2. ORGANICKÉ ZLÚČENINY OBSAHUJÚCE O, X, S

1

RNDr. Mária VILKOVÁ, PhD.

ORGANICKÉ ZLÚČENINY OBSAHUJÚCE O, X, S



zlúčeniny obsahujúce atóm C viazaný jednoduchou väzbou na heteroatóm - O, X, S

ALKOHOLY a ÉTERY

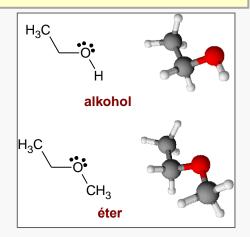
- alkoholy hydroxylová skupina (OH) viazaná na tetraedrický atóm C
- étery –dve alkylové skupiny viazané na atóm O
- atóm O má dva voľné elektrónové páry

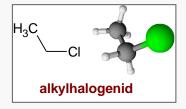
ALKYLHALOGENIDY

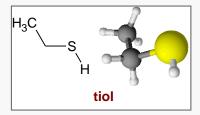
- atóm halogénu viazaný na tetraedrický atóm C jednoduchou väzbou
- atóm X má tri voľné elektrónové páry

TIOLY

- obsahujú tiolovú skupinu (SH) viazanú na tetraedrický atóm C
- atóm S má dva voľné elektrónové páry



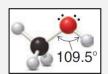


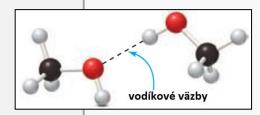




ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI ALKOHOLOV

- –OH skupina viazaná na sp³ hybridizovaný atóm C
- na atóme O sú dva voľné elektrónové páry na O
- molekula má lomený tvar s väzbovým uhlom 109,5°

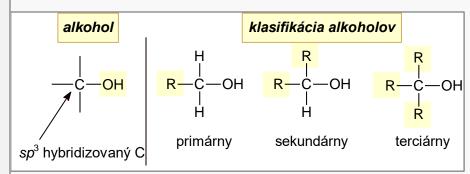




- atóm O je elektronegatívnejší ako atómy C a H → väzby C-O a O-H sú polárne
- medzi molekulami vznikajú vodíkové väzby

KLASIFIKÁCIA ALKOHOLOV

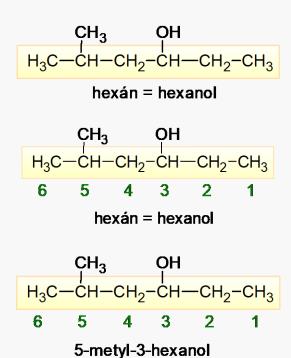
- na základe počtu alkylových skupín viazaných na atóm C, na ktorý je naviazaná –OH skupina sa delia na:
- 1. primárne
- 2. sekundárne
- 3. terciárne





NÁZVOSLOVIE ALKOHOLOV

- od názvu základného uhľovodíka s tým istým počtom atómov C → nahradíme koncovku –án koncovkou -ol
- nájdeme najdlhší reťazec obsahujúci atóm C, na ktorý je viazaná OH skupina
- 2. číslovanie atómov C základného reťazca (atóm C, na ktorý je naviazaná OH skupina = najnižšie číslo)
- názvy substituentov + násobiace predpony





REAKCIE ALKOHOLOV

1. DEHYDRATÁCIA

- odštiepenie vody → eliminačná reakcia
- pôsobením silných kyselín
- elimináciou malej molekuly dochádza k vzniku novej násobnej väzby
- ak molekula obsahuje dva alebo tri rôzne β C → dehydratácia je regioselektívna → vzniká produkt podľa Zajcevovho pravidla

H OH nová π väzba alkénu eliminácia H-OH

ZAJCEVOVO PRAVIDLO viac substituovaný alkén je majoritným produktom máme 3 βC, z ktorých sa môže odštiepiť H

