BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szerves kémia sokszínű világa

Dr. Hornyánszky Gábor

Egyetemi docens

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Budapesti Teleki Blanka Gimnázium 2025.02.17.

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR (VBK)

OLÁH GYÖRGY

NOBEL DÍJ 1994

Bemutatkozó film

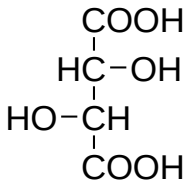
BME Vegyészmérnöki
és Biomérnöki Kar

BME VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR
1873

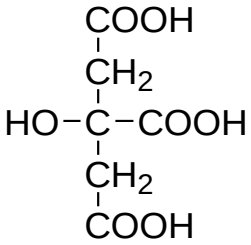
A Szerves kémia tárgya - bevezetés

- XVIII. század – A szerves anyag előállításához elő szervezetre van szükség (*Vis vitalis* elmélet)
- Példák azonosított szerves vegyületekre:

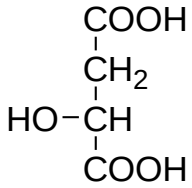
Borkősav: (*Scheele*, 1769)



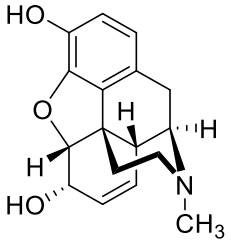
Citromsav: (*Scheele*, 1784)



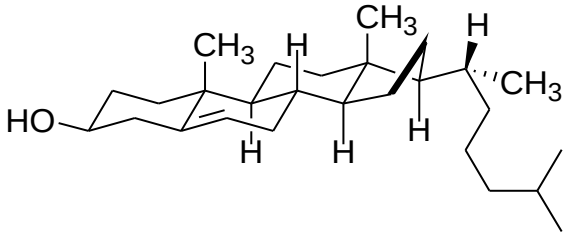
Almasav: (*Scheele*, 1785)



Morfin: (*Sertürner*, 1804)

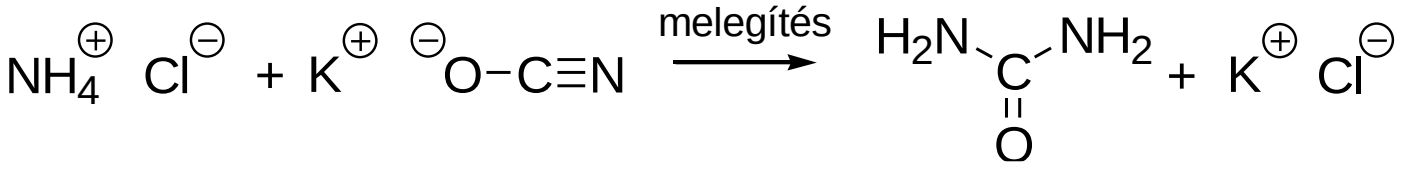


- **Koleszterin**: (*Chevreul*, 1815)



A Szerves kémia tárgya - bevezetés

- A *vis vitalis* elmélet megdöntése – Wöhler, 1828



- A szénvegyületek rendkívül nagy száma, hasonló kémiai tulajdonságaik, valamint az, hogy az élővilág vegyületei, a biomolekulák, jellemzően szerves vegyületek, indokolják, hogy a *szénvegyületek* kémiáját, a *szerves kémiát*, továbbra is külön tudományágként kezeljük.

  Szerves vegyületek száma: kb. 20 millió

  Szervetlen vegyületek száma: kb. 2 millió

A szerves vegyületek csoportosítása

Vegyületcsaládok:

- **Paraffin szénhidrogének:** telített szénhidrogének
- **Olefinek, diolefinek:** kettős kötést tartalmazó szénhidrogének
- **Acetilén származékok:** hármas kötést tartalmazó szénhidrogének
- **Aromás szénhidrogének:** benzol és származékai
- **Halogéntartalmú szerves vegyületek:** halogén atomokat tartalmazó vegyületek
- **Hidroxi vegyületek:** alkoholok és fenolok (-OH csoportot tartalmazó vegyületek)
- **Éterek:** éter-kötést (C-O-C egységet) tartalmazó vegyületek
- **Karbonil-vegyületek (oxovegyületek):** szén-oxigén kettős kötést (C=O) tartalmazó vegyületek (aldehidek és ketonok)
- **Karbonsavak:** karboxil csoportot (–COOH) tartalmazó vegyületek
- **Észterek:** karbonsavból és alkoholból képződő vegyületek, észter-kötést tartalmaznak (-CO-O-C)

