

Orvosi kémia

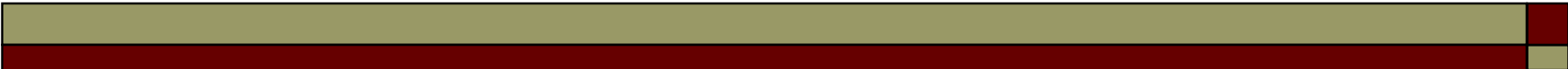
SZTE Orvosi Vegytani Intézete

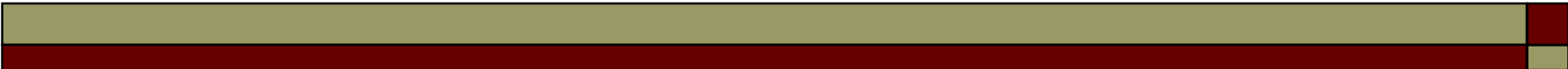
Intézetvezető: Prof. Tóth Gábor

Dóm tér 8., legfelső szint

www.mdche.u-szeged.hu



- 
-
- Előadásanyagok és egyéb információk:
<http://www.coosp.etr.u-szeged.hu/>



Tankönyvek

Általános kémia:

Gergely Pál – Erdődi Ferenc – Vereb György
Általános és bioszervetlen kémia

Szerves kémia:

Gergely Pál – Penke Botond – Tóth Gyula
Szerves és bioorganikus kémia

Anyagok csoportosítása

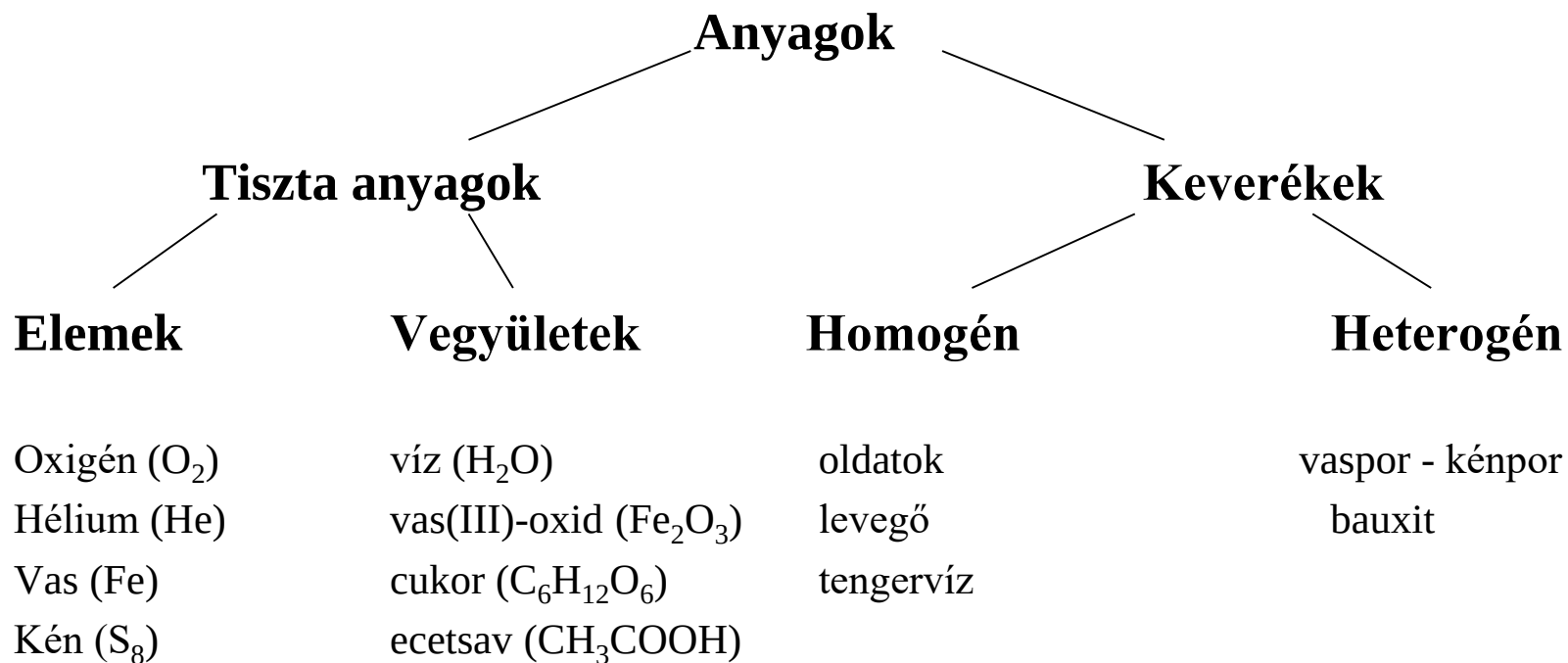
1. Tiszta anyagok: összetételük és tulajdonságaik állandóak.

- **Elemek** az azonos rendszámú atomok halmaza.
- **Vegyületekben** az atomokat, ionokat kémiai kötés kapcsolja össze, s tulajdonságaik emiatt az alkotó atomok, ionok tulajdonságaiktól jelentősen eltérnek. A vegyületekben az őket alkotó atomok, ionok aránya mindig állandó.

2. Keverékek: Összetételük változó, a komponensek fizikai eljárásokkal (pl. szűrés, oldás, bepárlás, desztillálás) elválaszthatók.

- **Homogén keverékek:** komponensei nem megkülönböztethetők.
- **Heterogén keverékek:** alkotórészei jól megkülönböztethetők.

Anyagok csoportosítása



Anyagok tulajdonságai

- **Fizikai tulajdonság:** meghatározása a kémiai összetétel megváltoztatása nélkül elvégezhető. Ezek a tulajdonságok akár érzékszerveinkkel is észlelhetők.
- **Fizikai tulajdonságok:** szín, szag, halmazállapot, olvadáspont, forráspont, vezetőképesség, mágneses tulajdonság, megmunkálhatóság.
- **Kémiai tulajdonság:** csak kémiai reakciók során figyelhetők meg, miközben az anyagok kémiai összetétele megváltozik.
- **Kémiai tulajdonságok:** reakciókészség, oxidáló tulajdonság

Kémiai alapfogalmak

Tudományos atomelmélet: John Dalton, 1803.

1. Minden kémiai elem kis, oszthatatlan részecskékből, ún. **atomok**ból áll.
 2. Egy **elem** atomjainak tulajdonságai megegyeznek, de a különböző elemek atomjainak tulajdonságai eltérnek.
 3. A **vegyületek**et két vagy több különböző elem atomjai alkotják.
 4. A **kémiai reakció** a reagensek atomjainak átrendeződése termékekké.
- Az atomok nem változnak meg a reakció során.

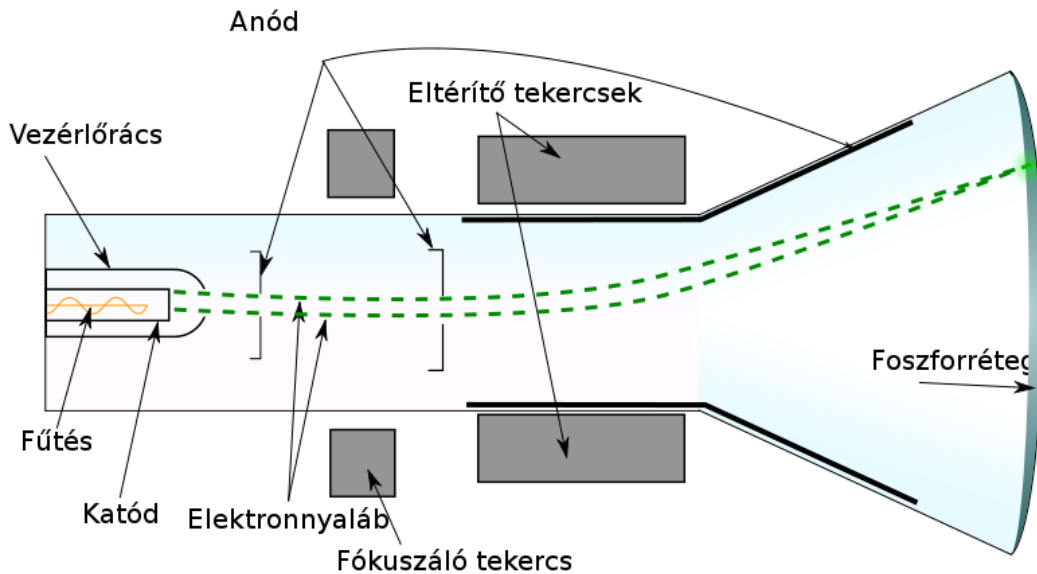
Az atomok szerkezete

Fizikai kísérletek a XIX. sz. végén – XX. sz. elején



Az atomok **nem oszthatatlanok!**

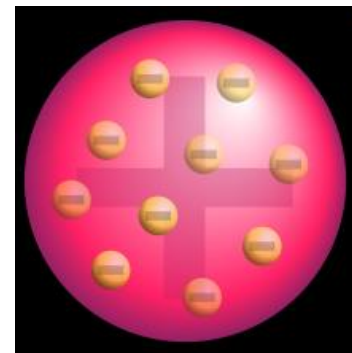
Az elektron felfedezése



Katódsugárcső
J.J. Thomson, 1897.
(1906. Nobel-díj)