β1

CH₃

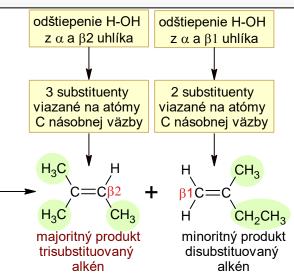
β2

H₃C — C — CH₂CH₃

OH

2-metyl-2-butanol

OH skupina sa
odštiepi z αC



Základy organickej chémie



2. OXIDÁCIA

- nárast počtu C-O väzieb alebo pokles počtu C-H väzieb
- u alkoholov ide o náhradu C-H väzby na atóme C nesúcom OH skupinu za väzbu C-O → z alkoholov vznikajú karbonylové zlúčeniny
- primárne alkoholy sú oxidované na aldehydy (RCHO), ktoré sú ďalej oxidované na karboxylové kyseliny (RCOOH)
- sekundárne alkoholy sú oxidované na ketóny (R₂CO)



ETANOL – NAJROZŠÍRENEJŠIA DROGA

- po konzumácii etanolu dochádza k rýchlej absorpcii v žalúdku a tenkom čreve → následne sa transportuje krvou k iným orgánom
- etanol je metabolizovaný v pečeni oxidáciou za prítomnosti enzýmov (dehydrogenáza)

- po konzumácii veľkého množstva etanolu dochádza k hromadeniu toxického acetaldehydu, ktorý spôsobuje "stav po opici"
- Antabus liečba závislosti od alkoholu, inhibuje oxidáciu acetaldehydu na kyselinu octovú, čím navodzuje nepretržite stav po opici

METANOL

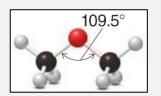
- pre ľudský organizmus toxický
- je oxidovaný na formaldehyd a následne na kyselinu mravčiu – oba metabolity sú pre organizmus extrémne toxické
- enzýmy majú vyššiu afinitu k etanolu ako ku metanolu → otrava metanolom sa lieči etanolom

ÉTERY



ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI ÉTEROV

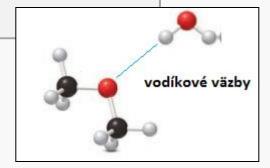
- obsahujú atóm O, na ktorý sú viazané dve alkylové skupiny
- na atóme O sú dva voľné elektrónové páry
- molekula má lomený tvar s väzbovým uhlom 109,5°



- atóm O je elektronegatívnejší ako atómy C a H → väzby C-O a O-H sú polárne
- medzi molekulami vznikajú vodíkové väzby

NÁZVOSLOVIE ÉTEROV

 pomenujeme alkylové skupiny podľa počtu atómov C v reťazci + slovo éter:



$$H_3C$$
— O — CH_2 - CH_3

etylmetyléter

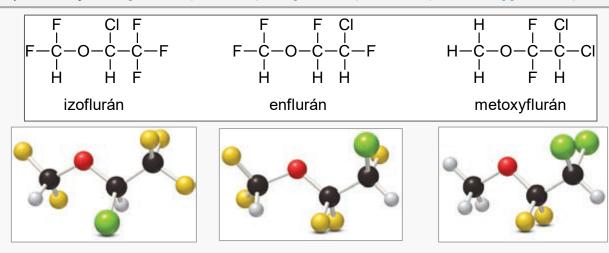
dietyléter

ÉTERY



ÉTERY AKO ANESTETIKÁ

- dietyléter
 - o využívaný v 19. storočí ako anestetikum
 - o negatíva: vysoko horľavý a spôsobuje nevoľnosť
- v súčasnosti sa používajú: izoflurán (Forane), enflurán (Ethrane), metoxyflurán (Penthrane)

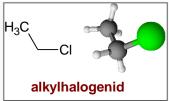


ALKYLHALOGENIDY



ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI ALKYLHALOGENIDOV

- obsahujú atóm X viazaný na sp³ hybridizovaný atóm C
- atóm X je elektronegatívnejší ako atómy C a H → väzby C-X sú polárne