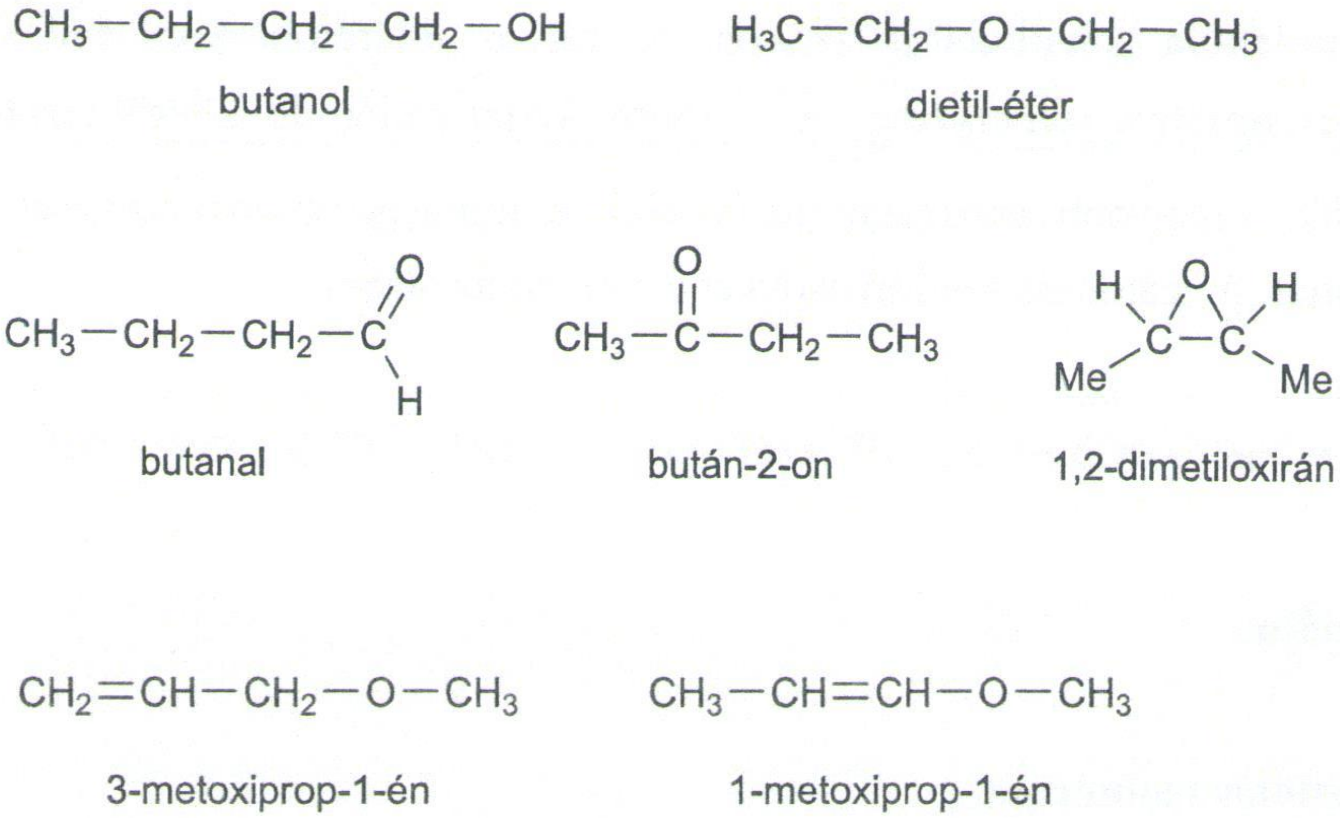
A szerves vegyületek csoportosítása

Vegyületcsaládok (folytatás):

- **Nitrovegyületek**: nitro-csoportot ($-NO_2$) tartalmazó vegyületek
- **Aminok**: az ammónia alkilezett származékai, amino-csoportot tartalmaznak ($-NH_2$, -NH-, -N<)
- **Amidok** (savamidok): savszármazékok, amid-csoportot ($-CO-NH_2$) tartalmaznak
- **Aminosavak, peptidek**: amino- és karboxil-csoportot is tartalmazó vegyületek
- **N-tartalmú heterociklusok**: pirrol, piridin, pirimidin, purin
- **Szénhidrátok**: polihidroxi-aldehidek, illetve polihidroxi-ketonok
- **Fehérjék**: aminosavakból felépülő makromolekulák
- **Nukleinsavak**: cukor-foszfát láncot és heterociklusos bázisokat tartalmazó makromolekulák

Az izoméria típusai – szerkezeti izoméria

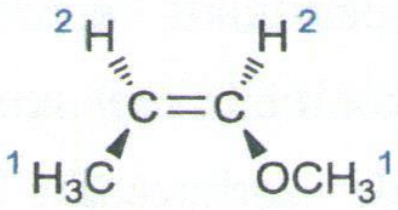
- Konstitúció: az atomok kapcsolódási sorrendje



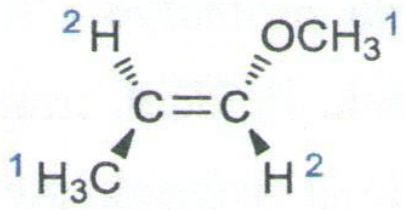
Az izoméria típusai - sztereoizoméria

- Konfiguráció: egy adott szénatom körül a szubsztituensek térbeli elhelyezkedése
- Geometriai izoméria:

  (diasztereomerek)



