

Követelmények a „Szerves Kémia” tárgyból tanárszakos és biológia BSc szakos (2016-ban vagy korábban felvett) hallgatóknak

1. A félév végén az előadás vizsgával zárul. Ez írásbeli és szóbeli részből áll. Az írásbeli vizsga eredményes, ha az elért eredmény 50 %-nál jobb. Amennyiben az eredmény 50 % alatt van a vizsgát meg kell ismételni.
2. A vizsga anyaga a tematikát alapján
 - a) az előadáson elhangzottak és
 - b) a kéziratos (interneten) elérhető jegyzet.
3. Ajánlott olvasmányok
 - a) Antus Sándor - Mátyus Péter: Szerves kémia I-III (Nemzeti Tankönyvkiadó, 2005)
 - b) Buckner Győző: Szerves kémia I-1, II-1 és II-2 (Tankönyvkiadó, 1974)
 - c) Kajtár Márton: Változatok négy elemre (Gondolat, 1984, Eötvös Kiadó, 2016)
 - d) Furka Árpád: Szerves kémia, (Tankönyvkiadó, 1988)
 - e) Römpf: Vegyészeti lexikon 1-4, Műszaki kiadó
 - f) Clayden, Greeves, Warren, Wothers: Organic chemistry (Oxford University Press, 2001)
 - g) Hoffman, R.V.: Organic chemistry (Second Edition) John Wiley & Sons, Inc. 2004
 - h) Nyitrai, Nagy: Útmutató a szerves vegyületek IUPAC-nevezéktanához. (Magyar Kémikusok Egyesülete, 1998)
4. A szóbeli vizsga alól mentesülnek azok a hallgatók, akik a félév során kétszer megírják az önkéntes felmérő dolgozatokat és mindkétszer legalább 80 %-ot érnek el. Az írásbeli vizsga alól mentesülnek azok a hallgatók, akik a félév során kétszer megírják az önkéntes felmérő dolgozatokat és mindkétszer legalább 70 %-ot érnek el.

1. Előadás

A szerves kémiai tárgya, főbb történeti korszakainak jellemzése.

A szénvegyületek csoportosítása, felosztás funkciós csoportok szerint.

A kovalens kötés.

Másodlagos kötések (H kötés stb).

Szénvegyületek szerkezetvizsgálata.

- I. Izolálás, tisztítás, homogenitás
- II. Szerkezet meghatározás („analitikus“)
- III. Szerkezetbizonyító szintézis („szintetikus“)

1. A szerves kémia tárgya

1784 A szénvegyületek kémiája (A. L. Lavoisier, 1743 - 1794)

1807 „Szerves kémia” - J. J. Berzelius (1779 - 1848)

1916 A C - C kötést tartalmazó vegyületek és a metán.

2. A szerves kémia története

2.1. Felosztás

Primitív kor - 1750)

Történeti kor (1751 - 1858)

Klasszikus kor (1859 - 1916)

Modern kor (1917 -)

2.2. Primitív kor

(adatgyűjtés, metodika)

Ókor

Középkor

„alkoholos” erjedés (arab)
„szeszes” erjedés (bor-ecet)
bőr-cserzés

bíborfestés (India, i.e. 2500)

Alkímia (XI - XIV.sz.)

„aranycsinálás”

„életelixír”

(technika: retorta, fújtatók)

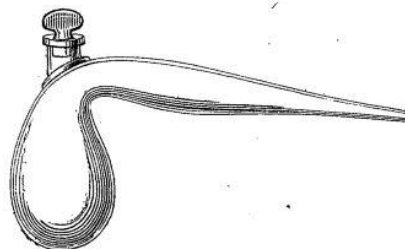
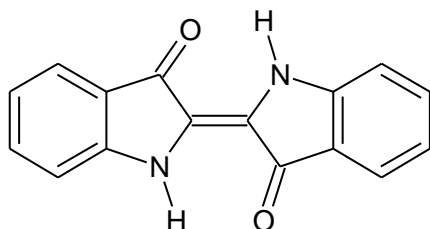


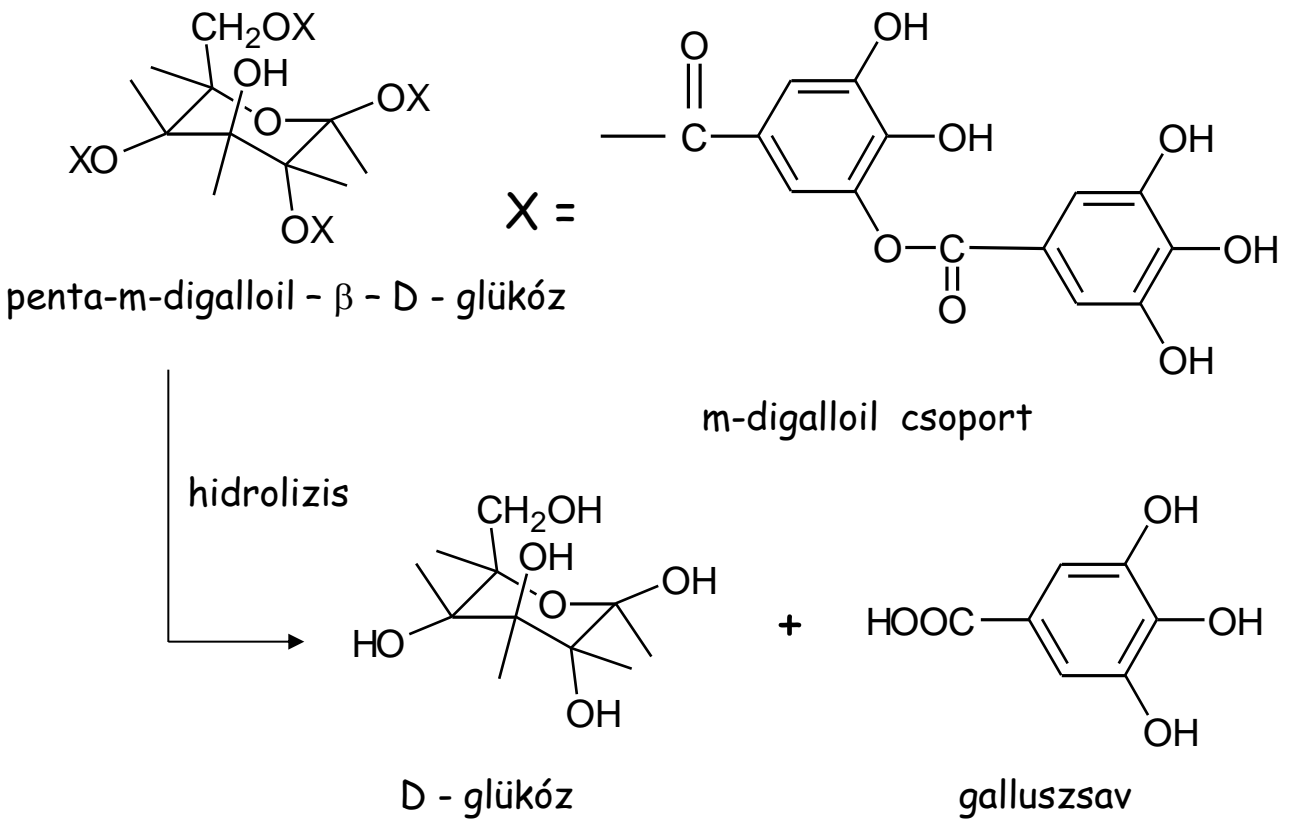
Fig. 764.

homeopátia (Kína, i.e. 2500)

- asztma, - vérnyomás

1493 - 1541 Philippus Aureolus Theophrastus Bombastus von Hohenheim, Paracelsus, orvos, alkimista, író

- Jatro (iatro) kémia - gyógyszerkészítés
 - életfolyamatok kémiája (szemben áll az alkímiával)
- Izolálás („kivonatok”)
 - pl. tannin (csersav), tölgyfakéreg, gubacs főzet
 - indikáció: sebes bőr, gyomorfekély

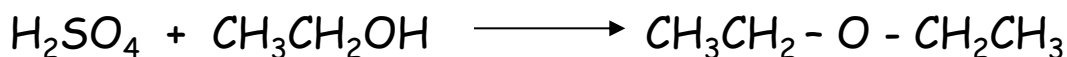


Kinai tölgy: 1 mol glükóz : 9-10 mol galluszsav
 Török tölgy: 1 mol glükóz : 5 mol galluszsav

Szintézis: E. Fischer

Cserzés: tannin plusz fehérje = csapadék

1550 „kénéter” (dietiléter) előállítása
(Valerius Cordus, 1743 - 1794)



1693 flogiszton elmélet, G. E. Stahl (1660-1734)