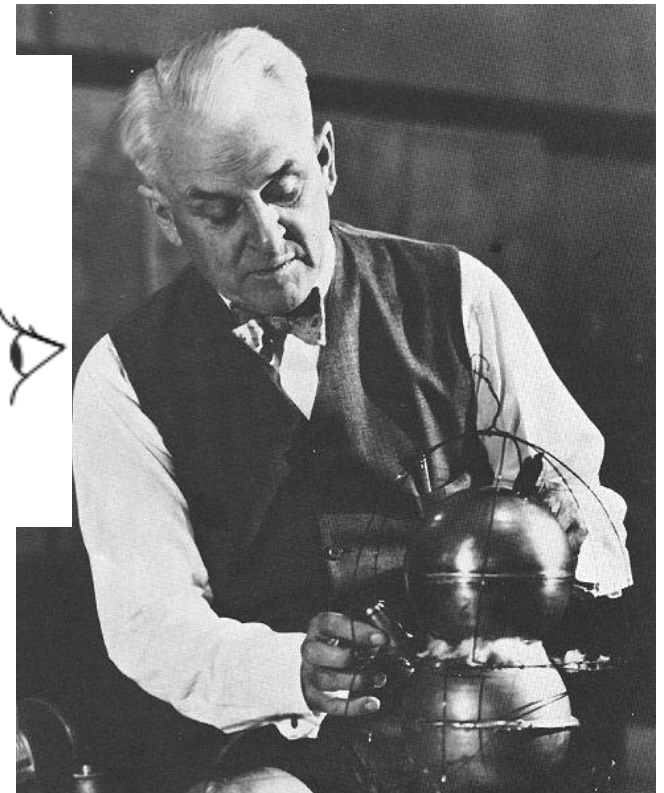
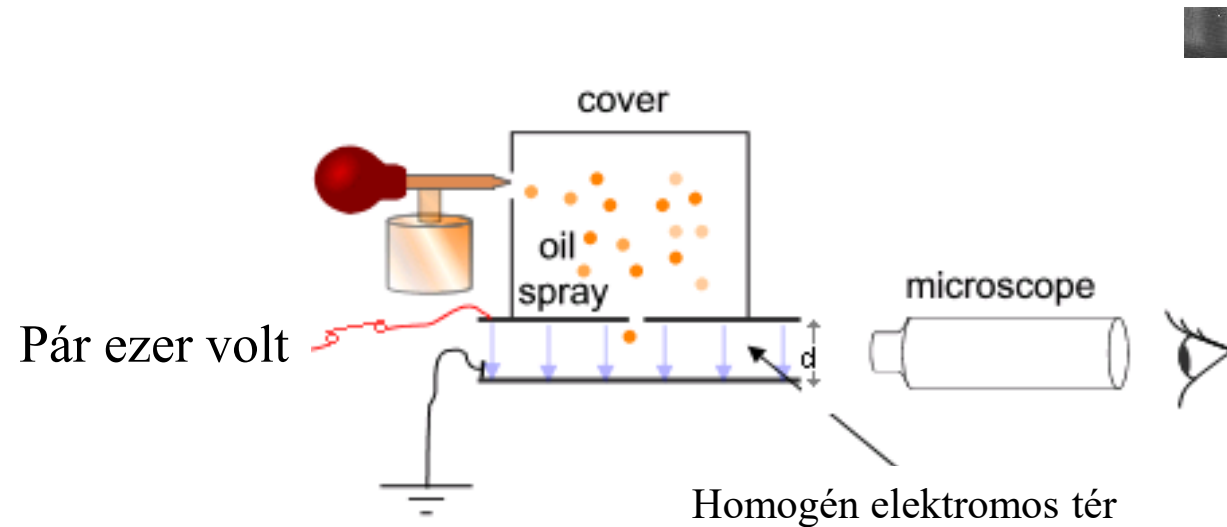


„mazsolás puding” modell



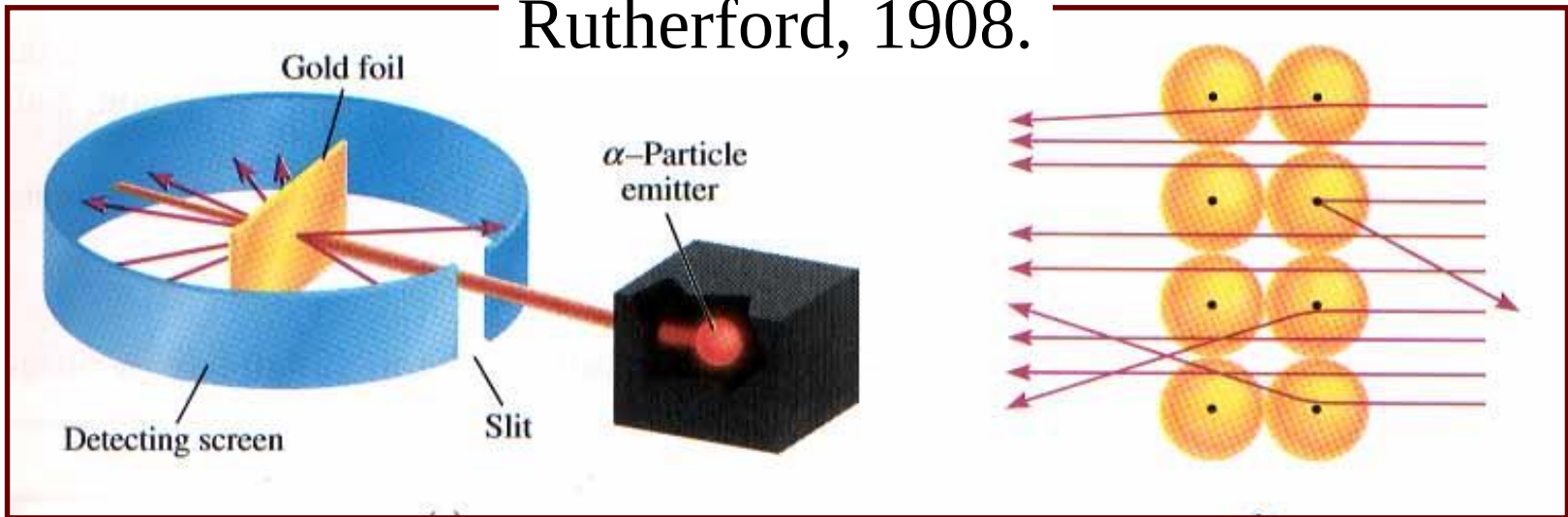
Az elektron töltésének meghatározása

□ Millikan olajcsepp kísérlete (1909)



Az atommag felfedezése

Rutherford, 1908.

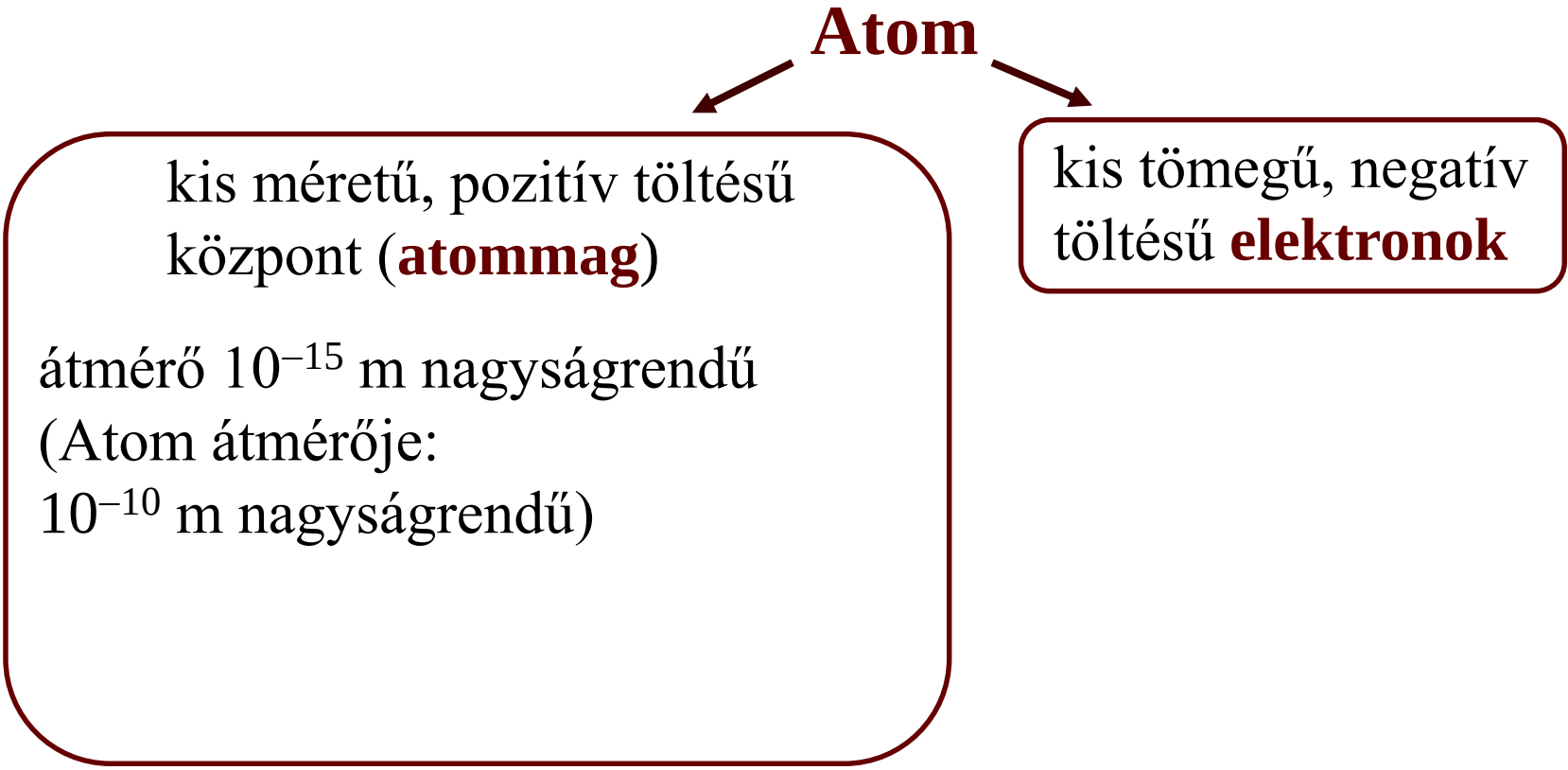


- A legtöbb α -részecske irányváltoztatás nélkül áthaladt.
 - Néhány részecske kismértékben eltérült.
 - A részecskék kis hányada nagyon eltérült.
- ➔
- Az atommag pozitív töltésű.
 - Az atommag kicsi.