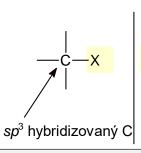




KLASIFIKÁCIA ALKYLHALOGENIDOV

- na základe počtu alkylových skupín viazaných na atóm C,
 na ktorý je naviazaný atóm X sa delia na:
 - 1. primárne
 - 2. sekundárne
 - 3. terciárne

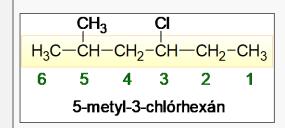
alkylhalogenid



klasifikácia alkylhalogenidov

NÁZVOSLOVIE ALKYLHALOGENIDOV

- nájdeme najdlhší reťazec obsahujúci atóm C, na ktorý je viazaný atóm X
- číslovanie atómov C základného reťazca → atóm C, na ktorý je naviazaný X = najnižšie číslo
- názvy substituentov + násobiace predpony

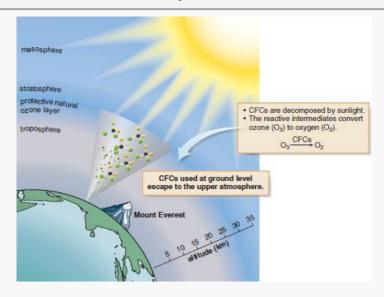


ALKYLHALOGENIDY



ALKYLHALOGENIDY A OZÓNOVÁ VRSTVA

- hoci niektoré halogénované uhľovodíky majú veľký význam → mnoho z nich má nepriaznivý dopad na životné prostredie
- freóny (CF_xCl_{4-x}) inertné, netoxické
 - o využívajú sa ako chladiace zmesi, rozpúšťadlá, súčasť pohonných hmôt
 - o unikajú do atmosféry, kde sa rozkladajú vplyvom slnečného žiarenia za vzniku vysoko reaktívnych intermediátov a tieto narušujú ozónovú vrstvu

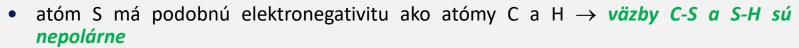


TIOLY



ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI TIOLOV

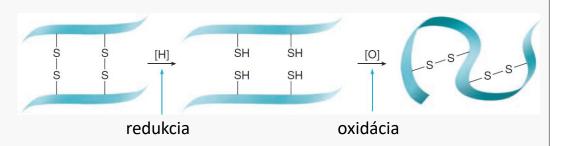
- obsahujú SH skupinu viazanú na sp³ hybridizovaný atóm C
- atóm S má dva voľné elektrónové páry
- molekula má lomený tvar s väzbovým uhlom 109,5°

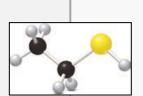


medzi molekulami nevznikajú vodíkové väzby

BIOLOGICKY VÝZNAMNÉ TIOLY

- oxidácie a redukcie tiolov → určujú tvar proteínov
- napr. α-keratín proteín nachádzajúci sa vo vlasoch, obsahuje mnoho disulfidických väzieb



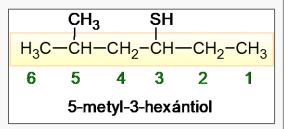


TIOLY



NÁZVOSLOVIE TIOLOV

- 1. najdlhší reťazec musí obsahovať atóm C, na ktorý je viazaná SH skupina
- 2. číslovanie atómov C základného reťazca \rightarrow atóm C, na ktorý je naviazaná SH skupina = najnižšie číslo
- 3. názvy substituentov + násobiace predpony