2.3. Történeti kor (izolálás, szintézis, izoméria, elmélet)

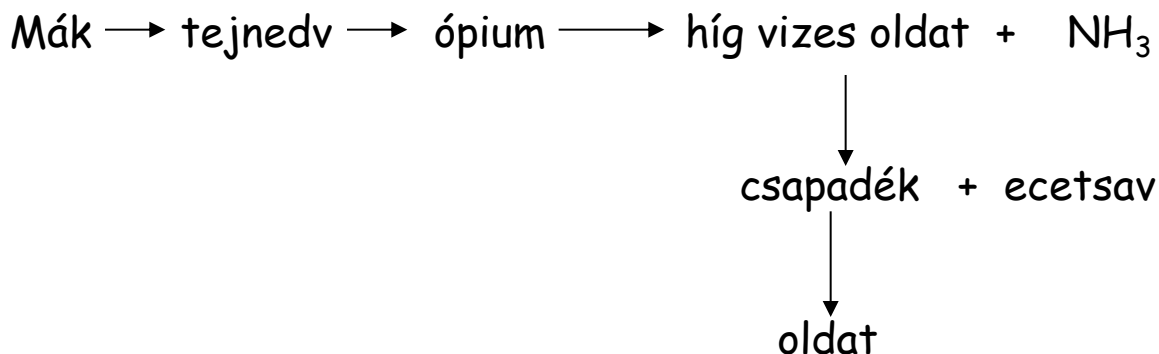
2.3.1. Izolálások

1772 Metán Joseph Priestley, brit teológus, vegyész,
1733 - 1804

1773 Karbamid

1769 - 1783 Borkősav, húgysav, benzoesav, oxálsav, tejsav,
almasav, glicerin, citromsav
C.W. Scheele, svéd, gyógyszerész, 1742 - 1786

1806 Morfin F.W.Sertürner, francia, gyógyszerész
(1817) 1783 -1841
„principium somniferum”
alvásisten Somnus fia Morpheus



1815 Koleszterin M.E. Chevreul, francia vegyész
1786 - 1889
hét zsírsav (pl. sztearinsav), glicerin

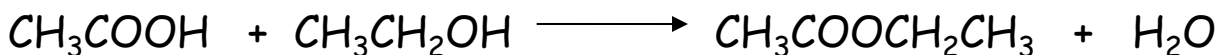
1817 - 1820 Klorofill, sztrichnin, brucin, kinin (kininfa), colchicin, koffein

P. J. Pelletier, francia, vegyész, 1788 - 1842

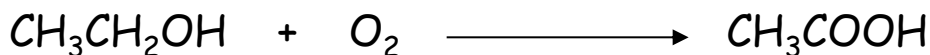
J. B. Caventou, francia, gyógyszerész, 1795 - 1877

2.3.2. Szintézisek

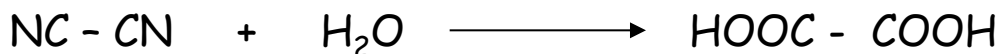
1781 szerves savak észterképzése, ásványi savakkal történő hidrolizise (C.W. Scheele)



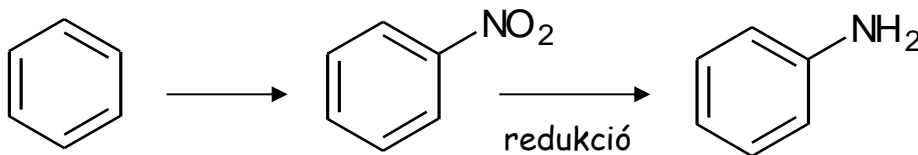
1786 Alkohol oxidációja ecetsavvá (A. L. Lavoisier)



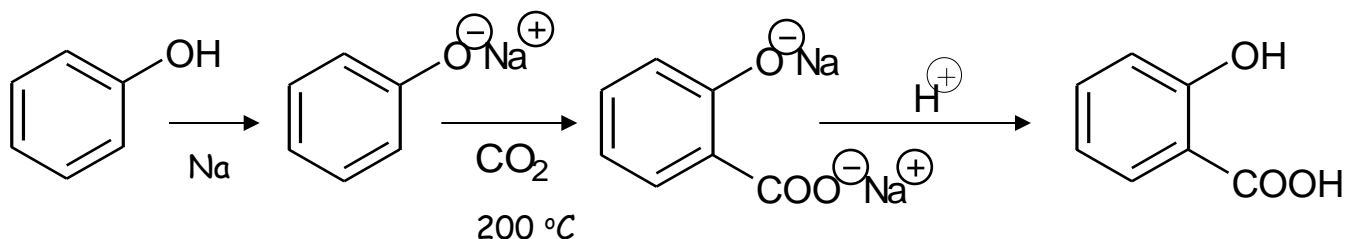
1824 Dician (oxálsav nitril) hidolizise: sóskasav (oxálsav) (F. Wöhler, német, kémia tanár, 1800 - 1882)



1834 Anilin szintézise (E. Mitscherlich, német, N. Zinyin, orosz)



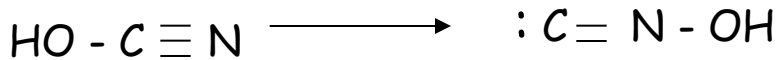
1852 Szalicilsav szintézise (H. Kolbe, német, 1818 - 1884) (fűzfa (salix)-, nyárfakéreg)



2.3.3. Izoméria felfedezése

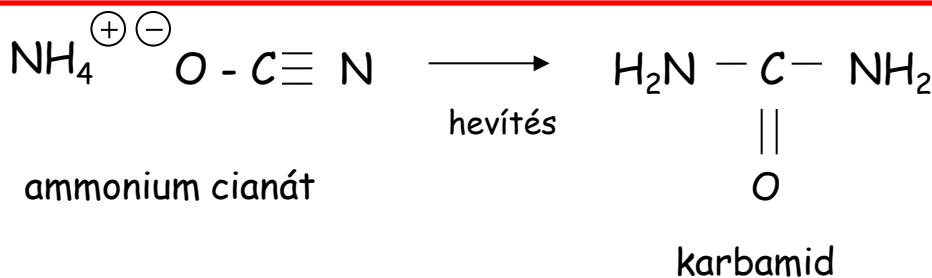
1815 optikai izoméria (polarimetria)
Jean B. Biot, francia fizikus, 1774 - 1862

1824 izoméria, Justus Liebig, Friedrich Wöhler



ciánsav

fulminsav



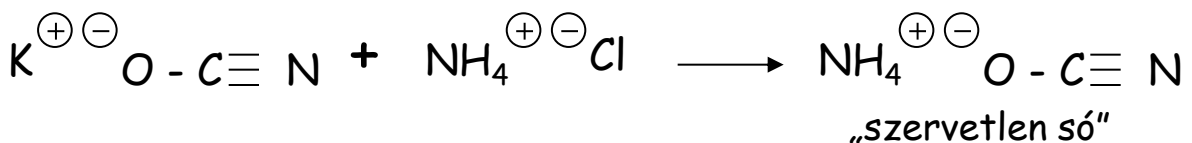
Fogalom: „Ugyanazon elem atomjaiból épülnek fel, de eltérő szerkezetűek.” (Berzelius, 1830)

1848 Optikai aktivitás - molekuláris diszimmetria
Borkósav izomerek szétválasztása optikailag aktív módosulatokra - „csipesszel”
Louis Pasteur, francia, vegyész, 1822 - 1895

2.3.4. Elméletek

1784 Flogiszton J. Priestley, 1733 - 1804
C.W. Scheele, A. L. Lavoisier

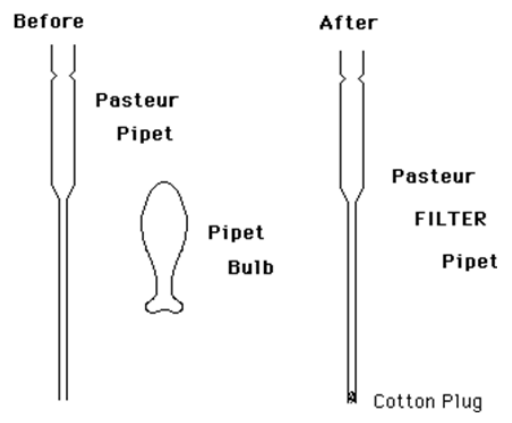
1828 Vis vitalis F. Wöhler



kálium cianát

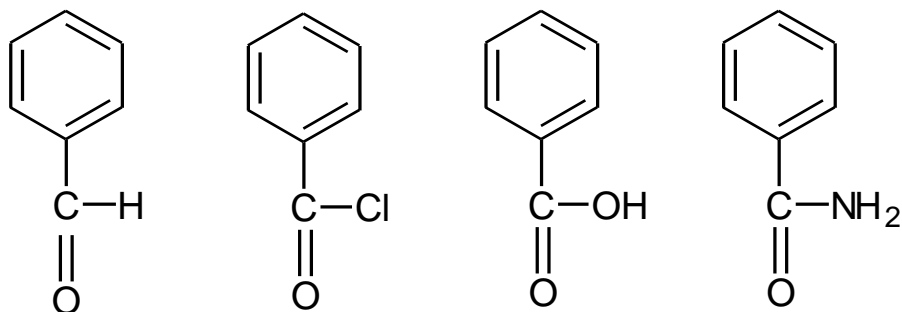
ammonium cianát

Louis Pasteur (1822 - 1895)



