

**Szerves Kémia (1)** kvInIes1/1, kredit: 4; Jalsovszky István  
Sztereokémia I.

Sztatikus sztereokémia.

A szén tetraéderes vegyértékorientációja és ennek következményei.

Molekulamodellek használata a sztereokémia törvényszerűségeinek vizsgálatára.

Tetraéderes szén centrum 4 különböző ligandummal.

Kiralitás.

Enantiomer modellek.

Fischer-projekció.

Wohl-Freudenberg specifikáció, D-L nomenklatura.

Cahn-Ingold-Prelog konvenció, (R)-(S)-nomenklatura

Sztereokémia II.

Sztatikus sztereokémia.

A "D-L" és az (R)-(S)-nomenklatura összehasonlítása.

Fischer-projekciók kiralitásának meghatározása.

Molekulamodellek 2 kiralitáscentrummal.

Modellek 2 azonos telítettségű kiralitáscentrummal. Mezo-módosulat és racemát.

Modellek 2 különböző telítettségű kiralitáscentrummal.

Diasztereomerek.

Olefinék és kumulált rendszerek sztereoizomériája: a van't Hoff-féle formális levezetés tetraéderek összekapcsolásával.

A (Z)-(E)-nomenklatura.

Sztereokémia III.

Dinamikus sztereokémia. Szemléltetés molekulamodellekkel.

Konformációk, energiagátak, stabilitás.

Etán, bután konformációi.

Fűrészbak-projekció.

Newman-projekció.

Borkősavak stabilis konformációi. „Konformációs racemát”.

Királis vegyületek mérhető jellemzői. Fajlagos forgatóképesség.

Királis molekulamodellek megfeleltetése valódi királis vegyületeknek.

Abszolút konfiguráció és meghatározásának lehetőségei.

Enantiomerek szétválaszthatósága. Diasztereomer sópárok.

Sztereokémia IV.

Cikloalkánok konformációja. A ciklohexán részletes tárgyalása.

Axiális, ekvatoriális térállás. Preferenciák.

Diszubsztituált cikloalkánok sztereokémiája. Sematikus levezetés a legnagyobb szimmetriájú modell alapján.

1,2-, 1,3- és 1,4-diszubsztituált ciklohexánok sztereokémiájának részletes tárgyalása. Cisz-transz izoméria. 2 azonos szubsztituenszt tartalmazó 1,2-diszubsztituált ciklohexánok. A cisz-izomer akiralitásának magyarázata a valós geometria figyelembe vételével.

Cisz- és transz dekalin térszerkezete.

Királis szerves vegyületek kiralitáscentrum nélkül. Szubsztituált difenilek. Helicének.

## Szerkezetleírás és szerkezetmeghatározás I.

Oktettképletek használata. Példák a 2. periódus elemeiből képzett vegyületekkel.

Kovalens kötésű vegyületekben szereplő atomok töltésének kiszámítása.

Molekulahalmazok.

Molekulahalmazok fizikai tulajdonságait meghatározó kölcsönhatások: van der Waals erők, dipól-dipól kölcsönhatások, inter- és intramolekuláris hidrogénhidak. Szerves kémiai példák az egyes kölcsönhatásokra.

Vegyületek elemi összetételének meghatározása. Izolálási és tisztítási technikák.

Tisztaságellenőrzés kromatográfiai módszerekkel.

## Szerkezetleírás és szerkezetmeghatározás II.

A szerves kémiai szerkezetmeghatározásban leggyakrabban alkalmazott műszeres módszerek.

Tömegspektrometria.

Infravörös spektroszkópia

$^1\text{H}$  NMR spektroszkópia.

$^{13}\text{C}$  NMR spektroszkópia.

A módszerek ismertetése alkalmazáscentrikus. 1-1 tematikus ábra a mérés kivitelezéséről, a készülékekről. Minimális elméleti háttér. A hangsúly azon van, hogyan értelmezzük a módszerek által szolgáltatott információkat.

Jellegzetes fragmensek egyszerű vegyületek tömegspektrumában.

IR-rezgési frekvenciák.

NMR kémiai eltolódások. Elsőrendű protonspektrumok. Spin-spin csatolás. Csatolási állandók.

## Szerkezetleírás és szerkezetmeghatározás III.

Szerkezetmeghatározás MS, IR,  $^1\text{H}$  NMR és  $^{13}\text{C}$  NMR együttes alkalmazásával, egyszerű példákon keresztül: gyakorlás.

Pivalinsav-metilészter. Terc.-butil-acetát. Metil-acetát. Etil-acetát. Etil-propionát. Izopropil-acetát. 2-Metil-benzoésav-metilészter. 3-Metil-benzoésav-metilészter. 4-Metil-benzoésav-metilészter. 4-Metoxi-benzaldehid. 4-Etil-benzaldehid.