Rutherford-féle atommodell

Bolygó-modell, 1911.

Atom



```
graph TD; Atom[Atom] --> Nucleus[kis méretű, pozitív töltésű központ (atommag)]; Atom --> Electrons[kis tömegű, negatív töltésű elektronok];
```

kis méretű, pozitív töltésű
központ (**atommag**)

átmérő 10^{-15} m nagyságrendű
(Atom átmérője:
 10^{-10} m nagyságrendű)

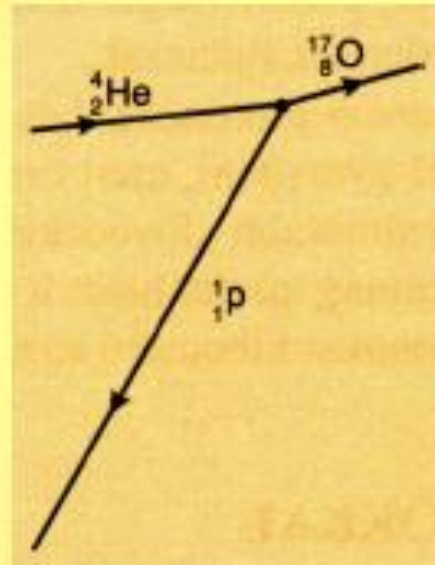
kis tömegű, negatív
töltésű **elektronok**

nukleonok: **protonok** és **neutronok**

1918, Ernest Rutherford

A proton felfedezése

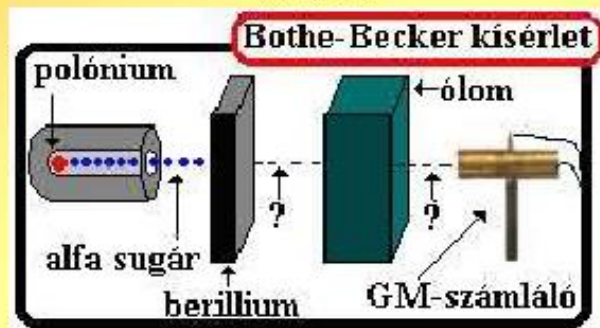
1925: **Blacket**: ködkamrában lefényképezte a magreakció nyomát



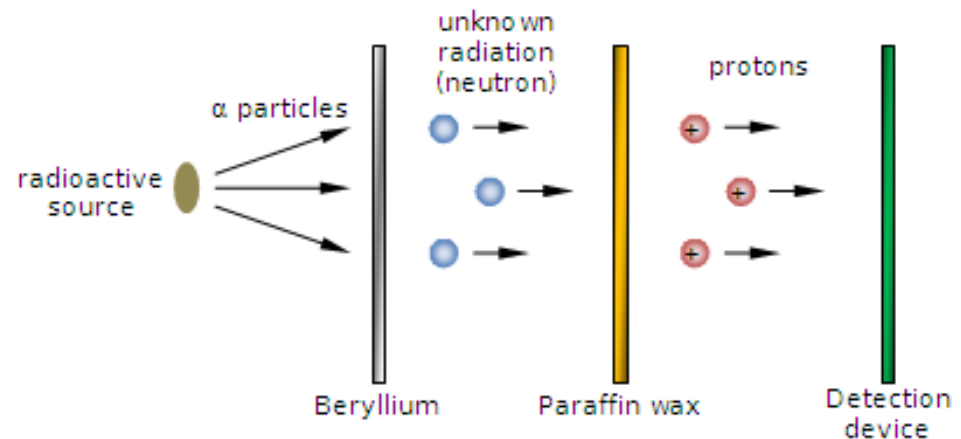
nukleonok: protonok és neutronok

A neutron felfedezése

1930: Bothe és Becker: α -részecskék segítségével próbálták könnyű elemekben magreakciót létrehozni

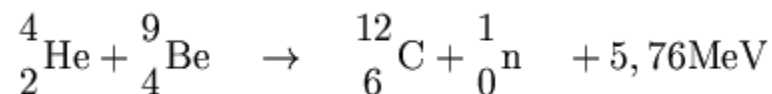


- Berilliumot bombázva α -részecskékkel igen nagy áthatoló képességű, semleges részecskékből álló sugárzást tapasztaltak



1932 Irène Joliot-Curie, Frédéric Joliot Curie:

1932, James Chadwick



Az elemi részecskék tulajdonságai

Elemi részecske	Tömeg (kg)	Töltés (C)	Relatív tömeg (a _e)	Relatív töltés (e)
Elektron (e⁻)	$9,10953 \cdot 10^{-31}$	$-1,60219 \cdot 10^{-19}$	0,00055	-1
Proton (p⁺)	$1,67265 \cdot 10^{-27}$	$+1,60219 \cdot 10^{-19}$	1,00728	+1
Neutron (n⁰)	$1,67495 \cdot 10^{-27}$	0	1,00866	0

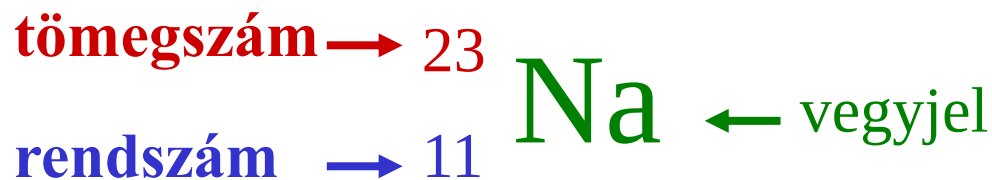
Az atom jellemzése

Rendszám (Z): az atommagban lévő protonok száma.

Tömegszám (A): az atommagban lévő protonok és neutronok számának összege.

$A = Z + N$, ahol N az atommagban lévő neutronok száma

Jelölés:



(11 proton, 12 neutron és 11 elektron)

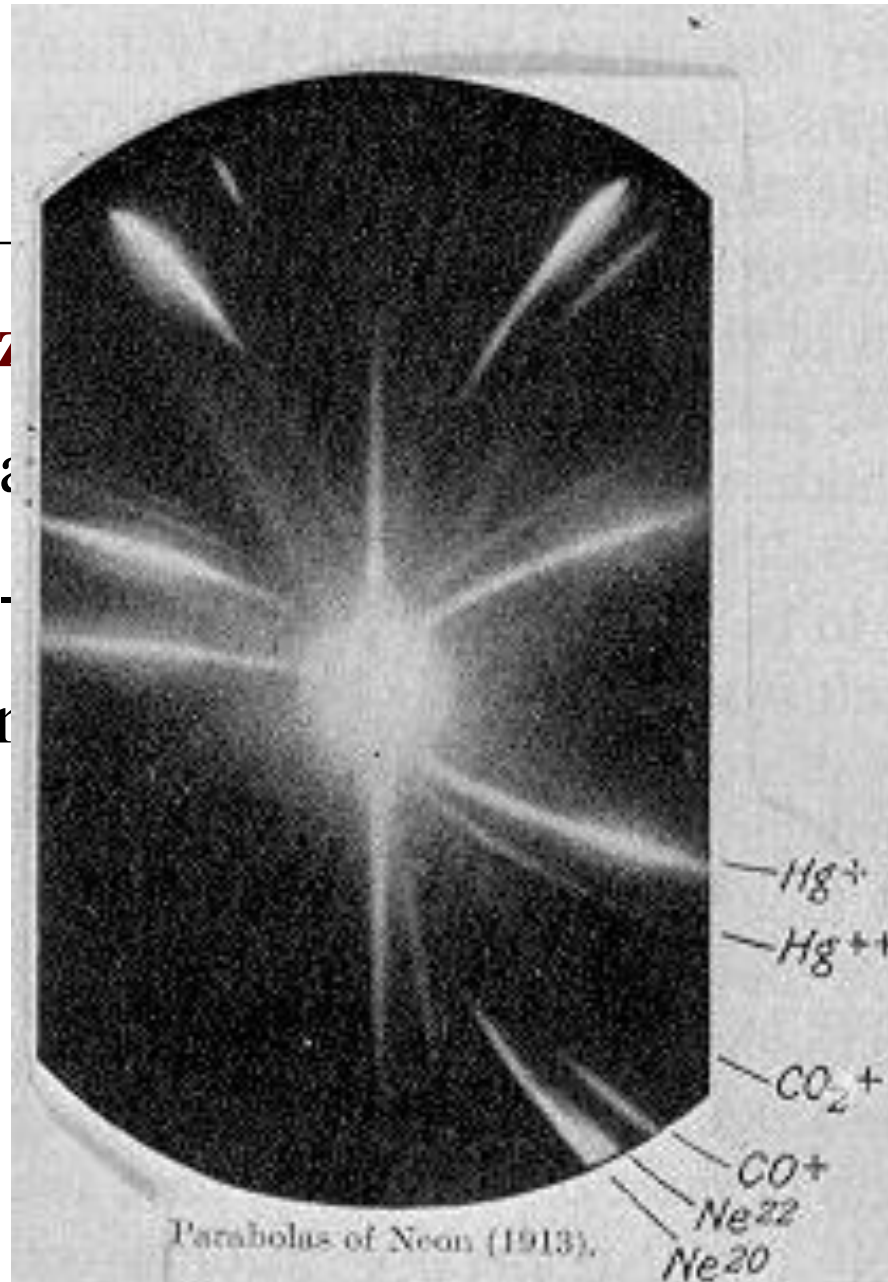
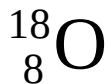
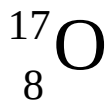
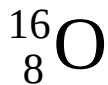
Azonos rendszerek

(Az izotópokban)

Elnevezés: izotóp

A természetben

Példa:



azonos számú atomok.

