Amidy
7. Nitrily
8. Aldehydy
9. Ketony
10. Alkoholy, fenoly, thioly
11. Hydroperoxydy, thiohydroperoxydy
12. Aminy
13. Etery, sulfidy
14. Peroxydy, disulfidy

Typ sloučeniny	Skupina	Předpona	Přípona
Oniový kation	- ^a	-	-onium
Karboxylové kyseliny	-COOH	karboxy-	-(karboxyl)ová kyselina
Sulfonové kyseliny	-SO ₃ H	sulfo-	-sulfonová kyselina
Soli karbox. kyselin	-COO ⁻	-	-(o)át, -karboxylát
Estery	-COOR	R-oxykarbonyl-	R-(o)át, R-karboxylát
Amidy	-CONH ₂	karbamoyl-	-karboxamid
Nitrily	-C≡N	kyan-	-(karbo)nitril
Aldehydy	-CH=O	formyl-	-al, -karbaldehyd
Ketony	>C=O	oxo-	-on
Alkoholy, fenoly	-OH	hydroxy-	-ol
Thioly	-SH	sulfanyl-	-thiol
Aminy	-NH ₂	amino-	-amin
Etery	-OR	R-oxy-	-ether
Sulfidy ^b	-SR	R-sulfanyl-	-
Halogenderiváty ^b	-F, -Cl, -Br, -I	fluor-, chlor-, brom-, jod-	-
Nitroderiváty ^b	-NO ₂	nitro-	-

^a Např. RNH₃⁺ alkylamonium, R₄N⁺ tetraalkylamonium, ROH₂⁺ alkyloxonium, R₃S⁺ trialkylsulfonium.

^b Výhradně jako předpony.

Předpony a zakončení pro vyjádření přítomnosti charakteristických skupin

Skupina	Vzorec ^{a)}	Předpona	Zakončení
Kationty / <u>cations</u>	–	-onio-	-onium
Karboxylové kyseliny / <u>carboxylic acids</u>	–COOH	č.n. karboxy- a.n. carboxy-	č.n. -karboxylová a.n. -carboxylic acid
	–(C)OOH	–	č.n. -ová kyselina a.n. -oic acid
Sulfonové kyseliny / <u>sulfonic acids</u>	–SO ₂ OH	sulfo-	č.n. -sulfonová kyselina a.n. sulfonic acid
Soli / <u>salts</u>	–COOM ^{b)}	č.n. karboxylato- a.n. carboxylato-	č.n. -karboxylat a.n. -carboxylate
	–(C)OOM ^{b)}	–	č.n. -oat, -at, -an ^{c)} a.n. -oate, -ate
Estery / <u>esters</u>	–COOR ^{d)}	č.n. R-oxykarbonyl- a.n. R-oxycarbonyl-	č.n. -karboxylat a.n. -carboxylate
	–(C)OOR ^{d)}	–	č.n. -oat, -at, -an ^{e)} a.n. -oate, -ate
Amidy / <u>amides</u>	–CONH ₂	č.n. karbamoyl- a.n. carbamoyl-	č.n. -karboxamid a.n. -carboxamide
	–(C)ONH ₂	–	č.n. -amid a.n. -amide
Nitrily / <u>nitriles</u>	–C≡N	č.n. kyan- a.n. cyano-	č.n. -karbonitril a.n. -carbonitrile
	–(C)≡N	–	č.n. -nitril a.n. -nitrile
Aldehydy / <u>aldehydes</u>	–CHO	formyl-	č.n. -karbaldehyd a.n. -carbaldehyde
	–(C)HO	oxo-	-al
Ketony / <u>ketones</u>	$\begin{matrix} \diagup \\ \text{C} \\ \diagdown \end{matrix} \text{=O}$	oxo-	č.n. -on a.n. -one
Alkoholy a fenoly / <u>alcohols, phenols</u>	–OH	hydroxy-	-ol
Thioly / <u>thiols</u>	–SH	č.n. merkapto- a.n. mercapto-	-thiol