1832 Gyökelmélet J. Liebig, F. Wöhler

benzoil gyök (radikale, lat. radix = gyökér)



$(C_7H_5O)H$, $(C_7H_5O)Cl$, $(C_7H_5O)OH$, $(C_7H_5O)NH_2$

1838 Szubsztitúciós elmélet

J. B. Dumas, 1800 - 1884 (az MTA külső tagja)



1853 Típuselmélet = Gyök + Szubsztitúció

F. A. Kekule von Stradonitz, 1829 - 1896

„5 típus” : H_2 , HCl , H_2O , NH_3 , CH_4

2.4. Klasszikus kor (izolálás, szintézis, izoméria, elmélet)

2.4.1. Izolálások

2.4.2. Szintézisek (szerkezetbizonyító szintézisek)

1865 Acetecetészter,

1871 Fenolftalein

1883 Antipirin,

1899 Aszpirin

Szerkezetbizonyítás kémiai reakciókkal

lebontás

felépítés

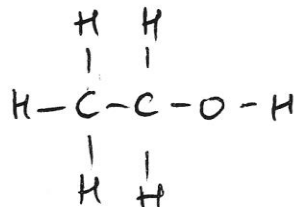
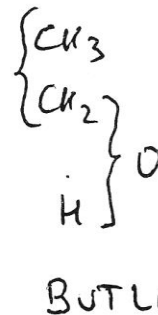
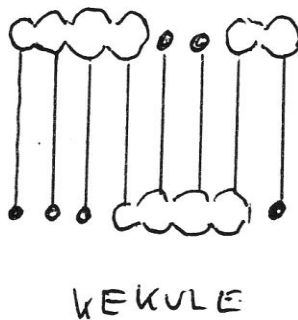
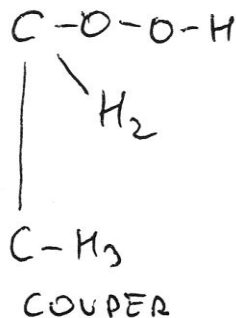
1861	kaucsuk	izoprén	1886	koniin (Ladenburg)
1866	naftalin (E. Erlenmayer)		1895	húgysav (E. Fischer)
1891	cukrok (E. Fischer)			
1899	peptid	aminosav		

2.4.3. Elméletek

1858 - 1865 Struktúra tan (Butlerov, Couper, Kekule)

„Az atomok határozott számú vegyértékeik útján kapcsolódnak molekulákká.”

„A szénvegyületekben a szénatom négy vegyértékű és vegyértékeik egyformák.”

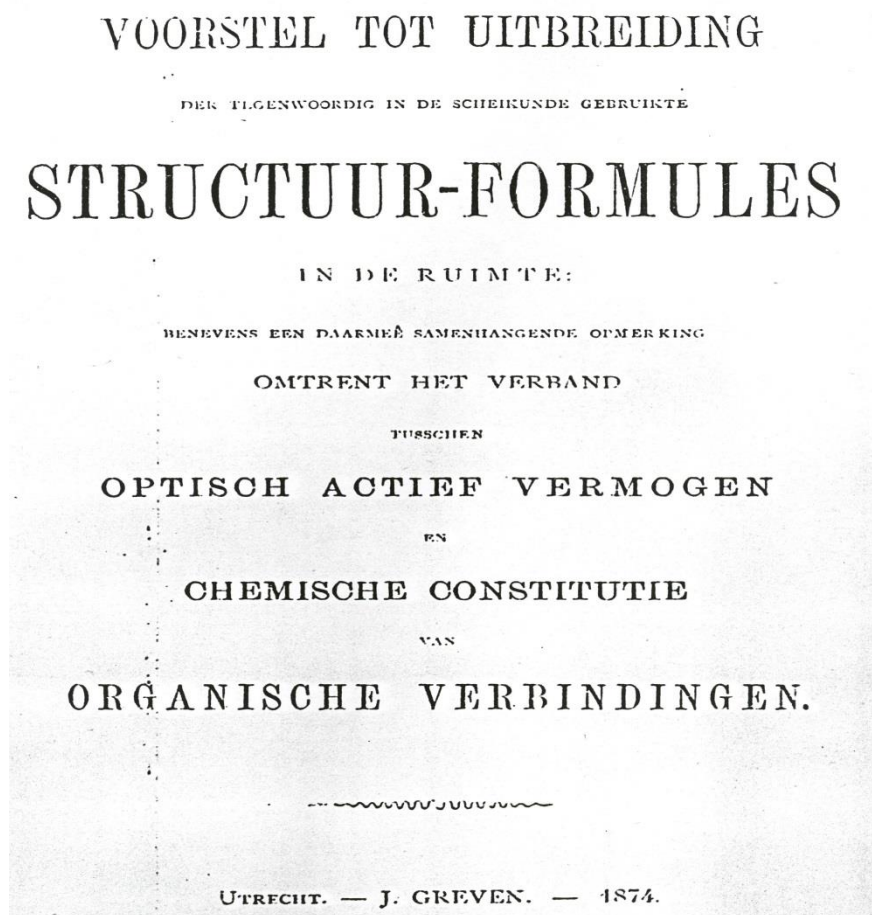


- Megadható a gyökök belső szerkezete, atomok kapcsolódása
- Kémiai reakciók értelmezése (szerkezetvizsgálat)
- Izoméria értelmezése.

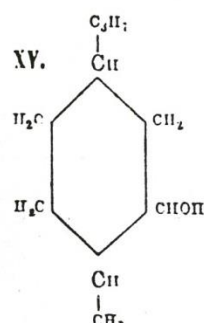
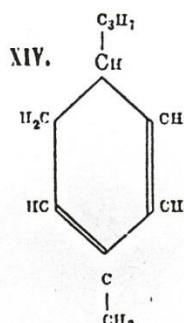
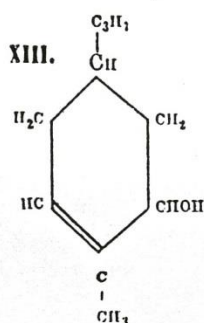
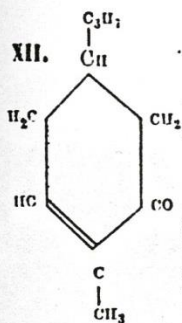
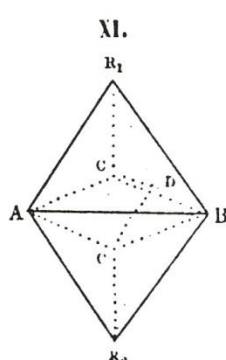
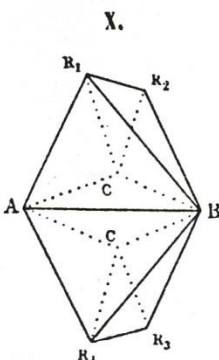
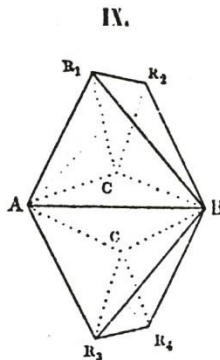
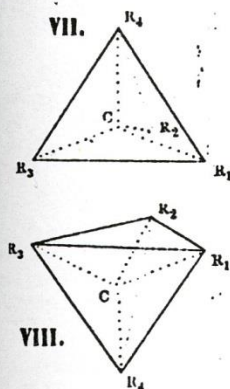
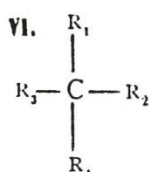
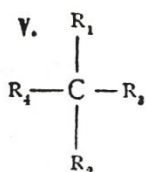
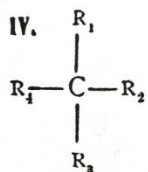
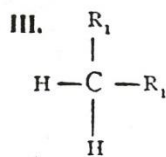
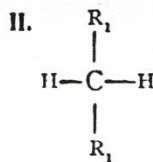
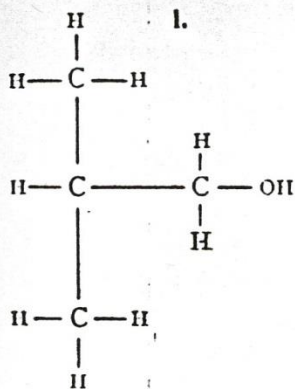
1873 - 1900 Szintézisek tipizálása

- 1873 Acetecetészter szintézisek
- 1877 Friedel-Crafts szintézisek
- 1880 Malonészter szintézisek
- 1899 Walden inverzió
- 1900 Grignard reakció (Nobel díj, 1912)

1874 Az optikai aktivitás szerkezeti magyarázata
J. H. van t'Hoff (1850 - 1911), J. A. Le Bel (1847 - 1930)



Aszimmetrikus C atom - izoméria - optikai aktivitás.
Geometriai izoméria értelmezése.



