

# ORVOSI KÉMIA ELŐADÁSOK TEMATIKÁJA

2021-2022 tanév, I félév

## 1. hét (2021. szept. 6-10.)

### ANYAGSZERKEZET

#### Atom felépítése

Kvantummechanikai alapjelenségek, a részecske-hullám kettős természet, részecske-hullámok valószínűségi értelmezése.

*Szeptember 7. kedd: Lars Edvinsson tanévnyitó előadása*

## 2. hét (2021. szept. 13-17.)

A helyhez kötött elektron viselkedése, a kvantálás geometriai értelmezése, jellemzése kvantumszámokkal és azok hatása az energiaszintekre.

Több elektron kölcsönhatása, a Pauli-féle kizárási elv, a „kézzelfogható” anyag kialakulása.

A kvantummechanikai atommodell, elektronhéjak és a kvantumszámok kapcsolata, Hund szabály, vegyérték héj és atomtörzs fogalma, elektronegativitás.

Kémiai elemek, tömegszám, rendszám, izotópok. Radioaktivitás, radioaktív izotópok, felhasználásuk a gyógyászatban. A hidrogén izotópjai

A periódusos rendszer, felépítése a kvantummechanikai atommodell alapján, elektronszerkezeti magyarázat. Az elemek csoportosítása: az s-, p-, d- és f- mező elemei. Fémek, félfémek és nemfémek.

#### Elsőrendű kémiai kötések

A vegyérték elektronok viselkedése két atomtörzs jelenlétében: a kovalens kötés. Molekulapályák kialakulása atomi pályákból, alakjuk, szimmetriájuk és energiájuk.

Poláros kovalens kötés és ionos kötés. Dipólus momentum. Dipólus molekulák. Elektronegativitás-háromszög. Ionrács kialakulása, rácsenergia. Sók. A fontosabb ionok elnevezése, sók nevezéktana.

## 3. hét (2021. szept. 20-24.)

Egyszeres és többszörös kovalens kötések, kötéshosszak és kötési energiák. Kovalens kötések lehetséges száma (oktett elv).

A kovalens kötések egyszerűsített ábrázolása két dimenzióban: a Lewis képlet. Molekulák térbeli felépítése, vegyérték elektronpár taszítási elv

Kötés kialakítása több atom atomi pályájának kombinációjával: delokalizáció. A fémes kötés.

A datív kötés. Nemkötő elektronpár megosztása üres atomi pályákra és lazító pályákra.

### **Másodlagos kémiai kötések**

Hidrogénkötés, elektrosztatikus és kovalens stabilizációja. Kialakulás szerkezeti feltételei.

A víz szerkezete folyadék és szilárd halmazállapotban. Hidrogénkötés szerves vegyületekben: az alkoholok, aminok, karbonsavak, heterociklusos vegyületek asszociációja.

Elektrosztatikus kölcsönhatások: Dipólus-dipólus, sóhíd

Diszperziós kölcsönhatások: indukált dipólusok

Szolvatáció és szolvofób kölcsönhatások

### **Halmazállapotok**

**A gázhalmazállapot.** Állapotjelzők. A kinetikus gázelmélet, Maxwell-Boltzmann-eloszlási görbék. Az egyesített gáztörvény, az egyetemes gázállandó.

Anyagmennyiség fogalma, mol, Avogadro-állandó

Reális gázok fogalma

**A folyékony halmazállapot.**

Molekulák közötti kötőerők, molekula asszociációk. A folyadékok tulajdonságai.

**A szilárd halmazállapot.**

A kristályos anyagok tulajdonságai.

A kristályrácsok típusai (a négy fő rács típus definiálása).

## **4. hét (2021. szept. 27. – okt. 1.)**

### **Heterogén rendszerek**

Gázelegyek, oldatok és ötvözetek.

Az oldatok típusai, jellemzése.

Az oldás folyamata.

Oldhatóság, telített oldatok.

Molekulaszerkezet és oldhatóság. Poláris-apoláris, hidofil-hidrofób, lipofil-lipofób anyagok.

Oldatok koncentrációja, kifejezési formái, koncentráció egységek.

Az oldhatóság hőmérséklet- és nyomásfüggése.

Gázok oldhatósága, Henry törvénye.

**A mikroheterogén rendszerek, a kolloid állapot:** Kolloid mérettartomány.

A Tyndall-jelenség. A kolloidok tulajdonságai, típusai.

A kolloidok felosztása: hidofil és hidrofób, diszperziós és asszociációs kolloidok (micellák).

Makromolekuláris kolloidok.