^{a)} Atom uhlíku v závorce je zahrnut do názvu základního skeletu :

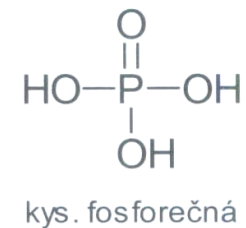
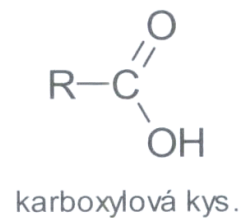
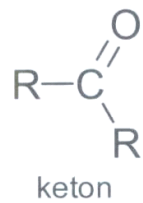
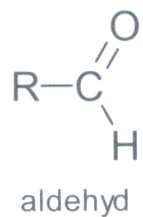
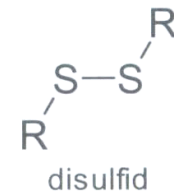
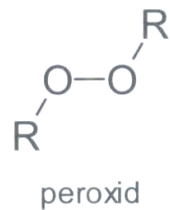
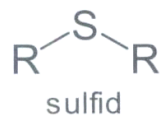
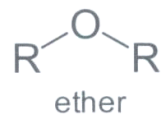
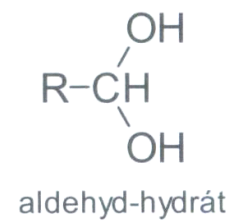
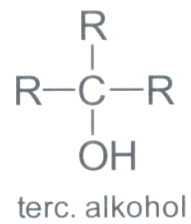
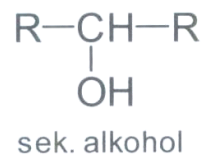
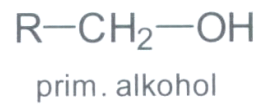
^{b)} M znamená atom kovu ;

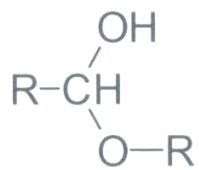
^{c)} Zakončení -at je užíváno v souvislosti s triviálními názvy kyselin, zakončení -an je užíváno v anorganickém názvosloví a v souvislosti s triviálními názvy kyselin českého původu v odborné literatuře (např. octan) ;

^{d)} R znamená uhlovodíkový zbytek esterifikovaného hydroxyderivátu.

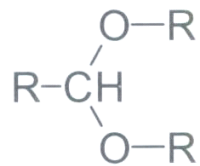
Při určování názvu organické sloučeniny postupujeme podle těchto obecných kroků:

- určí se základní struktura, hlavní řetězec má nejvíc charakteristických skupin a násobných vazeb
- určí se, která z charakteristických skupin bude jako hlavní skupina vyjádřena příponou
- pojmenuje se základní struktura
- pojmenuje se hlavní skupina příponou
- určí se ostatní substituenty a pojmenují se předponami
- přiřadí se lokanty tak, aby hlavní skupina měla nejmenší lokant
- sestaví se jednotlivé části, předpony jsou řazeny podle abecedy, nerozhoduje první písmeno násobící předpony

