

Kémia Egyiptomban



egyiptomi fémmegmunkálás
hét fém (és hét égitest):

arany, ezüst, réz, vas ón, ólom, higany

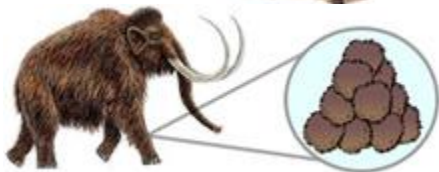
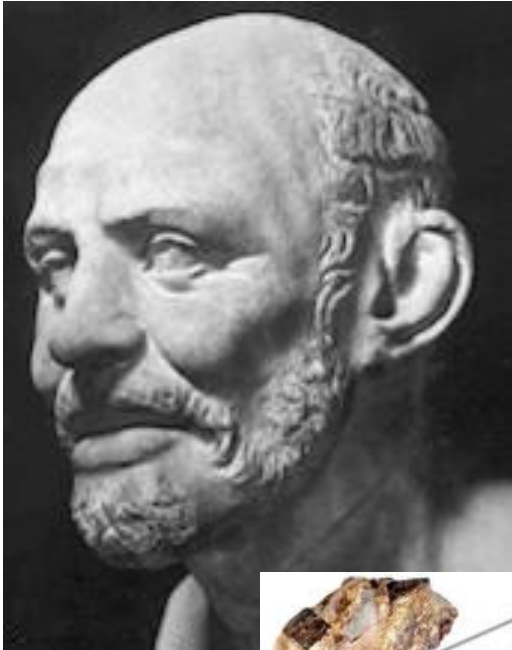


illatszerek, festékek

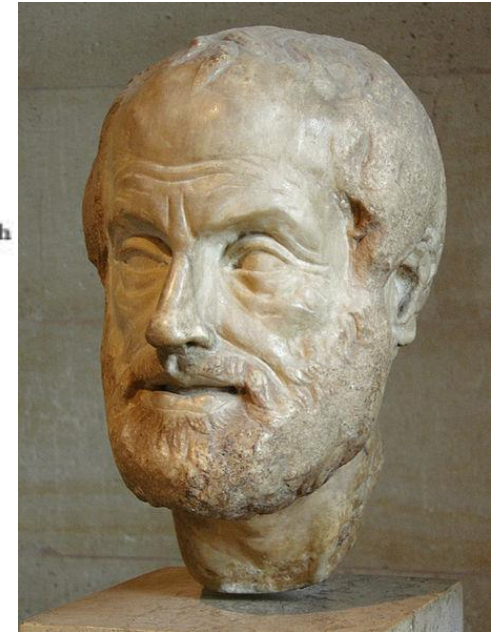
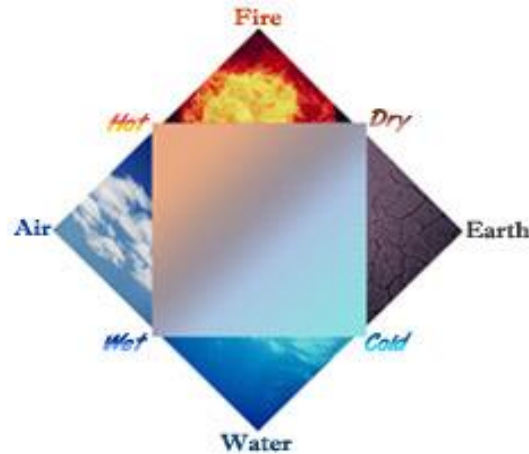
Kémia („chemistry”) szó eredete:

- kēme* (egyiptomi, jelentése: föld)
 - Khem* (egyiptomi, jelentése: Egyiptom [Nílus környéke], „egyiptomi művészet”)
 - chemeia* (görög, jelentése: összeönt)
 - chemi* (egyiptomi → arab → görög, jelentése: fekete)
 - kimia* (perzsa, jelentése: arany)
 - chin-i* (kim-ja, kínai, jelentése: aranykészítő lé)
- al-*: arab névelő

Ókori görög anyagelmélet



Démokritosz
(i.e. ~460–371)
atomelmélet

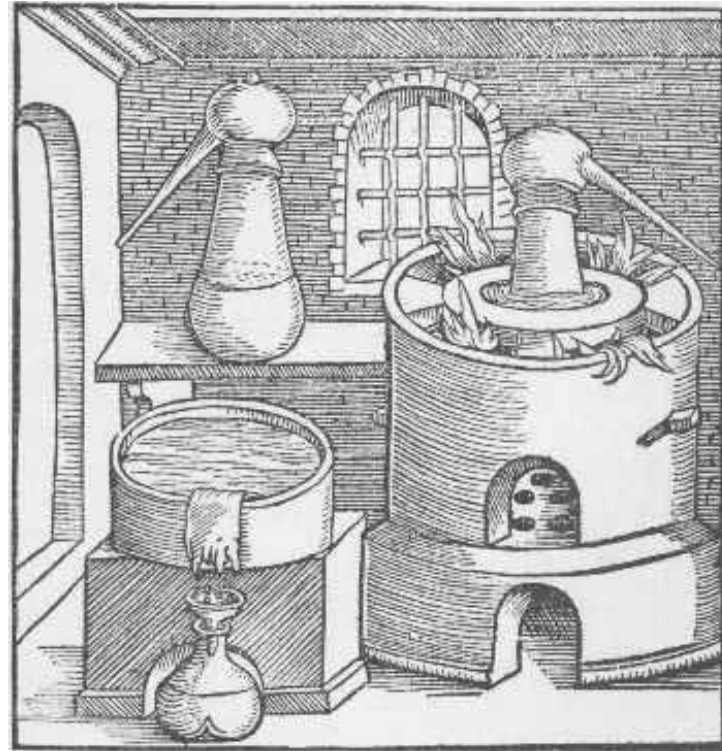


Arisztotelész
(i.e. 384–322)
folytonos anyagelmélet

Az arab (iszlám) alkímia



Abu Musa Jābir ibn Hayyān
Latin néven: Geber (721 – 815)
perzsa vagy arab „természettudós”



eszközök: pl. retorta, alembik
műveletek: kristályosítás, desztilláció
anyagok: sósav, salétromsav, kénsav,
királyvíz

Európai alkímisták



Albertus Magnus
(Szent Albert)
(? – 1280)
arzén felfedezése



Fig. 5. Roger Baco.

Roger Bacon
(1214 – 1294)
„A természet maga a legjobb
tanítómester, a tapasztalás
az egyetlen forrása és döntő
próbája minden tudásnak a
bennünket körülvevő világról.”



Raymundus Lullus
(1232 – 1315)
kísérleti eszközök
tökéletesítése

Magyar (magyar vonatkozású) alkímisták: Cillei Borbála (1392 – 1451),
Habsburg Rudolf (1552 – 1612)

(Szathmáry László: Magyar alkémisták, 1986)

Középkori európai anyagtudomány: Alkímia

folytonos anyagelmélet

ALCHEMICAL SYMBOLS

The Four Basic Elements

- △ Air
- ▽ Earth
- △ Fire
- ▽ Water

Basic Operations

-  To filter
-  To mix
-  To dissolve
-  To boil
-  To distill
-  To precipitate
-  To melt or liquify



The Seven Planetary Metals

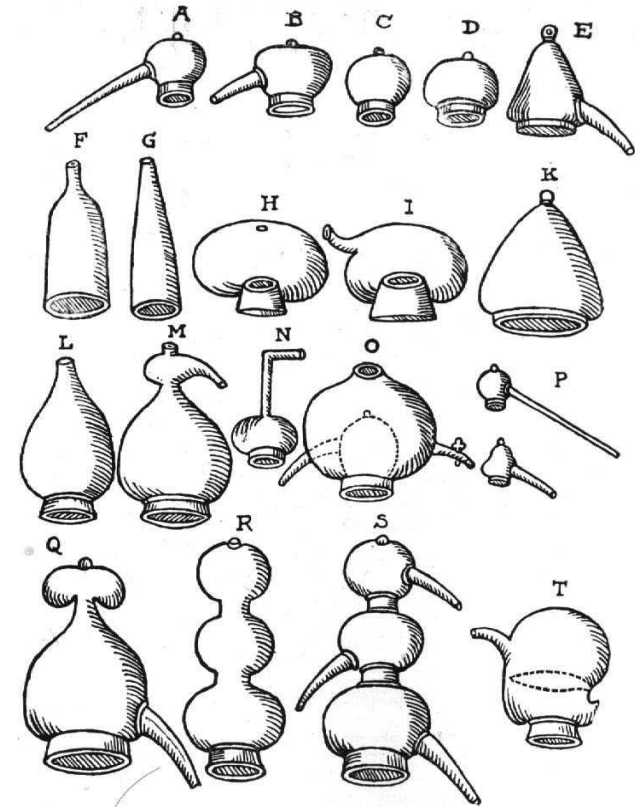
- | | | | |
|---|---------|---------|-----------|
|  | Gold | Sol | Sunday |
|  | Silver | Luna | Monday |
|  | Copper | Venus | Friday |
|  | Iron | Mars | Tuesday |
|  | Mercury | Mercury | Wednesday |
|  | Lead | Saturn | Saturday |
|  | Tin | Jupiter | Thursday |

Symbols for Time

-  An hour
-  A day
-  A week
-  A month

The Twelve Processes in Zodiacal Time

- | | | | | | |
|---|--------|--------------|---|-------------|----------------|
|  | Aries | Calcination |  | Libra | Sublimation |
|  | Taurus | Congelation |  | Scorpio | Separation |
|  | Gemini | Fixation |  | Sagittarius | Ceration |
|  | Cancer | Solution |  | Capricornus | Fermentation |
|  | Leo | Digestion |  | Aquarius | Multiplication |
|  | Virgo | Distillation |  | Pisces | Projection |



Andreas Libavius, *Alchymia...*, 1606

szélhámosság vagy tudomány???

→ metallurgia, jatrokémia

Jatrokémia és metallurgia



Theophrastus Bombastus von Hohenheim (Paracelsus) (1493 – 1541):

Jatrokémia (orvosi kémia)

minden anyag három elemből épül fel:
Például ami a fában "... ég, az a Kén,
ami füstöl, az a Higany, ami hamuvá
lesz, az a Só".