(izotóp.)

„azonos hely”

keveréke

állandó

Atomtömeg

Az atomok tömege nagyon kicsi.

${}^1_1\text{H}$ tömege: $1,6736 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Önkényes skála.

Egység: **atomi tömegegység (ate)**

1 ate = ${}^{12}\text{C}$ tömegének 1/12-ed része

Relatív atomtömeg (A_r) (az adott elem természetes izotópösszetételéből számolható súlyozott átlag)

Pl. (75.781%) $A_r {}^{35}\text{Cl} = 34.9688$
 A_r (24.22%) ${}^{37}\text{Cl} = 36.9659$

Relatív molekulatömeg (M_r) (a molekulát alkotó atomok relatív atomtömegeinek összege)

$(75,78 \cdot 34,968 + 24,22 \cdot 36,966) / 100 = 35,45$

Példa a relatív atomtömeg számolására

Pl.

Előfordulás: 75.781%

$$A_r {}^{35}\text{Cl} = 34.9688$$

Előfordulás: 24.22%

$$A_r {}^{37}\text{Cl} = 36.9659$$

$$(75,78 \times 34,968 + 24,22 \times 36,966)/100 = 35,45$$

A mól fogalma és az Avogadro-állandó

Alapegység: **anyagmennyiség** (jele: **n**)

Mértékegység: **mól** (jele: **mol**)

1 mol annak az anyagnak az anyagmennyisége, amely ugyanannyi elemi egységet (atomot, molekulát, iont, stb.) tartalmaz, amennyi C-atom található 12,00 g ^{12}C -nuklidban.

12,00 g ^{12}C -nuklidban **$6,022 \cdot 10^{23}$** db C-atom van.

Avogadro-állandó

Moláris tömeg v. moltömeg (M), mértékegysége: g/mol

Izotópok

A hidrogén izotópjai

${}^1_1\text{H}$ prócium, 99,985%

${}^2_1\text{H}$ deutérium, 0,015%, nehézvíz (D_2O) alkotórésze

${}^3_1\text{H}$ trícium, közel 0%, radioaktív (β^- bomlás)

Az izotópok egy része radioaktív.



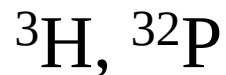
Radioaktivitás

A nem stabil atommagok bomlása sugárzás kibocsájtása közben.
Henri Becquerel, 1896.

	Típus	Kibocsájtott részecske	Ok
	α-bomlás	He^{2+}	túl sok p^+ ($Z > 83$)
β-bomlás	negatív β -bomlás	e^-	N/Z túl nagy
	pozitron emisszió	pozitron	N/Z túl kicsi
	elektron befogás	röntgen foton	N/Z túl kicsi
	γ-bomlás	γ -foton	nagy energiájú atommag

Radioaktív izotópok felhasználása

Kutatás: biokémiai, gyógyszerhatástani vizsgálatok



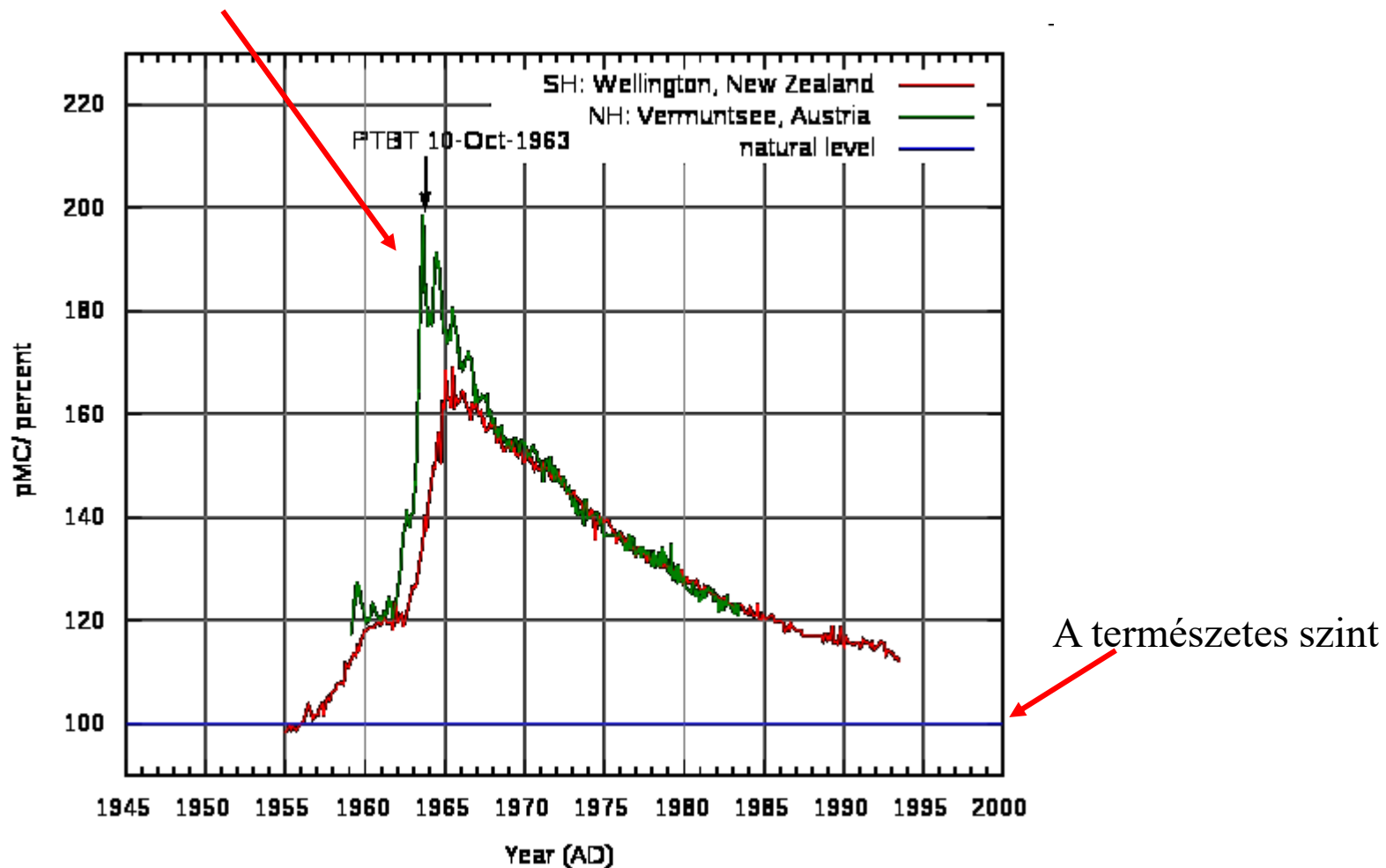
Ipari alkalmazás

Régészet: kormeghatározás ^{14}C izotóppal ($t_{1/2} = 5730$ év)

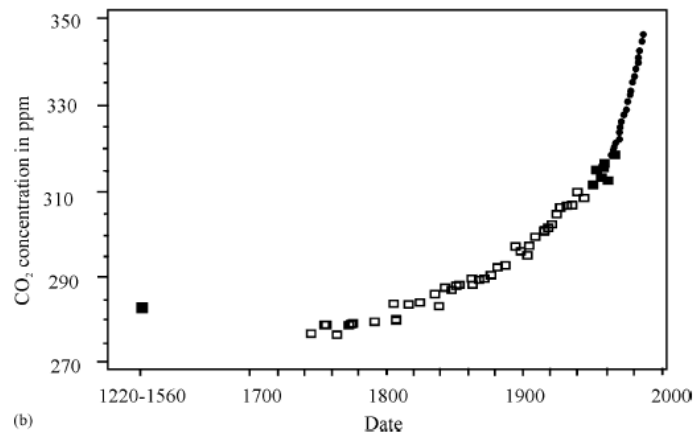
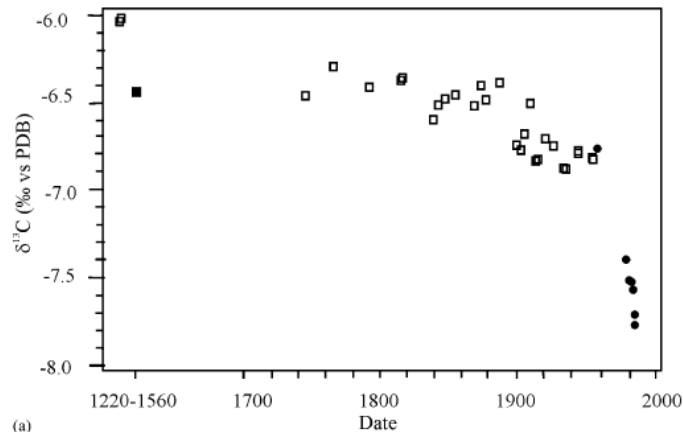
($t_{1/2}$: felezési idő)

A ^{14}C mennyiségének változása 1955-1993

A növekedés forrása: légköri atomkísérletek



A légköri CO₂ ¹³C/¹²C arányának változása a XIII. századtól napjainkig



Radioaktív izotópok a gyógyászatban

Nukleáris medicina, 1950-es évek, ^{131}I

Rövid felezési idő ($t_{1/2}$)!!!