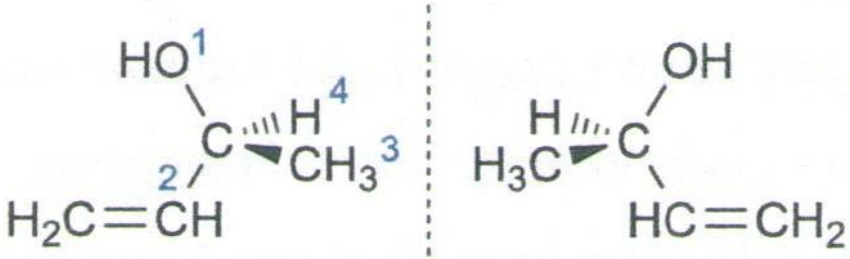
(*Z*)-izomer
(*cisz*-izomer)



(*E*)-izomer
(*transz*-izomer)

- Optikai izoméria:

(S)-izomer

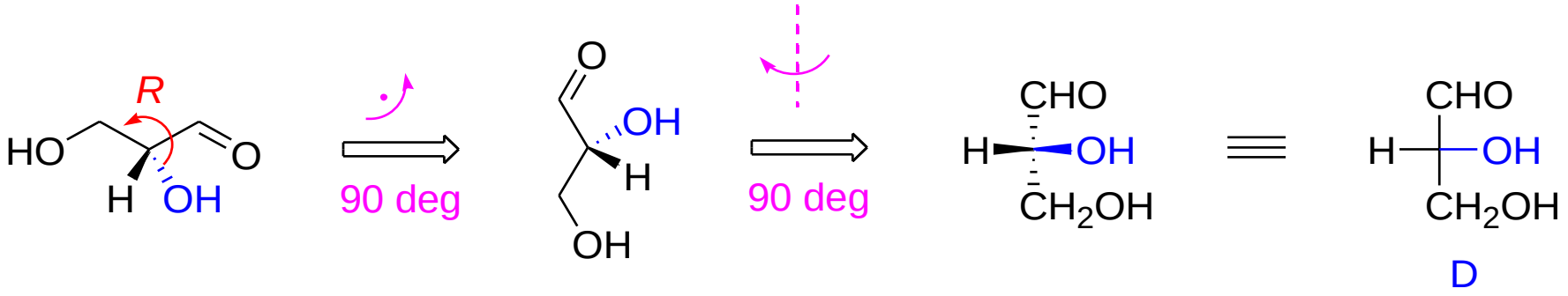


(R)-izomer

enantiomerek

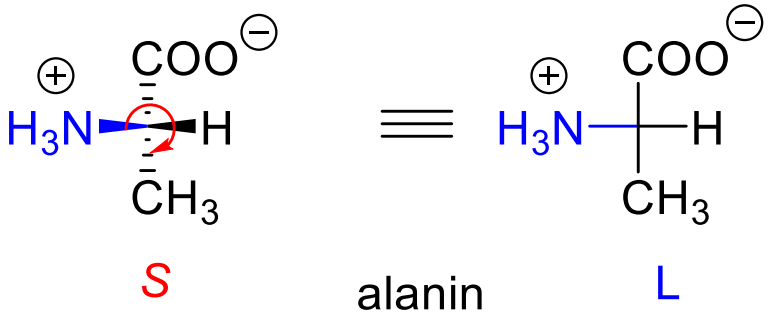
Az izoméria típusai - sztereoizoméria

- A Fischer-konvenció: D- és L-rendszer



(R)-(+)-glicerinaldehid

D-(+)-glicerinaldehid



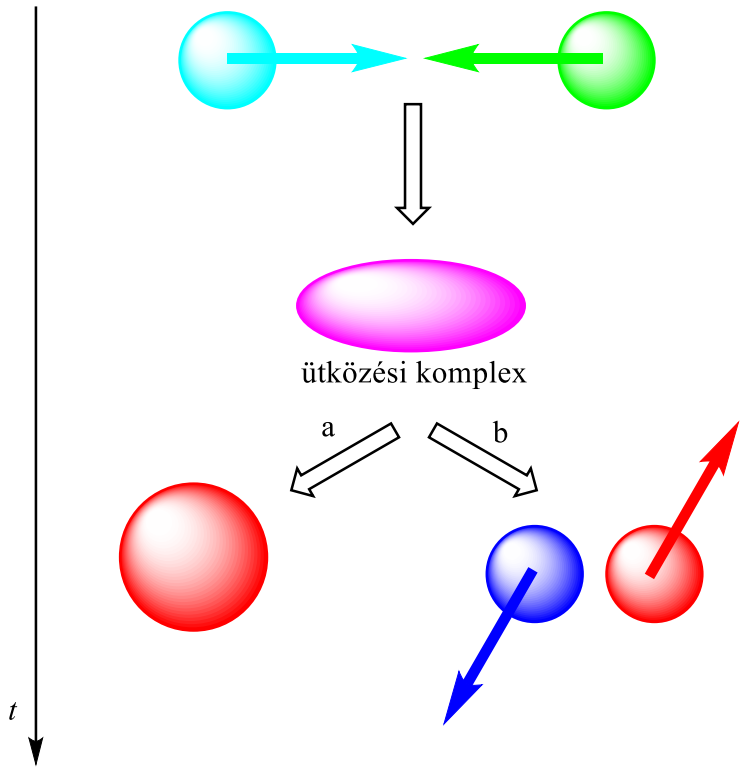
alanin

Reakciótípusok - alapfogalmak

- **Szubsztrátumnak** nevezzük azt a szerves vegyületet, amelynek szerkezete a reakció következményeként megváltozik.
- **Reagens** az az általában szervetlen vegyület, amely hatására a szubsztrátumon a változás bekövetkezik, miközben maga is átalakul.
- **Katalizátornak** nevezzük azt az anyagot, amely szükséges a reakció végbemeneteléhez, részt vesz a reakcióban, akár időlegesen át is alakul, de a reakció végén változatlan formában van jelen.
- Egy kötés felbomlása történhet **homolízissel**, amikor az elektronpár felbomlik, és egy-egy elektron kerül mindkét atomhoz (gyökök keletkeznek).
- **Heterolízisről** akkor beszélünk, ha az ionpár az egyik atom környezetében marad (ionok keletkeznek).
- **Molekularitás** alatt értjük a reakció sebességmeghatározó lépésében részt vevő részecskék számát. Ez alapján megkülönböztetünk **monomolekuláris** reakciót, ha csak egy molekula szenved kötésváltozást, illetve **bimolekuláris** reakciót, ha két részecske ütközése eredményez változást.

