

Związki organiczne

W związkach organicznych podstawowym pierwiastkiem jest węgiel



Roczna produkcja związków organicznych? Około kilkuset milionów ton? (np. SPC ok. 3 mln ton, tworzywa sztuczne 300 mln. ton,)

Znaczna część całkowitej ich produkcji przechodzi do środowiska.

Zarejestrowanych w bazie CAS, na dzień 30.05.2017:

1 3 0, 1 1 3, 4 0 2 ORGANIC AND INORGANIC SUBSTANCES TO DATE

(09.06.2015: 98 951 937)

(25.10.2012: 69 125 327)

Czerwiec 2019 – ponad 151 mln. organicznych i nieorganicznych substancji (Czerwiec 2018 – 142 mln.)

Chemical Abstracts Service – największa na świecie chemiczna naukowa baza danych, będąca własnością American Chemical Society. CAS to także nazwa instytucji zajmującej się tworzeniem tej bazy danych.

<http://www.cas.org/>

1

Substancje organiczne, wymieniane w aktach prawnych określających jakość wody przeznaczonej do spożycia przez ludzi

Akryloamid, Akrylonitryl, Benzen, Benzo(a)piren, Bromodichlorometan, Bromoform (tribromometan), Chlorobenzen, Chlorofenole (bez pentachlorofenolu), Chloroform (trichlorometan), Chlorooctowy kwas, Czterochlorek węgla (tetrachlorometan), Dibromochlorometan, Dichloroetan, Dichlorobenzen, Dichlorometan, Epichlorohydryna, Etylobenzen, Etylenu tenek, Fenol, Ftalan dibutyłu, Formaldehyd, Ksylene, PCB (polichlorowane bifenylo), Styren, Substancje powierzchniowo czynne (anionowe), Tetrachloroetan, Tetrachloroeten, Toleń, Trichlorobenzen, Trichloroetan, Trichloroetan, ΣTHM – trihalometany (Suma THM – chloroform, bromoform, bromodichlorometan, dibromochlorometan), CHZT (met. z KMnO_4), Suma wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych o właściwościach rakotwórczych: benzo(b) fluoranten; benzo(k) fluoranten; benzo(ghi) perylen; indeno(1,2,3 cd.) piren; Winyłu chlorek, Pestycydy - insektycydy, herbicydy, fungicydy, akarycydy, algicydy, nematocydy, rodentycydy, slimycydy, pokrewne produkty (między innymi regulatory wzrostu i ich produkty metabolizmu, degradacji i reakcji. Oznaczać należy tylko te pestycydy, których występowanie jako zanieczyszczenia jest prawdopodobne. Wartość parametryczna odnosi się do każdego pestycydu indywidualnie, z wyjątkiem aldrinu/dieldryny i epoksydu heptachloru, dla których wartość parametryczna wynosi $0,03 \mu\text{g}/\text{dm}^3$). Suma pestycydów (Suma wszystkich wartości parametrycznych oznaczonych pestycydów).

2

Źródła substancji organicznych środowisku

- Substancje i procesy naturalne
- Ścieki przemysłowe i miejskie
- Spływy powierzchniowe
- Opady atmosferyczne
- Związki organiczne powstające przy uzdatnianiu wody i oczyszczaniu ścieków
- Związki organiczne powstające w zbiornikach wodnych
- Emisje do powietrza (spaliny, zakłady syntezy organicznej)



3

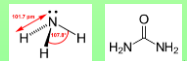
Związki organiczne



Związki chemiczne, w skład których wchodzi głównie węgiel. Mogą zawierać także wszystkie pozostałe pierwiastki, ale najczęściej zawierają również wodór, tlen, azot a także siarkę, fosfor oraz fluorowce.