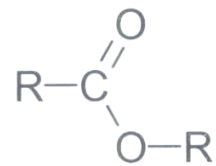




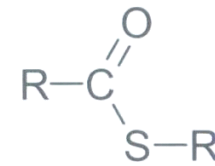
poloacetal



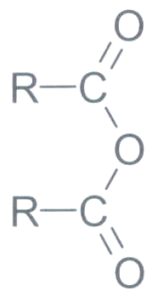
acetal



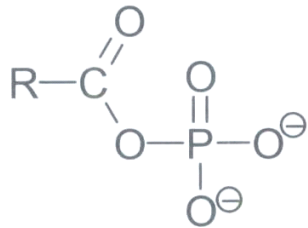
ester



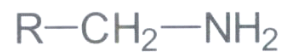
thioester



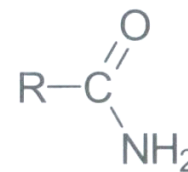
anhydrid



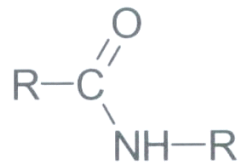
acylfosfát



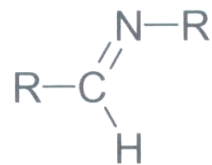
amin



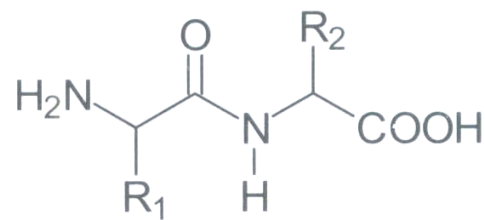
amid



N-alkylamid



aldimin

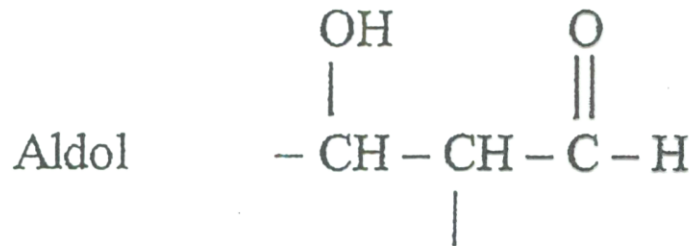
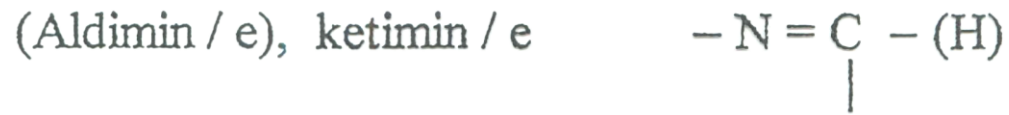


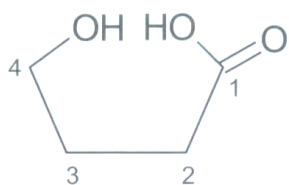
dipeptid

	Kyselina	Aldehyd	Thiol	Alkohol
Alkohol	ester $\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{O}-\text{R}$	poloacetal ^a $\text{R}-\overset{\text{OH}}{\underset{\text{O}-\text{R}}{\text{C}}}$	-	ether $\text{R}-\text{O}-\text{R}$
Thiol	thioester $\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{S}-\text{R}$	thiopoloacetal $\text{R}-\overset{\text{OH}}{\underset{\text{S}-\text{R}}{\text{C}}}$	sulfid $\text{R}-\text{S}-\text{R}$	
Amin	amid ^b $\text{R}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{NH}-\text{R}$	aldimin ^c $\text{R}-\overset{\text{N}-\text{R}}{\underset{\text{H}}{\text{C}}}$		
Aldehyd	-	aldol ^d $\begin{array}{ccccccc} & & & \text{O} & & & \\ & & & \parallel & & & \\ \text{CH}_2 & - & \text{CH} & - & \text{CH} & - & \text{C} \\ & & & & & & \\ \text{R} & & \text{OH} & & \text{R} & & \text{H} \end{array}$		
Kyselina	anhydrid $\begin{array}{c} \text{O} & & \text{O} \\ \parallel & & \parallel \\ \text{C} & - \text{O} - & \text{C} \\ & & \\ \text{R} & & \text{R} \end{array}$	^a Reakci poloacetalu s alkoholem vzniká acetal R-CH(OR) ₂ . ^b Produkt kondenzační reakce (uvolní se voda). Při acidobazické reakci dusík přijme H ⁺ od kyseliny a vznikne alkylamonná sůl R-NH ₃ ⁺ R-COO ⁻ . ^c Také zvaný Schiffova báze. ^d Vzniká pouze v silně alkalickém prostředí.		