Reakciótípusok - bevezetés

- Molekulák reakciót eredményező találkozása gázhalmazállapotban. (*t*: idő-tengely)
- Világoskék és zöld: találkozó molekulák, illetve mozgásirányuk. Rózsaszín: ütközési komplex.
- Kék és piros: termék molekulák. Az „*a*” úton az ütközési komplex nem hasad szét, molekulán belüli átrendeződéssel stabilizálódik.
  A „*b*” úton az ütközési komplex két, vagy több részre hasadva stabilizálódik.



A reakciók csoportosítása

1) **A szubsztrátumon végbemenő szerkezetváltozás alapján:**

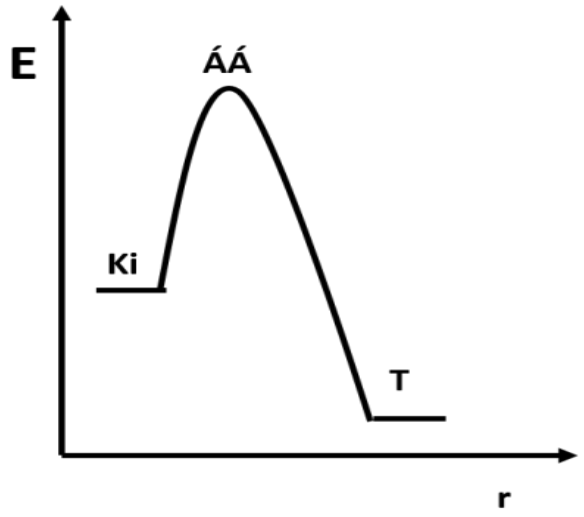
- szubsztitúció (S)
- addíció (Ad)
- elimináció (E)
- átrendeződés vagy izomerizáció (I)

2) **A reakció mechanizmusa alapján:**

- gyökös reakció (homolitikus bomlás esetén)
- ionos reakció (heterolitikus bomlás esetén)
  - elektrofil (elektront kedvelő)
  - nukleofil (atommagot kedvelő)
- összehangolt (koncertikus)

A reakciók csoportosítása

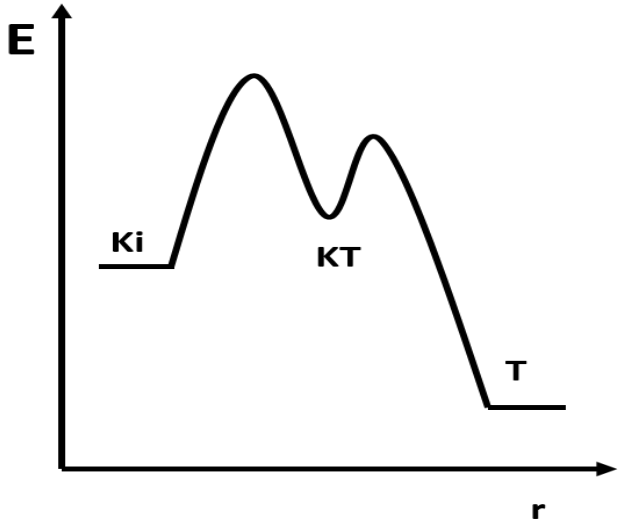
Egylépéses reakció



Aktivált komplex - Átmeneti állapot

(élettartama egy molekularezgés - 10^{-14} s)

Többlépéses reakció



Köztitermék: valós létidővel rendelkező képződmény

(létezése kimutatható)

A gyökös szubsztitúció (S_R)