Georgius Agricola (Georg Bauer
1494 – 1555): **Metallurgia**

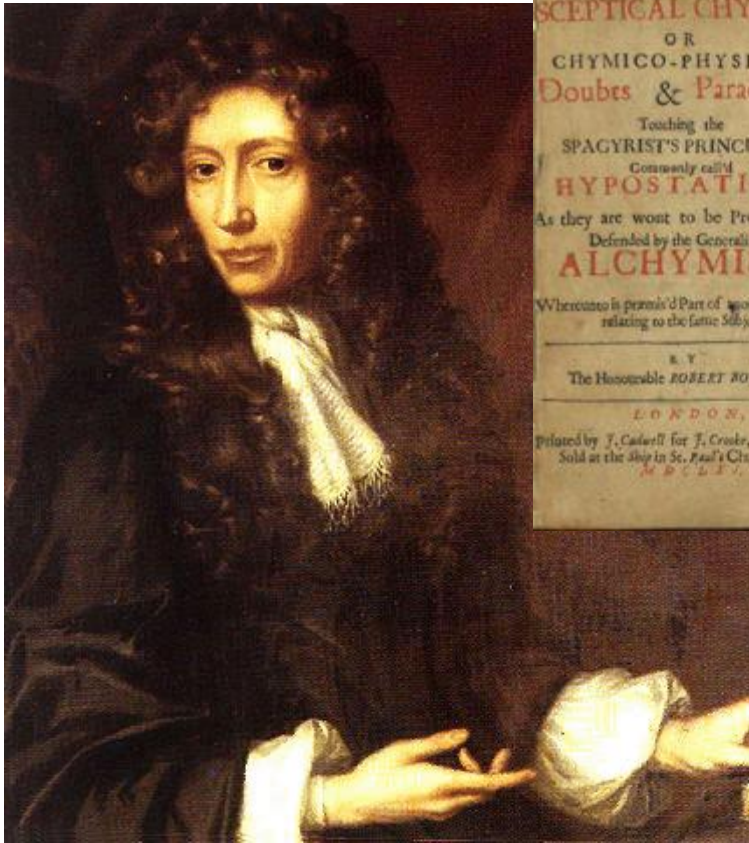
De re metallica libri XVII
(17 könyv a fémek természetéről)
pl. bizmut megkülönböztetése az
ólomtól és óntól

Az alkímia kora



Hennig Brand
foszfor felfedezése: 1669

A modern anyagelmélet felé



Robert Boyle (1627 – 1691)
1661: „A szkeptikus kémikus”
„alkímikus” szemlélet kritikája
kísérletek: elrontott égési kísérlet

→ **flogiszton-elmélet**
Johann Joachim Becher
(1635 – 1682)



Georg Ernst Stahl (1659-1734)

A modern anyagelmélet születése

Anyag-, tömegmegmaradás törvénye



Mihail Vasziljevics
Lomonoszov
(1711-1765)

Boyle korábbi hibás égési
kísérletének
megisméltése →
flogiszonelmélet cáfolata



Antoin Laurent Lavoisier
(1743-1794)

Cavendish, Scheele, Priestley munkái
alapján a flogiszonelmélet cáfolata:
kémiai égés: oxigénnel való egyesülés

ELEMEK
és
VEGYÜLETEK

A modern anyagelmélet születése



Joseph Louis Proust
(1754 – 1826)

Állandó súlyviszonyok törvénye



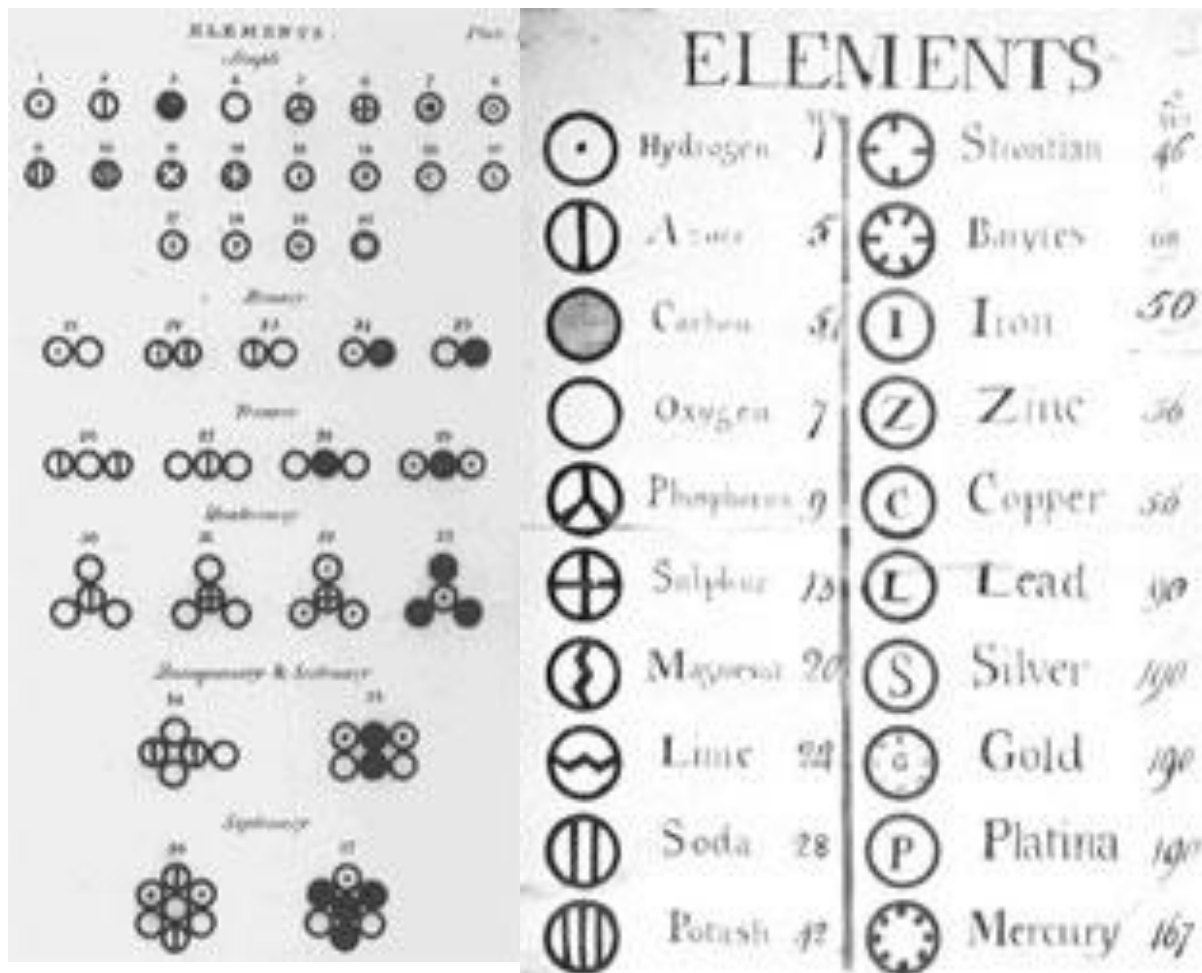
John Dalton
(1766 – 1844)

Többszörös súlyviszonyok törvénye

A modern anyagelmélet születése

DALTON:

- 1) Az anyagok **atomokból** épülnek fel.
- 2) **Elemek** azonos atomokból épülnek fel. A különböző atomoknak eltérő tulajdonságaik (pl. tömeg!) vannak.
- 3) Különböző atomok kémiai reakciójában **vegyületek** keletkeznek.
- 4) A vegyületek pontos **képletekkel** leírhatók: egészszámok törvénye.



A vegyjelek



Jöns Jacob Berzelius
(1779 – 1848)

Továbbá:

- szelén, szilícium, tórium, cérium felfedezése
- atomtömegek mérése
- allotrópia, szerves kémia, katalizátor, fehérje, halogének, polimer, izomer fogalma
- elektrolízis és „sók”

BERZELIUS:

A kémiai jeleknek betűknek kell lenniük, mert ezeket könnyebb leírni, és nem formátlanítják el a nyomtatott könyveket. ... Ezért én kémiai jelnek minden elem latin nevének kezdőbetűjét fogom használni.

DALTON:

Berzelius jelei szörnyűségeseek; a vegytan ifjú hallgatói a hébert sem tanulnák meg nehezebben, mint ezeket. Mintha az atomok káoszát látnánk, [amely csak arra szolgál,] ... hogy összezavarja a tudóst, elbátortalanítsa a tanulót és elhomályosítsa az atomelmélet szépségét.

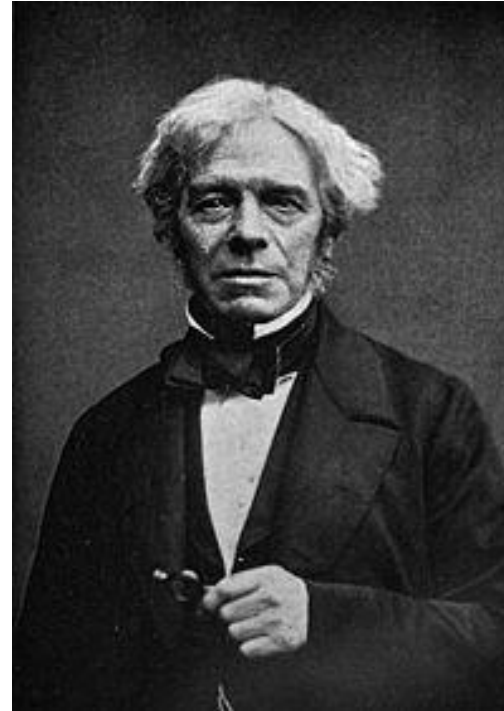
Elektrokémia



Sir Humphry Davy
(1778 – 1829)

Na, K, Ca, Mg, Ba, B
előállítása eletrolízissel

Továbbá: savak H-t tartalmaznak
gázok élettani hatása, klór vizsgálata,
Davy-lámpa, ...



Michael Faraday
(1791 – 1867)

anód, katód, elektród, ion fogalma
Faraday-állandó
Továbbá:
benzol felfedezése,
elektromágneses indukció, kolloidok



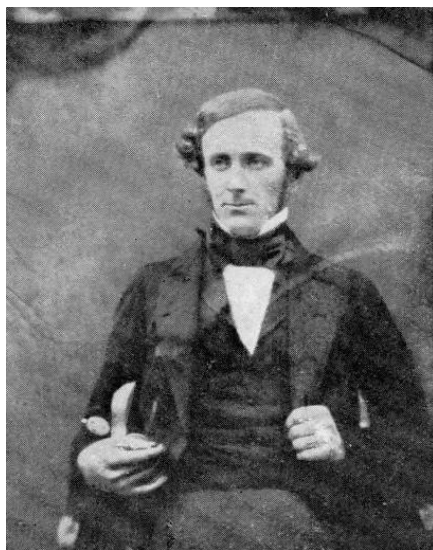
aranyoszol
Faraday Múzeum,
London

Szerves kémia és vegyértékek



Friedrich Wöhler
(1800–1882)

Vis vitalis (életerő)
elmélet megdöntése
karbamid előállítása
ammónium-cianátból



Sir Edward Frankland
(1825 –1899)

vegyérték
(„valencia”,
„ekvivalencia”)



Archibald Scott
Couper
(1831–1892)

kémiai kötés
szerves vegyületek szerkezete



Friedrich August
Kekule von Stradonitz
(1829 – 1896)

A modern anyagelmélet születése



Joseph Louis Gay-Lussac
(1778 – 1850)

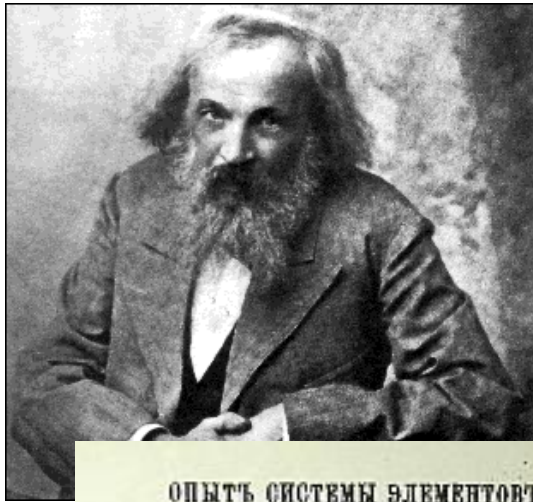


Amedeo Carlo Avogadro
(1776–1856)

azonos nyomású és hőmérsékletű gázok egységnyi térfogata azonos számú részecskét tartalmaz

ATOM és MOLEKULA fogalma (Canizzaro közvetítésével) (H_2 , O_2 , H_2O !)
többszörös súlyviszonyok törvényének alátámasztása gázokra

Mengyelejev-féle periódusos rendszer



Dimitri Mengyelejev
(1834 – 1907)

előtte: Stanislao Canizzaro, John Newlands,
Béguyer de Chancourtois, Lothar Meyer

ОПЫТЪ СИСТЕМЫ ЭЛЕМЕНТОВЪ,
ОСНОВАННОЙ НА ИХЪ АТОМНОМЪ ВѢСѢ И ХИМИЧЕСКОМЪ СВОЙСТВѢ.