2.5. Modern kor (izolálás, szintézis, módszer, elmélet)

2.5.1. Módszerek

kromatográfiák
spektroszkópiák (UV, IR, NMR...)
diffrakciós módszerek
izotóptechnika (X-ray, neutron..)

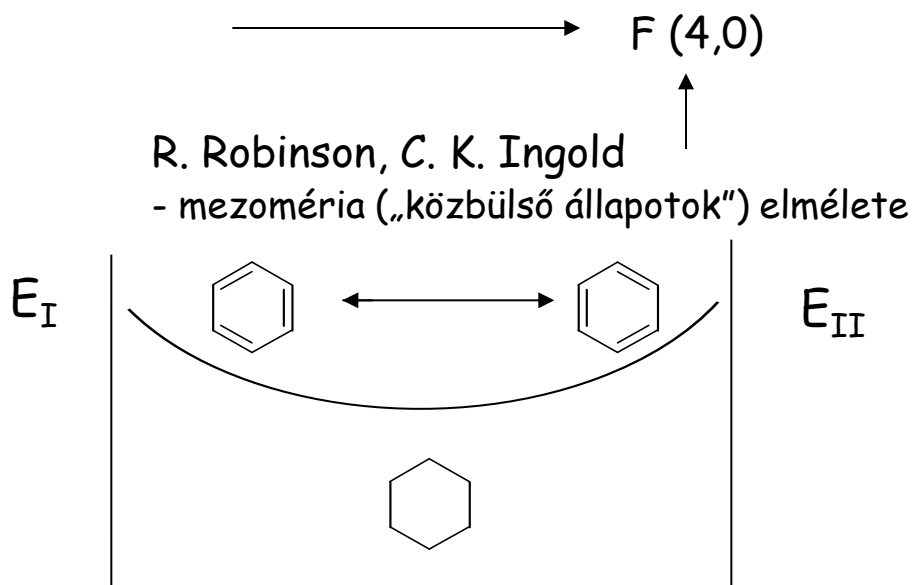
2.5.2. Szerkezetbizonyító szintézisek

1929		Hemin	H. Fischer	1930
1930	1950	A-vitamin		
1928	1933	C-vitamin	Szentgyörgyi A.	1937
1940	1960	klorofil	H. Fischer	
			R. B. Woodward	1965
1926	1953	nukleinsavak	L. Levene	
			A. R. Todd	1957
			J. D. Watson	
			M. H. F. Wilkins	
			F. H. C. Crick	1962
1953	1964	inzulin	F. Sanger	1958
			H. Zahn	
1973		B12 szintézis	S. B. Woodward	
1985		Fullerén	H. W. Kroto	1996

2.5.3. Elméletek

	szerves	szervetlen
1900	80 000	
1937	470 000	
1970	3 000 000	30 000
1994	12 000 000	50 000
2004	20 000 000	100 000, de fémorganikus: 1,5 millió

- 1916 Walter Kossel (1888 - 1956)
 Gilbert N. Lewis (1875 - 1946)
 - oktett-szabály
 - ionos és kovalens kötés megkülönböztetése
- 1919 Irving Langmuir (1881 - 1957)
 - vegyérték oktett elmélete
 - elektrópároképződés → kémia kötés
- 1927 Nevil V. Sidgwick (1874 - 1952)
 „The electronic theory of valence”
- 1923-1932 G. N. Lewis, C. K. Ingold, L. Pauling
 - elektronegativitás/elektronaffinitás
 - kötések állandó polározottsága
 W. Pauli (1900 - 1959)
 - periodusos-rendszer vs. elektronegativitás



1927-1939 L. Pauling, G. W. Wheland
 Vegyértékkötés módszer („valence bond”): molekula elektron-szerkezetét az alkotó atomokhoz tartozó vegyérték elektronokból hozza létre.

F. Hung, R. S. Mulliken, E. Hückel
 Molekulapálya módszer („molecular orbital”): a vegyértékelektronok több, a molekulát alkotó atom erőterében mozognak (delokalizáció).

Kvantummechanika - kvantumdinamika

Linus Carl Pauling (1901-1994)

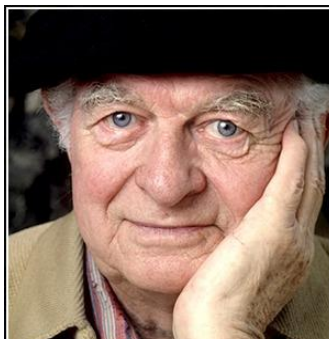


Nobel díj 1954 (kémia):

„kémiai kötés természetének kutatása terén elért eredményeiért, és ezeknek .. a szerkezetmeghatározásban történő felhasználásáért”

Nobel díj 1962 (béke):

„a nukleáris fegyverek tesztelése ellen folytatott tevékenységéért”



The best way to have a good idea is
to have a lot of ideas.

— Linus Pauling —

3. A szerves kémia Magyarországon



XIX. Század
1882-89

Fabinyi Rudolf (1849-1920)
Vegytani Lapok

XX. Század

Széki Tibor (1879-1950), Szeged 1935, Budapest 1948

Konek Frigyes (1867-1944)

Zechmeister László (1889-1971), karotinoidok, tankönyv

Zemplén Géza (1884-1956), szénhidrátok, Műegyetem

1945 Tanszékek (Tudományegyetem, Műegyetem, Orvosi,
Budapest, Szeged)

Iskolák

Flavonoidok

Bognár Rezső, KLTE
Farkas Lóránd, BME

Szénhidrátok

Csűrös Zoltán, BME
Deák Gyula, KOKI
Kuszman János, GYOKI

Karotinoidok

Cholnoky László, PTE

Peptidkémia

Bruckner Győző, ELTE
Bajusz Sándor, KOKI
Kovács Kálmán, SZOTE
Medzihradszky Kálmán, ELTE

Elméleti kémia

Müller Sándor, ELTE
Lempert Károly, BME
Messmer András, KKKI
Kucsman Árpád, ELTE

Szerkezetvizsgálat

Kajtár Márton, ELTE
Kálmán Alajos, KKKI

A KÍSÉRLETI CHEMIA ELEMEI

1897-1898 I. Kötet : Általános chemia és elemi testek leírása.

1. könyv. Általános kémia
2. könyv. Az elemi testek leírása

1906 (?) II. Kötet : A törzsvegyületek és a carbonidok leírása.

3. könyv. A törzsvegyületek leírása

1908 Than Károly elhunyt

2005 Fábián Éva, Vegyészeti Múzeum, Várpalota

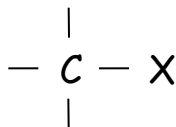
2007 Próder István levele

2013 Tömpe Péter, restaurálás, digitalizáció

2015 Megjelent
az első szerves kémia tankönyv

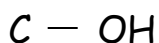
4.2. Funkciós csoportok szerint

Halogéntartalmú vegyületek (halogénezett szénhidrogének)