A metán klórozása (láncreakció):

$$Cl—Cl \xrightarrow{h\nu} Cl^{\bullet} + Cl^{\bullet}$$

iniciálás

A reakció a klór molekula homolitikus bomlásával indul, majd gyökös láncreakcióban keletkezik a halogénezett szénhidrogén.

$$H_3C—H + Cl^{\bullet} \longrightarrow CH_3^{\bullet} + HCl$$

$$CH_3^{\bullet} + Cl—Cl \longrightarrow H_3C—Cl + Cl^{\bullet}$$

lánctagok

A reakcióban nem zárható ki a többszörösen halogénezett származékok megjelenése.

$$Cl^{\bullet} + Cl^{\bullet} \longrightarrow Cl—Cl$$

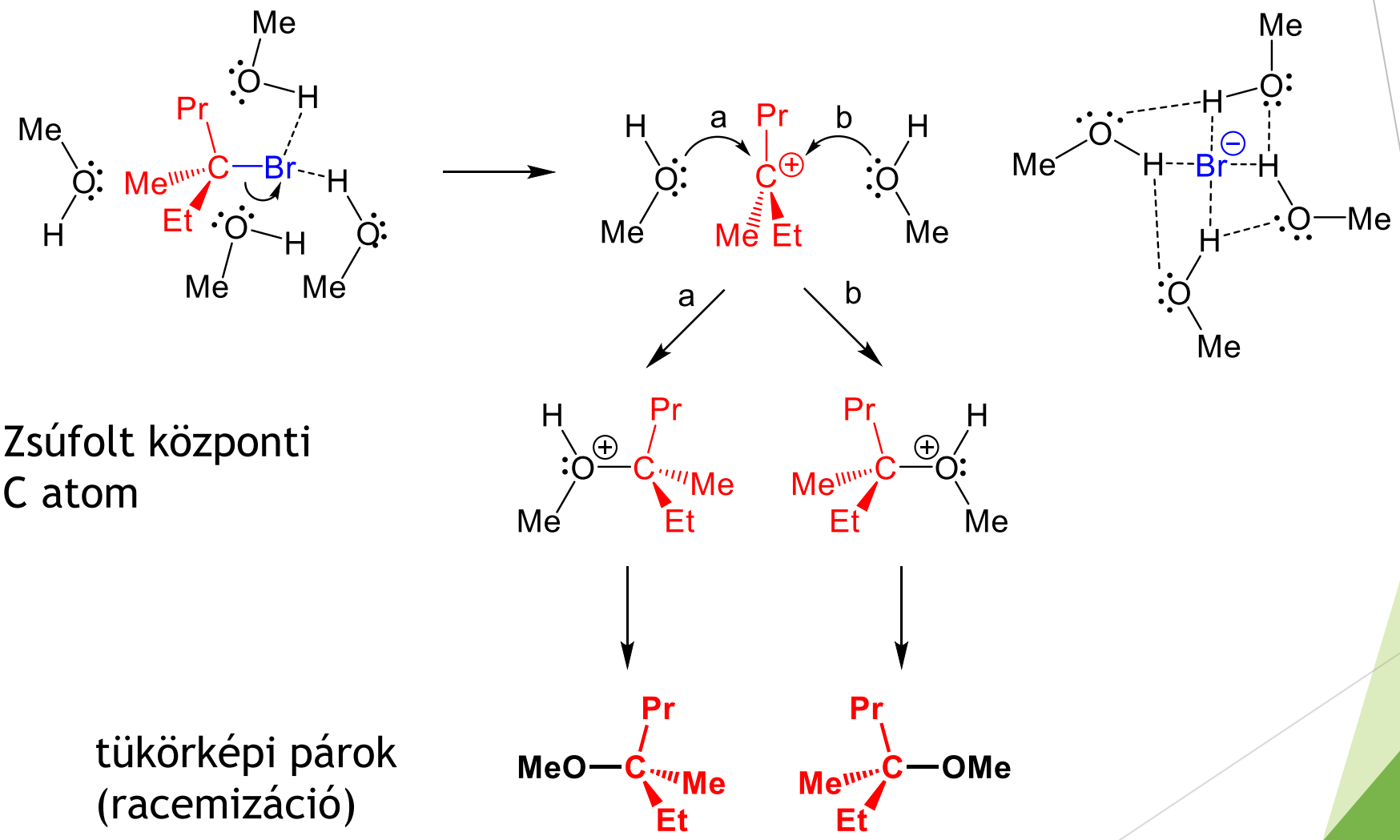
$$Cl^{\bullet} + CH_3^{\bullet} \longrightarrow \mathbf{Cl—CH_3}$$

$$CH_3^{\bullet} + CH_3^{\bullet} \longrightarrow H_3C—CH_3$$

lánczáró lépések

Általában igaz, hogy a gyökös reakciók nehezebben irányíthatóak.