	Ti=50	Zr=90	?=180.
	V=51	Nb=94	Ta=182.
	Cr=52	Mo=98	W=186.
	Mn=55	Rh=104,5	Pt=197,5
	Fe=56	Ru=104,5	Ir=198.
	Ni=Co=59	Pt=106,5	Os=199.
H=1	Cu=63,5	Ag=108	Hg=200.
Be=9, Mg=24	Zn=65,2	Cd=112	
B=11	Al=27,4	?=68	Er=116
C=12	Si=28	?=70	Su=118
N=14	P=31	As=75	Sb=122
O=16	S=32	Se=79,	Te=128?
F=19	Cl=35,5	Br=80	I=127
Li=7	Na=23	K=39	Rb=85,4
		Ca=40	Sr=87,6
		Sc=45	Ce=92
		Yt=96	La=94
		?Yt=99	Di=95
		?H=76,5	Th=118?

Д. Менделѣевъ.

Group	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
Period 1	H=1							
2	Li=7	Be=9.4	B=11	C=12	N=14	O=16	F=19	
3	Na=23	Mg=24	Al=27.3	Si=28	P=31	S=32	Cl=35.5	
4	K=39	Ca=40	?=44	Ti=48	V=51	Cr=52	Mn=55	Fe=56, Co=59 Ni=59
5	Cu=63	Zn=65	?=68	?=72	As=75	Se=78	Br=80	
6	Rb=85	Sr=87	?Yt=88	Zr=90	Nb=94	Mo=96	?=100	Ru=104, Rh=104 Pd=106
7	Ag=108	Cd=112	In=113	Sn=118	Sb=122	Te=125	J=127	
8	Cs=133	Ba=137	?Di=138	?Ce=140				
9								
10			?Er=178	?La=180	Ta=182	W=184		Os=195, Ir=197 Pt=198
11	Au=199	Hg=200	Tl=204	Pb=207	Bi=208			
12				Th=231		U=240		

Modern atomelmélet



Joseph John Thomson
(1856–1940)

1897: az elektron
felfedezése

1906: fizikai Nobel-díj



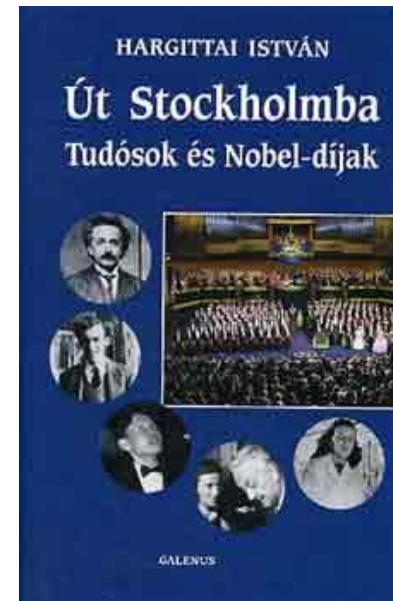
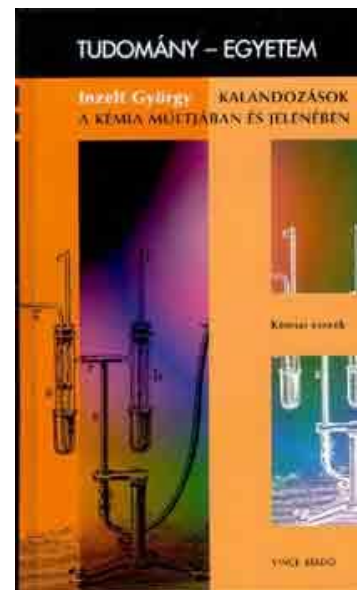
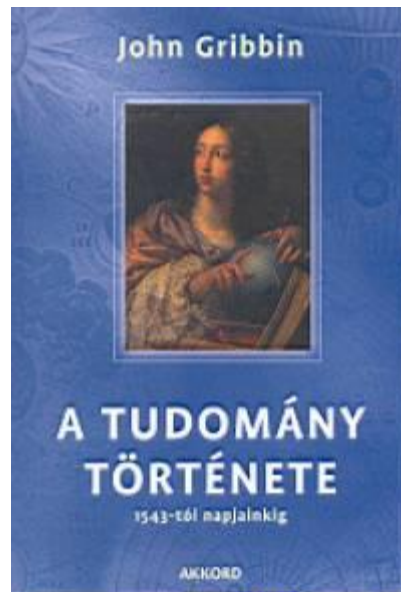
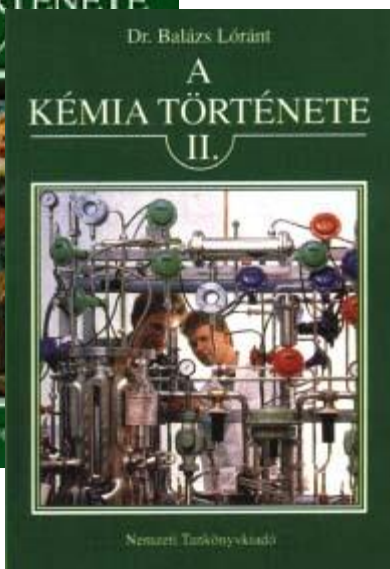
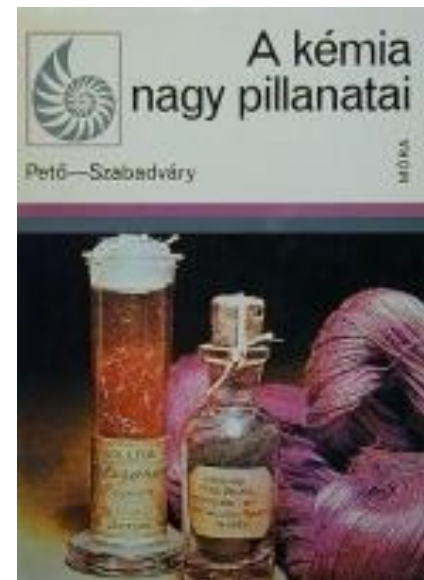
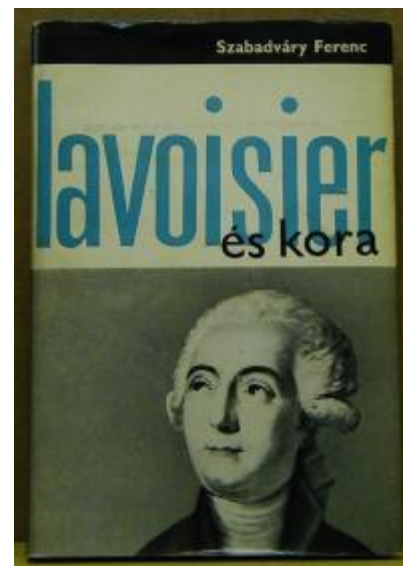
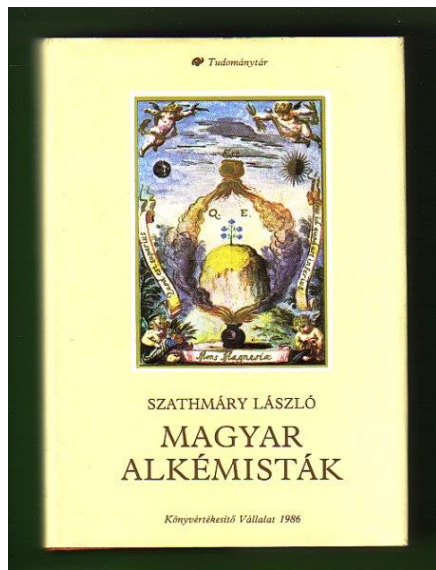
Ernest Rutherford
(1871–1937)

α - és β -sugárzás
atommag
1908: kémiai
Nobel-díj



Niels Bohr
(1885– 1962)

kvantumelméleten
alapuló
atomszerkezet
1922: fizikai
Nobel-díj



ELTE – Kémiai Intézet

- 1635 ELTE alapítása (Nagyszombat), 1950-től Eötvös L. név
- 1784 Pestre költözik az egyetem
- 1770 első kémiai tanszék: Winterl Jakab
- 1860 magyar nyelvű oktatás (Than Károly)
- 19-20. század forduló: három külön intézet
- 1993 Kémiai Doktori Iskola
- 2006-ig: 8 tanszék → Kémiai Tanszékcsoport
- 2006: Kémiai Intézet: 4 tanszék (oktatás) + 18 kutató laboratórium + 4 ELTE-MTA kutatócsoport

Magyar származású kémiai Nobel-díjasok

http://nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/



Richard Adolf
Zsigmondy
1925



George de
Hevesy
1943



John C. Polanyi
1986



George Olah
1994



Avram Hershko
2004

Fiziológiai (orvosi)



Albert von Szent-Györgyi
Nagrapolt
1937

Kémiai Nobel-díjak a XXI. században

- **2001**: William S. Knowles, Ryoji Noyori, K. Barry Sharpless: **Királis szintézisek**
- **2002**: John B. Fenn, Koichi Tanaka, Kurt Wüthrich: **Biológiai makromolekulák szerkezet-meghatározására kifejlesztett műszeres módszerek**
- **2003**: Peter Agre, Roderick MacKinnon: **Sejthártyák víz- és ioncsatornáinak felfedezése és vizsgálata**
- **2004**: Aaron Ciechanover, Avram Hershko, Irwin Rose: **Ubikvitin-vezérelt fehérjelebomlás**
- **2005**: Yves Chauvin, Robert H. Grubbs, Richard R. Schrock: **Metatézises szerves szintézisek kifejlesztése**
- **2006**: Roger D. Kornberg: **A transzkripció vizsgálata eukariótákban**