Oxigéntartalmú vegyületek

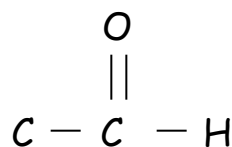
alkoholok



éterek



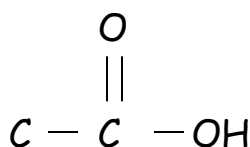
aldehidek



ketonok



karbonsavak

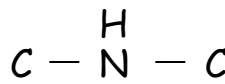
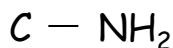


karbonsav származékok

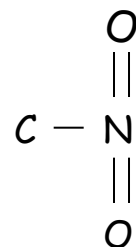


Nitrogéntartalmú vegyületek

aminok



nitro vegyületek

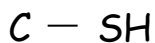


nitrozó vegyületek



Kéntartalmú vegyületek

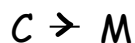
tiolok



tioéterek



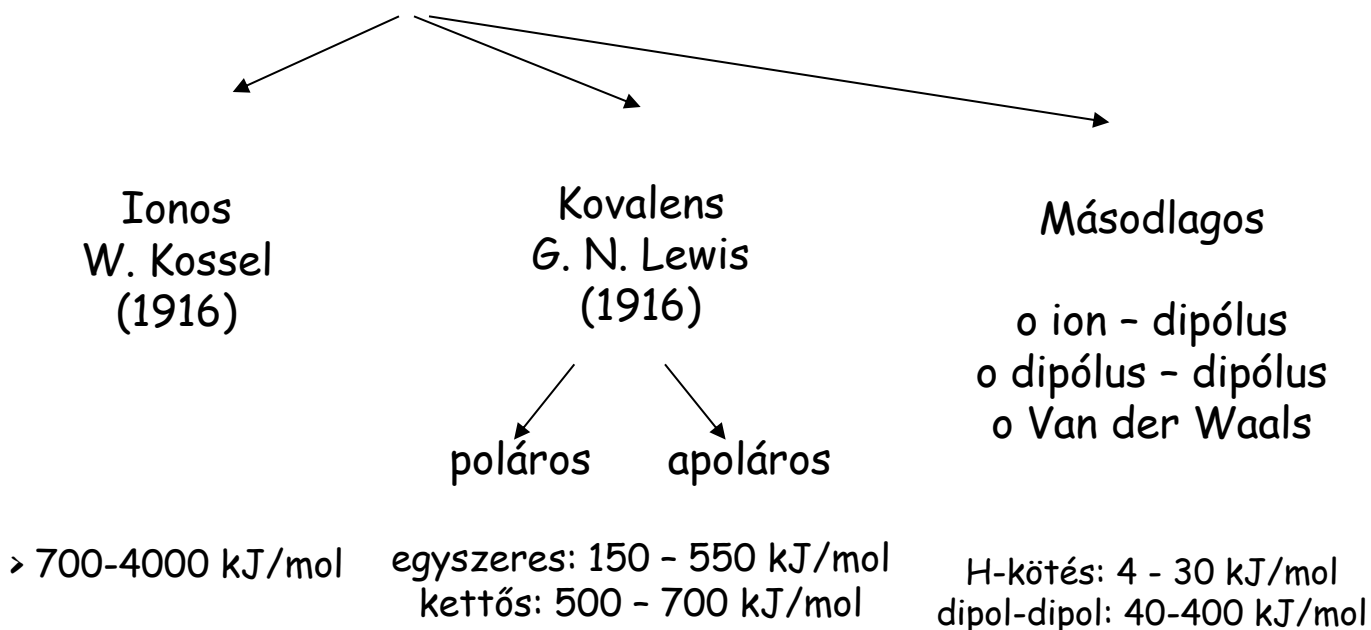
Fémorganikus vegyületek



5. A kémiai kötés

5.1. Definíció: Atomok, molekulák között vonzóerők léte esetén létrejövő tartós kapcsolat.

5.2. Kötéstípusok:



5.3. Kötések elméleti értelmezése

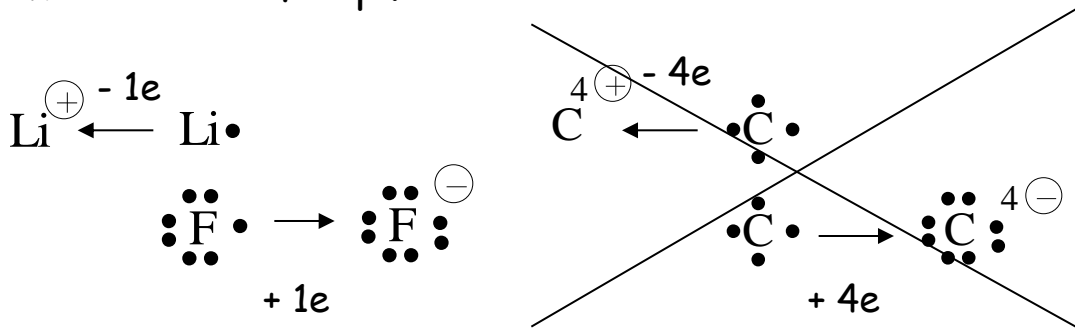
5.3.1. Bohr atom modell - oktett elv (1916)

	Li.....	C.....	F	N
Rendszám (összes elektron)	3	6	9	10
Vegyértékhéj	K	2	2	2 (lezárt)
	L	1	4	7
			7	8

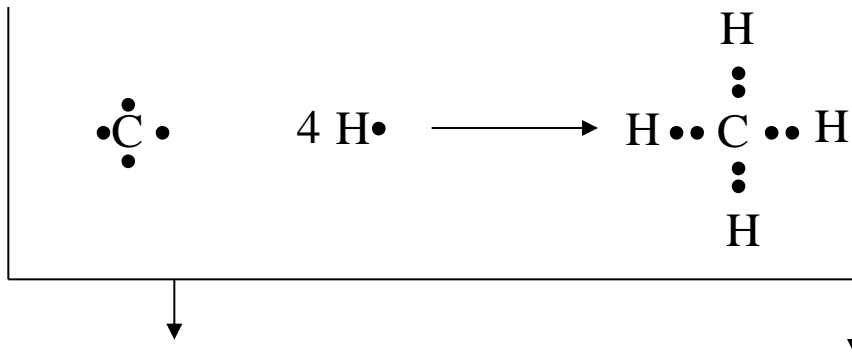
Hajtóerő: „lezárt héj”

„Módszer”: a) elektron transzfer, b) elektron megosztás

a) Elektron transzfer pl. $\text{Li}^{\oplus}\text{F}^{\ominus}$



b) Elektron megosztás pl. CH_4



Szimmetrikus

A kötő elektronpár szimmetrikusan oszlik meg a két atom között.



- o izolált molekula (gáz)
- o apoláros kötés
- o apoláros molekula

Aszimmetrikus

A kötő elektronpár közelebb „húzódik” a nagyobb elektron negativitású atomhoz.



- o folyadék, szilárd
- o poláros kötés
- o poláros molekula

EN értékek	
C 2,5	O 3,5
H 2,15	F 3,95
N 3,0	

Δ EN értékek	
C - H	$\Delta \text{EN} = 2,5 - 2,15 = 0,35$
C - F	$\Delta \text{EN} = 1,45$
C - O	$\Delta \text{EN} = 1,0$
C - N	$\Delta \text{EN} = 0,5$

5. 3. 2. Kvantumelméleti megközelítés

Kísérletekből adódó tapasztalatok:

- o Kötéstávolságok eltérőek (egyszeres, kettős, hármas..)
- o Kötésszög eltérő
(pl. metán HCH 109°, víz HOH 104°, H₂S 93°)
- o Töltéseloszlás aszimmetrikus
- o Sztereoizoméria, optikai aktivitás
- o Eltérő kémiai reaktivitás (egyszeres, kettős, hármas..)

Példák:

$C - C$	1,54 Å	HCH, CCC 109°
$C = C$	1,34 Å	HCH 116,7°; HCC 121,6°
$C \equiv C$	1,29 Å	CCH 180°

Elméleti megfontolások:

1924 L. De Broglie

Az elektron részecske és hullám.

1926 E. Schrödinger

Az elektron energiája kifejezhető egy hullámfüggvény (Ψ) megoldásaként.

Pauli elv: Egyazon atomban két vagy több elektron nem lehet egyidejűleg ugyanabban a kvantumállapotban.

