



TANTÁRGYI ADATLAP

Tárgy neve:		Kódja:	
Szerves vegyületek sztereokémiája		VEMKOK5112S	
Stereochemistry of organic compounds			
Tárgyfelel s oktató:		Tárgyfelel s tanszék:	
Dr. Bakos József		Szerves Kémia Intézeti Tanszék	
Elmélet (óra):		Kredit:	Számonkérés:
2 (/hét)		2	Vizsga

A tárgy oktatója:

név	kurzus típusa	kurzus kódja	nyelv
Dr. Bakos József	Elmélet	01	magyar

Tantárgy képzési célja:

A sztatikus és dinamikus sztereokémiai elvi alapjainak elsajátításával olyan sztereokémiai szemléletmód kialakítása, amely leegyszerűsíti a jelenségek megértését, leírását és rendszerezését.

Tantárgy tematikája:

1. Sztatikus sztereokémia, klasszikus sztereokémia és konfigurációtan.
2. Molekulák geometriai jellemzői, molekulák szimmetriasajátságai.
3. Egyszerű szénvegyületek szimmetriasajátságai, vegyületek szimmetria szerinti osztályozása.
4. Sztereoiszoméria és kiralitás, királis molekulák jellegzetességei.
5. Több aszimmetriacentrumot tartalmazó molekulák.
6. Konfiguráció kísérleti meghatározása.
7. Enantiomerek elválasztásának alapelvei, szénvegyületek konformációja.
8. A sztereokémia dinamikus jelenségei, módszertani ismeretek, homotópia, enantiotópia, diasztereotópia. NMR spektrumok és kinetikus jelenségek kapcsolata.
9. Konfigurációs és konformációs változások kinetikája, racemizáció és epimerizáció, konfigurációs inverzió.
10. Rotáció különböző kötések körül, gyuruátfordulás.
11. Alkalmazott sztereokémia. Reakciók sztereokémiai jellegzetességei.
12. Azonos szerkezetű csoportok, trigonális centrumok átalakításai.
13. Sztereoiszomerek keletkezése, térszerkezet (konfiguráció, enantiomerek, diasztereomerek) és reakciókészség.
14. Az enantiomerikus tisztaság meghatározásának módszerei.
15. Monoton polimerek sztereokémiája, szervetlen komplexek sztereokémiája.



TANTÁRGYI ADATLAP

Tantárgy követelménye:

Vizsgakérdések, vizsgakövetelmények:

Történeti áttekintés (Malus, Biot, Arago, Pasteur, Kekule, van't Hoff, Le Bel, Hassel, Mislow, Chan-Ingold-Prelog). A sztereokémia tárgyalásának indokoltsága: háromdimenziós valóság, művészet-szimmetria, természet és szimmetria, biológiai tulajdonságok és szerkezet, íz és szerkezet, szag és szerkezet, reakciómechanizmus felderítése. Molekulák geometriai jellemzői: van der Waals sugár, kötéshossz, kötésszög, diédes szög. Molekulák szimmetriasajátságai, szimmetriaelemek (szimmetriasisík, szimmetriatengely, tükrözési szimmetriatengely). Egyszerű szénvegyületek szimmetriaviszonyai: egy-, két-, három- és négyligandumos centrumok. Vegyületek szimmetria szerinti osztályozása. Schönflies-féle pontcsoportok. Királis szimmetriaosztályba tartozó pontcsoportok (C_n , D_n): C_1 , C_2 , C_3 , C_6 ; D_n diédes szimmetriájú pontcsoport (n -lapátú propellerek): D_2 (o, o' -hidas bifenilek), D_3 , D_4 . Akirális szimmetriaosztályba tartozó szimmetriacsoportok: C_s , S_n , C_{nv} , C_{nh} , D_{nd} , T_d . C_s : S_n : S_2 , S_4 , S_6 . C_{nv} : C_{2v} , C_{3v} , C_{4v} . C_{nh} : C_{2h} , C_{3h} . D_{nd} : D_{2d} , D_{3d} . D_{nh} : D_{2h} , D_{3h} , D_{6h} . T_d . Vegyületek osztályozása szimmetriasajátságai alapján. Királis molekulák jellegzetességei: királis molekulák létrejöttéhez szükséges szerkezeti sajátságok, kiralitás iránya (Fischer-projekció, Cahn-Ingold-Prelog konvenció), királis molekulák osztályozása (centrális, axiális, planáris kiralitás, csavarok kiralitása). Több aszimmetriacentrumot tartalmazó molekulák: nyíltláncú vegyületek (borkosavak konformációja és statisztikus szimmetriája). Mezo-borkosav akirális és királis konformerjei. Pszeudokiralitás (centrum, sík, tengely): trihidroxiglutársav akirális és királis sztereoizomerjei. Pszeudokiralitás gyakorlati alkalmazása: optikailag aktív alkoholok enantiomerikus összetételének meghatározása akirális reagenssel (PCl_3) O, O -dialkil-foszfonsavészteren keresztül ^{31}P NMR alkalmazásával. A relatív konfiguráció meghatározásának fizikai módszerei. Kiroptikus jelenségek, az optikai rotációs diszperzió (ORD) és a cirkulációs optikai dikroizmus (CD). Síkban polározott fény létrehozása ellentétesen cirkulárpolaros összetevőkből akirális közegben és királis közegben. Pozitív és negatív Cotton-effektus. Elektronszínképek kromoforcsoportjai. Konfiguráció és a Cotton-effektus összefüggései. Ketonok kirotikus sajátságai. Oktánszabály. Önmagukban királis kromoforok. Az enantiomerikus tisztaság meghatározásának módszerei. Polarimetria alapelve, a meghatározás hibái. Gáz és folyadékkromatográfiás meghatározás. NMR spektroszkópiás módszerek: királis származékképzés (CDA), királis szolvatálószer (CDA), királis lantanida shiftreagensek (CLSR), akirális reagensek alkalmazása. Szénvegyületek konformációja. Az etán konformációja. n -bután konformációja. Térbeli kölcsönhatások: szünklinális, antiperiplanáris, szünklinális és antiklinális konformerek relatív energiaszintje. Relatív konformerpopuláció. A ciklohexán konformációja (van't Hoff koncepció, Baeyer feszültségelmélet, Sachse, Hassel, Barton). A szék, kád és királis csavart kád konformerekre ható feszültségtényezők. Monoszubsztituált ciklohexán-származékok konformációs energiái. Homotóp és heterotóp ligandumok, felületek. Homotóp, enantiotóp, diasztereotóp ligandumok és felületek. Helyettesítési és addíciós kritérium. Szimmetria kritérium. Ligandumok és vegyületek osztályozása. Ligandumok és felületek prokiralitása. Az NMR spektrum és a molekulán belüli szimmetriaviszonyok kapcsolata: izokron (izogám, anizogám), anizokron magok. Reakciók sztereokémiai jellegzetességei. Azonos szerkezetű csoportok. Átalakulásai. Homotóp, enantiotóp és diasztereotóp csoportok átalakulásai, reaktivitása. Homotóp, enantiotóp és diasztereotóp felületek reakciói, reaktivitása. Konfiguráció és reakciókészség: enantiomerek, diasztereomerek és konformerek viszonylagos reakciókészsége. NMR spektrumok és kinetikus jelenségek kapcsolata. Dinamikus mágneses magrezonancia. Konfiguráció és konformációs változások kinetikája. Racemizáció és

Tantárgyhoz kapcsolódó irodalom:

Felhasznált tankönyvek:

- Nógrádi, M.: Bevezetés a sztereokémiába, Muszaki Könyvkiadó, Budapest (1975).
- Nógrádi, M.: Stereochemistry, Basic Concepts and Application, Akadémiai Kiadó, Budapest (1981).
- Eliel, E. L., Willen, S. H.: Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley and Sons, Inc., New York Budapest (1994).
- Juaristi, E.: Introduction to Stereochemistry and Conformational Analysis, John Wiley and Sons, Inc., New York (1991).
- Nógrádi, M.: Stereoselective Synthesis, VCH, Weinheim (1995).
- Aitken, R. A., Kilényi, S. N.: Asymmetric Synthesis, Blackie Academic and Professional, London, (1994).
- Alworth, W. L.: Stereochemistry and its Application in Biochemistry, Wiley Interscience, New York (1972).
- Simonyi, M.: Problems and Wonders of Chiral Molecules, Akadémiai Kiadó, Budapest (1990).
- Collins, A. N., Sheldrake, G. N., Crosby, J.: Chirality in Industry. The Commercial Manufacture and Application of Optically Active Compounds, John Wiley and Sons, Inc., New York (1992).
- Potapov, V. M.: Stereochemistry, MIR Publishers, Moscow (1979).
- Allenmark, S.: Chromatographic Enantioseparation, Ellis Horwood, New York (1991).
- Sheldon, R. A.: Chirotechnology, Marcel Dekker, Inc., New York (1993).