

ORVOSI KÉMIA ELŐADÁSOK TEMATIKÁJA

2020-2021 tanév, I félév

1. hét (2020. szept. 7-11.)

ANYAGSZERKEZET

Atom felépítése

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

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.

Felmérő dolgozat (első Coospace teszt): szeptember 8. kedd

2. hét (2020. szept. 14-18.)

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 (2020. szept. 21-25.)

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

4. hét (2020. szept. 28. – okt. 2.)

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).

Heterogén rendszerek

Gázelegyek, oldatok és ötvözetek.

Az oldatok típusai, jellemzése.

Az oldás folyamata.

Oldhatóság, telített oldatok.

Molekulaszerkezet és oldhatóság. Poláris-apoláris, hidrofíli-hidrofób, lipofíli-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: hidrofíli és hidrofób, diszperziós és asszociációs kolloidok (micellák).

Makromolekuláris kolloidok.

5. hét (2020. okt. 5-9.)

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 (ΔH^0) és standard képződési entalpiák.

A reakcióhő. Hess tétele.

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. főtétel kapcsolata. A szabadentalpia definíciója és tulajdonságai. Moláris szabadentalpia. Az egyensúly és a szabadentalpia kapcsolata.

6. hét (2020. okt. 12-16.)

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 reakciótipusok

Halmazállapot változással járó reakciók:

cserebomlás csapadékképződéssel, átalakulás gázfejlődéssel.

7. hét (2020. okt. 19-22.)

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.

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.

8. hét (2020. okt. 26-30.)

I. demonstráció: október 27, kedd

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.

9. hét (2020. nov. 2-6.)

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.

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⁺, K⁺, Li⁺ ionok biológiai szerepe.

A Mg²⁺ komplexei és élettani szerepe.

A kalcium élettani szerepe.

Halogenidionok az élő szervezetben.

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

10. hét (2020. nov. 9-13.)

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.

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 CO_2/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

11. hét (2020. nov. 16-20.)

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 funkciók csoportok szerint

Alapállapotú elektroneltolódások a szerves molekulákban.

Induktív effektus, induktív hatást létrehozó funkciók csoportok.

A π -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.

Homolízis és heterolízis, 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).

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.

12. hét (2020. nov. 23-27.)

II. demonstráció: november 24, kedd

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)

Alkinek.

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

Di- és poliének.

Butadién: a kettős kötések delokalizációja, mezomer határszerkezetek.

A butadién részleges brómmaddíciója.

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

Az izoprén szerkezete.

13. hét (2020. nov. 30. – dec. 4.)

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 (2020. dec. 7-11.)

Hidroxil-csoportot tartalmazó szénvegyületek: alkoholok, enolok és fenolok

Alkoholok

Az alkoholok csoportosítása, nevezéktana.

Alkoholok kémiai tulajdonságai, reakciói.

Az alkoholok néhány fontosabb képviselője.

Az alkoholok szerves savakkal képzett észterei: nitrítok, 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.

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