Kémiai Nobel-díjak a XXI. században

- **2007:** Gerhard Ertl: **Kémiai reakciók vizsgálata szilárd (határ)felületeken**
 - **2008:** Osamu Shimomura, Martin Chalfie, Roger Y. Tsien: **A zöld fluoreszkáló protein (GFP) felfedezése és alkalmazása biokémiai kutatásokban**
 - **2009:** Venkatraman Ramakrishnan, Thomas A. Steitz, Ada E. Yonath: **Riboszómák szerkezetének és funkciójának vizsgálata**
 - **2010:** Richard F. Heck, Ei-ichi Negishi, Akira Suzuki: **Palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciók**
 - **2011:** Dan Shechtman: **Kvázikristályok felfedezése**
 - **2012:** Robert J. Lefkowitz és Brian K. Kobilka: **G-fehérjékhez kapcsolt receptorok vizsgálata**
 - **2013:** Martin Karplus, Michael Levitt és Arieh Warshel
- Rövid ismertető a kémiai Nobel-díjakról 2007-től:**

A kémia néhány aktuális problémája és kihívásai a XXI. században

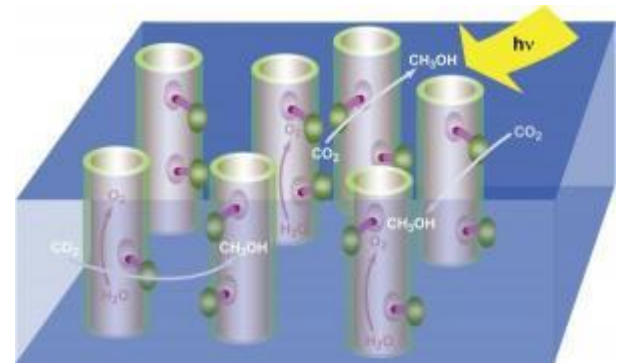
- **Néhány elméleti kérdés:**

- (Ha anyagi eredetű az élet, akkor) hogyan keletkezett? Mi a homokiralitás (élő szervezetekben csak az egyik enantiomer fordul elő) eredete?
- Létezhet-e a 137-es elemnél („Feynmanium”) nagyobb rendszámú elem? (Elméleti megfontolások szerint előlött az elektron gyorsabban mozogna, mint a fénysebesség. *Nemrég a 115-ös elemet azonosították!*)
- Milyen az ideális magas hőmérsékletű szupravezetők elektronszerkezete és fázisdiagramja?
- Víz pontos szerkezetének a leírása.
- Fehérjék felcsavarodásának („protein folding”) megértése. (Jelentőség többek között Alzheimer és Parkinson kórok kialakulásának megértése.)
- A jelenlegi elméleti (kvantumkémiai) modellek (számítás)technikai és elvi korlátainak megismerése.

A kémia néhány aktuális problémája és kihívásai a XXI. században

• Energia, nyersanyag, környezet, fenntarthatóság

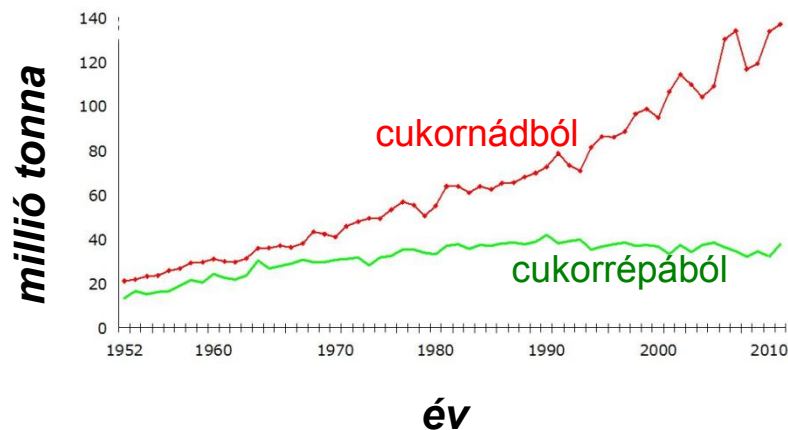
- A fosszilis tüzelőanyagok kb. 50-100 évre elegendőek → alternatív források
 - biodízel (jelenleg nem gazdaságos, etikai problémák éhezések miatt)
 - napelemek (fotovoltaikus cellák)
 - üzemanyagcellák
 - mesterséges fotoszintézis
- Üvegházhatás: Értjük-e kellőképpen?
Jelentős-e az emberi beavatkozás?
Ha igen, akkor hogyan kompenzálhatunk?
- Népesedés, életszínvonal és az ezekből következő ipari termelés növekedése miatt fellépő környezeti terhelések enyhítése. (Pl. megnövekedett mezőgazdasági termelés, csomagolóanyagok, gyógyszerek, piperecikkek, stb.)



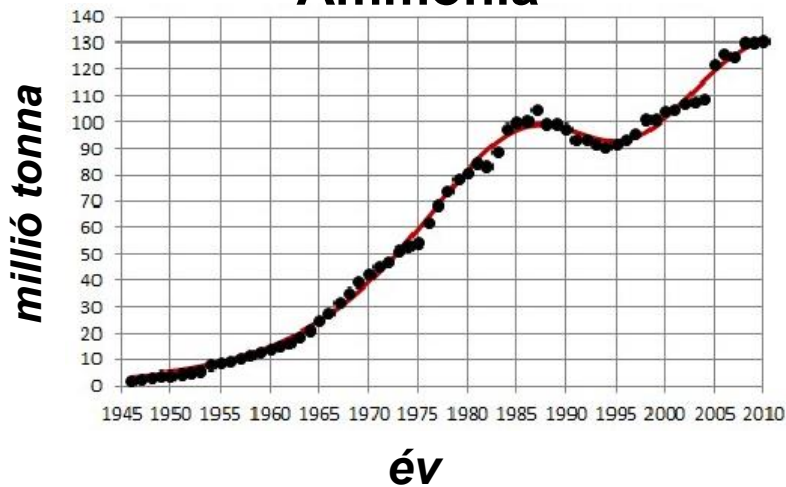
Zöld kémia fontossága!

A vegyipari termelés változása

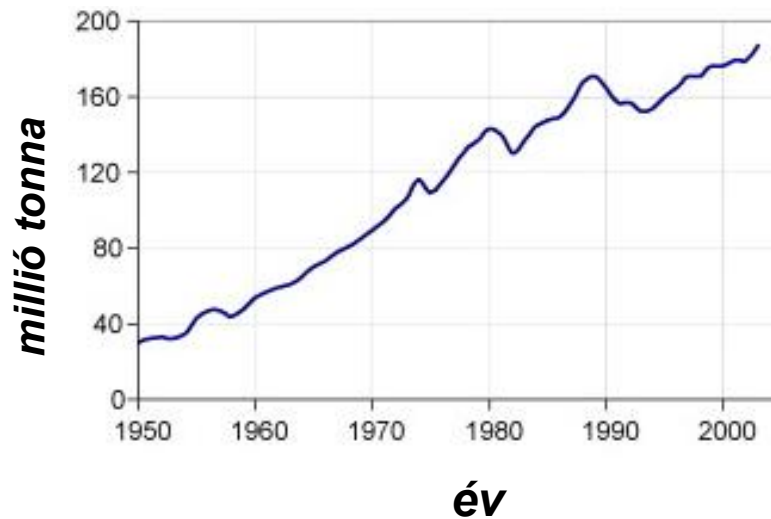
Cukor



Ammónia



Kénsav



A kémia néhány aktuális problémája és kihívásai a XXI. században

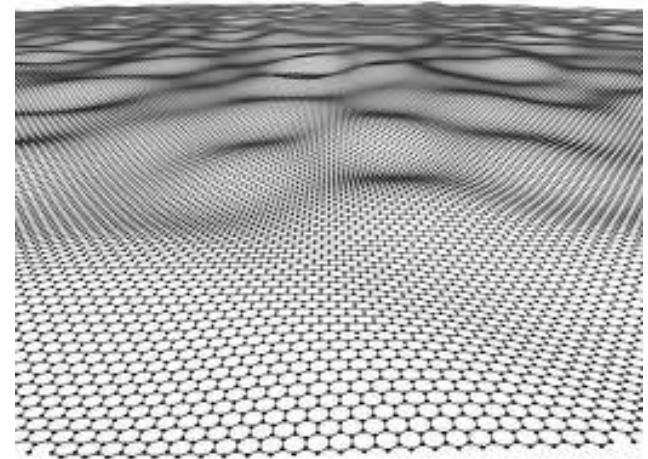
- **Egészség és gyógyszerkémia**

- Népesedégnövekedés és a növekvő mobilitás miatt a egyre fontosabb szerepe van a fertőző betegségek elleni védelemnek.
- AIDS és rák gyógyítása megoldásra vár.
- Gyógyszerek tervezésének fejlesztése.
- Kóros sejtek jelölése, szelektív hatás.
- Egyedi gyógyszerek génállomány alapján (?)
- Gyógyszerkémiai szempontból fontos szerves reakciók fejlesztése (katalízis, organokatalízis)

A kémia néhány aktuális problémája és kihívásai a XXI. században

• Anyagtudományok

- Nanokémia
- Adathordozás (Mi az adattároláshoz szükséges legkisebb anyagmennyiség?)
- Magas hőmérsékletű szupravezetők
- Extrém környezeti hatásoknak ellenálló anyagok fejlesztése (polimerek, kompozitok, kerámiák)
- Speciális fizikai tulajdonságokkal rendelkező anyagok fejlesztése (optika, elektronika, űrtudomány)
- „Intelligens” anyagok