Pierwotnie zaliczano do nich te związki, które występowały tylko w organizmach żywych, jednak wraz z rozwojem chemii organicznej okazało się, że można je otrzymać wychodząc z nieorganicznych substratów

Synteza Wöhlera (rok 1828) – konwersja amoniaku do mocznika



4

NAZWA KLASY	WZÓR OGÓLNY
Układy macierzyste:	
Węglowodory alifatyczne	R-H
Węglowodory aromatyczne	Ar-H
Związki heterocykliczne	Het-H
Pochodne:	
Bromki	R-Br
Jodki	R-J
Chlorki	R-Cl
Fluorki	R-F
Alkohole	R-OH
Fenole	Ar-OH
Etery	R ¹ -O-R ²
Aldehydy	R-CHO
Ketony	R ¹ -CO-R ²
Kwasy karboksylowe	R-COOH
Estry kwasów karboksylowych	R ¹ COOR ²

Halogeny:

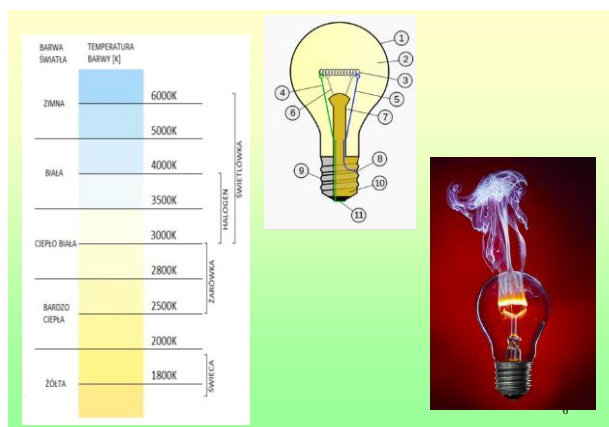


Fluorowce - Fluor, Chlor, Brom, Jod (Astat, Ununseptium)

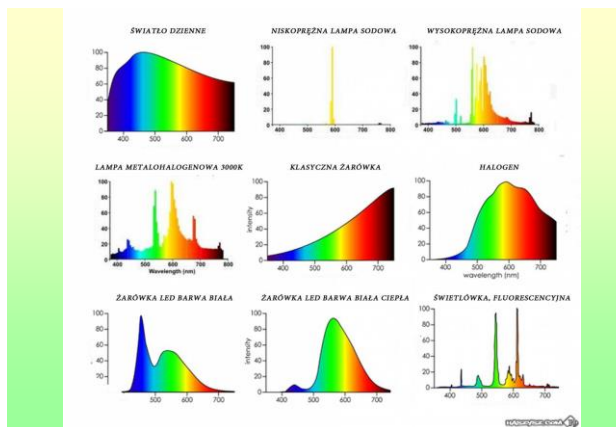
Międzynarodowa Unia Chemii Czystej i Stosowanej (IUPAC) niedawno potwierdziła nazwę Tennessee dla pierwiastka 117. Odkryto go w 2010 r., ale oficjalnie potwierdzono jego istnienie dopiero 5 lat później. Nowy pierwiastek chemiczny ma skrót Ts.

Tennessee swoją nazwę odziedziczył po amerykańskim stanie Tennessee, w którym znajduje się Oak Ridge National Laboratory (ORNL), gdzie dokonano jego odkrycia. Tennessee jest syntetycznym pierwiastkiem chemicznym, transuranowcem o liczbie atomowej 117. Do tej pory stosowano nazwę systematyczną pierwiastka - ununseptium.

5



6



Halogeny

Temperatura < 1400°C

Temperatura > 1400°C

Stopka wolframowa

Ważne składniki: Białe sole, Ciężkie halogeny, Zestępek wolframu - halogenami

ZARÓWKA ZARÓWKA HALOGENOWA

Wewnątrz szklanej bańki znajduje się wolframowa spiralna, która po włączeniu światła rozgrzewa się do temperatury 2500 °C.

Halogeny powstają w reakcji z wolframem i spirala.

Halogeny powstają w reakcji z wolframem i spirala.

Zarówki halogenowe świecą dłużej, gdyż opóźniają obrotowe powstawanie do nich niewielkie ilości halogenów (głównie jodu).

The Halogen Regenerative Cycle

Tungsten Atom ● Halogen Atom ● Oxygen Atom ●

Figure 1

$$\begin{array}{c} \text{Br} \\ | \\ \text{CH}_3\text{CH}_2\text{CHCH}_3 \\ | \\ \text{Br} \end{array}$$

2-bromobutan

$$\begin{array}{c} \text{Cl} \quad \text{Br} \\ | \quad | \\ \text{CH}_2\text{CH}_2\text{CHCH}_2\text{CH}_3 \end{array}$$