Diagnosztika

^{131}I (13 h) és ^{67}Ga : pajzsmirigy

szcintigráfia

Emissziós tomográfia:

PET (pozitron emissziós tomográfia):

^{18}F (110 min), ^{11}C (20 min), ^{13}N (10 min),

^{15}O (2 min)

SPECT (foton emissziós computer tomográfia)

$^{99\text{m}}\text{Tc}$ (6 h), ^{131}I (13 h), ^{201}Tl (73 h)

Terápia

A sejtek genetikai állománya
roncsolódik



Sejtosztódás gátlása



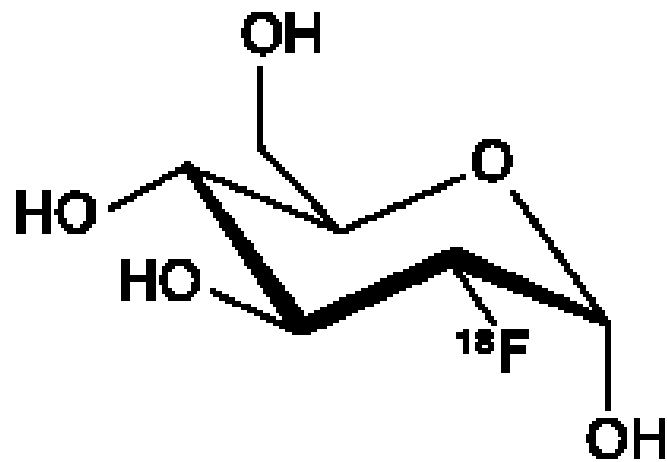
Daganatsejtek sugárérzékenyebbek.

Külső vagy belső sugárforrás.

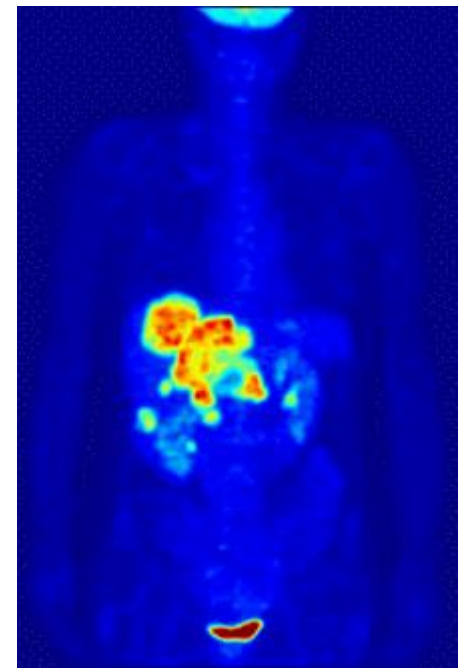
^{131}I

^{60}Co (γ -sugárzó)

PET (pozitron emissziós tomográfia):



2-dezoxi-2- ^{18}F -glükóz



Stabil izotópok a gyógyászatban

30-40 % halálos

Table 1

Theoretical maximal values for the ratios of rate constants of a reaction involving the lighter isotope (k^L) to that of the heavier isotope (k^H) (from [28])

k^H/k^L	18	} Reakciósebesség arányok
$k^{12}\text{C}/k^{13}\text{C}$	1.25	
$k^{14}\text{N}/k^{15}\text{N}$	1.14	
$k^{16}\text{O}/k^{18}\text{O}$	1.19	

60% mellékhatás nélkül

Stabil izotópok a gyógyászatban

Helicobacter pylori
ureáz



Az atomok elektronszerkezete

Az atomok által **kisugárzott** vagy **elnyelt** fény színekének tanulmányozása.

emissziós színeképek

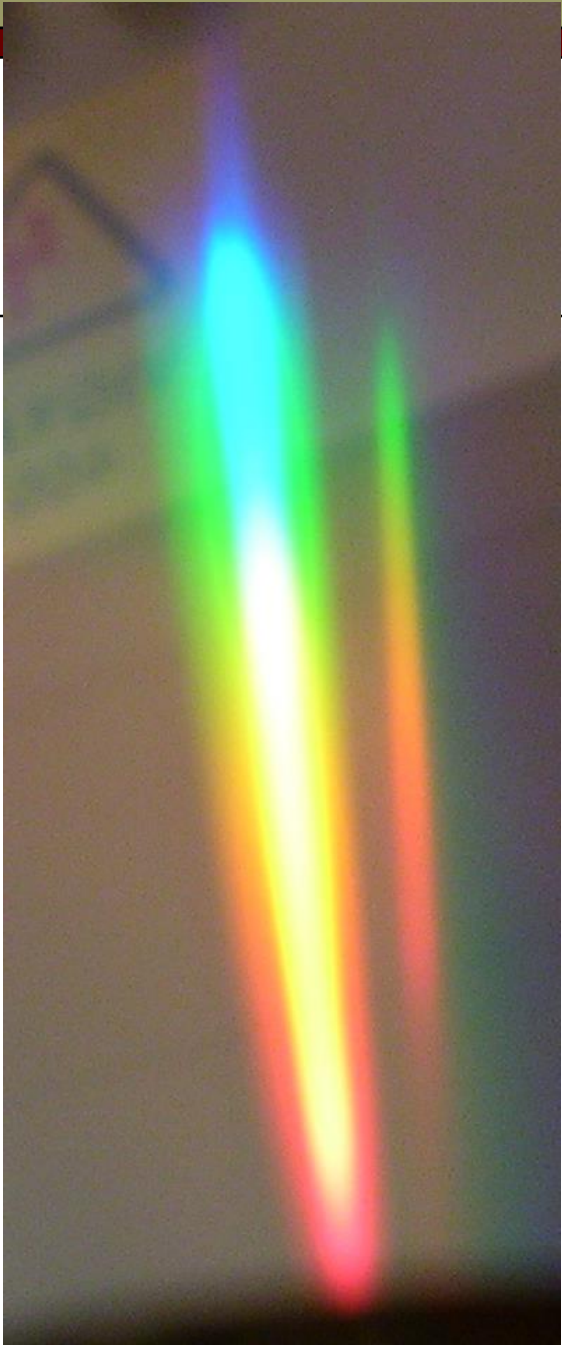
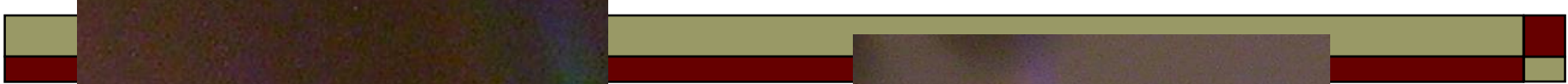
abszorpciós színeképek

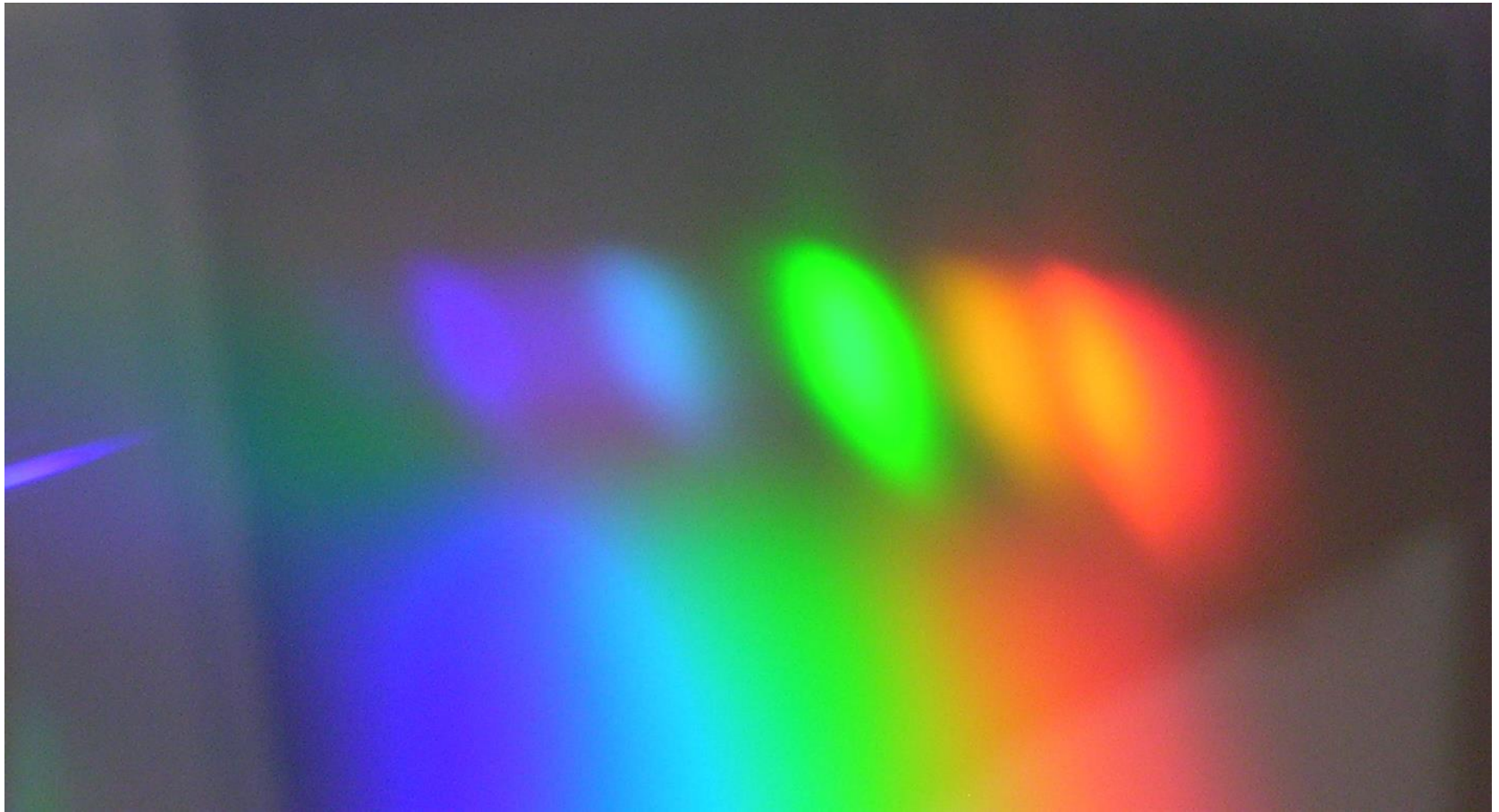
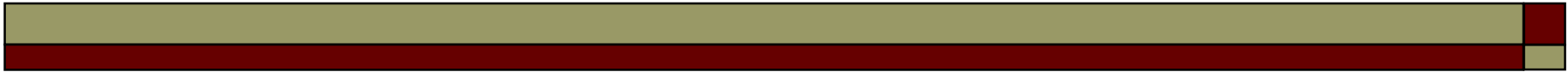
1. gerjesztés
2. kisugárzott fény felbontása prizmával, optikai ráccsal