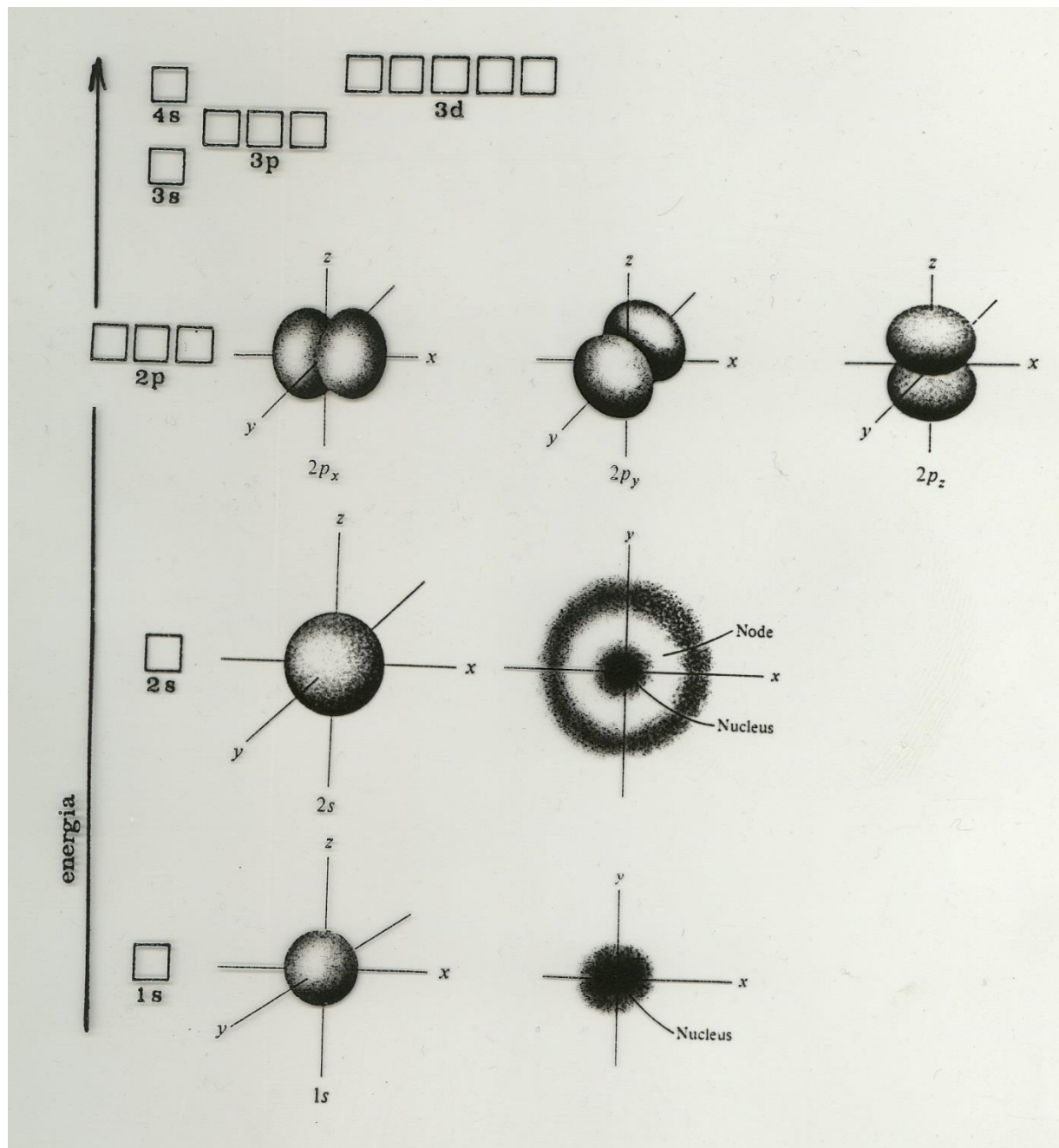
Hund szabály: Újabb kvantumpályára elektron nem kerül, amíg van betöltetlen, alacsonyabb energiájú pályán hely.

Schrödinger egyenlet: a) differenciál egyenlet

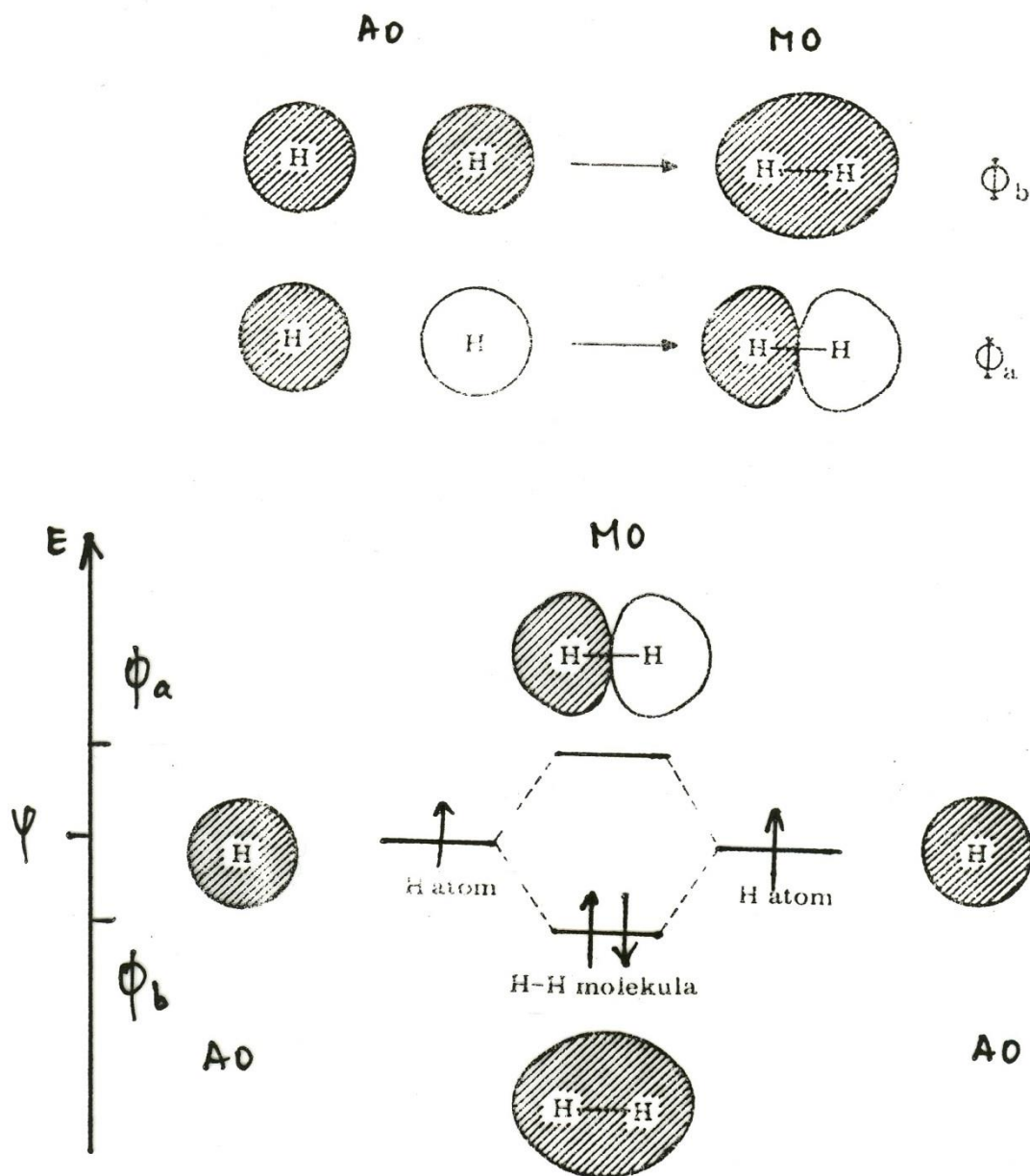
b) megoldásai hullámfüggvények (Ψ_n , $n = 1, \dots$)

c) a hullámfüggvényhez tartozó sajátérték az elektron energiája (E_n , $n = 1, \dots$)

Atompályák



3.2.1. Molekulapálya (MO) módszer



3.2.2. Hibridizált atomi pályák (VB) módszer Lásd „A szénvegyületek kötése” fejezet

A kémiai kötés leírása (összegzés)

Hullámegyenlet



1. Hullámfüggvény (Ψ_n , $n = 1, 2, \dots$)
2. Energia (E_n , $n = 1, 2, \dots$)

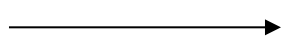
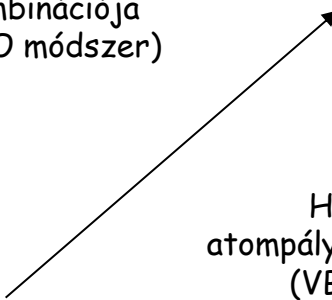
Atomok
Atompályák (AO)
(Ψ , E)

Molekulák
Molekulapályák (MO)
(Ψ_m , E_m)

Atompályák lineáris
kombinációja
(LCAO módszer)