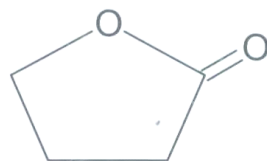
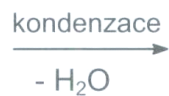
Vzájemné reakce funkčních skupin
Mutual reactions of functional groups

	KYSELINA ACID	ALDEHYD / E KETON / E	AMIN / E	ALKOHOL ALCOHOL FENOL PHENOL
ALKOHOL ALCOHOL - OH FENOL PHENOL	ester	poloacetal hemiacetal	-	ether
AMIN / E - NH ₂	amid / e	aldimin / e	-	
(ALDEHYD / E) KETON / E (H) - C = O	-	aldol		
KYSELINA ACID - COOH	anhydrid / e			



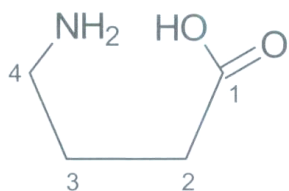


4-hydroxybutanová kys.

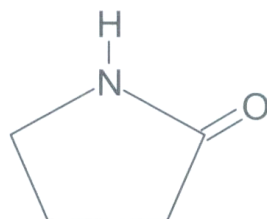
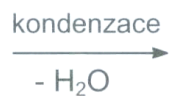


butano-4-lakton

LAKTON
cyklický ester

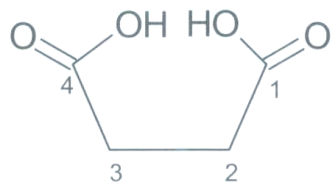


4-aminobutanová kys.

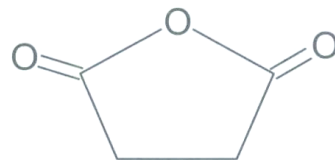
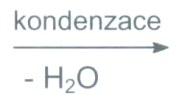


butano-4-laktam

LAKTAM
cyklický amid

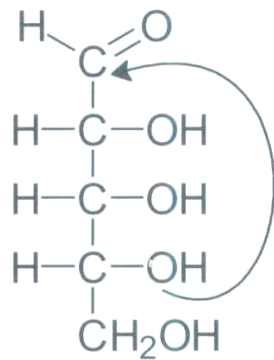


jantarová kys.

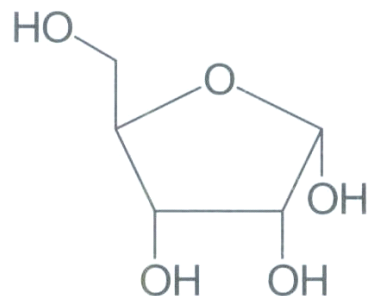


sukcinanhydrid

cyklický anhydrid

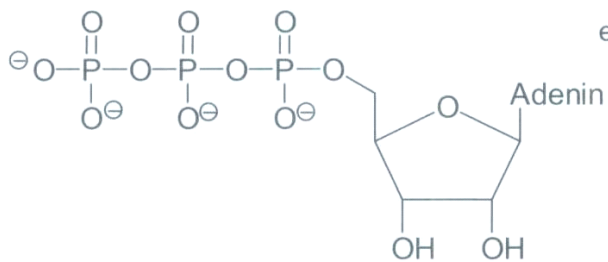


α-D-ribosa



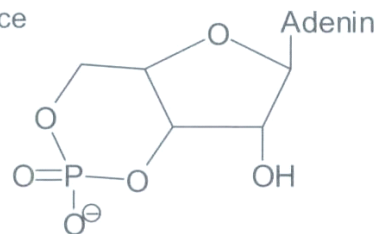
α-D-ribofuranosa

FURANOSA
cyklický poloacetal



ATP

enzymová kondenzace
(adenylátcyklasa)



cAMP

cyklický diester
kys. fosforečné

Substrát	Produkt	Obecné schéma dehydrogenace
----------	---------	-----------------------------

alkan

alken



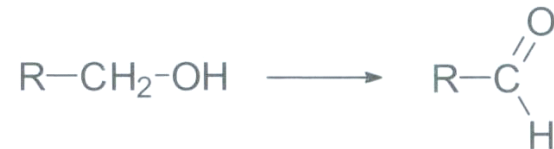
alkanoyl-CoA

2,3-alkenoyl-CoA



prim. alkohol

aldehyd



sek. alkohol

keton



endiol

diketon



aldehyd-hydrát

karboxylová kys.