## Szerves reakciók vizsgálata

Reakciótipusok példákkal: addíció, elimináció, szubsztitúció, átrendeződés.

Reagens-szubsztrát felosztás. Elektrofil, nukleofil, gyökös reagensek és reakciók.

Reakciókinetikai és termodinamikai alapfogalmak. Elemi lépések.

Arrhenius-egyenlet, Eyring-egyenlet.

Egylépéses reakciók, átmeneti állapot, aktivált komplex.

Többlépéses reakciók, intermedierek.

Kinetikus és termodinamikai kontroll.

Kinetikai egyenletek.

Exoterm és endoterm reakciók energiaprofilja.

Aktiválási energia.

Reakcióhő.

## Lewis-savak és Lewis-bázisok

Aciditás, bázicitás.  $pK_A$  és  $pK_B$  jelentése.  
Példák szerves savakra és szerves bázisokra.  
Szerves hidrogéntartalmú vegyületek rangsorolása .  $pK_A$  szerint.  
A savi erősséget meghatározó tényezők.  
Töltésdelokalizáció az anionban. Határszerkezetek.  
Enol-oxo, iminohidrin-savamid és izonitrozo-nitrozo tautoméria.  
Tautomerek és határszerkezetek közötti különbség megvilágítása.  
Határszerkezetek felírásának szabályai.

## A molekulapálya-elmélet alapjai I.

Elektronkonfiguráció.  
A VB- és az MO-módszer alapjai.  
Hibridizáció. Szerkezetleírás lokalizált 2-centrumos kötésekkel.  
A hibridállapot és a molekulák geometriája közötti kapcsolat.  
 $sp^3$ -hibridállapotú szén, telített vegyületek. Problémák kis tagszámú gyűrűk esetén.  
 $sp^2$ -hibridállapotú szén, olefinek.  
 $sp$ -hibridállapotú szén, acetilének, kumulált kettőskötéses szénvegyületek.

## A molekulapálya-elmélet alapjai II.

A Hückel-módszer alapjai. Praktikus elhanyagolások, egyszerűsítések. NDO-közelítés.  
Szekuláris determinánsok, polinomok. Gyökök meghatározása.  
Energiaszintek. Delokalizációs energia.  
MO-koeficiensek meghatározása.  
Kötésrend és elektronsűrűség.  
Alternáló és nemalternáló szénhidrogének.  
Etén jellemzése a HMO-elmélet alapján.

## A molekulapálya-elmélet alapjai III.

Allilrendszerek jellemzése a HMO-elmélet alapján.  
Butadién jellemzése a HMO-elmélet alapján.  
Ciklobutadién jellemzése a HMO-elmélet alapján.  
Benzol jellemzése a HMO-elmélet alapján.  
Az aromaticitás Hückel-féle kritériumai.  
Érdekes aromás vegyületek.

## A molekulapálya-elmélet alapjai IV.

Reakciók kvalitatív leírása határ-molekulapályák kölcsönhatásával.  
Kemény és lágy savak, illetve bázisok.  
Kemény és lágy nukleofilek. Ambidens nukleofilek.  
Korrelációs diagram.  
Periciklusos reakciók: elektrociklusos reakciók, szigmatróp átrendeződések, Diels-Alder addíciók, keletrop reakciók. Periciklusos reakciók nómenklatúrája.  
Woodward-Hoffmann szabály.

## Szénhidrogének reakciói I.

Metán gázfázisú klórozása. Gyökös szubsztitúciós láncreakció mechnizmusa.  
Alkánok gyökös szubsztitúciós halogénezése: klórozás, brómozás.  
Hőmérséklet szerepe.  
Szelektivitás.  
Alkánok gázfázisú nitrálása. Szelektivitás. Láncszakadás.  
Gyök intermedierek.  
Gyökök stabilitását meghatározó tényezők.  
Allil-helyzetű szubsztitúciós halogénezés: propén gázfázisú klórozása, oldatfázisú reakciók N-bróm-szukcinimiddel.  
Allilgyök.

## Szénhidrogének reakciói II.

Halogének elektrofil addíciója olefinekre.  
Az elektrofil addíció MO-leírása (lágy elektrofil-lágy nukleofil HOMO-LUMO kölcsönhatása)  
Etén brómozása.  
Brómaddíció sztereokémiája: „*szin*”- és „*anti*”-mechanizmus.  
 $\pi$ -és  $\sigma$ -komplex.  
Bromónium ionok.  
Bromónium ionok szelektív gyűrűfelfnyitása.  
A brómozási reakció idealizált és valós kinetikai egyenlete: tanulságok.  
 $v = k [\text{olefin}] [\text{X}_2]$  ( $A_E2$ -mechanizmus)  
 $v = k_1 [\text{olefin}] [\text{Br}_2] + k_2 [\text{olefin}] [\text{Br}_2]^2 + k_3 [\text{olefin}] [\text{Br}_2] [\text{Br}^-]$   
Klorónium ionok stabilitása.