3-bromo-1-chloropentan

$$\begin{array}{c} \text{Cl} \\ | \\ \text{C}-\text{H} \\ | \\ \text{Cl} \end{array}$$

chloroform

Freony – chloro-fluoro-węglowodory

CFC – chlorofluorocarbon

HFC – hydrofluorocarbon

HCFC – hydrochlorofluorocarbon

Oznaczenia	Nazwa angielska	Nazwa polska
R-11	CFC-11	trichlorofluoromethane / trichlorofluorometan
R-12	CFC-12	dichlorodifluoromethane / dichlorodifluorometan
R-13	CFC-13	chlorotrifluoromethane / chlorotrifluorometan
R-22	HCFC-22	chlorodifluoromethane / chlorodifluorometan
R-23	HFC-23	trifluoromethane / trifluorometan
R-113	CFC-113	trichlorotrifluoroethane / trichlorotrifluoroetan
R-114	CFC-114	1,2-Dichloro-1,1,2,2-tetrafluoroethane / 1,2-dichloro-1,1,2,2-tetrafluoroetan
R-115	CFC-115	1-Chloro-1,1,2,2,2-pentafluoroethane / 1-chloro-1,1,2,2,2-pentafluoroetan
R-116	CFC-116	hexafluoroethane / heksafluoroetan
R-134a	HFC-134a	1,1,1,2-tetrafluoroethane / 1,1,1,2-tetrafluoroetan
R-227ea	HFC-227ea	1,1,1,2,3,3,3-heptafluoropropane / heptafluoropropan

Ze względów praktycznych freony oznaczają kodem liczbowym. Pierwsza cyfra oznacza liczbę atomów węgla w cząsteczce, pomniejszona o jeden, natomiast druga cyfra oznacza liczbę atomów wodoru powiększoną o jeden. Trzecia cyfra odpowiada liczbie atomów fluoru. Jeżeli freon zawiera jeden atom węgla, to pierwsza cyfra w oznaczeniu jest pomijana (1-1=0).

CCl₄ symbol: R10
CClF₃ symbol: R13
CHCl₂F symbol: R21

(liczba po R+90 = CHF)

Aminy pierwszorzędowe	R-NH ₂
Aminy drugorzędowe	R ¹ NHR ²
Aminy trzeciorzędowe	R ¹ R ² R ³ N
Amidy pierwszorzędowe kwasów karboksylowych	RCONH ₂
Nitryle (cyjanki)	RCN
Związki nitrowe (nitrozwiazki)	RNO ₂

Substancje organiczne – podział i nazewnictwo:

•Węglowodory

–alifatyczne węglowodory nasycone i nienasycone.

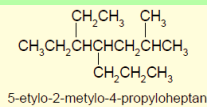
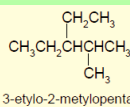
$$\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_3$$

węglowodór o łańcuchu prostym

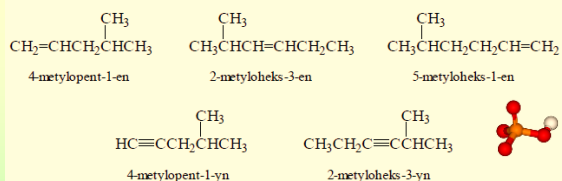
$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ | \quad | \\ \text{H} \quad \text{CH}_3 \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H}-\text{C}-\text{CH}_2\text{-CH}_3 \\ | \\ \text{H} \end{array}$$

węglowodór o łańcuchach rozgałęzionych

Liczba atomów C	Nazwa alkanu	Liczba atomów C	Nazwa alkanu
1	metan	11	undekan
2	etan	12	dodekan
3	propan	13	tridekan
4	butan	14	tetradekan
5	pentan	15	pentadekan
6	heksan	16	heksadekan
7	heptan	17	heptadekan
8	oktan	18	oktadekan
9	nonan	19	nonadekan
10	dekan	20	ejkozan



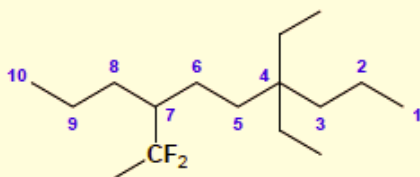
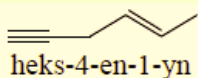
13



Liczba	Mnożnik	Liczba	Mnożnik
1	mono, hen (w złożeniach)	7	hepta
2	di, do (w złożeniach)	8	okta
3	tri	9	nona
4	tetra	10	deka
5	penta	11	undeka
6	heksa	20	ikoza