poloacetal (cykl.) ester (lakton)



hydroxykyselina oxokyselina



p-difenol

p-chinon



amin

imin



aminokyselina

iminokyselina



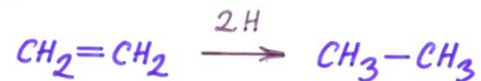
thiol

disulfid

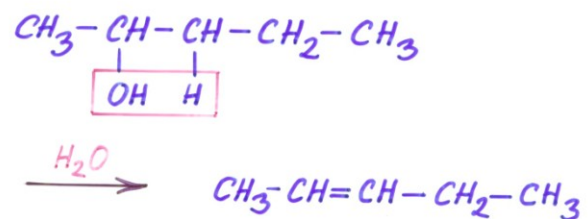


Základní typy reakcí org. sloučenin:

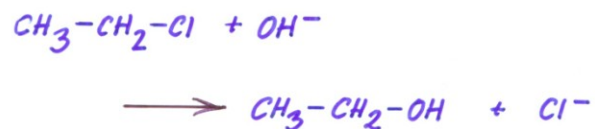
1 ADICE



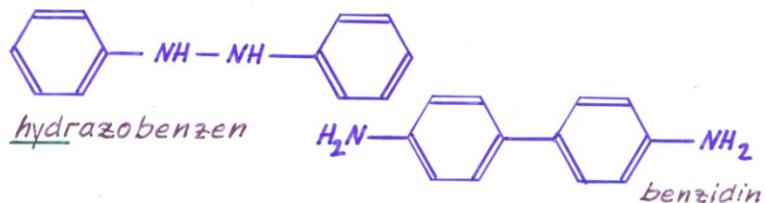
2 ELIMINACE



3 SUBSTITUCE



4 MOLEKULOVÉ PŘESMYKY



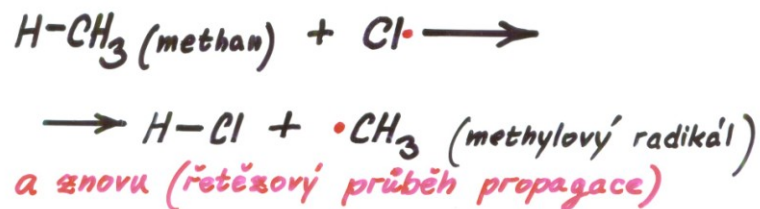
Radikálové substituce:

- charakteristické pro sloučeniny s nepolárními kovalentními vazbami (např.: alkany)
- v jejím průběhu: homolýza vazeb C-H neb C-C

1) iniciace (vznik radikálů):



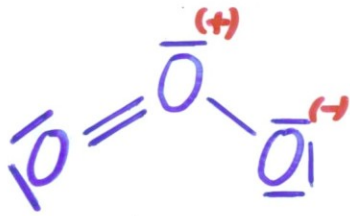
2) propagace:



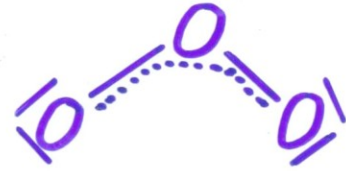
3) terminace (vymizení radikálů):