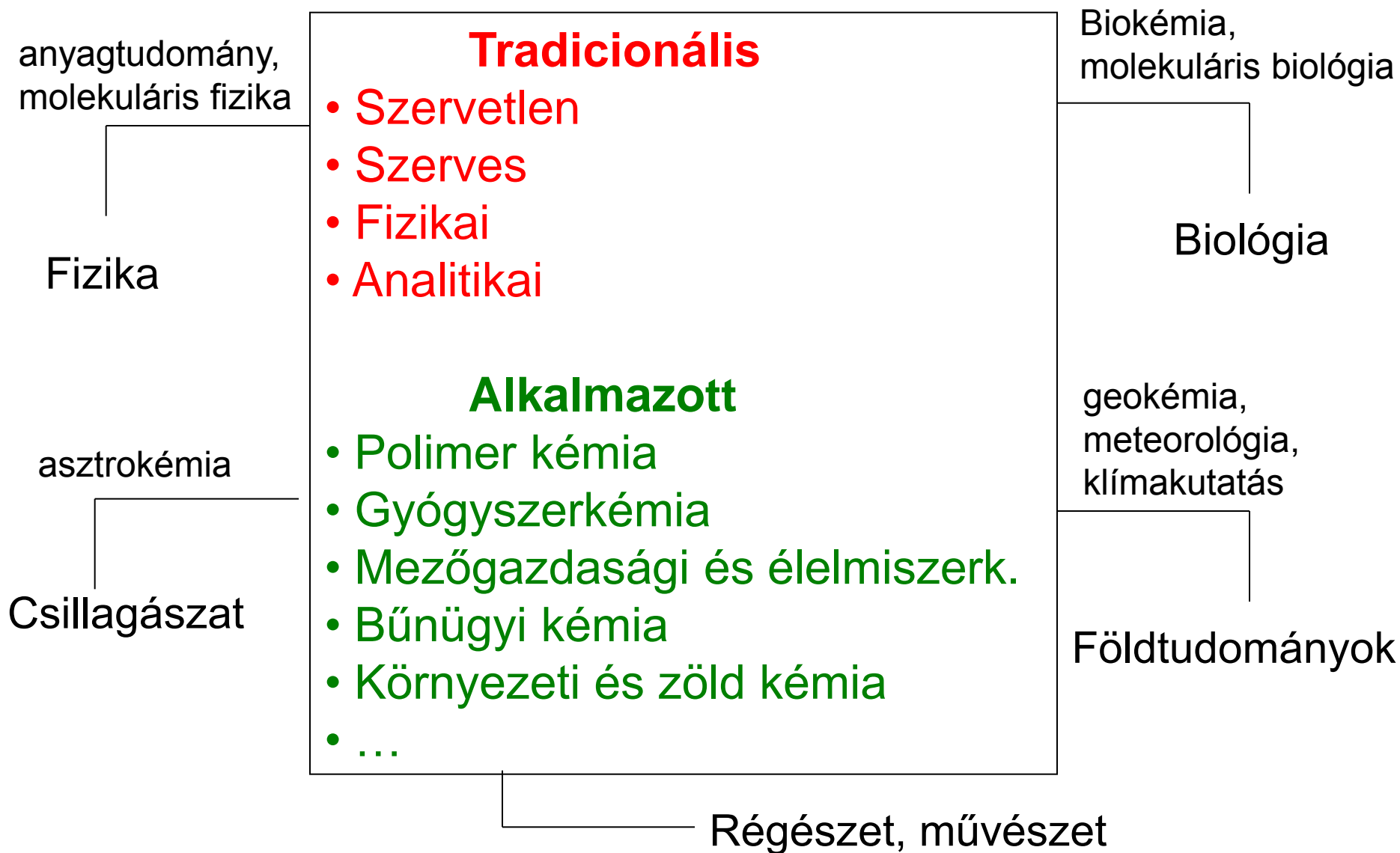


grafén



aerogél

Kémiai a XXI. században



A kémia felosztása

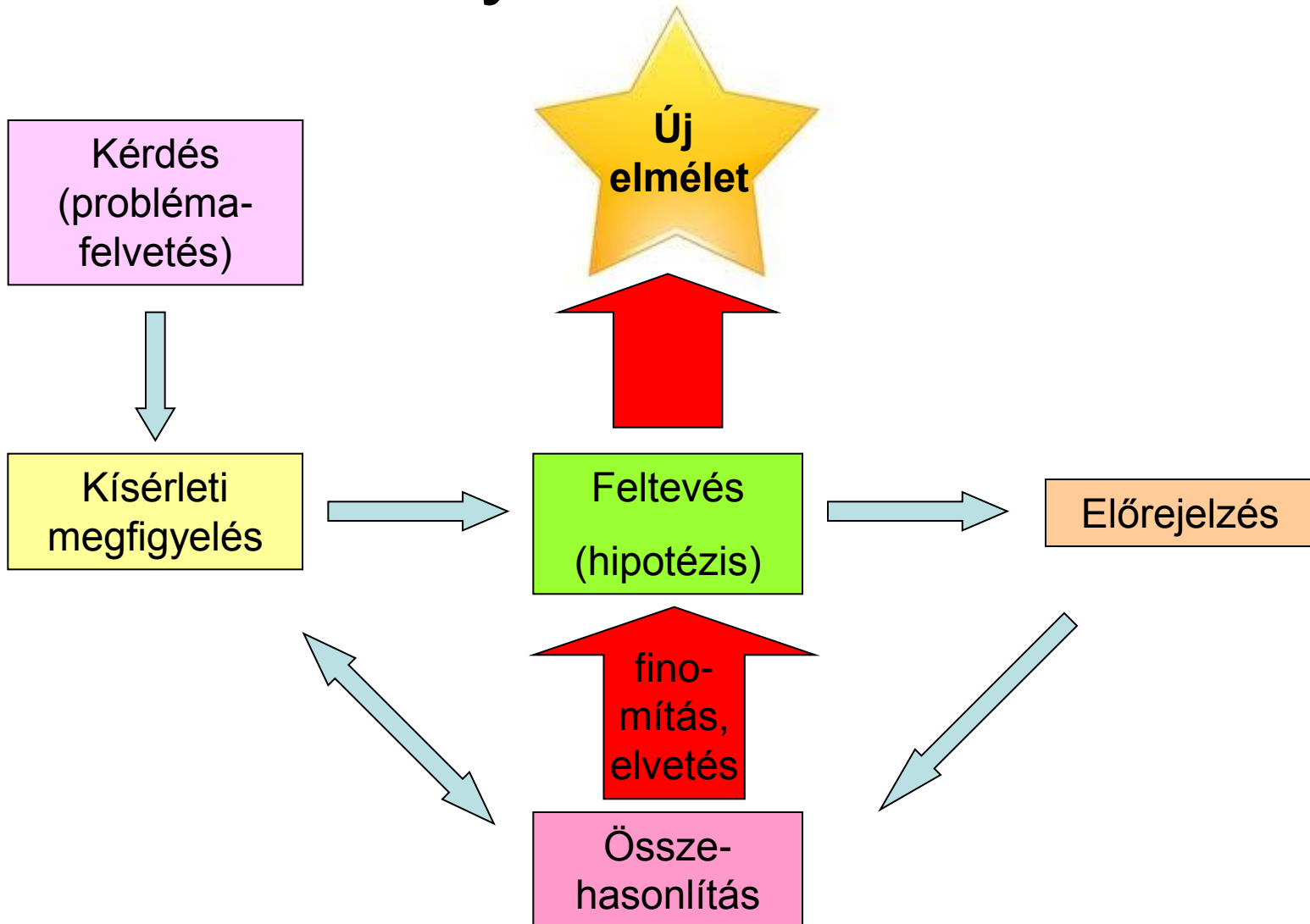
Wiley - Chemistry

Analytical Chemistry
Biochemistry
Chemical Engineering
Computational Chemistry & Molecular Modeling
Electrochemistry
Environmental Chemistry
General Chemistry
Industrial Chemistry
Inorganic Chemistry
Organic Chemistry
Physical Chemistry
Polymer Science & Technology
Special Topics
Spectroscopy

Americal Chemical Society

Agricultural & Food Chemistry
Agrochemicals
Analytical Chemistry
Biochemical Technology
Biological Chemistry
Carbohydrate Chemistry
Cellulose, Paper & Textile
Chemical Toxicology
Colloid & Surface Chemistry
Computers in Chemistry
Environmental Chemistry
Fluorine Chemistry
Fuel Chemistry
Geochemistry
Industrial & Engineering Chemistry
Inorganic Chemistry
Medicinal Chemistry
Nuclear Chemistry & Technology
Organic Chemistry
Petroleum Chemistry
Physical Chemistry
Polymer Chemistry
Polymeric Materials: Rubber

A tudományos kutatás módszere



A tudományos (kémiai) közlemény

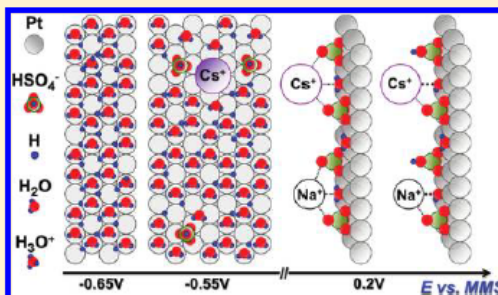
Influence of Cs⁺ and Na⁺ on Specific Adsorption of *OH, *O, and *H at Platinum in Acidic Sulfuric Media

Balázs B. Berkes,^{†,§} György Inzelt,[§] Wolfgang Schuhmann,^{†,‡} and Alexander S. Bondarenko^{*,†}

[†]Center for Electrochemical Sciences—CES and [‡]Analytische Chemie—Elektroanalytik & Sensorik, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, D-44780 Bochum, Germany

[§]Department of Physical Chemistry, Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, H-1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A, Hungary

ABSTRACT: The influence of Cs⁺ and Na⁺ on the adsorption of *H, *OH, and *O (where * denotes adsorbed species) at polycrystalline Pt in acidic sulfuric media has been investigated. Electrochemical impedance spectroscopy (EIS), cyclic voltammetry, and electrochemical nanogravimetry were used (i) to elucidate the models of the interface between polycrystalline Pt and the electrolytes in a wide range of electrode potentials and (ii) to resolve contributions originating from adsorbed *H, (bi)sulfate, *OH, and *O as well as the cations to the overall interface status. Using impedance analysis it was possible to separate at least two adsorption processes: (bi)sulfate and hydrogen adsorption. The nanogravimetry additionally resolves the contribution from Cs⁺. Specific adsorption of Cs⁺ at Pt surface significantly affects



1. INTRODUCTION

A phase boundary between platinum electrodes and liquid electrolytes plays a role of a model system in physical chemistry and electrochemistry.¹ The importance of these systems primarily originates from the fact that Pt demonstrates exceptionally good catalytic activity toward numerous techno-

controls the activity of a number of reactions, particularly the ORR in alkaline solutions. It means that, to understand electrocatalytic trends in the ORR, HER, and HOR as well as some other reactions on Pt surfaces, noncovalent interactions at the interface should be considered as well.¹¹

Polycrystalline Pt electrodes in sulfate-containing media are

adsorption of (bi)sulfates significantly affects, for example, the ORR, if compared with acidic perchlorate solutions. However, not only specifically adsorbing anions can influence catalytic activities of the electrodes. It has been recently demonstrated that the nature of cations such as Li⁺, Na⁺, K⁺, and Cs⁺ also

of the adsorbed species, either sulfate or bisulfate, can remain

Received: January 26, 2012

Revised: April 4, 2012

Published: April 26, 2012

Folyóirat

Cím
Szerzők

Intézet

Rövid kivonat
(sok folyóiratban
már figyelemfelhívó
ábrával)

Bevezetés
(Kapcsolódó korábbi munkák
összegzése.)