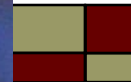
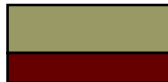
Az atomok emissziós színeképe vonalas (sávos):

csak egyes frekvenciák vagy frekvenciasávok fordulnak elő benne.

A színeképvonalak **sorozatokat** alkotnak.







Kvantumelmélet

Kvantumelmélet (kvantummechanika): XX. sz. eleje

Planck (1900-1904): az energia kis mennyiségekben, **kvantumokban** emittálódik.

$$E = h \cdot \nu, \text{ ahol } h = 6,626 \cdot 10^{-24} \text{ Js}$$

Einstein (1905): a fény kettős természete, **fénykvantumok** létezése.

A fény energiát hordozó egysége, a fénykvantum, a **foton**.

A Bohr-féle atommodell

Bohr, 1913.

Posztulátumok:

1. Energiaszint posztulátum

Az elektron csak meghatározott sugarú körpályán keringhet.

Az elektron energiája csak meghatározott értékeket vehet fel.

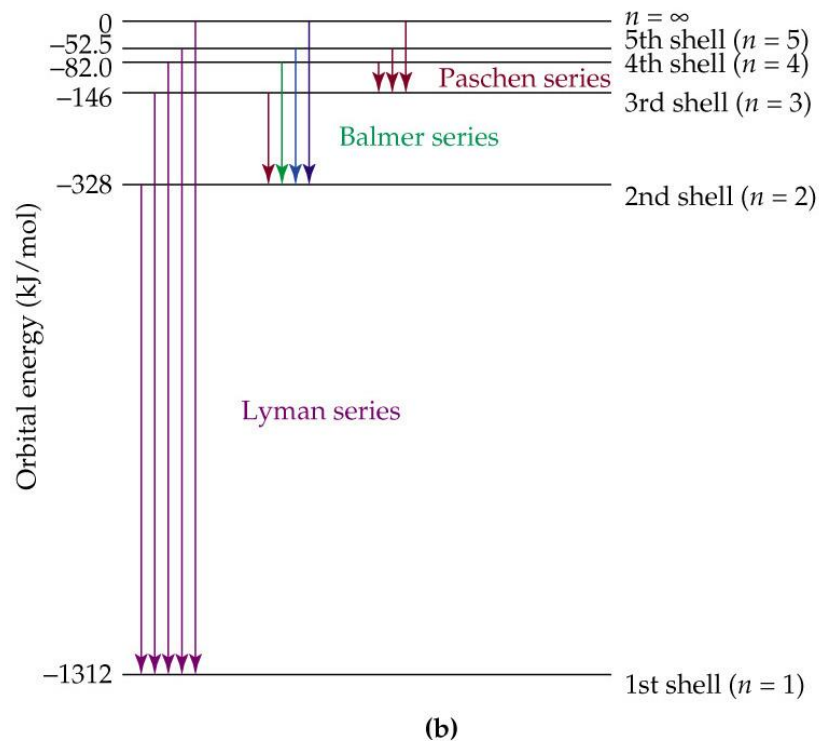
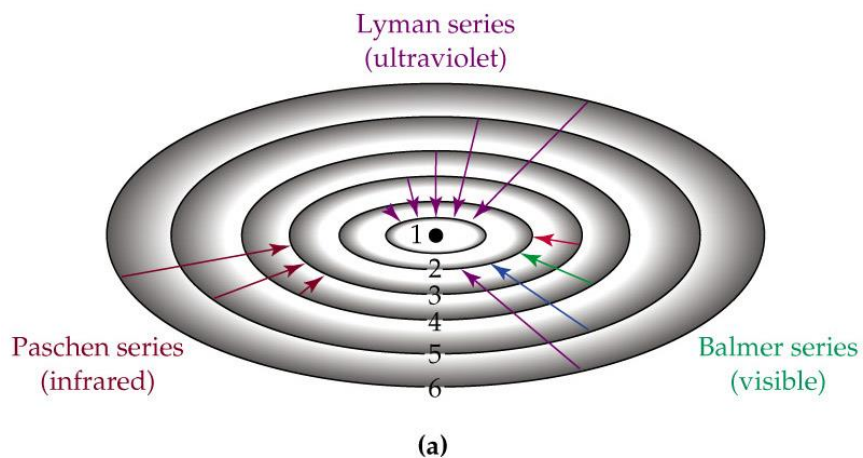
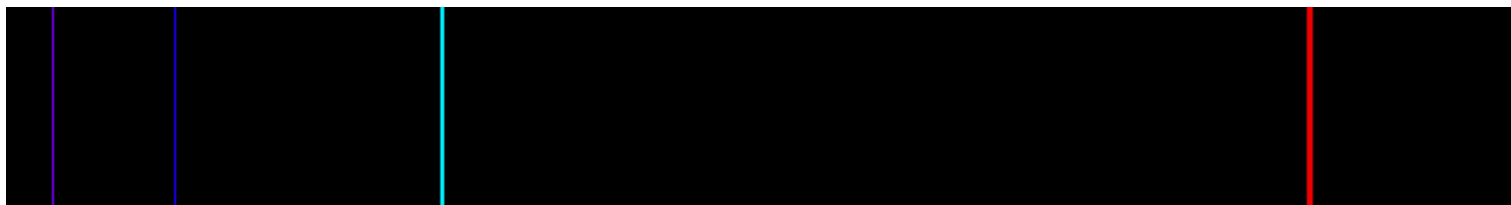
2. Átmenet az energiaszintek között

A kisugárzott vagy elnyelt energia egyenlő a két pálya energiaszintje különbségével: $\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot \nu$

Egyelektronos rendszerekre igaz: H-atom, He^+ , H_2^+

Megmagyarázza ezek **vonalas színeképét**.

A hidrogén vonalas színeképe



Az elektron hullámtermészete

de Broglie (1924): az elektron is kettős természetű



elektronhullámok



Kvantummechanika:

az elektron tulajdonságai **hullámfüggvények**kel írhatók le.

Schrödinger (1926), **Schrödinger-egyenlet**: az elektron hullámmozgását írja le az atommag erőterében.

Heisenberg (1927): határozatlansági elv

Egy elektron helyzete és impulzusa nem határozható meg egyidejűleg tetszőleges pontossággal.

A kvantummechanikai atommodell

Statisztikus jellegű.

Megállapításai:

1. Az atomban az elektron energiája meghatározott, *kvantált*.
2. Az elektron térbeli helyzete és impulzusa nem adható meg tetszőleges pontossággal.
3. Az elektron legvalószínűbb tartózkodási helye adható meg (elektronfelhő).

Atompálya (atomorbitál): az a térrész, ahol nagy a tartózkodási valószínűség.

Az elektronok **négy kvantumszámmal** írhatók le.

Kvantumszámok

Főkvantumszám (n): $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

K, L, M, N, ... **héjak**

Az elektron távolsága az atommagtól. (Az atompálya sugara.)



Meghatározza az **elektron energiáját**.

Mellékkvantumszám (l): $l = 0, 1, 2, 3, \dots (n-1)$

s, p, d, f, ... **alhéjak**

Az atompálya alakja.