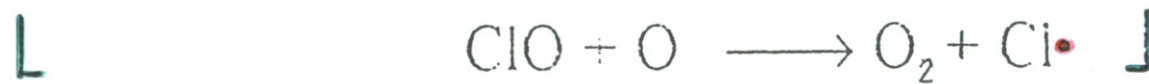
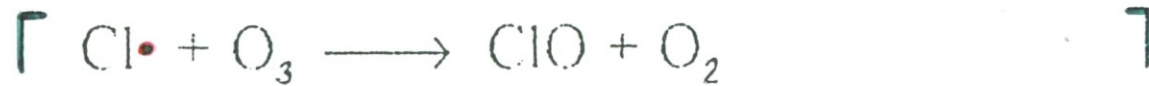
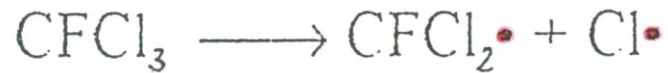
(obdobně dál: \longrightarrow di-, tri- až tetra chlormethan)



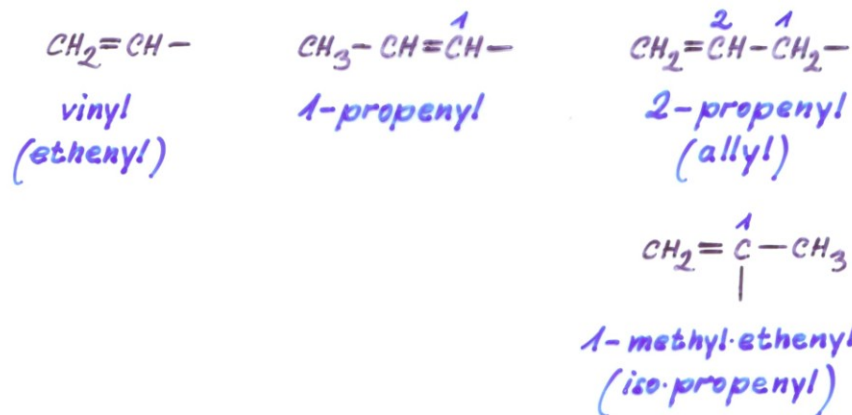
ozone



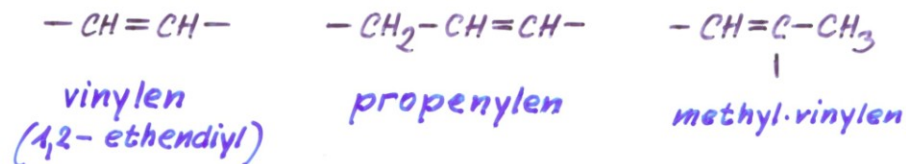
freony, CFC, chlorofluorocarbons



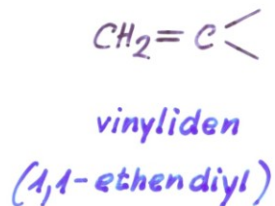
JEDNOVAZNÉ ALKENYLY



DVOJVAZNÉ ALKENYLENY (ALKENDIYLY)



ALKENYLIDENY



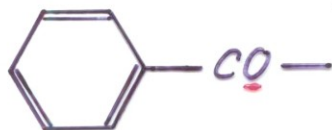
$-SH$	(merkaptó- sulhydro-)	thiol (alkyl-sulfid)
$-S-$	thio-ether	sulfid (di-alkyl-sulfid)
$-S-S-$	di-sulfid	
$-\overset{\ominus}{S}^{\oplus}$ ↓	sulfonium	

← a, e, i, o, u

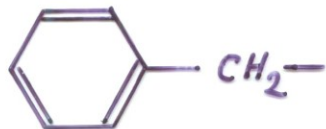
$-SO_3H$	sulfonová kys.	sulfo-
$-SO_2H$	sulfinová kys.	sulfino-
$-SOH$	sulfenová kys.	sulfeno-

$>SO_2$	-sulfon
$>SO$	-sulfoxid

dithioničitan sodný	$Na_2S_2O_4$
thiosíran	$Na_2S_2O_3$
tetrathionan	$Na_2S_4O_6$



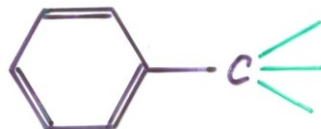
benzoyl-



benzyl-



benzyliden



benzylidin



fenyl-



tolyl-

(různé polohy
o-, m-, p-