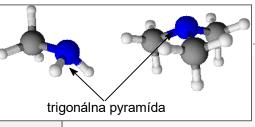
AMÍNY A NEUROTRANSMITÉRY

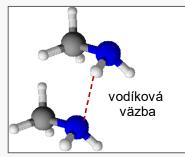
14



ŠTRUKTÚRA A VLASTNOSTI AMÍNOV

- amíny sú organické dusíkaté zlúčeniny
- na atóm N sú naviazané tri skupiny a voľný elektrónový pár
- molekula má tvar trigonálnej pyramídy s väzbovými uhlami 109,5°
- atóm N je elektronegatívnejší ako atómy C a H → väzby C-N a N-H sú polárne
- medzi molekulami vznikajú vodíkové väzby
- atóm N má voľný elektrónový pár → môže vytvoriť 4. väzbu → nesie kladný náboj → takéto deriváty sa nazývajú kvartérne amóniové soli





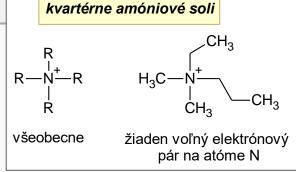
KLASIFIKÁCIA AMÍNOV

- na základe počtu alkylových skupín viazaných na atóm
 N sa delia na:
- 1. primárne
- 2. sekundárne
- 3. terciárne

R—N—H R—N—H R—N—R H R R primárny sekundárny terciárny

HETEROCYKLY

atóm N môže byť súčasťou kruhu \rightarrow *heterocykly*







NÁZVOSLOVIE AMÍNOV

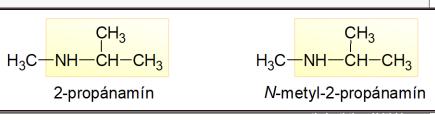
- 1. PRIMÁRNE AMÍNY
 - o názov základného uhľovodíka podľa počtu atómov C → koncovku −án nahradíme koncovkou −yl + pridáme slovko amín

H₃C—NH₂
metán - metylamín

- 2. NÁZVOSLOVIE AMÍNOV SEKUNDÁRNE AMÍNY S IDENTICKÝMI ALKYLOVÝMI SKUPINAMI
 - od názvu základného uhľovodíka s tým istým počtom atómov C koncovku –án nahradíme koncovkou –yl + pridáme slovko amín a násobiacu predponu di-, tri-

- 3. NÁZVOSLOVIE AMÍNOV SEKUNDÁRNE A TERCIÁRNE AMÍNY S RÔZNYMI ALKYLOVÝMI SKUPINAMI
 - o pomenujte najdlhší reťazec, ktorý je viazaný na atóm N
 - pomenujte substituent(y), zoraďte ich v abecednom poradí a pridajte prefix N-

$$H_3C$$
 $-NH$ $-CH_2$ $-CH_3$ $-NH$ $-CH_2$ $-CH_3$ $-NH$ $-CH_2$ $-CH_3$ propánamín N -metyl-propánamín



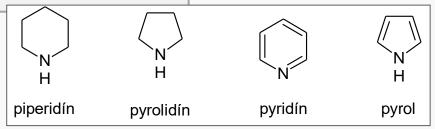


AROMATICKÉ AMÍNY

majú atóm N viazaný na benzénové jadro → deriváty anilínu

HETEROCYKLICKÉ AMÍNY

- heterocyklické deriváty obsahujú v kruhu heteroatóm
- heterocyklické amíny obsahujú v kruhu atóm N





KOFEÍN

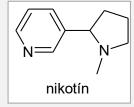
- výskyt: káva a čaj, tiež v nápojoch a čokoláde
- <u>účinky</u>: mierny stimulant, zvyšuje aktivitu srdca, rozširuje dýchacie cesty a stimuluje sekréciu žalúdočných štiav
- normálne dávky: neškodný
- vyššie dávky: nespavosť, nepokoj, dehydratáciu, v tehotenstve spôsobuje potrat
- neodporúča sa príjem kofeínu dojčiacim matkám, keďže prechádza do materského