## KÉMIAI TERMODINAMIKA

### Termodinamikailag megengedett változások

Rendszer és környezet; izolált, zárt és nyitott rendszer.

Energia, hő, munka, termodinamikai állapotjelzők.

A belső energia mint állapotfüggvény összetétele és megváltoztatása hő és munka segítségével

A termodinamika 1. főtétele.

Az entalpia definíciója és tulajdonságai

Entalpia változása a fizikai és kémiai folyamatok során: fázisátmenetek, oldódás, kémiai reakciók. Standard entalpiaváltozás ( $\Delta H^0$ ) és standard képződési entalpiák.

A reakcióhő. Hess tétele.

### 5. hét (2021. okt. 4-8.)

### Termodinamikailag valószínű változások

Rendezetlenség, termodinamikai valószínűség és a Boltzmann eloszlás

Az entrópia definíciói (klasszikus és statisztikus) és molekuláris szintű értelmezése.

A termodinamika 2. főtétele: termodinamikailag valószínű (spontán) változások.

Biokémiai reakciók és kölcsönhatások entrópiaváltozása.

Az élet és a 2. főtétele kapcsolata. A szabadentalpia definíciója és tulajdonságai. Moláris szabadentalpia. Az egyensúly és a szabadentalpia kapcsolata.

### Biológiailag fontos kémiai egyensúlyok termodinamikai háttere

Fázisátmenetek szerkezeti háttere és a termodinamikai állapotfüggvények szakadása. Halmazállapot-változások egyensúlyai, és ezek nyomás- és hőmérséklet függése: fázisdiagrammok. A víz fázisdiagramja, halmazállapotainak tulajdonságai, biológiai jelentősége. Biopolimerek és membránok fázisátalakulásai.

Az elegyedés entrópia és szabadentalpia változása. A kémiai potenciál definíciója és függése a koncentrációtól.

Kémiai potenciál biológiai alkalmazásai: ozmózis, Donnan-egyensúly

Kémiai reakciók szabadentalpiája. A kémiai reakció egyensúlya, egyensúlyi állandó termodinamikai definíciója és függése a reakció szabadentalpiától. A tömeghatás törvénye. A Le Chatelier-elv; a koncentráció-, a hőmérséklet- és a nyomás-változás hatása az egyensúlyokra.

## KÉMIAI REAKCIÓK

### Kémiai reakciótípusok

**Halmazállapot változással járó reakciók:**

cserebomlás csapadékképződéssel, átalakulás gázfejlődéssel.

### **Elektronpár megosztással járó reakciók:**

Sav-bázis reakciók, komplex képződés. Savbázis elméletek áttekintése Arrhenius, Brønsted és Lowry, Lewis sav-bázis elméletei. Konjugált sav-bázis párok. Amfoter anyagok (amfolitok). A kémiai szerkezet összefüggése a savak és bázisok erősségével.

### **6. hét (2021. okt. 11-15.)**

Elektrolitok fogalma. Elektrolitos disszociáció, disszociációfok. Erős és gyenge elektrolitok. Elektrolitok oldhatósága és az oldhatósági szorzat.

A víz disszociációs egyensúlya, víz-ionszorzata.  
pH és pOH fogalma. pH számítások.

Savak ill. bázisok disszociációs egyensúlya, disszociáció állandók ( $K_s$  és  $K_b$ ).  
Ionok reakciója vízzel: hidratáció, solvatáció, hidrolízis. Semleges, lúgos és savas kémhatású sók.

Sav-bázis titrálási görbék:  $\text{HCl} + \text{NaOH}$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{NaOH}$ . A  $\text{H}_3\text{PO}_4 + 3 \text{NaOH}$  titrálási reakció görbéje. Indikátorok.

Pufferoldatok és alkalmazásuk. A puffer pH-jának számítása, pufferkapacitás pufferek pH-optimuma. Pufferek az élő szervezetben. Acetátpuffer, foszfátpuffer, hidrogén-karbonát - széndioxid puffer.

### **7. hét (2021. okt. 18-22.)**

#### **Redoxi reakciók:**

Oxidáció és redukció fogalma, teljes és részleges elektronátmenet.

Oxidációs szám fogalma, oxidációs szám változás számítása. Példák redox reakciókra.

Egyensúlyok a redoxi reakciókban, elektrokémia

Galvánelem fogalma. Vezetők, elektrolitok, elektródok. Az elektródok típusai.

A standard H-elektrod.

Elektródpotenciál, standard redukciós elektródpotenciál értékek ezek kapcsolata a oxidáló, ill. redukáló készséggel.