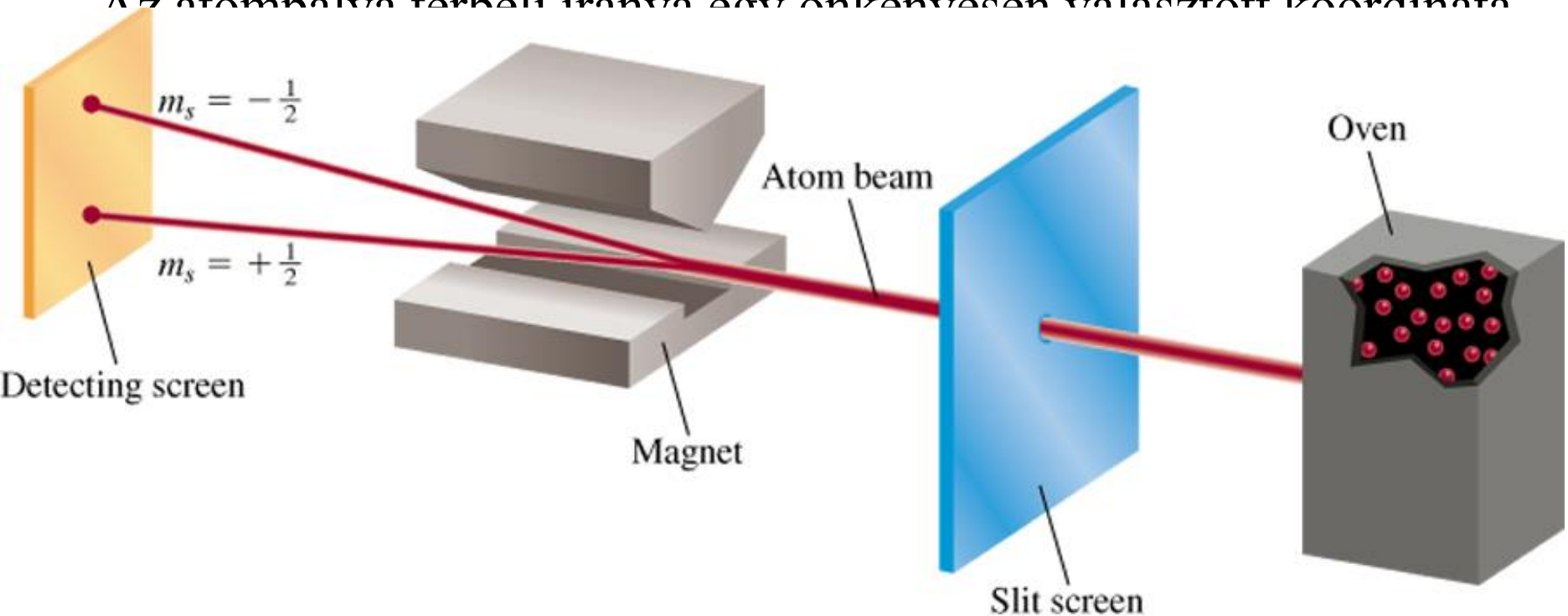
Függ tőle az **elektron energiája**.

Kvantumszámok

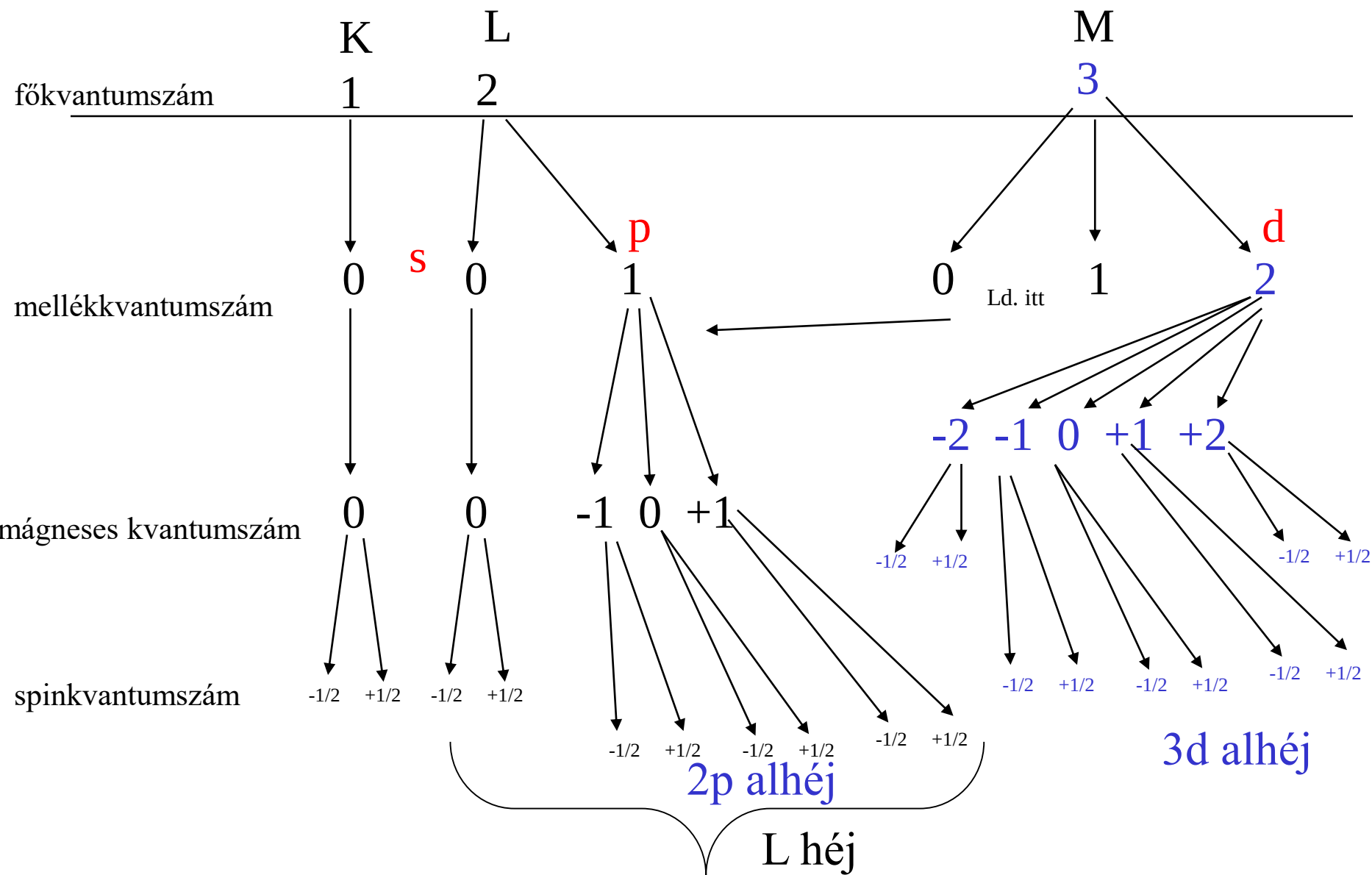
Mágneses kvantumszám (m_l): $m_l = -l, \dots 0 \dots +l$

atompályák

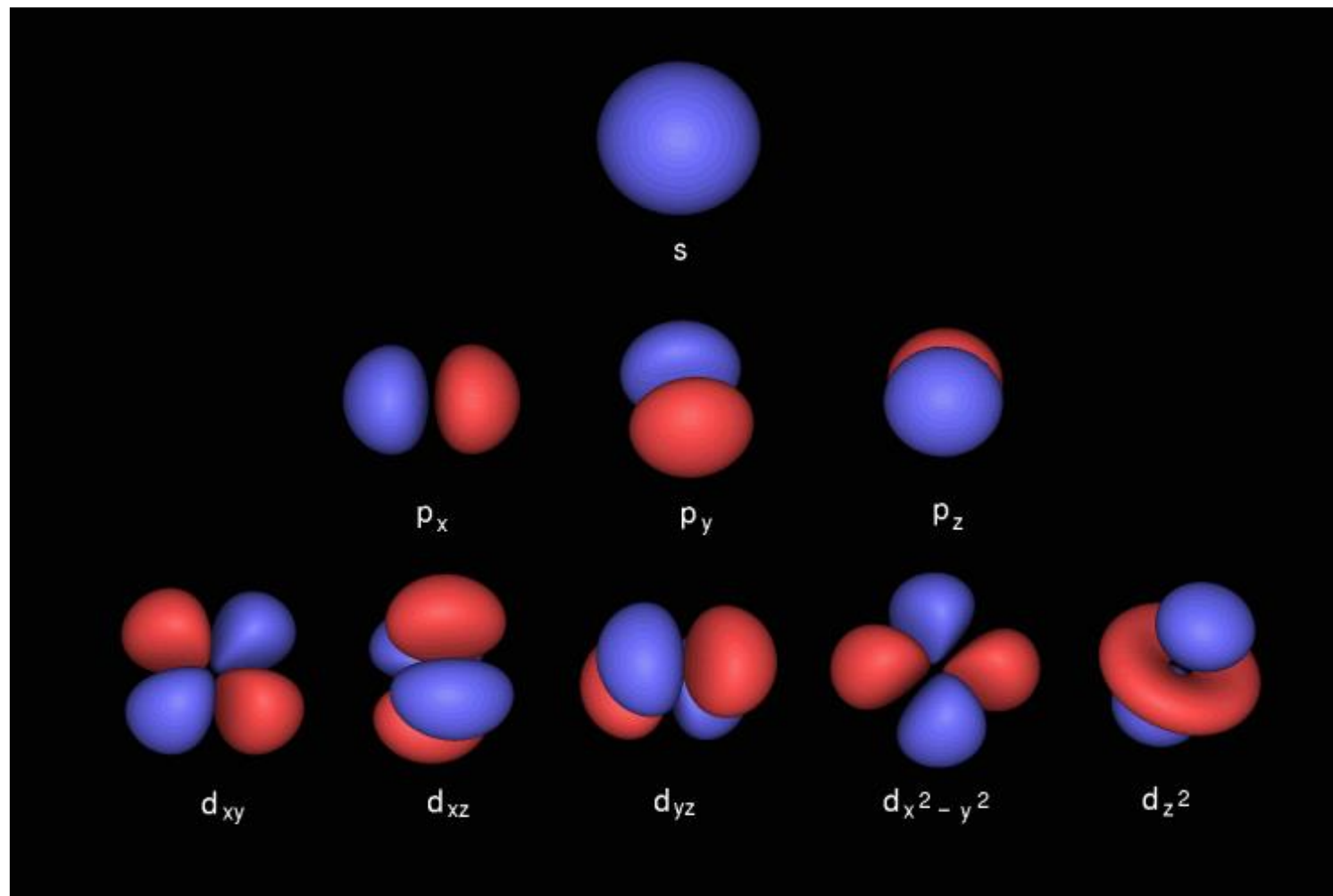
Az atompálya térbeli iránya egy önkényesen választott koordináta



