



# TANTÁRGYI ADATLAP

<b>Tárgy neve:</b>		<b>Kódja:</b>	
Elméleti szerves kémia		VEMKOK2112A	
Theoretical organic chemistry			
<b>Tárgyfelel s oktató:</b>		<b>Tárgyfelel s tanszék:</b>	
Ungváry Ferenc Dr.		Szerves Kémia	
<b>Elmélet (óra):</b>		<b>Kredit:</b>	<b>Számonkérés:</b>
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:				
név	kurzus:	min. limit (fő)	max. limit (fő)	nyelv
Speier Gábor Dr.	Elmélet	5	10	

### A tantárgy célkitűzése

Óktatási cél: Az alap szerves kémia kurzus folytatásaként a szerves kémiai reakciók mélyebb megértését szolgáló fizikai szerves kémiai ismeretek bemutatása.

Ismeretkörök (heti bontásban): 1. Delokalizált kötések, aromás jelleg, antiaromások. 2. Fluxionális viselkedés, szerves és fémorganikus példák. 3. Gyenge kötések: donor-akceptor komplexek, hidrogénhíd kötés. 4.

Konformációs izoméria. Nyíltláncú és ciklikus rendszerek. Konformáció és NMR spektroszkópia. A konformáció hatása a reakciókészségre. 5. Konfigurációs izomerek, prokiralitás, enantiomerek előállítás, kiroptikai jelenségek. 6. Karbénok. Karbokationok. 7. Szerves savak és bázisok. Karbanionok, enolátok alkilezése. 8. Évközi ellenőrző zárthelyi. 9. Szabad gyökök, gyökmechanizmusú reakciók. 10. Fotokémiai alapfogalmak. A karbonilcsoport fotokémiai aktiválása. 11. Fotokémiai reakciók. 12. Orbitálszimmetria megmaradása szinkronreakciónál. 13. Szerkezet és reakciókészség: Hammett és Taft összefüggés. 14.

Átmenetifém-organikus homogén katalízis törvényszerűségei. 15. Második évközi zárthelyi.

Felhasznált tankönyvek: Dr. Markó László, Dr. Ungváry Ferenc Szerves Kémia V. Kézirat Veszprém 1997. Dr. Szántay Csaba Elméleti Szerves Kémia 3. kiad. Mész. Könyvkiadó Budapest 1984. Dr. Nógrádi Mihály Bevezetés a sztereokémiába Mész. Könyvkiadó Budapest 1975 (Dr. Nógrádi Mihály Stereochemistry, Basic Concepts & Applications, Pergamon Press, 1981. Egyéb ajánlott irodalom: T. H. Lowry, K. Schueller Richardson: Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 3. Edition, Harper and Row, New York 1990.

### Tantárgy képzési célja:

Az alap szerves kémia kurzus folytatásaként a szerves kémiai reakciók mélyebb megértését szolgáló fizikai szerves kémiai ismeretek bemutatása.

### Tantárgy tematikája:

Ismeretkörök (heti bontásban):

1. Delokalizált kötések, aromás jelleg, antiaromások.
2. Fluxionális viselkedés, szerves és fémorganikus példák.
3. Gyenge kötések: donor-akceptor komplexek, hidrogénhíd kötés.
4. Konformációs izoméria. Nyíltláncú és ciklikus rendszerek. Konformáció és NMR spektroszkópia. A konformáció hatása a reakciókészségre.
5. Konfigurációs izomerek, prokiralitás, enantiomerek előállítás, kiroptikai jelenségek.
6. Karbénok. Karbokationok.
7. Szerves savak és bázisok. Karbanionok, enolátok alkilezése.
8. Évközi ellenőrző zárthelyi.
9. Szabad gyökök, gyökmechanizmusú reakciók.
10. Fotokémiai alapfogalmak. A karbonilcsoport fotokémiai aktiválása.
11. Fotokémiai reakciók.
12. Orbitálszimmetria megmaradása szinkronreakciónál.
13. Szerkezet és reakciókészség: Hammett és Taft összefüggés.
14. Átmenetifém-organikus homogén katalízis törvényszerűségei
15. Második évközi zárthelyi.



# TANTÁRGYI ADATLAP

## Tantárgy követelménye:

Vizsgakérdések, vizsgakövetelmények:(kiragadott példák)

1. Mik az aromások ismérvei?
2. Mi a tropiliumion és miről nevezetes?
3. Hogyan gyoződhetünk meg egy molekula fluxionális viselkedéséről?
4. Milyen erők tartják össze a szénhidrogén molekulákat kondenzált fázisban?
5. Hogyan befolyásolja a hidrogénkötés a molekulák spektrális tulajdonságait?
6. Mi a fenokinin?
7. Mik a konformációs sztereoizomerek?
8. Állapítsa meg az abszolút konfigurációját az alábbi molekulának és nevezze meg!
9. Írjon fel példát axiális kiralitású molekulára!
10. A  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{Br})\text{CH}_2\text{COOCH}_3$  -ban lévő metilén hidrogénjei homotópok, enantiotópok vagy diasztereotópok? Indokolja meg választát!
11. Melyik molekulát ábrázolja az alábbi Newman projekció? Nevezze meg!
12. Mik a szupersavak?
13. Mit értünk karbenoid alatt?
14. Milyen stabilis karbaniont ismer?
15. Miért nevezik kemény savnak a protont és az alumínium-trikloridot?
16. Milyen az elektronszerkezete a tripllett dioxigénnek?
17. Mi a ketil, és mire jó?
18. Hogyan állítunk elo gyököket?
19. Rajzolja fel a karbonil-csoport szingulett és tripllett állapotainak elektronsémáját!
20. Melyik gerjesztett állapot a leghosszabb élettartamú?
21. Mi a foszforeszcencia jelensége?
22. Mi történik ha cisz-sztilbent fénnel besugározzunk?
23. Mit mond a Woodward-Hoffmann szabály?
24. Írjon fel példát elektrociklikus reakcióra!
25. A Diels-Alder reakcióhoz termikus vagy fotokémiai aktiválás szükséges?
26. Mit értünk a molekulák felületi pályáin?
27. Magyarázza meg, hogy miért képződik foltokémiai reakcióban a cisz,transz-2,4-hexadiénből transz-2,3-dimetil-ciklobutén!
28. Írjon példát  $\text{S}_{\text{N}}2$  mechanizmusú reakcióra! Mik e mechanizmus jellemzői?
29. Magyarázza meg az alábbi reakció eredményét:
30. Milyen lépésekből tevődik össze az aldol reakció?
31. Mi a reakció terméke:  
 $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CH}_2 + \text{HOCl}$
32. Mit értünk primer kinetikus izotóp effektus alatt?
33. Mi az a Taft-összefüggés?
34. Mit értünk katalízisen?
35. Ismertesse az olefinek ródium-katalizált hidrogénezésének mechanizmusát!

## Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Felhasznált tankönyvek: Dr. Markó László, Dr. Ungváry Ferenc Szerves Kémia V. Kézirat Veszprém 1997. Dr. Szántay Csaba Elméleti Szerves Kémia 3. kiad. Musz. Könyvkiadó Budapest 1984. Dr. Nógrádi Mihály Bevezetés a sztereokémiába Musz. Könyvkiadó Budapest 1975 (Dr. Nógrádi Mihály Stereochemistry, Basic Concepts & Applications, Pergamon Press, 1981.  
Egyéb ajánlott irodalom: T. H. Lowry, K. Schueller Richardson: Mechanism and Theory in Organic Chemistry, 3. Edition, Harper and Row, New York 1990.