



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	Szerves vegyületek sztereokémiája
Tárgykód:	VEMKOK5112S
Felelős szervezet neve:	Szerves Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKOK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Bakos József

Oktatás célja:

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

Tantárgy tartalma:

1. Sztatikus sztereokémia, klasszikus sztereokémia és konfigurációtan. 2. Molekulák geometriai jellemzői, molekulák szimmetriasajátságai. 3. Egyszerű szénvegyületek szimmetriasajátságai, vegyületek szimmetria szerinti osztályozása. 4. Sztereoizoméria 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. Sztereoizomerek keletkezése, térszerkezet (konfiguráció, enantiomerek, diasztereomerek) és reakciókészség. 14. Az enantiomerikus tisztaság meghatározásának módszerei. 15. Monoton polimerek sztereokémiája, szervesetlen komplexek sztereokémiája.

Számonkérési és értékelési rendszere:

Vizsgakérdések, vizsgakövetelmények: Történelmi áttekintés (Malus, Biot, Arago, Pasteur, Kekulé, 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, diéderes szög. Molekulák szimmetriasajátságai, szimmetriaelemek (szimmetriasík, szimmetriatengely, tükrözési szimmetriatengely). Egyszerű szénvegyületek szimmetriaviszonyai: egy-, két-, három- és négyligandumos centrumok. Vegyületek szimmetria szerinti osztályozása. Schönflies-féle pontcsoportok. Királis szimmetriacsoportba tartozó pontcsoportok (C_n , D_n): C_1 , C_2 , C_3 , C_6 ; D_n diéderes szimmetriájú pontcsoport (n -lapátú propellerek): D_2 (o, o' -hidas bifenilek), D_3 , D_4 . Akirális szimmetriacsoportba tartozó szimmetriacsoportok: C_s , S_n , C_{nv} , C_{nh} , D_{nd} , T_d . C_s : 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



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	Szerves vegyületek sztereokémiája
Tárgykód:	VEMKOK5112S
Felelős szervezet neve:	Szerves Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKOK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Bakos József

Számonkérési és értékelési rendszere:

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 (PCI3) O,O-dialkyl-foszfonsavészteren keresztül ³¹P 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 cirkulárpóláros összetevőkből akirális közegben és királis közegben. Pozitív és negatív Cotton-effektus. Elektron színképek kromoforcsoportjai. Konfiguráció és a Cotton-effektus összefüggései. Ketonok kiroptikus sajátosságai. 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. A 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

Kötelező és ajánlott irodalom:

Felhasznált tankönyvek: 1. Nógrádi, M.: Bevezetés a sztereokémiába, Muszaki Könyvkiadó, Budapest (1975). 2. Nógrádi, M.: Stereochemistry, Basic Concepts and Application, Akadémiai Kiadó, Budapest (1981). 3. Eliel, E. L., Willen, S. H.: Stereochemistry of Organic Compounds, John Wiley and Sons, Inc., New York Budapest (1994). 4. Juaristi, E.: Introduction to Stereochemistry and Conformational Analysis, John Wiley and Sons, Inc., New York (1991). 5. Nógrádi, M.: Stereoselective Synthesis, VCH, Weinheim (1995). 6. Aitken, R. A., Kilényi, S. N.: Asymmetric Synthesis, Blackie Academic and Professional, London, (1994). 7. Alworth, W.



Tárgytematika

Félév:	2012/13/1
Tárgynév:	Szerves vegyületek sztereokémiája
Tárgykód:	VEMKOK5112S
Felelős szervezet neve:	Szerves Kémia Intézeti Tanszék
Felelős szervezet kódja:	MKOK
Tárgyfelelős neve:	Dr. Bakos József

Kötelező és ajánlott irodalom:

L.: Stereochemistry and its Application in Biochemistry, Wiley Interscience, New York (1972). 8. Simonyi, M.: Problems and Wonders of Chiral Molecules, Akadémiai Kiadó, Budapest (1990). 9. 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). 10. Potapov, V. M.: Stereochemistry, MIR Publishers, Moscow (1979). 11. Allenmark, S.: Chromatographic Enantioseparation, Ellis Horwood, New York (1991). 2. Sheldon, R. A.: Chirality, Marcel Dekker, Inc., New York (1993).