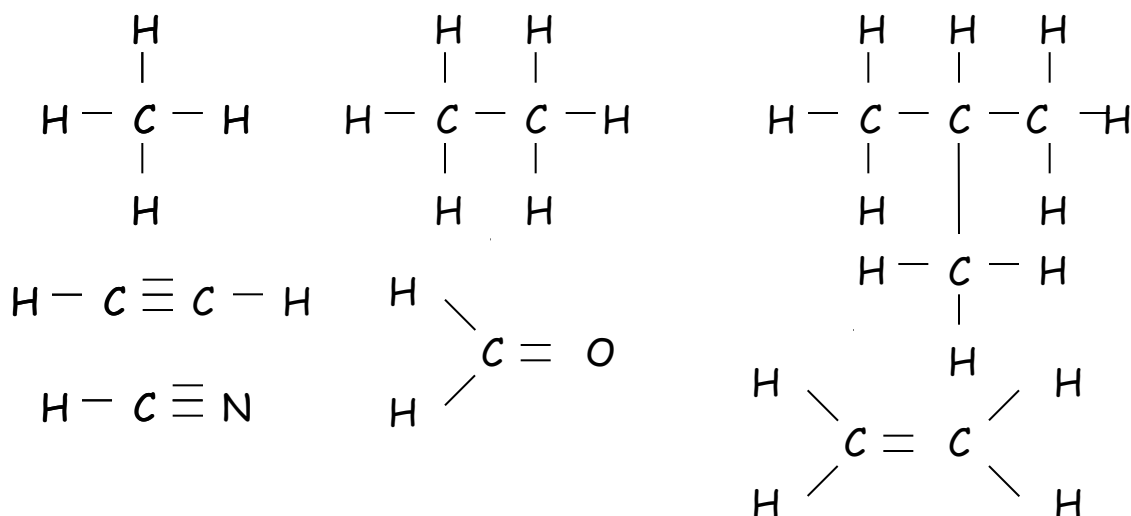
Hibridizált
atompályák kombinációja
(VB módszer)

Hibridizált
atompályák
(Linus Pauling, 1930)

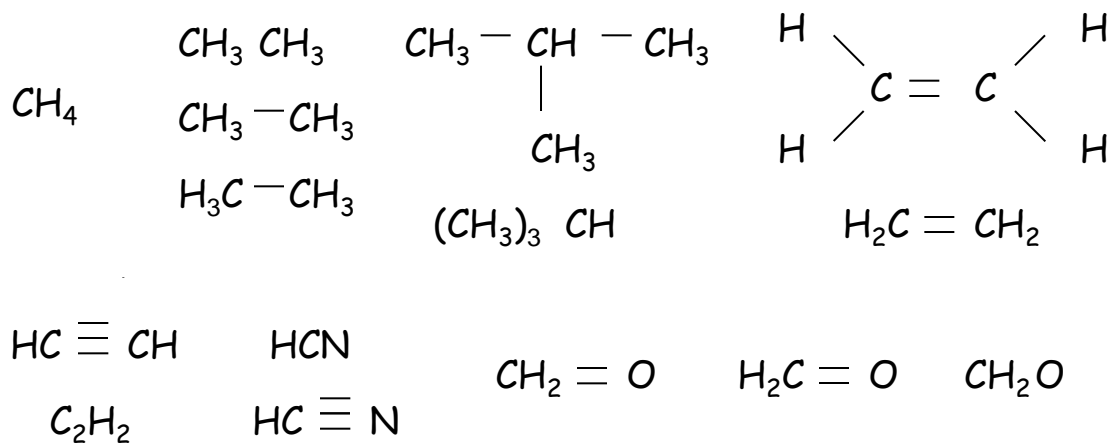


6. Szerkezetábrázolás

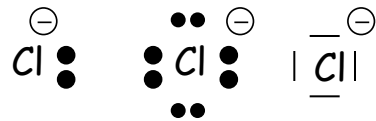
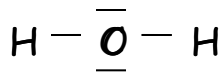
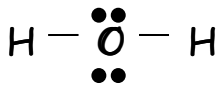
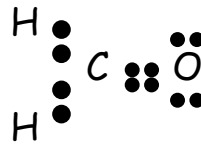
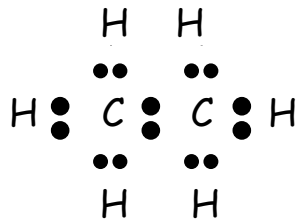
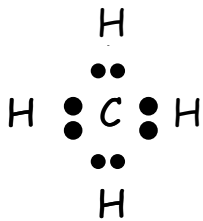
Szerkezeti képletek (vegyértékelmélet, 1870)



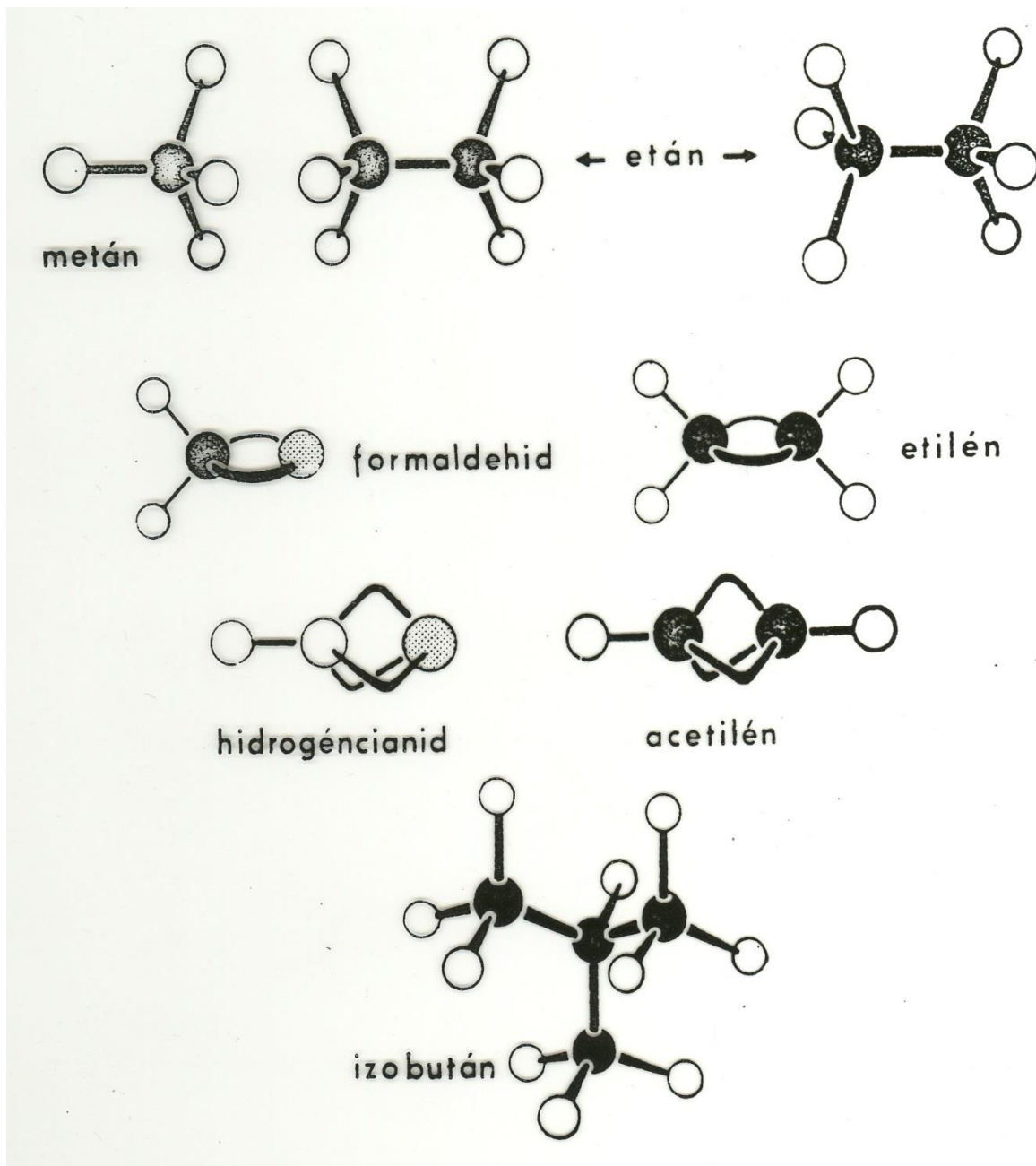
Összevont szerkezeti képletek (1916)



Elektronképletek (oktett elmélet)

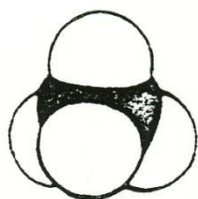
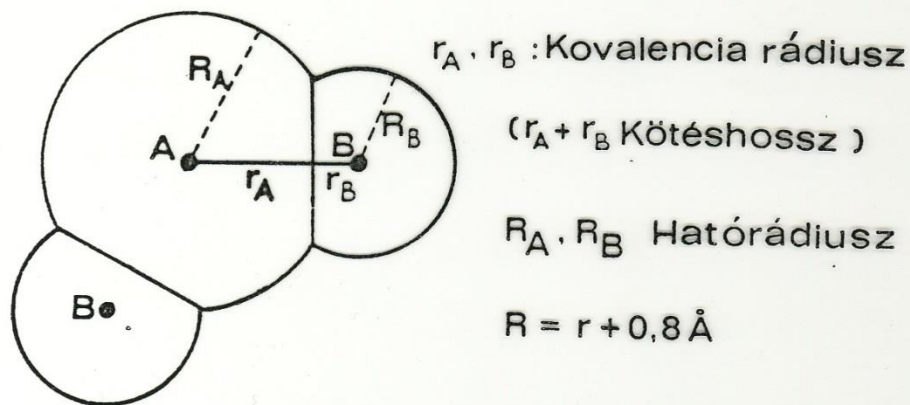