## Szénhidrogének reakciói III.

Brómaddíció konjugált diénekre.  
Allil-kation típusú intermedierek.  
Kinetikus és termodinamikai kontroll: 1,2- és 1,4-addíció.  
HX elektrofil addíciója alkénekre.  
Markovnyikov-szabály és magyarázata.  
Karbénium ionok stabilitása. Wagner-Meerwein átrendeződés.  
Példák W-M átrendeződésre. Pinén-bornil-klorid-kamfén átalakítás.

## Szénhidrogének reakciói IV.

Alkének és alkinek vízáddíciós reakciója.

Problémák alkének esetén: egyensúly, Wagner-Meerwein átrendeződés.

Vízaddíció higany sókon keresztül alkénekre és alkinekre.

Gyűrűs merkuríniumsók és bontásuk.

Alkinek reakciója hangyasavval.

HX gyökös addíciója olefinekre: anti-Markovnyikov-szabály.

## Szénhidrogének reakciói V.

Olefinok epoxidálása persavval. Mechanizmus.

Epoxidgyűrű felnyitási lehetőségei: elektron- és szterikus effektusok.

Olefinok transz-hidroxilezése: gyakorlás (*Z*)- és (*E*)-olefineken.

Olefinok cisz-hidroxilezése ozmium-tetroxiddal és kálium-permanganáttal. Mechanizmus.

Cisz-hidroxilezés (*Z*)- és (*E*)-olefineken.

Newman-projekciók alkalmazása a reakciók sztereokémiájának ábrázolásában.

Sztereokémiai általánosítások.

## Szénhidrogének reakciói VI.

Olefinok és acetilének hidrobórlása. Mechanizmus.

Reakció diboránnal illetve  $\text{Q}_2\text{BH}$ -val.

Regioszelektivitás magyarázata.

Adduktumok átalakítása szénhidrogénné, illetve oxigéntartalmú vegyületekké.

A lúgos-peroxidos bontás mechanizmusa.

Telítetlen vegyületek cikloaddíciós reakciói. Fontosabb példák.

Dipoláris cikloaddíciók.

Ozonolízis mechanizmusa.

## Szénhidrogének reakciói VII.

Alifás elektrofil szubsztitúció: oxovegyületek  $\alpha$ -helyzetű halogénezése.

Aromás elektrofil szubsztitúció (konkrét alkalmazások nélkül).

$\pi$ - és  $\sigma$ -komplex.

A  $\sigma$ -komplex töltéeloszlása.

A  $\sigma$ -komplex jellemzése határszerkezetekkel.

Irányítási szabályok a  $\sigma$ -komplex szerkezte alapján.

Aromás nukleofil szubsztitúció Meisenheimer-komplexen keresztül.

## Halogéntartalmú vegyületek I.

A korábbi anyagban még nem szerepelt előállítások.  
Fluortartalmú vegyületek néhány előállítási reakciója.  
H – F csere kobalt-trifluoriddal: perfluor-alkánok előállítása.  
Halogéncsere reakciók antimon-fluoridokkal.  
Jódvegyületek előállítása: OH – I csere, Cl – I csere.  
Nukleofil szubsztitúciós reakciók: S<sub>N</sub>1, S<sub>N</sub>2.  
S<sub>N</sub>-reakciók sztereokémiája.  
Nukleofil szubsztitúciók kimenetelét befolyásoló tényezők: oldószer, távozó csoport, nukleofil.  
Töltés- és pályakontrollált reakciók.

## Halogéntartalmú vegyületek II.

S<sub>N</sub>-reakciók allil-halogenideken.  
Intramolekuláris nukleofil szubsztitúció.  
Eliminációs reakciók: E1, E2, E1cB mechanizmus példákkal.  
Regio- és sztereoszelektivitás eliminációs reakciókban.  
Zajcev-szabály érvényességi köre.  
Eliminációs és szubsztitúciós reakciók feltételeinek összehasonlítása.

## Fémorganikus vegyületek

Fém-szén kötés polaritása.  
Wurtz-reakció.  
Fémorganikus vegyületek sav – bázis tulajdonságai.  
Néhány gyakoribb lítiumorganikus vegyület.  
Grignard-reagens előállítása és tulajdonságai.  
Elektron-donor aprotikus oldószer szerepe.  
Grignard-reagens reakciói: sav – bázis reakciók proton-donor vegyületekkel, nukleofil szubsztitúciós reakciók, nukleofil addíciós reakciók.  
Példák: Grignard-reagens reakciója vízzel, savval, 1-alkinokkal, allil-halogenidekkel, orto-hangyasav-trietilészterrel, epoxidokkal, oxovegyületekkel, észterekkel, nitrilekkel.  
Kadmiumorganikus vegyületek előállítása és felhasználása.  
Reformatszkij-reagens előállítása és reakciója oxovegyületekkel.