14

Wzory szkieletowe



7(1,1-difluoroetylo)-4,4-dietylodekan

15

Wzory konstytucyjne

C₂H₆O: etanol lub eter dimetylowy;C₂H₄O₂: kwas octowy, mrówczan metylu, 2-hydroksyetanal

Wzory strukturalne



kwas octowy

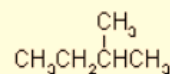


mrówczan metylu



2-hydroksyetanal

Wzory strukturalne grupowe



16

Węglowodory cykliczne



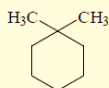
cyklopropan



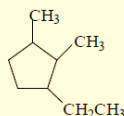
cyklopentan



cykloheksan



1,1-dimetylocykloheksan



1-etylo-2,3-dimetylocyklopentan

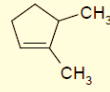
17



cykloheksen



3-metylocykloheksa-1,4-dien



2,3-dimetylocyklopentan

18

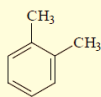
Węglowodory aromatyczne (Areny)



benzen



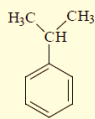
toluen



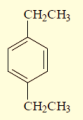
ksylen (izomer *ortho*)



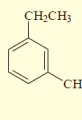
styren



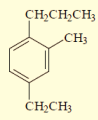
kumen



1,4-dietylobenzen
lub *p*-dietylobenzen



1-etylo-3-metylobenzen
lub *m*-etylotoluen



4-etylo-2-metylo-1-propylobenzen



19



ksylen



fenol



krezol



anilina



kwas benzoesowy



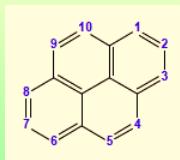
kwas salicylowy



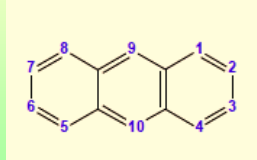
20

Wielopierścieniowe Węglowodory Aromatyczne - WWA

PAH - Polycyclic Aromatic Hydrocarbons

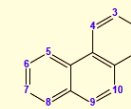


Piren

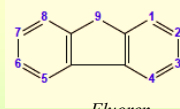


Antracen

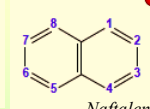
21



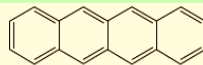
Fenantren



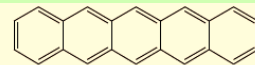
Fluoren



Naftalen



tetracen



pentacen



22

Układy heterocykliczne



pirydyna



pirydazylna



pirymidyna



piryazylna



furan



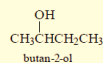
tiofen



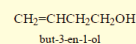
piryol

23

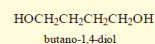
Alkohole



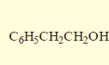
butan-2-ol



but-3-en-1-ol



butano-1,4-diol



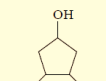
2-fenyletoanol



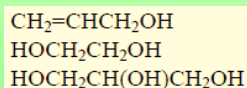
2,2-dimetylopropan-1-ol



cykloheks-2-en-1-ol



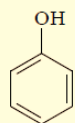
3,4-dimetylocyklopentan-1-ol



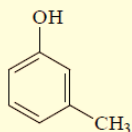
alkohol allilowy
 glikol etylenowy
 glicerol (gliceryna)

24

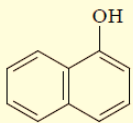
Fenole



fenol



m-krezol
(oraz izomery *orto* i *para*)



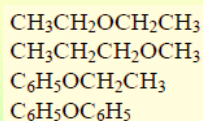
1-naftol (α -naftol)
(oraz izomer β)



Grupa fenyłowa – Ph (Ph-R)