Rudas gömbmodellek (Dreiding modell)

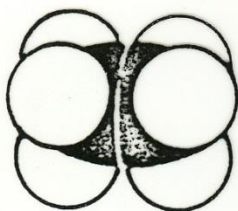


Kötéshossz arányos rudak, atom: gömb, tetraéder

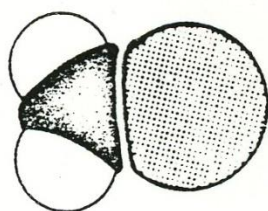
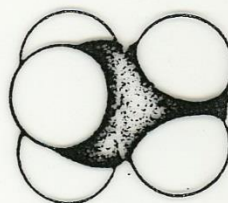
Stuart-Briegleb modellek



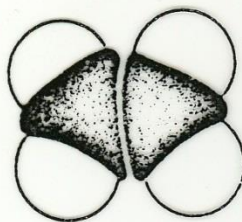
metán



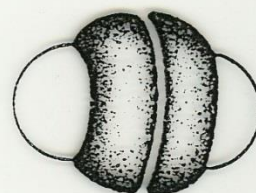
etán



formaldehid



etilén

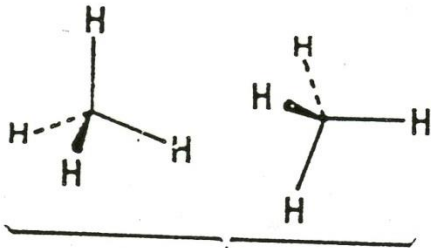


acetilén

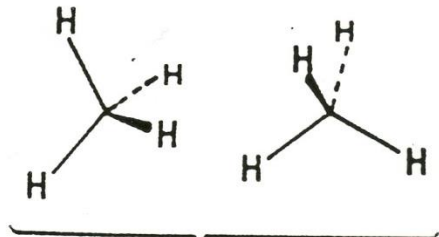
Méret- és alakhű modellek
(kötéshossz, kötésszög, hatórádiusz)

Sztereoeképletek

Cabcd strukturák pl: CH_4

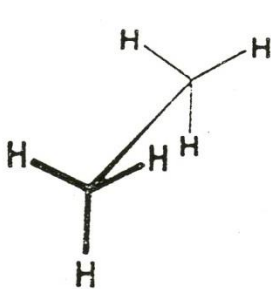


egy H" kiemelése"

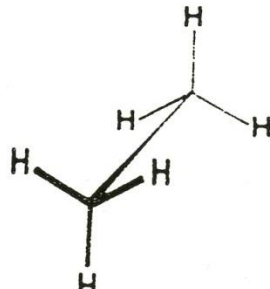


két H" kiemelése"

abcC-Cabc strukturák pl: CH_3-CH_3

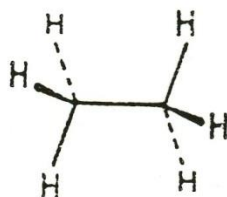
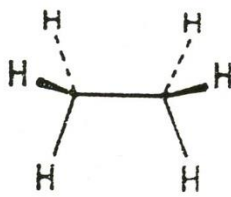


fedő állás
(eclipsed)



nyitott állás
(staggered)

"fűrészbak"-
ábrázolás



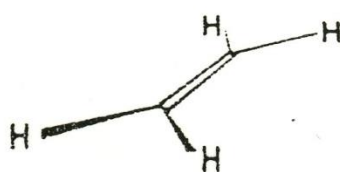
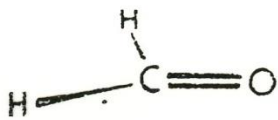
"szaggatottvonal-ék"
ábrázolás

abC=X

abC=Cab strukturák

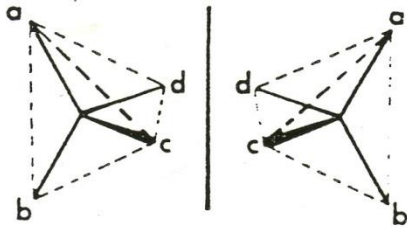
pl: $\text{CH}_2=\text{O}$

$\text{CH}_2=\text{CH}_2$

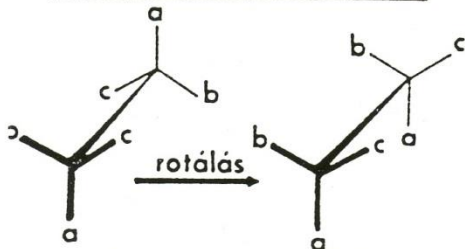


h) PROJEKTIV KÉPLETEK

Cabcd struktúra

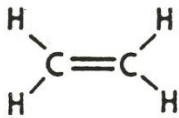


abcC-Cabc strukturák

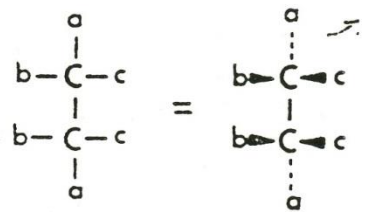
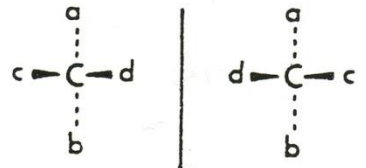
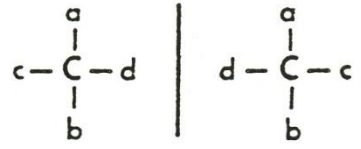


nyitott állás fedő állás

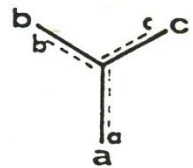
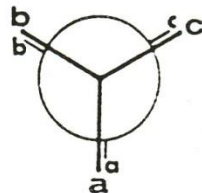
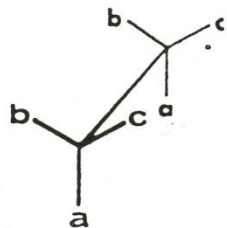
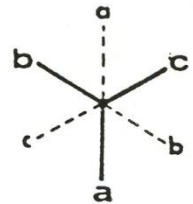
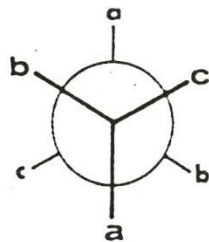
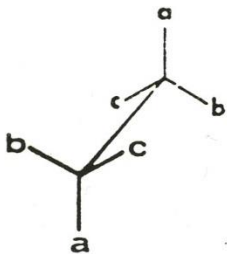
abC=Cab strukturák



függőleges élt papírra helyezni!



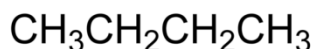
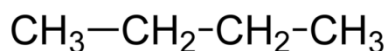
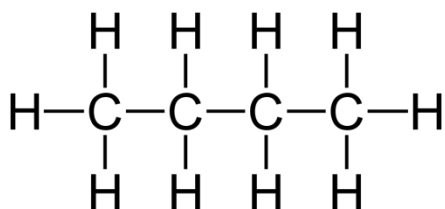
NEWMAN-KÉPLETEK



Egy példa: n-bután, C_4H_{10}

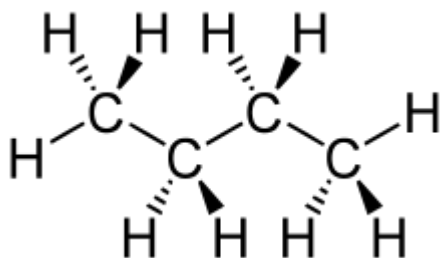
Molekula (összeg) képlet: C_4H_{10}

Szerkezeti képlet:

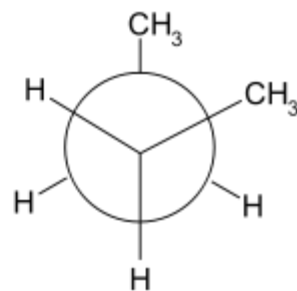
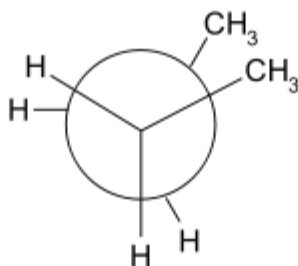
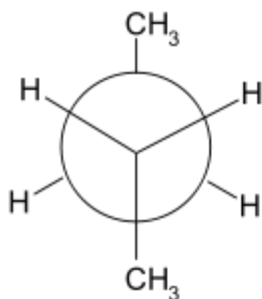


sík képlet

egyszerűsített konstitúciós képletek



térbeli éleket leíró konstitúciós képlet



konformációs képlet