Beküldés és publikáció ideje

Kiadó, oldalszám, elektroni-
kus hozzáférés

A tudományos (kémiai) közlemény

2. EXPERIMENTAL SECTION

A Biologic SP-300 potentiostat and a QCM 200 quartz crystal microbalance (Stanford Research Systems) were used to perform the EIS, cyclic voltammetry, and electrogravimetric experiments. The experimental protocol for the impedance and QCM measurements was the same as described previously.^{28–32,43,45} The potential was scanned stepwise, from



3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Measurements Using Cyclic Voltammetry and Electrochemical Quartz Crystal Nanobalance. The nature of the cations influences the voltammetry of polycrystalline Pt in acidic sulfuric electrolytes.³⁷ A typical example is shown in Figure 1 for the case of Pt electrodes in solutions of 0.05 M H₂SO₄ containing 0.05 M of either Na₂SO₄ or Cs₂SO₄,



4. CONCLUSIONS

The influence of two cations, Na⁺ and Cs⁺, on the adsorption of *H, *OH, and *O at polycrystalline Pt in acidic sulfuric media has been investigated. Noncovalent interactions at the interface caused by alkali cations change drastically the interface status,



■ ACKNOWLEDGMENTS

A.S.B. is thankful to Prof. Bernard Tribollet (Laboratoire Interfaces et Systemes Electrochimiques) and Dr. Ulrich



■ REFERENCES

- (1) Climent, V.; Feliu, J. M. *J. Solid State Electrochem.* **2011**, *15*, 1297–1315.
- (2) Nørskov, J. K.; Bligaard, T.; Rossmeisl, J.; Christensen, C. H. *Nature Chem.* **2009**, *1*, 37–46.

Kísérleti és/vagy elméleti módszerek leírása

Eredmények tárgyalása, új elmélet, hipotézisek felállítása, ezek bizonyítása, összevetése korábbi elméletekkel, kísérletekkel

Konklúziók

(Összefoglalás, javaslatok további kísérletekre, az eredmények fontossága, használhatósága, stb.)

Köszönetnyilvánítás

(Anyagi források és szerzők között nem szereplő, kisebb „ötletgazdák”, munkatársak)

Hivatkozások

(Korábbi munkák pontos elérhetősége)

A tudományos (kémiai) közlemény

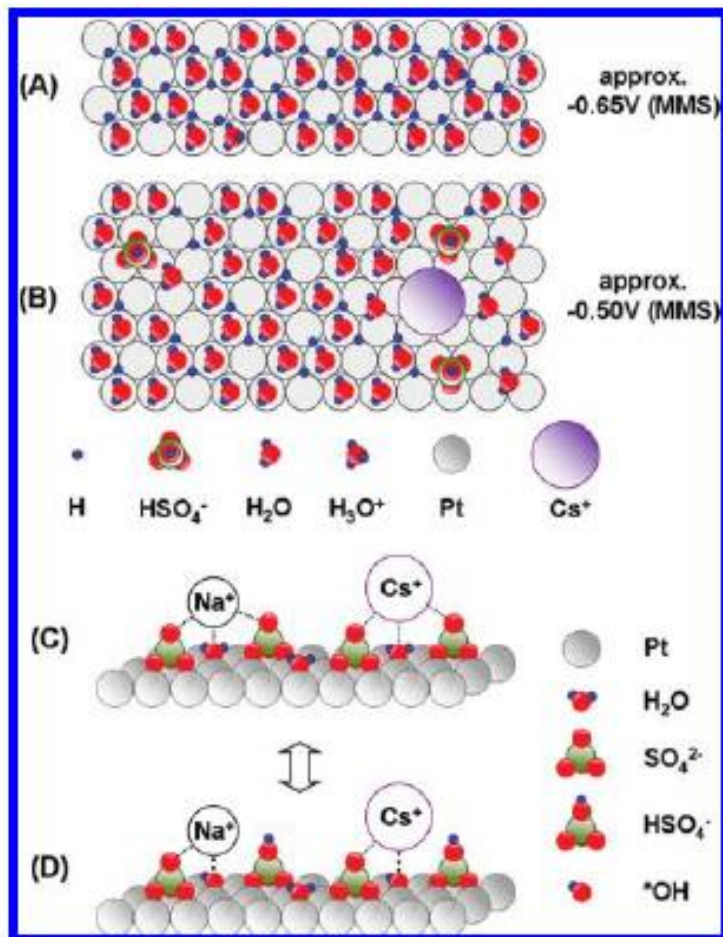


Figure 7. Schematic representation of possible adsorbate superstructures formed at (111) facets of Pt electrodes in (A, B) *H adsorption and (C, D) *OH and *O adsorption regions.

Ábrák (számozással, képaláírással)

$$Z_{dl} = C'_{DL} {}^{-1}(j\omega)^{-n} \quad (4)$$

where C'_{DL} is the pre-exponential parameter of the CPE, which

Egyenletek (számozással)

Table 2. Computed Vibrational Frequencies ($\tilde{\nu}$ in cm^{-1}), Intensities (I in km mol^{-1}), TED Analysis of Conformer 2 of 2-Chloropropionic Acid, and Experimental Vibrational Frequencies of Conformer 2 in Site c of Ar Matrix

	computed			exptl
	ν	I	TED	c
ν_1	3578.2	83	νOH 100%	3572
ν_2	3033.3	5	νCH 58%, $\nu\text{CH}_{3,\text{as}}$ 41%	
ν_3	3016.1	3	$\nu\text{CH}_{3,\text{as}}$ 60%, νCH 40%	
ν_4	2995.3	8	$\nu\text{CH}_{3,\text{as}'}$ 99%	2993
ν_5	2930.1	10	$\nu\text{CH}_{3,\text{S}}$ 100.0%	2940
ν_6	1758.9	330	$\nu\text{C}=\text{O}$ 85%	1773
ν_7	1459.7	5	$\delta\text{CH}_{3,\text{as}}$ 93%	
ν_8	1451.4	13	$\delta\text{CH}_{3,\text{as}'}$ 97%	1456
ν_9	1386.8	6	$\delta\text{CH}_{3,\text{S}}$ 94%	
ν_{10}	1339.2	39	βOH 34%, $\nu\text{C}-\text{O}$ 22%, $\nu\text{CC}'$ 12%, βOCO 11%	1362

^aX: CH_3- , $\text{H}-$, $\text{Cl}-$. Y: $=\text{O}$, $-\text{O}$.

Táblázatok (számozással, fejléccel, szükség esetén lábjegyzettel)

Kémiai folyóiratok

- Általános természettudományos lapok: pl. **Science, Nature**
- Összefoglaló cikkeket közlő kémiai lapok: pl. **Chemical Reviews, Reviews of the Chemical Society**
- Általános kémiai lapok: pl. **Chemistry – A European Journal, Angewandte Chemie, Journal of the American Chemical Society**
- Fő diszciplínák szerint: pl. **Inorganic Chemistry, Physical Chemistry – Chemical Physics, Analytical Chemistry**, stb...
- Speciális alterületek szerint: pl. **Applied catalysis, Vibrational spectroscopy, Computational Chemistry**, ..., stb.

növekvő presztízs és impaktfaktor ↑

Hagyományos (olvasó fizet a papíralapú és/vagy az internetes kiadásért)
vs. nyílt hozzáférésű („open access”, szerzők fizetnek a megjelenésért) folyóiratok

Kémiai adatbázisok

SciFinder (www.cas.org)

- Kémiai szakirodalom az 1800-as évek elejétől
- 68 millió szerves és szervetlen vegyület
- Naponta kb. 15 ezer új vegyület
- 44 millió reakció

Keresés: képlet, vegyület neve, kulcsszavak, szerző, intézet, év, hivatkozások

Substance Detail

Get References Get Reactions Get Commercial Sources Get Regulatory Info Send to SciPlanner

Link Save

Return

4.

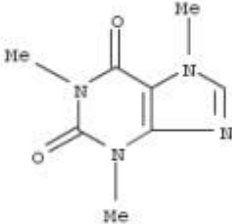
CAS Registry Number: 58-08-2

C₈ H₁₀ N₄ O₂

1H-Purine-2,6-dione, 3,7-dihydro-1,3,7-trimethyl-

Caffeine (8CI); 1,3,7-Trimethyl-2,6-dioxopurine; 1,3,7-Trimethylxanthine; 3,7-Dihydro-1,3,7-trimethyl-1H-purine-2,6-dione; 7-Methyltheophylline; Alert-Pep; Asia migraine; Cafalgine; Caffeina; Caffedrine; Caffein; Cafipel; DHCplus; Dasin; Diurex; Durvitan; Guaranine; Hycomine; Koffein; Mateina; Methyltheobromine; Midron extra; Miudol; NSC 5036; New Cetamol; No-Doz; Palergot-C; Phensal; Propoxyphene Compound 65; Refresh'n; SK 65 Compound; Shape Plus; Stay Alert; Stim; Synalgos; Thein; Theine; Tri-Aqua; Wigraine

Deleted CAS Registry Numbers: 71701-02-5, 95789-13-2



Kémiai adatbázisok

SciFinder
(www.cas.org)

1. View Reaction Detail [Link](#)
3 Steps Hover over any structure for more options.

▼ Overview

Steps/Stages	Notes
1.1 R:K ₂ CO ₃ , S:THF, S:DMF, 18 h, rt	3) microwave irradiation, thermal, Reactants: 4, Reagents: 6, Catalysts: 2, Solvents: 4, Steps: 3, Stages: 6, Most stages in any one step: 3
2.1 R:(Me ₃ Si) ₂ NH •Li, S:THF, 5 min, -78°C	
2.2 -78°C → rt; 40 min, rt	
2.3 R:NaHCO ₃ , S:H ₂ O, rt	
3.1 R: 	References Discovery of Potent and Selective Inhibitors of Ataxia Telangiectasia Mutated and Rad3 Related (ATR) Protein Kinase as Potential Anticancer Agents Q Full Text By Charrier, Jean-Damien et al From Journal of Medicinal Chemistry, 54(7), 2320-2330; 2011
R:AcOK, C:95464-05-4, S:Dioxane, 2 h, rt → 90°C	
3.2 R:Disodium carbonate, C:Pd(PPh ₃) ₄ , S:H ₂ O, 30 min, rt → 150°C	

▼ Experimental Procedure

Step 1
2-(4-bromophenylsulfonyl)-N,N-dimethylpropan-1-amine To a suspension of 1-bromo-4-(2-chloroethylsulfonyl)benzene (5 g, 18 mmol) and potassium carbonate (4.9 g, 35 mmol) in DMF (50mL) was added a 2M THF solution of dimethylamine (18 mL, 35 mmol) and the solution was stirred at rt for 18 hours. Water was added and the reaction mixture was extracted with EtOAc (3 x 50 mL). The combined organic layers were dried (MgSO₄) and concentrated to dryness, to give an oil which solidified upon standing to give 2-(4-bromophenyl)sulfonyl-N,N-dimethyl-ethanamine (4.3 g, 14.72 mmol, 83 %). MS (ES+) *m/z* 293 (M + H)⁺; ¹H NMR (400.0 MHz, CDCl₃) δ 7.79 (dd, 2H), 7.72-7.70 (m, 2H), 3.26 (dd, 2H), 2.71-2.68 (m, 2H) and 2.16 (s, 6H) ppm.