25

Etery



eter dietylowy
eter metylowo-propylowy
eter etylowo-fenyłowy
eter difenyłowy



furan



1,4-dioksan

Chlorowane dibenzooksyny i dibenzofurany

26

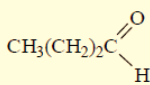
Aldehydy



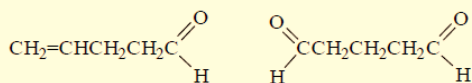
metanal



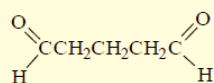
etanal



butanal



pent-4-enal



pentanodial

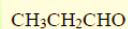
27



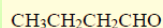
a) aldehyd mrówkowy
b) formaldehyd



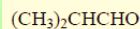
a) aldehyd octowy
b) acetaldehyd



a) aldehyd propionowy
b) propionoaldehyd



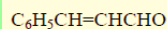
a) aldehyd masłowy
b) butyraldehyd



a) aldehyd izomasłowy
b) izobutyraldehyd



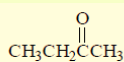
a) aldehyd benzoesowy
b) benzaldehyd



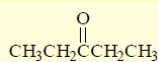
a) aldehyd cynamonowy

28

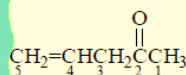
Ketony



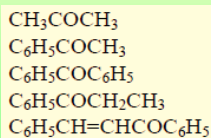
butan-2-on



pentan-3-on



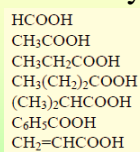
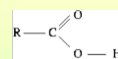
pent-4-en-2-on



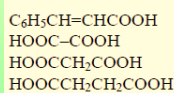
aceton
acetofenon
benzofenon
propiofenon
chalkon

29

Kwasy karboksylowe

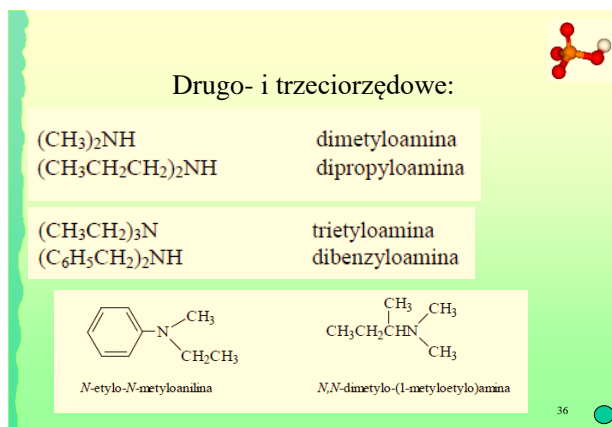
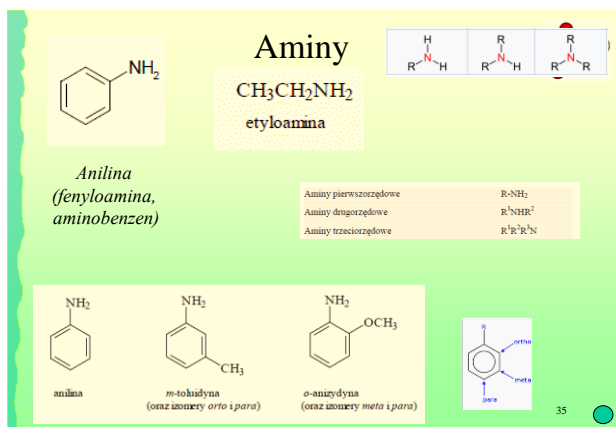
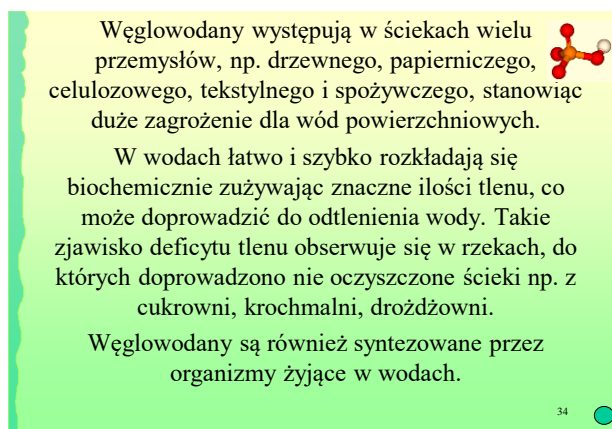
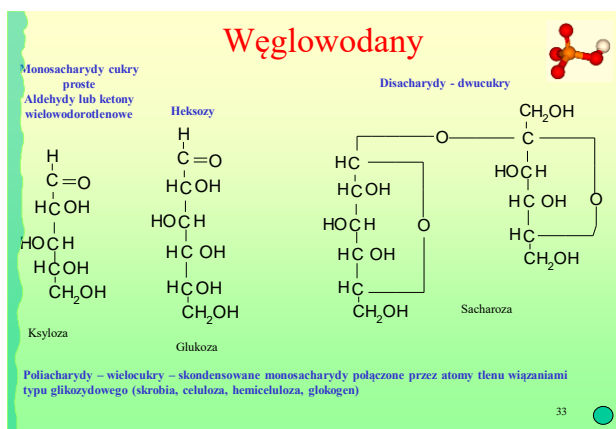
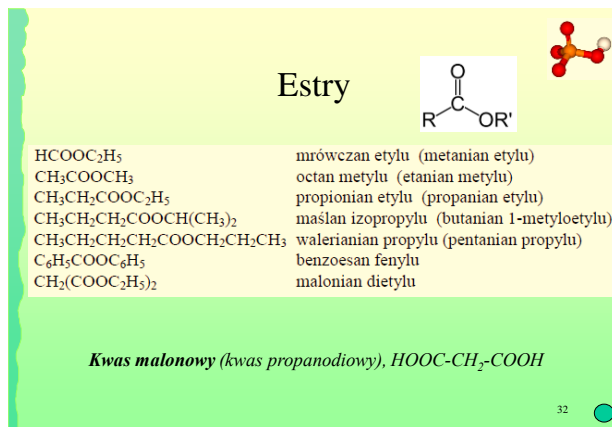
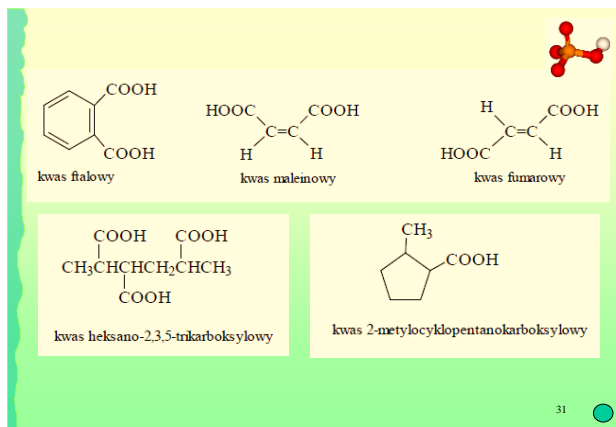