A Nernst-egyenlet. Elektromotoros erő.

Redoxi elektródok. Referencia elektródok. Koncentrációs elemek.

Az üvegelektrod. pH-mérés koncentrációs elemmel.

Elektrolízis.

#### **Reakciókinetika**

Elemi reakciók,

A reakciók molekularitása.

A kémiai reakciók sebessége, a sebességi egyenlet, a sebességi állandó.

A reakciók kinetikus rendje. Elsőrendű reakciók. Másodrendű reakciók. Nulladrendű reakciók.

Több elemi lépésből álló, összetett reakciók típusai. Egyensúlyra vezető reakciók. Sorozatreakciók. Párhuzamos reakciók. Láncreakciók.

## **8. hét (2021. okt. 25-29.)**

**Konzultáció: október 25, hétfő**

*I. demonstráció: október 26, kedd*

## **9. hét (2021. nov. 2-5.)**

Hőmérséklet hatása a reakciósebességre: az Arrhenius egyenlet.  
Az ütközési elmélet; a molekulák térbeli orientációja, aktiválási energia.  
Az átmeneti állapot elmélet; aktivált komplex.

Katalizátorok fogalma. A katalizátor hatása az aktiválási energiára  
Katalízis: homogén és heterogén katalízis.  
Katalizátorok irányító hatása, katalízis biológiai jelentősége.  
Enzimek mint katalizátorok, enzimreakciók mechanizmusa.

Aktivátorok és inhibitorok.

Fotokémiai reakciók.

## **BIOSZERVETLEN KÉMIA**

### **Ionok az élő szervezetben**

**A fontosabb alkáli- és alkáliföldfém ionok biológiai funkciója:**

Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Li<sup>+</sup> ionok biológiai szerepe.

A Mg<sup>2+</sup> komplexei és élettani szerepe.

A kalcium élettani szerepe.

**Halogenidionok az élő szervezetben.**

A klorid-ion és a fluorid-ion biológiai szerepe, a fluorapatit.

**Átmeneti fémionok az élő szervezetben:**

A vas, réz, cink,

Mangán ionok élettani jelentősége.

Nehézfém-ionok mérgező hatása (higany, kadmium, réz).

A nemesfémek (Ag, Au, Pt) szerepe a gyógyászatban.

## **10. hét (2021. nov. 8-12.)**

### **Komplexek**

Komplexek képződése vizes oldatban.  
Komplexek szerkezete, első és második koordinációs szféra.  
Kelátkomplexek.  
Komplexek elnevezése.  
Komplexek stabilitása, geometriai felépítése, izomériája.  
Komplexek szerepe a biológiai rendszerekben.

### **Élettani szempontból fontos nemfémes vegyületek**

#### **A szén oxidjainak biológiai szerepe, élettani hatása:**

A szén-monoxid.  
A szén-dioxid és a szénsav. A  $\text{CO}_2/\text{HCO}_3$  puffer  
A szilíciumvegyületek orvosi alkalmazásai (szem, mell implantátum)

Biológiailag fontos nitrogénvegyületek (NO mint jelátvivő)  
A foszforsav és a foszfátok szerepe az élő szervezetben.

Az oxigén, oxigén-tartalmú szabad gyökök képződése és élettani hatásai.

Mérgező szerves vegyületek: HCN, Arzenát

## **SZERVES KÉMIA**

### **SZERVES KÉMIA ALAPJAI**

#### **Alapfogalmak**

A szerves kémia kialakulása.  
A szerves kémia mint a szénvegyületek kémiája.  
Szén-szén kovalens kötések kialakulása, geometriája és a hibridizáció.

#### **Szerves vegyületek csoportosítása és nevezéktan alapjai**

Csoportosítás alapváz szerint.  
Csoportosítás funkciós csoportok szerint

Alapállapotú elektroneltolódások a szerves molekulákban.  
Induktív effektus, induktív hatást létrehozó funkciós csoportok.  
A  $\pi$ -elektronpárok eltolódása: konjugációs hatás. Konjugációs hatást kiváltó csoportok. A rezonanciaelmélet.

#### **Szerves kémiai reakciók típusai.**

Szubsztitúció, addíció és elimináció.

#### **Izoméria típusok a szerves vegyületekben.**

#### **A szerves kémiai reakciók mechanizmusa.**

Homólízis és heterólízis, gyökös és ionos mechanizmusú reakciók.  
Nukleofil és elektrofil reagensek.  
Példák elektrofil addícióra és szubsztitúcióra ( $A_E$  és  $S_E$ ), valamint nukleofil addícióra és szubsztitúcióra ( $A_N$  és  $S_N$ ).