Step 2
 To a solution of 2-(4-bromophenyl)sulfonyl-N,N-dimethyl-ethanamine (500 mg, 1.7 mmol) in THF (5.3

Kémiai adatbázisok

Web of Science, Web of Knowledge (www.isiknowledge.com)

- Természettudományos szakirodalom az 1975-től
- Folyóirat impaktfaktorok

Keresés: kulcsszavak, szerző, intézet, év, hivatkozások, kutatók idézettsége

Scopus (<http://www.scopus.com>)

- kevésbé teljes, de általánosabb adatbázis (pl. szociológai, könyvek is)

Google Scholar (<http://scholar.google.hu>)

- Kevésbé teljes, de ingyenes
- Ingyenesen hozzáférhető honlapok

Egyéb adatbázisok:

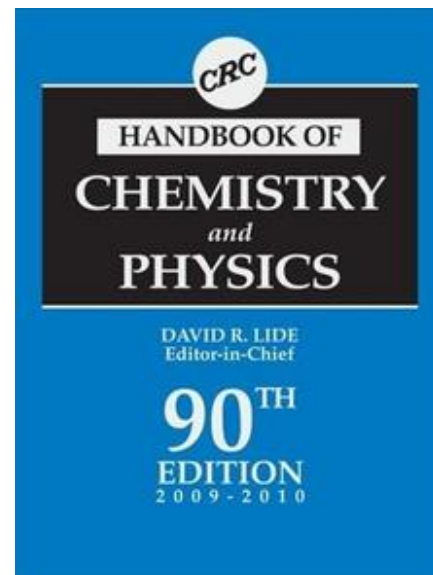
Belstein Crossfire (szerves vegyületek, reakciók)

Gmelin (szervetlen vegyületek, reakciók)

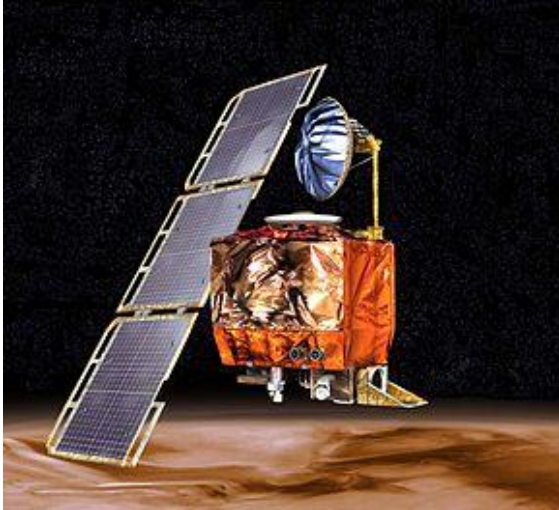
CRC Handbook of Chemistry and Physics

PubMed (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>)

NIST Chemistry WebBook (<http://webbook.nist.gov>)



Két példa az egységes tudományos nyelv és az egységes mértékegység-rendszer fontosságára



Mars Climate Orbiter

- NASA 125 millió \$-os műholdja
- 1999-ben 10 hónapos utazás után becsapódott a Marsba

OK: A hajtóműveket gyártó cég angolszász mértékegységben adta meg a tolóerőt, míg a NASA SI mértékegységben számolta



Air Canada Flight 143

- Kényszerleszállás 1983-ban
- OK: Elfogyott az üzemanyag, mert töltésnél rosszul váltottak át a litert és a gallont


Az egységes mértékegységrendszer kialakulása


- CGS-rendszer (cm, g, s) 1850-es évek
- MKS-rendszer (m, kg, s)
- 1875: méteregeyzmény (akkor 17 ország, köztük az Osztrák-Magyar Monarchia írta alá Párizsban)
- 1946: az amper a negyedik alapegység (MKSA)
- 1954: K és cd új alapegység
- SI mértékegység-rendszer elfogadása az 1960-as nemzetközi konferencián („General Conference on Weights and Measures”)
- 1971: a hetedik alapegység az anyagmennyiség (mól)
- Az SI 1976-tól kötelező, 1980-tól kizárólagosan kötelező Magyarországon

A Mértékegységek Nemzetközi Rendszere (SI: Système International d'Unités)

Alapmennyiség		Alapmértékegység	
neve	jele	neve	jele
Hosszúság	l	méter	m
Tömeg	m	kilogramm	kg
Idő	t	másodperc	s
Áramerősség	I	amper	A
Hőmérséklet	T	kelvin	K
Fényerősség	I_v	kandela	cd
Anyagmennyiség	n	mól	mol

nyomtatásban:

dőlt 

álló 

Alapmennyiségek

gramm, kilogramm

- Eredeti definíció: $1,00 \text{ dm}^3$ víz tömege a legnagyobb sűrűségű állapotban (azaz $3,98^\circ\text{C}$ -on) és normál légköri nyomáson. Probléma: nyomást a tömegből származtatjuk az SI-ben: körkörös definíció.
- 1889: tömegetalon („hiteles mintapéldány”) bevezetése. Új definíció: 1 kg az a tömeg, amely megegyezik a Párizs mellett (Sèvres-ben) őrzött Pt-Ir etalon tömegével. Probléma: változik a tömeg (szennyeződés, kopás, stb)
- Új próbálkozások: pl. 28-as tömegszámú szilícium atomokból álló egykristály (tökéletes) kristály 93 mm átmérőjű tökéletes gömbjének a tömege



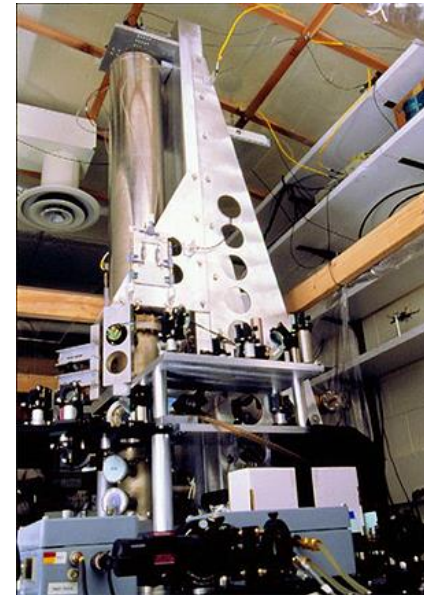
Alapmennyiségek

méter

- 1795–1983 méteretalonok
- 1983: Az a távolság, amit a fény vákuumban a másodperc $1/299\,792\,458$ -ad része alatt tesz meg

másodperc

- 1956: Az 1900. január 1. 0 óra 0 perchez tartozó (tropikus) év $1/31\,556\,925,9747$ -ed része.
- 1967: áttérés frekvencia-alapú (1/s) etalonra (A ^{133}Cs atom egy meghatározott (fény) sugárzásának $9\,192\,631\,770$ periódusa



Atomóra: 30 millió évenként
1 másodperc késés

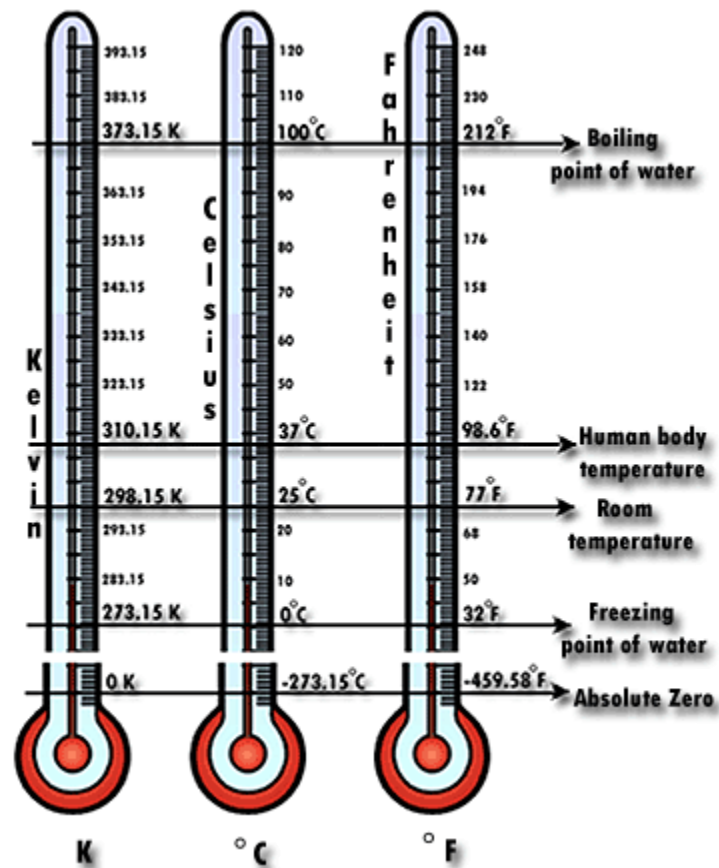
Alapmennyiségek

hőmérséklet

- 1954: 1 K az abszolút 0 fok és a víz hármaspontja (az a hőmérséklet, ahol a víz mindhárom halmazállapota megtalálható, $0,01^{\circ}\text{C}$) közötti skála $1/273,16$ -od része

anyagmennyiség

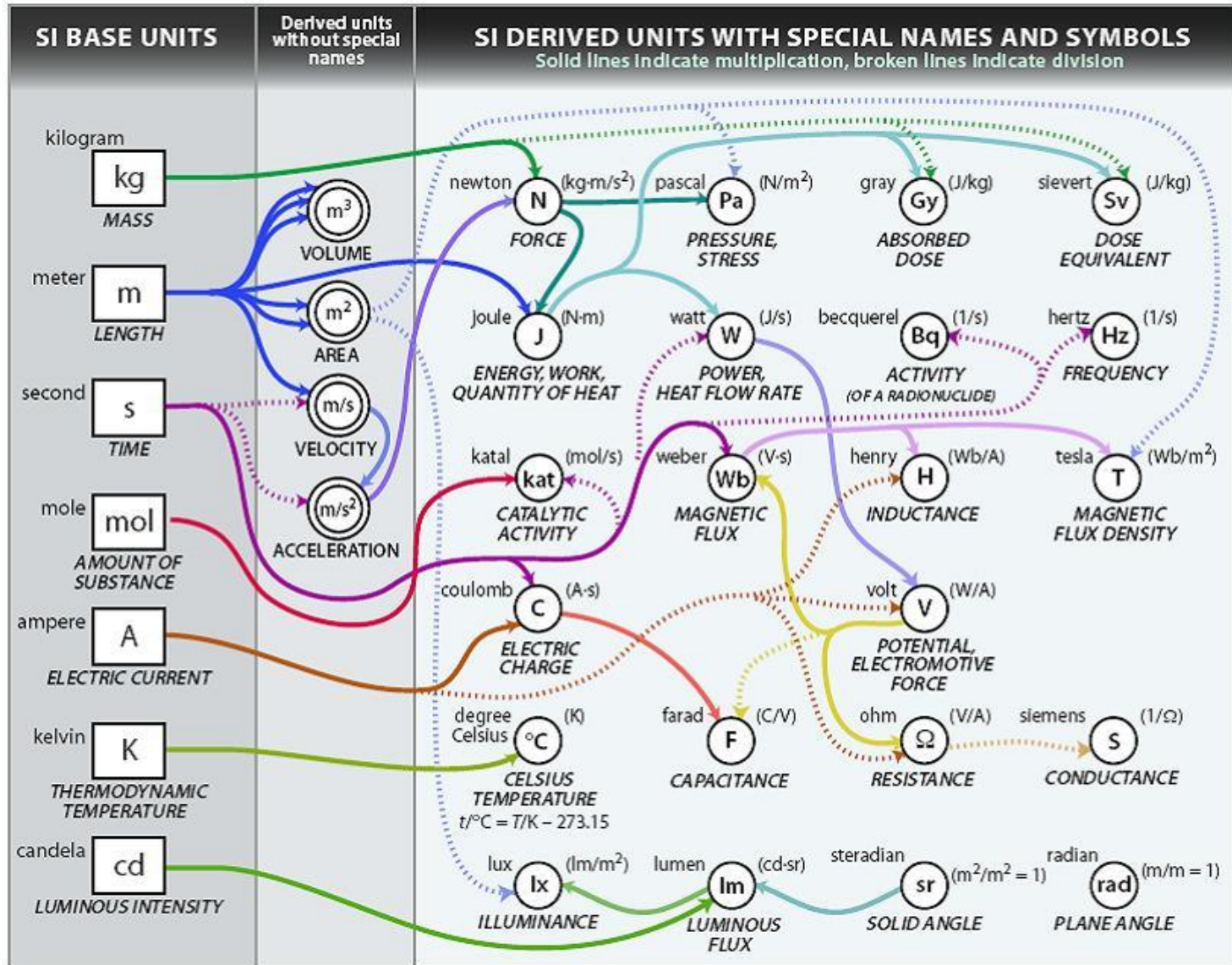
- 1960: 12 g csak 12-es tömegszámú szénizotópot (^{12}C) tartalmazó szénmintában található atomok száma
 $N_A = 6,02214179(30) \times 10^{23}$ 1/mol
(Avogadro-állandó)