kwasy mrówkowy
kwasy octowy
kwasy propionowy
kwasy masłowy
kwasy izomasłowy
kwasy benzoesowy
kwasy akrylowy

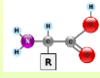
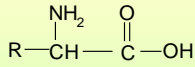


kwasy cynamonowy
kwasy szczawiowy
kwasy malonowy
kwasy bursztynowy

30



Aminokwasy





Są one podstawowym składnikiem białka. Głównym źródłem aminokwasów w wodach są wydzieliny żywych organizmów, mogą też być odprowadzane do wód ze ściekami miejskimi i przemysłowymi.

37

Aminokwasy

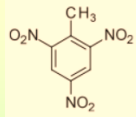


wzór	nazwa	kod	wzór	nazwa	kod
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ H	glycyna	Gly	$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ CH_2 SH	cysteina	Cys
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ CH_3	alanina	Ala		prolina	Pro
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ $(\text{CH}_2)_2$ COOH	kwas glutaminowy	Glu	$\text{HO}-\text{C}_6\text{H}_4-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{COOH}$ NH ₂	tyrozyna	Tyr
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ $(\text{CH}_2)_4$ NH ₂	lizyna	Lys		fenylalanina	Phe
$\text{H}_2\text{N}-\text{CH}-\text{COOH}$ $(\text{CH}_2)_2$ S CH ₃	metionina	Met			

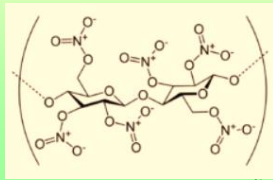
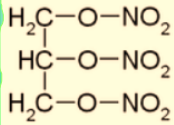
38

Azotany

TNT – trójnitrotoluen



Nitrogliceryna (*triazotan glicerolu*):



Nitroceluloza
(*azotan celulozy*):

39

Źródła:



Uniwersytet Jagielloński, Collegium Medicum, Katedra Chemii Organicznej



Nomenklatura systematyczna związków organicznych
Rekomendacje IUPAC 2004
wyciąg

POLITECHNIKA KRAKOWSKA
im. Tadeusza Kościuszki
WYDZIAŁ INŻYNIERII I TECHNOLOGII CHEMICZNEJ
INSTYTUT CHEMII I TECHNOLOGII ORGANICZNEJ
mgr inż. Maria Mikulska

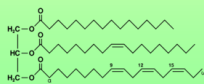
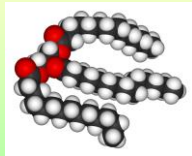
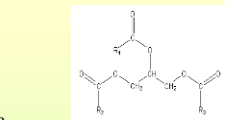
NAZEWNICZTWO WYBRANYCH KLAS ZWIĄZKÓW
ORGANICZNYCH

40

Tłuszcze

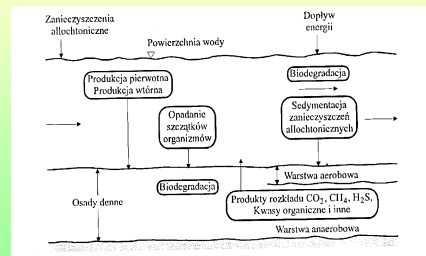
Tłuszcze są to mieszaniny estrów trójwodorotlenowych alkoholu (gliceryny) i kwasów organicznych. Tłuszcze zwierzęce są glicerydami wyższych nasyconych kwasów, głównie o cząsteczkach zawierających 16 i 18 atomów węgla. Oleje roślinne są glicerydami kwasów nienasyconych.

Tłuszcze i oleje są szkodliwe dla środowiska wodnego, ponieważ tworzą warstwę na powierzchni wody. Mogą być także absorbowane przez organizmy wodne i odkładać się w osadach dennych.



75

Rozkład związków organicznych w rzece



76

Wskaźniki zanieczyszczeń organicznych



- AOX** - adsorbujące się organiczne halogeny
- BZT** - biochemiczne zapotrzebowanie tlenu
- ChZT** - chemiczne zapotrzebowanie tlenu
- CIZO** - chlorowane związki organiczne
- EWA** - ekstrakt węglowo-alkoholowy
- EWCh** - ekstrakt węglowo-chloroformowy
- LCIZO** - lotne chlorowane związki organiczne
- LZO** - lotne związki organiczne
- OWO** - ogólny węgiel organiczny

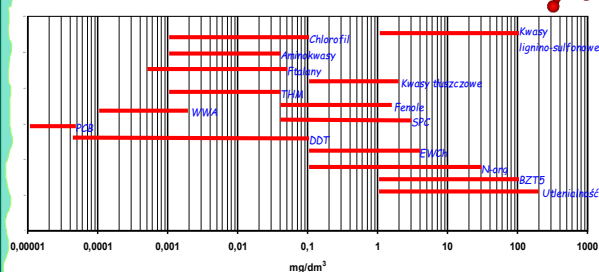
77

- PCB** - polichlorowane bifenyle
- SPC** - substancje powierzchniowo czynne (Anionowe, **K**ationowe lub **N**iejonowe)
- THM** - trihalometany
- WWA** - wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne
- Absorbancja w ultrafiolecie** ($\lambda=240, 254, 365 \text{ nm}$)



78

Orientacyjne zakresy przeciętnych stężeń niektórych substancji organicznych w wodach powierzchniowych



Wg: Jan. R. Dojda, Chemia wód powierzchniowych

79

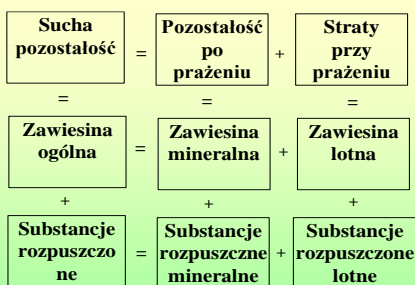
Metody oznaczania zanieczyszczeń organicznych