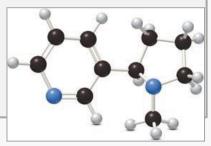
O N N

kofeín

NIKOTÍN

- vysoko toxický
- výskyt: tabak
- malé dávky: stimulant
- veľké dávky: spôsobuje depresie, vracanie a smrť
- rastlinami je syntetizovaný ako obranná látka v boji proti hmyzu, aj komerčne sa využíva ako insekticíd





mlieka

ALKALOIDY



- amíny izolované z rastlín
- alkaloid názov je odvodený zo slova alkali, keďže vodné roztoky alkaloidov sú mierne bázické

MORFÍN A PRÍBUZNÉ ALKALOIDY

MORFÍN

- výskyt: mak siaty
- <u>účinky</u>: analgetické a narkotické
- využitie: tíši chronickú bolesť v terminálnom štádiu rakoviny

KODEÍN

výskyt: mak siaty

HEROÍN

- rozšírená nezákonná droga
- 2–3x účinnejší ako samotný morfín

ALKALOIDY

---- (

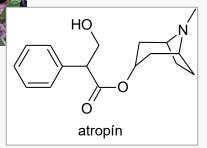
CHINÍN

- výskyt: kôra chininovníka
- <u>účinky</u>: antipyretikum, antimalarikum

ATROPÍN

- výskyt: rastlina Atropa belladona
- využitie: v oftalmológii
- <u>účinky</u>: relaxácia hladkého svalstva a interferuje s nervovými impulzmi
- vysoké dávky: smrť





AMÍNY AKO BÁZY



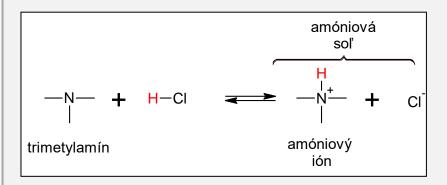
- amíny sú bázy = akceptóry protónu
- vo vodných roztokoch dochádza k ustáleniu rovnováhy: amín je príjemcom protónu z H₂O, pričom vzniká konjugovaná kyselina = amóniový ión a hydroxidová skupina OH⁻

$$H-N-H$$
 $+$ $H-O-H$ \longrightarrow $H-N^+-H$ $+$ $HO^ H$ amoniak amóniový ión

 amíny sú bázickejšie ako akékoľvek iné organické deriváty, avšak menej bázické ako anorganické bázy (NaOH)

REAKCIE AMÍNOV S KYSELINAMI

- reakciou amínov a kyselín vznikajú vo vode rozpustné soli = amóniové soli
- v týchto reakciách je amín akceptorom H⁺



- atóm N nesie kladný náboj
- amóniové soli sú rozpustné vo vode → rozpustnosť amínov môže byť modifikovaná reakciou s kyselinami: nerozpustné amíny dávajú rozpustné amóniové soli

AMÓNIOVÉ SOLI AKO LIEČIVÁ



- amóniové soli sú lepšie rozpustné vo vode ako amíny, lepšie transportovateľné v tele prostredníctvom krvi
- difenhydramín hydrochlorid antihistaminikum
- *fenylefrín hydrochlorid* látka znižujúca prekrvenie, nachádza sa napr. v lieku Theraflu
- metadón hydrochlorid narkotikum, analgetikum



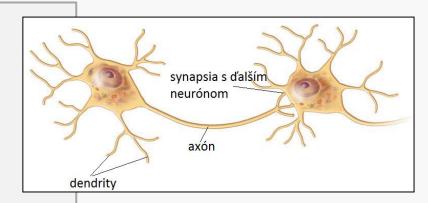
Neurotransmitéry = chemickí poslovia, ktorí prenášajú nervové impulzy z jednej nervovej bunky (neurónu) na inú nervovú bunku