Az S_N1 reakció

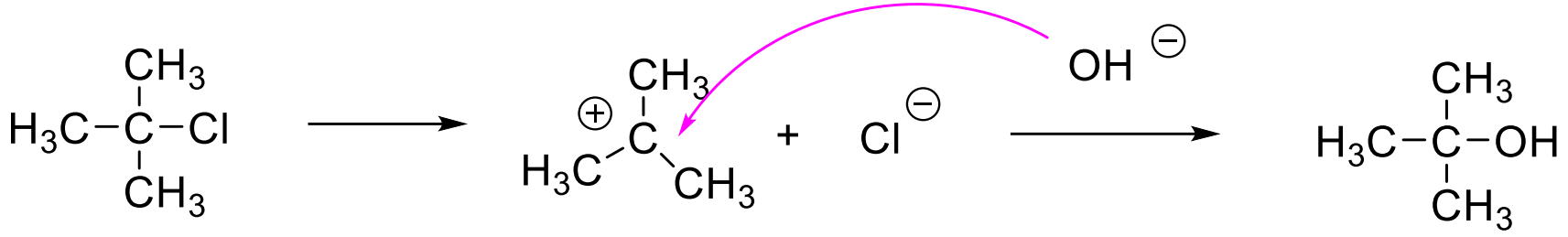


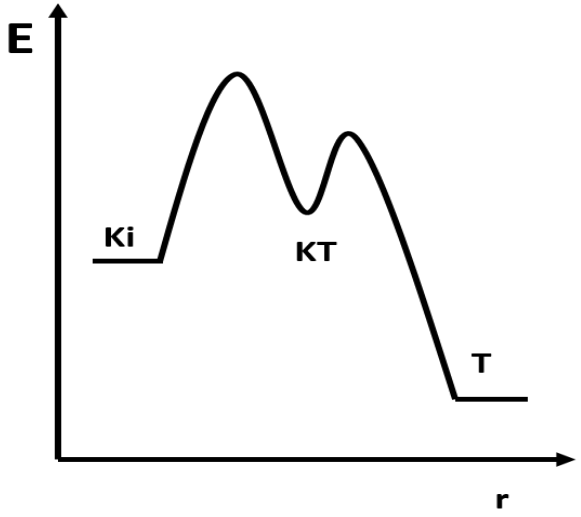
Zsúfolt központi
C atom

tükörképi párok
(racemizáció)

Az S_N1 reakció

Terc-butil-klorid reakciója lúggal:

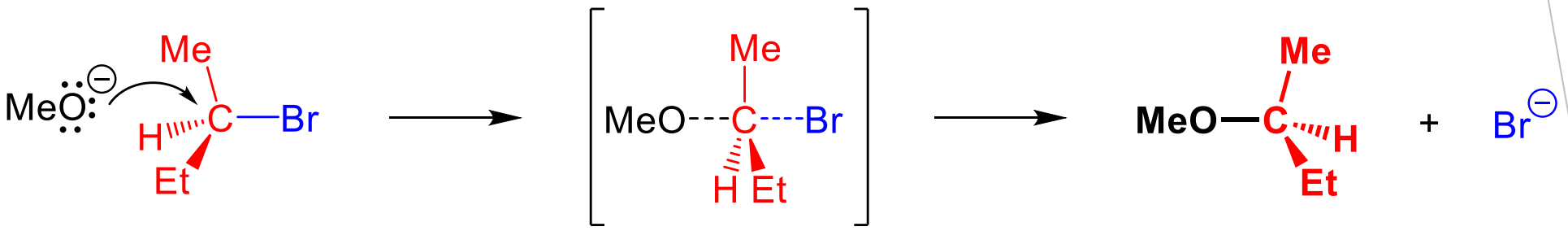




Jellemzők: stabil köztitermék
protikus poláris oldószer (víz, alkohol)
viszonylag alacsony hőmérséklet
magasabb rendű halogenid

Az S_N2 reakció

Ha a központi szénatom könnyen megközelíthető:



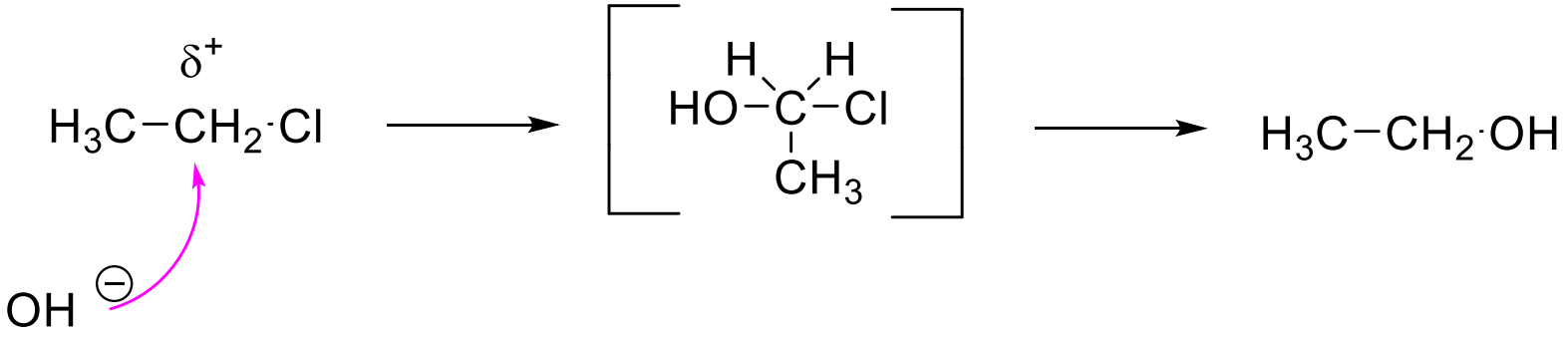
egylépéses reakció

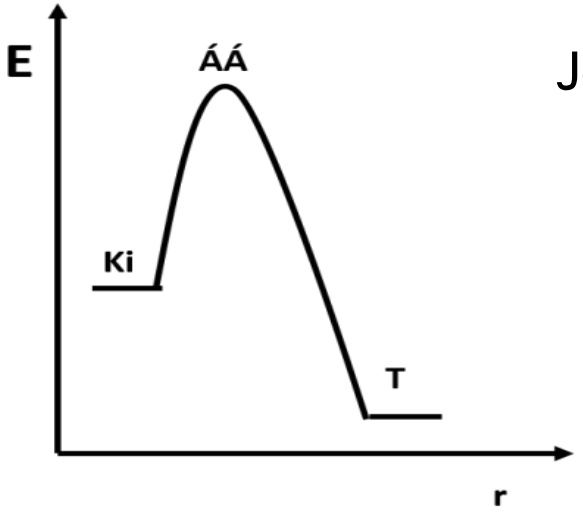
halogénnel ellenkező oldali támadás

a sztereokémia megváltozása (inverzió)

Az S_N2 reakció

Etil-klorid reakciója lúggal:





Jellemzők: zsúfolt átmeneti állapot
aprotikus poláris oldószer (aceton, DMF)
viszonylag alacsony hőmérséklet
alacsonyabb rendű halogenid

Sav-bázis reakciók

[redacted]

Szerves vegyületek sav-bázis reakciói

Egy vegyület saverősségét a K_s savi disszociációs állandó jellemzi. Gyenge savaknál ennek értéke viszonylag kicsi szám, ezért bevezették a pH mintájára a pK_s fogalmát:

$pK_s = - \lg K_s$ (Pl.: ecetsav $K_s = 1{,}78 \cdot 10^{-5}$ mol/dm^3, $pK_s = 4{,}75$)

Egy sav erősségét a visszamaradó konjugált bázisának termodinamikai stabilitása határozza meg. Minél stabilabb a konjugált bázis, annál erősebb a sav.

Például a hidrogén-halogénsavak erősségének sorrendje:

$HI > HBr > HCl > HF$

összhangban azzal, hogy a halogenid-ionokstabilitása a

$I^- > Br^- > Cl^- > F^-$

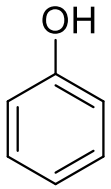
sorrendben változik.

Szerves vegyületek sav-bázis reakciói

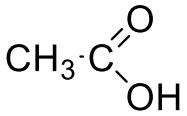
Hasonlítsuk össze ebből a szempontból az alkoholok, a fenolok és a karbonsavak saverősségét:

alapvegyület:

etil-alkohol

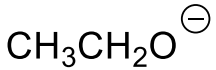


fenol

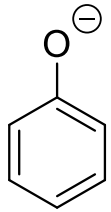


ecetsav

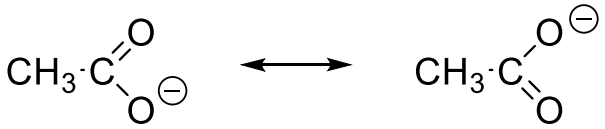
konjugált bázis:



alkoholát ion



fenolát ion



acetát ion

töltésfelesleg: 1 negatív töltés 0,7 negatív töltés 0,5 negatív töltés

$pK_s = 16$ $pK_s = 10$ $pK_s = 4,75$

Szupersavak

Amennyiben a visszamaradó konjugált bázis stabilitását meg tudjuk növelni, az eredeti sav saverőssége fokozható.

Lewis-savak (elektronpár befogadására alkalmas vegyületek) alkalmazásával a saverősség több nagyságrenddel is megnövelhető.

A ma ismert legerősebb mágikus sav a HF + SbF_5 rendszer.
A proton leadása után a visszamaradó anion az SbF_6^- komplex.

A fenti rendszer alkalmazásával karbokationok is előállíthatók.