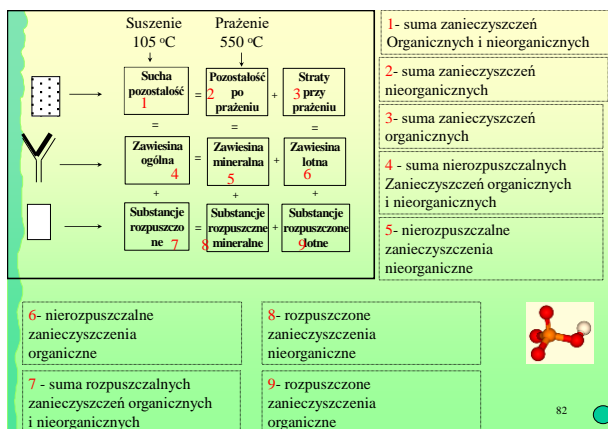
Pozostałość po prażeniu

Próbkę wody odparowuje się do sucha i następnie wypraża w temperaturze 550 °C. Związki organiczne spalają się, co powoduje ubytek masy. W czasie prażenia podlegają rozkładowi lub utleniają się także niektóre związki nieorganiczne w związku z czym jest to tylko przybliżona metoda oznaczania sumarycznej ilości związków organicznych.

80



81



82

Biochemiczne zapotrzebowanie tlenu – BZT (BOD – Biological Oxygen Demand)



Związki organiczne w warunkach tlenowych w obecności substancji pokarmowych i przy udziale mikroorganizmów rozkładają się biochemicznie.

Ostatecznym produktem rozkładu są związki nieorganiczne. Miarą zawartości związków organicznych jest zużycie tlenu. Zwykle mierzy się BZT₅, tj. zużycie tlenu przez okres 5 dób w temperaturze 20 °C. Metoda pozwala określić zawartość związków łatwo rozkładalnych. Pomiar BZT₅ jest przybliżoną metodą oznaczania związków organicznych.

83



BZT₅ dla czystych wód wynosi zwykle kilka mgO₂/dm³, dla wód zanieczyszczonych – kilkadziesiąt mgO₂/dm³, a dla ścieków przyjmuje wartości rzędu kilkaset mgO₂/dm³ i więcej.

84

Chemiczne zapotrzebowanie tlenu – ChZT (Chemical Oxygen Demand - COD)



Związki organiczne utlenia się w standardowych warunkach za pomocą silnych utleniaczy np. nadmanganianu (utlenialność – ChZT_{Mn}) lub dwuchromianu potasu (ChZT_{Cr}). Wyniki podaje się w ilości zużytego tlenu. Jest to również oznaczenie przybliżone, ponieważ nie obejmuje wszystkich związków organicznych, a tylko te, które utleniają się w danych warunkach. ChZT wykazuje na ogół wyższe wartości niż BZT₅.

85



	Wody czyste	Wody zanieczyszczone	Ścieki
ChZT _{Mn} mgO ₂ /dm ³	kilka - kilkanaście	kilkadziesiąt	kilkaset
ChZT _{Cr} mgO ₂ /dm ³	kilka - kilkadziesiąt	do ~300	kilkaset – kilka tysięcy

86

Ogólny Węgiel Organiczny –WO (Total Organic Carbon - TOC)



Substancje organiczne utlenia się w temperaturze ok. 950 °C i w obecności katalizatora do dwutlenku węgla. Wydzielony CO₂ oznacza się spektrofotometrycznie w podczerwieni. Metoda pozwala na oznaczenie całkowitej zawartości węgla organicznego, a więc pośrednio na pełne oznaczenie zawartości związków organicznych. Wyniki podaje się w mgC/dm³.

87



W wodach powierzchniowych zawartość OWO (ogólnego węgla organicznego - TOC) może wahać się od 0,05 – ok.100 mgC/dm³.

88

Pomiar absorpcji w ultrafiolecie

Po usunięciu zawiesin mierzy się absorpcję próbki wody przy długości fali 254 nm. Wyniki przedstawia się jako wartość absorpcji z zaznaczeniem długości fali. Jest to metoda niespecyficzna, określająca część związków organicznych. Nadaje się do kontroli jakości wody pobieranej w określonym, stałym punkcie.

89

Pomiar indywidualnych związków organicznych

Istotne znaczenie w wodach powierzchniowych ma kilkaset związków organicznych, które występują w stężeniach wykrywalnych i znaczących z punktu widzenia ekologicznego i sanitarnego. Najczęściej stosowane do oznaczania indywidualnych związków organicznych są: chromatografia gazowa (GC), wysokosprawną chromatografię cieczą (HPLC), spektrometria masowa (MS) i metody spektrofotometryczne.

90