**11. hét (2021. nov. 15-19.)**

## **FUNKCIÓS CSOPORTOK SZERKEZETE ÉS TULAJDONSÁGAIK I**

### **Telített szénhidrogének: alkánok és cikloalkánok**

#### **Alkánok**

Alkánok (paraffinok) szerkezete, nevezéktana.

Szerkezeti (konstitúciós) izoméria az alkánok körében.

A konformáció fogalma, az etán és bután konformációs viszonyai.

Az alkilcsoportok elnevezése.

Az alkánok fizikai tulajdonságai.

#### **Cikloalkánok.**

Cikloalkánok (cikloparaffinok) szerkezete, nevezéktana.

A gyűrűtagszám szerepe a stabilitásban, a Baeyer-féle feszülési elmélet. Szögfeszültség és torziós feszültség (ciklopropán, ciklobután).

A ciklohexán szék- és kád konformációja. Axiális és ekvatoriális helyzetű szubsztituensek.

Többgyűrűs telített szénhidrogének: a cisz- és transz-dekalin.

### **Telítetlen szénhidrogének: alkének és alkinek**

#### **Alkének**

Az alkének (olefinek) szerkezete, nevezéktana.

Szerkezeti és cisz-transz izoméria.

A szén-szén kettős kötés reakciói: elektrofil addíciók. A Markovnyikov-szabály.

Polimerizációs (poliaddíciós) reakciók. Orvosilag releváns adhéziós fogászat, implantátumok (3D nyomtatás)

**12. hét (2021. nov. 22-26.)**

**Konzultáció: november 22, hétfő**

***II. demonstráció: november 23, kedd***

**13. hét (2020. nov. 29. – dec. 3.)**

#### **Alkinek.**

Az etin (acetilén). Orvosilag releváns példa éndiin antibiotikum.

#### **Di- és poliének.**

Butadién: a kettős kötések delokalizációja, mezomer határszerkezetek.

A butadién részleges brómaddíciója.

Konjugált kettős kötésű rendszer, delokalizáció, fényabszorpció; színes vegyületek.

Az izoprén szerkezete.

## **Aromás vegyületek**

A benzol szerkezete.

Aromás vegyületek stabilitása, a rezonancia elmélet alkalmazása.

A Hückel-szabály.

A naftalin, az antracén és a fenantrén szerkezete és stabilitása.

A benzol származékai: toluol, xilolok, etilbenzol, vinilbenzol (sztírol).

Az aromás szénhidrogénekből levezethető aril- és aralkil-csoportok.

Diszubsztituált benzolszármazékok.

3,4-benzpirén és a kémiai karcinogének.

### **Az aromás vegyületek kémiai reakciói.**

Elektrofil szubsztitúciós reakciók: Friedel-Crafts acilezés.

Az elektrofil szubsztitúció mechanizmusa.

## **Halogénezett szénhidrogének**

Halogénezett szénhidrogének csoportosítása és nevezéktana.

Fontosabb halogén származékok: altatószerek, DDT.

## **14. hét (2021. dec. 6-10.)**

## **Hidroxil-csoportot tartalmazó szénvegyületek: alkoholok, enolok és fenolok**

### **Alkoholok**

Az alkoholok csoportosítása, nevezéktana.

Alkoholok kémiai tulajdonságai, reakciói.

Az alkoholok néhány fontosabb képviselője.

Az alkoholok szervesen savakkal képzett észterei: nitrátok, nitrátok, szulfátok és foszfátok.

Jelentőségük.

### **Fenolok**

A fenolok nevezéktana.

A fenolok savas jellege, az aromás gyűrű szubsztituenseinek befolyása.

A fenolok kémiai reakciói.

Fenolok oxidációja.

Fontosabb fenolok és fenol-származékok.

### **Enolok**

vinil alkohol, enol-oxo tautóméria (C-vitamin)

### **Éterek**

Éterek, gyűrűs éterek és fenoléterek. SN, Williamson szintézis

Az éterek kémiai tulajdonságai.

## **Szerves kén-vegyületek**

Tioalkoholok. A tioalkoholok kémiai tulajdonságai, oxidációs reakciók.

A tioéterek. A tioéterek kémiai tulajdonságai, oxidációs reakciók.

Oxidációs reakciók jelentősége biológiai rendszerekben.

Szulfoxidok, szulfonok, szulfonsavak. diszulfid-híd, metionin oxidáció.