$CH_4 + HF + SbF_5 = CH_5^+ + SbF_6^-$

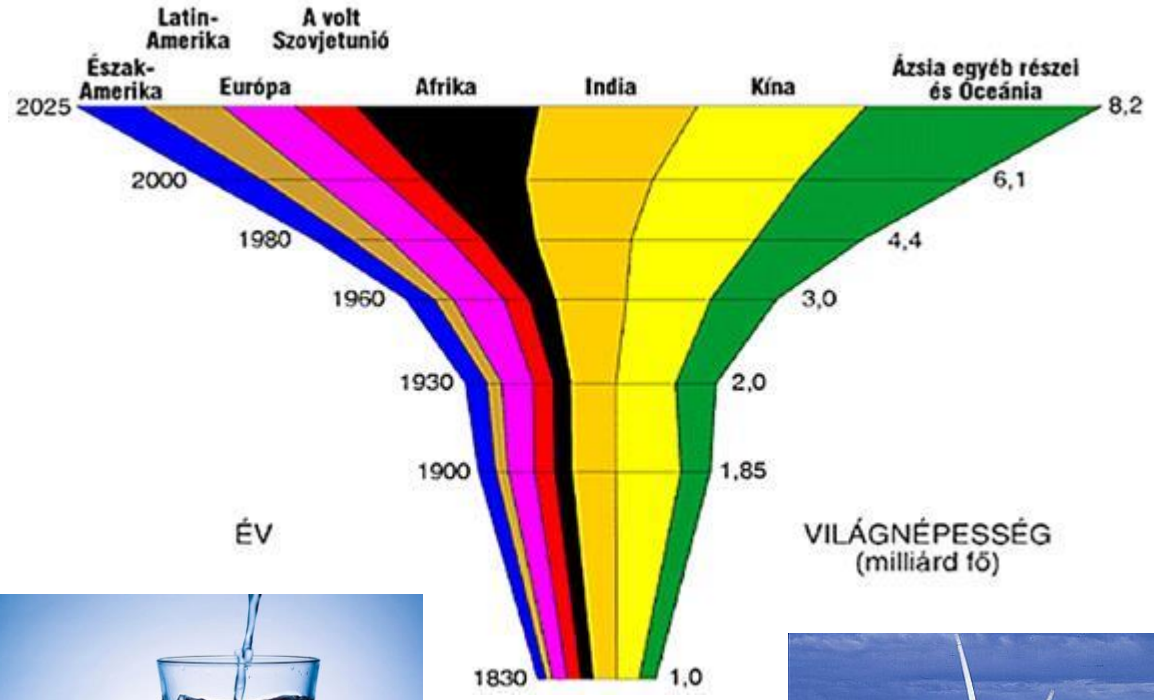
(Oláh György, kémiai Nobel díj 1994)

Mik a jelen és a belátható jövő legfontosabb kihívásai?

Egészséges környezet biztosítása

A klímaváltozás

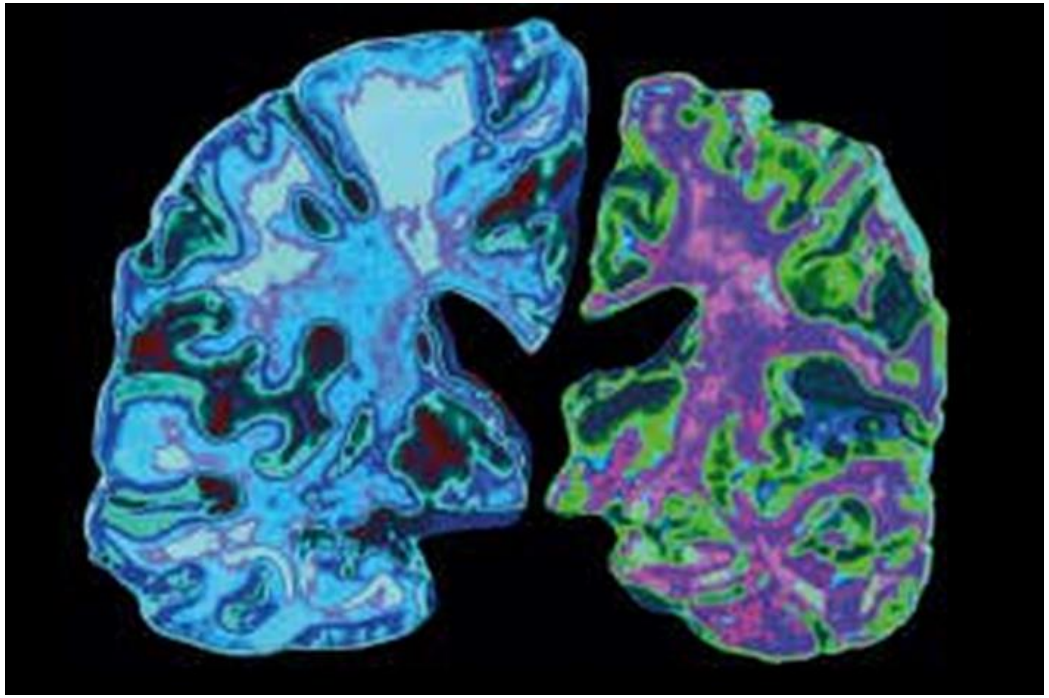
Mik a jelen és a belátható jövő legfontosabb kihívásai?



Tiszta víz és élelmiszer biztosítása

„Tiszta” energia

Mik a jelen és a belátható jövő legfontosabb kihívásai?



Betegségek, pl. a rák, az Alzheimer-kór, a malária gyógyítása

Betegségek kimutatása

A gyógyszer útja

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

BME Vegyészmérnöki
és Biomérnöki Kar

Köszönöm a megtisztelő figyelmet!