SI-prefixumok

Előtag	Jele	Szorzó	
		hatvánnyal	számnévvel
yotta-	Y	10^{24}	kvadrillió
zetta-	Z	10^{21}	trilliárd
exa-	E	10^{18}	trillió
peta-	P	10^{15}	billiárd
tera-	T	10^{12}	billió
giga-	G	10^9	milliárd
mega-	M	10^6	millió
kilo-	k	10^3	ezer
hekto-	h	10^2	száz
deka-	da (dk)	10^1	tíz
–	–	10^0	egy
deci-	d	10^{-1}	tized
centi-	c	10^{-2}	század
milli-	m	10^{-3}	ezred
mikro-	μ	10^{-6}	milliomod
nano-	n	10^{-9}	milliárdod
piko-	p	10^{-12}	billiomod
femto-	f	10^{-15}	billiárdod
atto-	a	10^{-18}	trilliomod
zepto-	z	10^{-21}	trilliárdod
yokto-	y	10^{-24}	kvadrilliomod

Származtatott SI mennyiségek



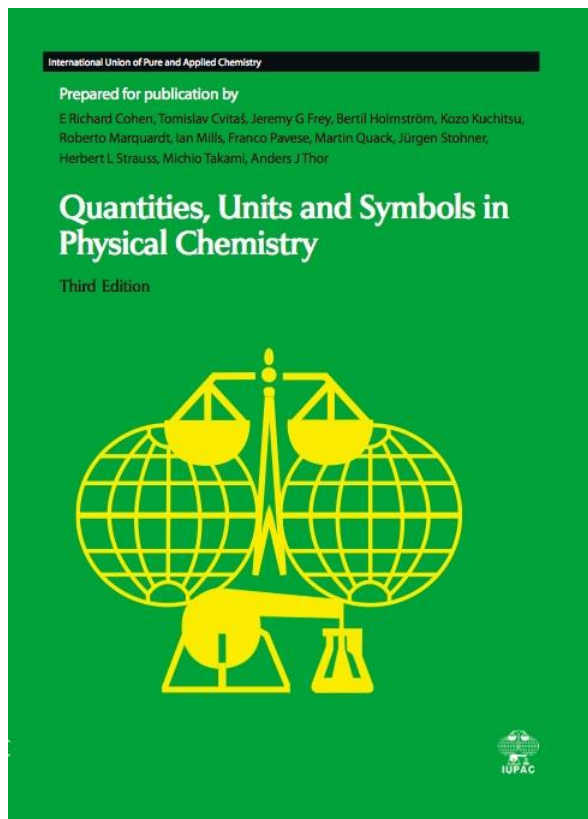
Néhány elfogadott, nem SI mértékegység: atomi egységek, csillagászati egység, óra, nap, perc, km/h, szögfok, szögperc, szögmásodperc, eV, kWh, hektár, bel (dB), liter, tonna, bar.

A kémia egységes, nemzetközi nyelve



<http://www.iupac.org/>

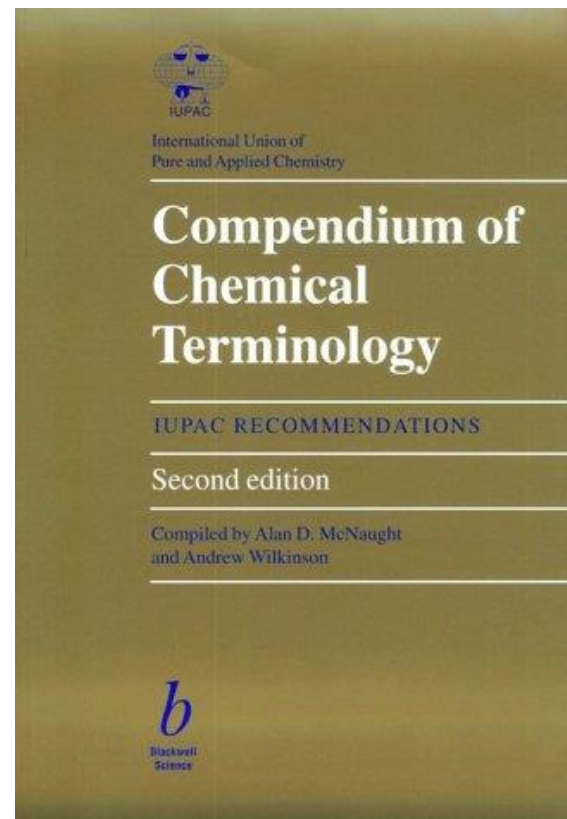
**International Union
of Pure and Applied
Chemistry**



IUPAC „Zöld könyv”

Fizikai-kémiai állandók, kémiai-
fizikai mennyiségek jelölése,
mértékegysége

[http://old.iupac.org/publications/books/
gbook/green_book_2ed.pdf](http://old.iupac.org/publications/books/gbook/green_book_2ed.pdf)



IUPAC „Arany könyv”

Kémiai fogalmak,
definíciók

[http://goldbook.iupac.org/PDF/
goldbook.pdf](http://goldbook.iupac.org/PDF/goldbook.pdf)

Legfontosabb kémiai mennyiségek

- Moláris tömeg (M)
$$M = \frac{m}{n} \quad [\text{g/mol}]$$
- Relatív atomtömeg: megmutatja, hogy adott elem atomjának átlagos tömege hányszor nagyobb a ^{12}C -izotóp tömegének az 1/12-ed részénél.
[dimenzó nélküli]
- Tömegszám (A): az adott elem atommagjában található protonok és neutronok számának összege
[dimenzió nélküli, egész]
- Moláris térfogat (V_m):
$$V_m = \frac{V}{n} \quad [\text{dm}^3/\text{mol}]$$

Legfontosabb kémiai mennyiségek

- Móltört (A-anyagra: x_A) $x_A = \frac{n_A}{n_{\text{összes}}}$ [dimenzió nélküli]

- Mól% (móltört %-ban kifejezve)

- Tömegtört (A-anyagra: w_A):

$$w_A = \frac{m_A}{m_{\text{összes}}} \quad [\text{dimenzió nélküli}]$$

- Tömeg % (tömegtört %-ban kifejezve)

- (Moláris) koncentráció (A-anyagra: c_A vagy [A])

$$c_A = \frac{n_A}{V} \quad [\text{mol/dm}^3]$$

- Tömegkoncentráció (A-anyagra: ρ_A)

$$\rho_A = \frac{m_A}{V} \quad [\text{g/dm}^3]$$

Legfontosabb kémiai mennyiségek

- Molalitás vagy Rault-koncentráció (A-anyagra: m_A)

$$m_A = \frac{n_A}{1 \text{ kg oldószer}} \quad [\text{mol/kg}]$$

- Sűrűség (ρ_A) $\rho_A = \frac{m_A}{V_A} \quad [\text{kg/m}^3] \text{ ([g/dm}^3])$

- ppm („parts per million”): db / 1 millió db

[dimenzió nélküli]

DIMENZIÓANALÍZIS

$$m_A = \rho_A \cdot V_A$$

$$[\text{g}] = [\text{g/dm}^3] \cdot [\text{dm}^3]$$

Extenzív és intenzív mennyiségek, a mérés

- Az **extenzív mennyiségek** olyan fizikai mennyiségek, amelyeknek az értéke a **rendszer mennyiségétől függ**. Két független rendszer egyesítésénél összeadódnak (additív).

(Megjegyzést segíti: az angol *extent* = „kiterjedés” szó.)

Példák: anyagmennyiség, tömeg, térfogat, energia, hőkapacitás

Mérésük: közvetlenül, összehasonlítással

- Az **intenzív mennyiségek** olyan fizikai mennyiségek, amelyeknek az értéke a rendszer **mennyiségétől független**. Két független rendszer egyesítésénél kiegyenlítődnek.

Példák: hőmérséklet, nyomás, sűrűség, fajlagos hőkapacitás, moláris térfogat


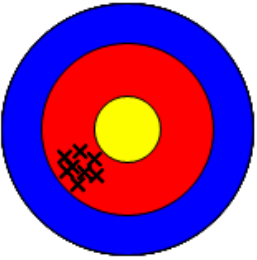

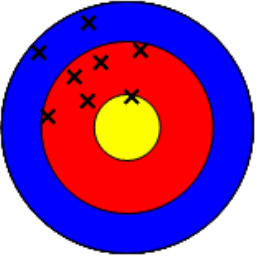
Mérésük: extenzív mennyiség mérésére visszavezetve
(pl. higanyos hőmérővel közvetlenül hosszúságot mérünk)

A mérések pontossága

Az angol nyelvben kétféle *pontosságot* különböztetünk meg:

accuracy- a mérések átlaga mennyire találja el az értéket

precision- a mérések mennyire reprodukálhatók, mennyire szórnak

	Accurate	Inaccurate (systematic error)
Precise		
Imprecise (reproducibility error)		

A mérési eredmény tudományos megadása:

1) $V = 20,15 \pm 0,04 \text{ cm}^3$

2) $V = 20,1(5) \text{ cm}^3$
(a bizonytalan jegy(ek) zárójelben)

3) $V = 20,15 \text{ cm}^3$
(az utolsó jegy bizonytalan)

Számításnál mindig a legpontatlanabb adat határozza meg a végeredmény pontosságát!

A-oldat tömege: 20,11 g

B-oldat tömege: 18,1 g

Összeöntve a tömeg: 38,2 g