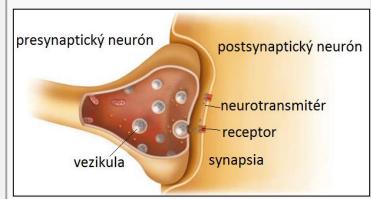
NEURÓN

- o telo bunky centrum látkovej premeny
- o výbežky:
 - dendrity (prijímajú vstupnú inf.)
 - axóny (vedú inf. od tela neurónu)

NEUROTRANSMITÉR

- všetky neurotransmitéry obsahujú atóm N
- vo vezikulách
- uvoľnenie vplyvom elektrického impulzu (vzruch)
- presynaptický neurón uvoľňuje neurotransmitér
- postsynaptický neurón príjemca neurotransmitéra, neurotransmitér sa viaže na receptor
- neurotransmitér je potom buď degradovaný alebo sa vracia naspäť do presynaptického neurónu

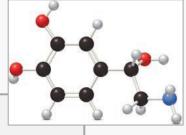






- liečivá ovplyvňujú neurotransmitéry niekoľkými spôsobmi:
 - zabraňujú uvoľneniu neurotransmitéra
 - zabraňujú naviazaniu na receptor
 - zvyšujú koncentráciu uvoľneného neurotransmitéra
 - ovplyvňujú degradáciu alebo znovu naviazanie do vezikúl

HO OH HO—CH—CH₂—NH₂ norepinefrín (noradrenalín)



NOREPINEFRÍN (NORADRENALÍN) A DOPAMÍN

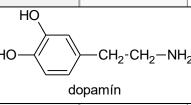
- syntetizované z tyrozínu
- správna hladina oboch látok je dôležitá pre mentálny rozvoj

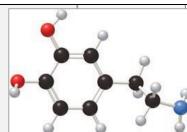
NOREPINEFRÍN

o je degradovaný na adrenalín vplyvom stresu alebo iných individuálnych zážit

DOPAMÍN

- o vplyvňuje procesy, ktoré riadia pohyb, emócie a radosť
- o degradáciou neurónov produkujúcich dopamín = Parkinsonová choroba
- o vysoká hladina dopamínu spôsobuje schizofréniu
- ∘ významná úloha pri vývoji závislosti, drogy zvyšujú hladinu dopamínu → pocity šťastia
- o neustálym dráždením receptorov dopamínu dochádza k ich degradácii → zvýšená potreba drog

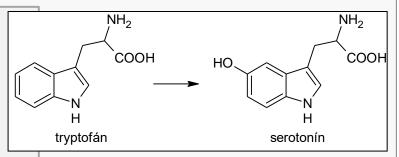


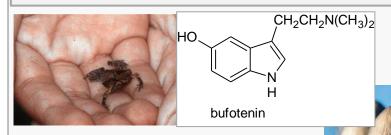




SEROTONÍN

- syntetizovaný z tryptofánu
- úloha nálada, spanie, vnímanie, regulácia teploty
- nízka hladina depresie, migréna
- liečba depresií: látky, ktoré spôsobujú reabsorpciu serotonínu presynaptickým neurónom a tým zvyšujú hladinu serotonínu
- liečba migrény: liečivá, ktoré pôsobia proti bolesti, nevoľnosti, citlivosti na svetlo
- drogy, ktoré interferujú s metabolizmom serotonínu majú vážny vplyv na mentálny stav, pr. bufotenín a psylocibín

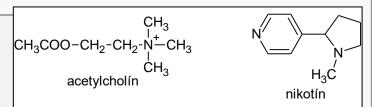






ACETYLCHOLÍN

- neurotransmitér medzi neurónmi a svalovými bunkami
- úloha nálada, pamäť, ...
- na acetylcholínové receptory sa viaže nikotín fajčiari majú pocity šťastia