A kvatumszámok lehetséges értékei

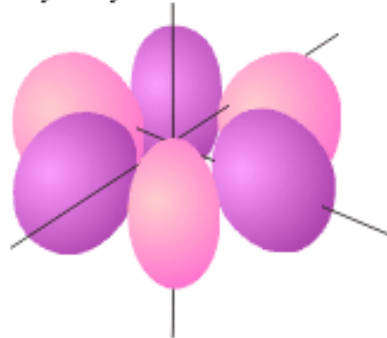


Atompályák alakja

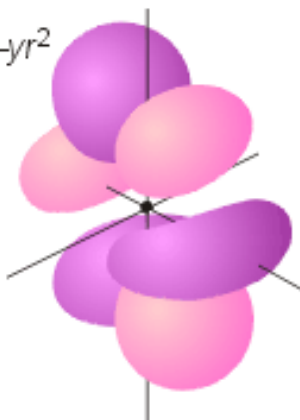


Atompályák alakja

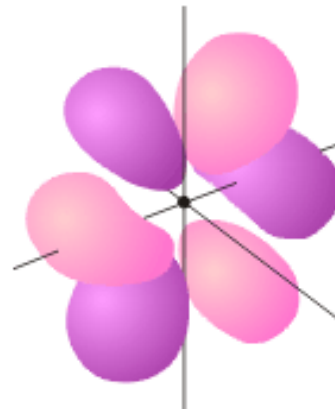
$$4f_{y^3-3yx^2}$$



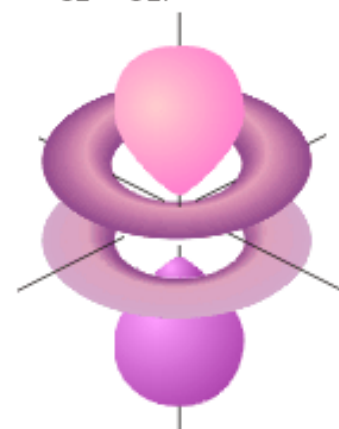
$$4f_{5yz^2-yr^2}$$



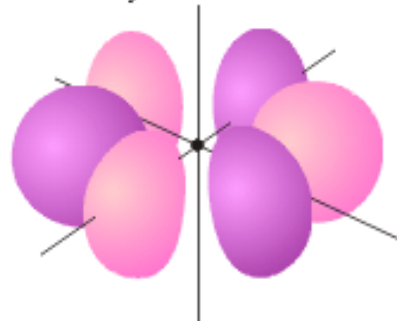
$$4f_{5xz^2-3xr^2}$$



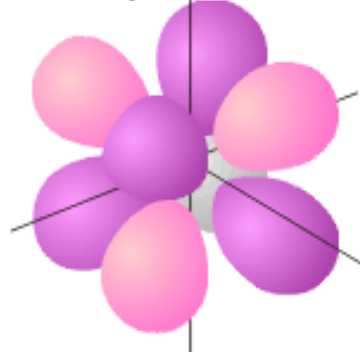
$$4f_{5z^3-3zr^2}$$



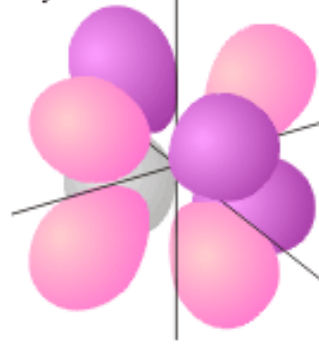
$$4f_{x^3-3xy^2}$$



$$4f_{zx^2-zy^2}$$



$$4f_{xyz}$$



Az elektronhéjak felépülésének törvényei

Az energiaminimumra való törekvés elve

Az elektronok az atompályákat növekvő energia szerinti sorrendben töltik fel. Az alhéjak növekvő energia szerinti sorrendje:

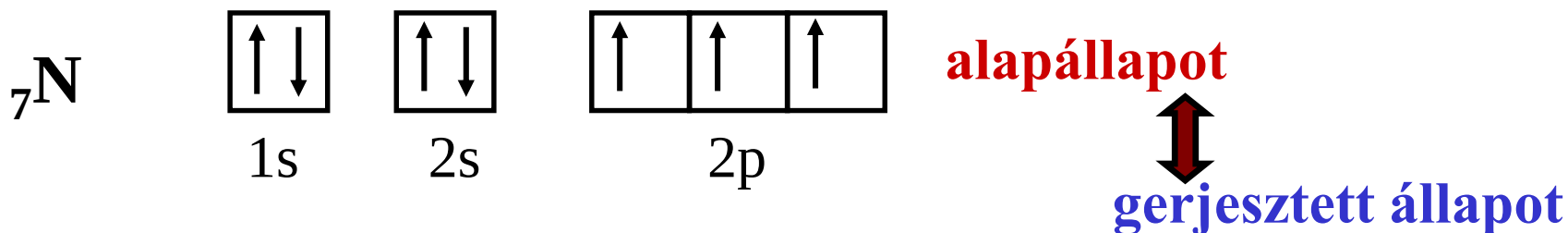
$$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s < \dots$$

Pauli-féle tilalmi elv

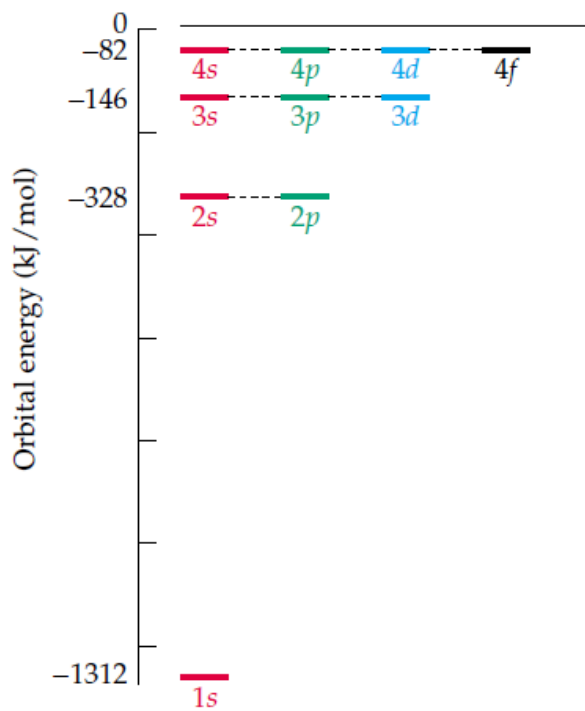
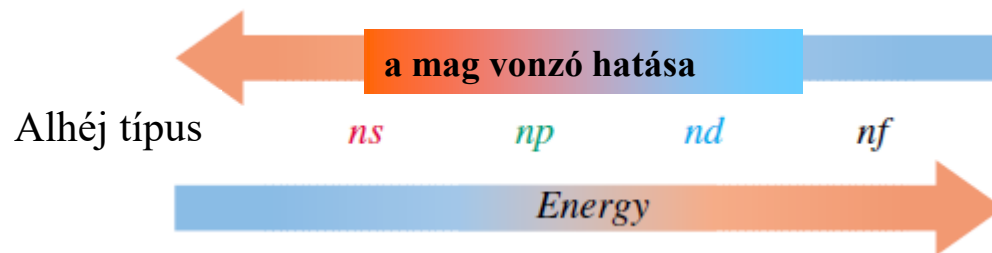
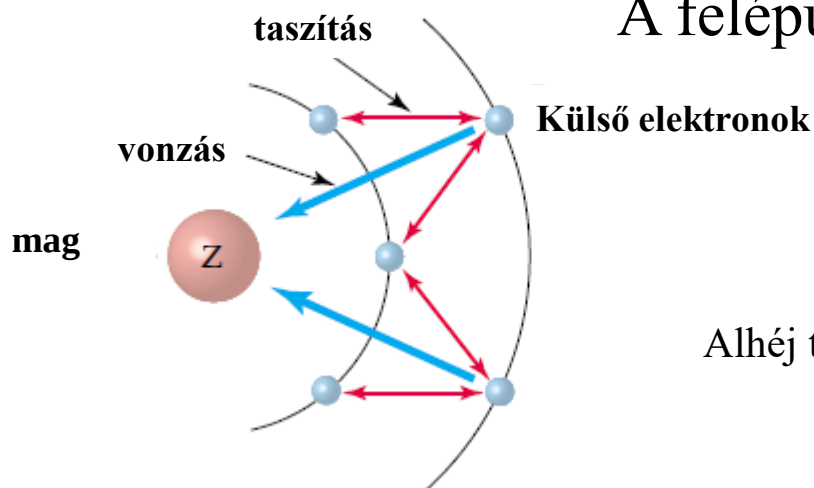
Az atomban nem lehet két olyan elektron, amelynek mind a négy kvantumszáma azonos.

Hund-szabály (maximális multiplicitás elve)

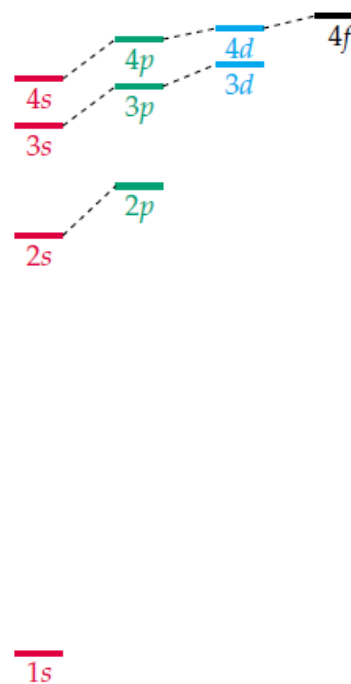
Az alhéjak atompályái egyenként, azonos párosítatlan spinnel töltődnek fel mindaddig, amíg félig be nem töltődik az alhész.



A felépülés sorrendjének magyarázata



(a) Hydrogen



Többelelektronos atom

Az elektronhéjak felépülésének törvényei