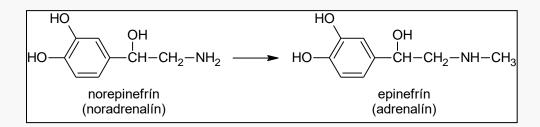
HORMÓNY

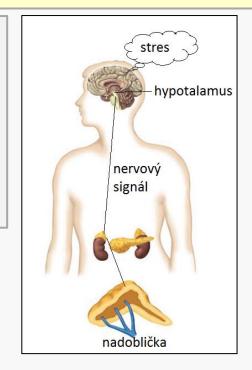


Hormóny = chemický poslovia endokrinného systému, prostredníctvom krvi sa dostávajú k cieľovému orgánu

EPINEFRÍN (ADRENALÍN)

- syntetizovaný nadobličkami z norepinefrínu
- vplyvom stresu/nebezpečenstva hypotalamus signalizuje nadobličkám syntézu a uvoľnenie epinefrínu, krvou sa dostane k orgánom, kde stimuluje odpoveď (zvýšenie srdcového rytmu, tlaku krvi, zvýšenie syntézy glukózy, rozšírenie dýchacích ciest)





DERIVÁTY 2-FENYLETYLAMÍNU

syntetizovaných mnoho derivátov odvodených od 2-fenyletylamínu štruktúrou podobných

vyššie spomínaným derivátom

AMFETAMÍN a METAMFETAMÍN

stimulujú centrálny nervový systém

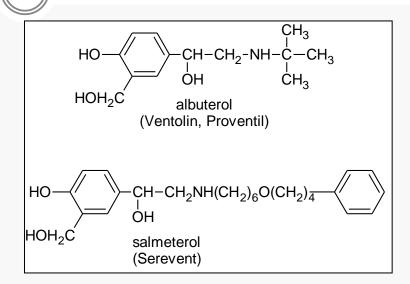
PSEUDOEFEDRÍN

- znižuje prekrvenie, súčasťou liečiv proti nádche
- môže byť premenený na metamfetamín
- nahradil sa fenylefrínom, ktorý nie je možné premeniť na metamfetamín

DERIVÁTY 2-FENYLETYLAMÍNU

ALBUTEROL a SALMETEROL

- liečivá astma
- rozširujú dýchacie cesty



Základy organickej chémie

HISTAMÍN A ANTIHISTAMINIKÁ

30

HISTAMÍN

- biologicky aktívny amín
- nezaraďujeme ani k hormónom ani k neurotransmitérom
- pôsobí blízko miesta svojho vzniku
- vznik: z histidínu
- viaže sa na receptory H1 a H2
- účinky: vazodilatant, spôsobuje alergické reakcie, stimuluje sekréciu kyseliny v žalúdku

ANTIHISTAMINIKÁ

- viažu sa na receptor H1
- účinok je opačný ako histamínu

CH₂-CH-NH₂

histidín

LIEČIVÁ VIAŽÚCE SA NA H2

 majú iný efekt, napr. cimetidín redukuje sekréciu žalúdočných štiav

PRÍKLADY

31)

1. Identifikujte funkčné skupiny zlúčenín:

$$\begin{array}{c|c} H_3C & CH_3 \\ CI & & & \\ &$$

2. Klasifikujte nasledujúce alkoholy – 1°, 2°, 3°:

Napíšte produkt dehydratácie alkoholu kyselinou sírovou:

$$H_3C \xrightarrow{H} CH_3 \longrightarrow OH$$

- 4. Napíšte štruktúru alkyl halogenidu podľa nasledujúcich inštrukcií:
 - a) 2° alkyl bromid s molekulovým vzorcom C₄H₉Br
 - b) 3° alkyl chlorid s molekulovým vzorcom C₄H₉Cl
- 5. Napíšte disulfid vznikajúci oxidáciou CH₃CH₂CH₂SH. Napíšte produkt redukcie disulfidu CH₃CH₂CH₂CH₂SSCH₂CH₃.
- 6. Napíšte štruktúry:
 - a) 3-chlór-2-metylhexán
 - b) propyl chlorid
- Napíšte produkt reakcie metamfetamínu s HCl.