

A tantárgy neve:		magyarul:	Reakciómechanizmusok					Kódja:	TTKME0311	
		angolul:	Reaction mechanisms							
A képzés 2. féléve (1. tavaszi félév)										
Felelős oktatási egység:			DE TTK, Szerves Kémiai Tanszék							
Kötelező előtanulmány neve:								Kódja:		
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	3	Heti	0	Heti	0	kollokvium	4	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató			neve:		Dr. Somsák László			beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja , hogy a hallgatók szemléletformáló jelleggel megismerjék a szerves kémiai reakciók lefutásának és szelektivitási viszonyainak értelmezésére legkiterjedtebben alkalmazott módszereket.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató <i>Tudás:</i> Ismeri a szerves vegyületek elektronszerkezetének leírását a vegyértékkötés (VB) és molekulapálya (MO) elméletek alapján, a határmolekulapályák és a sztereoelektron effektusok fogalmát, a legkisebb mozgás elvét és alkalmazásukat a heterolitikus, homolitikus, periciklusos mechanizmusú reakciótipusok értelmezésében. <i>Képesség:</i> Képes a szerves kémiai átalakulások tipizálására, új kísérleti eredmények értelmezésére az általános elméleti ismeretek alkalmazásával. Képes irodalmi reakciómechanizmus javaslatok kritikai feldolgozására. <i>Attitűd:</i> A megszerzett alapismeretekre építve továbbképzzi magát a szerves reakciók mechanisztikus szemléletében. <i>Autonómia és felelősség:</i> A kurzus ismeretei alapján önállóan kialakítja javaslatait adott szerves reakciókra vonatkozó kérdésekben, szakmai körben egyeztetési és képviselői szerepeket.										
A kurzus tartalma, témakörei A kémiai reakciók termodinamikai és kinetikai jellemzőinek összefoglalása. A szerves reakciók és mechanizmusok tipizálása. Homo- és heteronukleáris kötések leírása a VB és az MO módszer alapján. Az oldószerek jellemzése és csoportosítása, oldószereffektusok. Ionos reakciók (válogatás): szubsztitúció tetraéderez és trigonális szénatomon, addíciók és eliminációk. Periciklusos reakciók. Szabad gyökös átalakulások.										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek Interaktív előadás, aktív részvétel az órákon. A tárgyhoz tartozó fogalomtár használata.										
Értékelés A tárgy szóbeli kollokviummal zárul, melynek sikertelensége esetén a TVSZ rendelkezései az irányadóak.										
Kötelező olvasmány: Az előadáshoz tartozó ábra- és fogalomgyűjtemény.										
Ajánlott szakirodalom: 1. Fleming, I. <i>Frontier Orbitals and Organic Chemical Reactions</i> , Wiley, 1976. 2. Rauk, A. <i>Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry</i> , Wiley, 1994. 3. Giese, B. <i>Radicals in Organic Synthesis: Formation of Carbon-Carbon Bonds</i> ; Pergamon Press: Oxford, 1986. 4. Parsons, A. F. <i>An Introduction to Free Radical Chemistry</i> , Blackwell, 2000. 5. Alabugin, I. V. <i>Stereoelectronic Effects - A Bridge Between Structure and Reactivity</i> , Wiley, 2016. 6. Savin, K. <i>Writing Reaction Mechanisms in Organic Chemistry</i> , Academic Press, 2014. 7. Moloney, M. G. <i>How to Solve Organic Reaction Mechanisms</i> , Wiley, 2015.										

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>A kémiai kötések leírására használt VB és LCAO-MO módszer ismétlődő áttekintése. Homo- és heteronukleáris kötések, elektroneltolódási jelenségek (induktív és mezomer effektusok, konjugáció, hiperkonjugáció) leírása a VB és az MO módszer alapján. Szubsztituensek hatása a kötések/vegyületek/intermedierek energiaszintjére és elektronsűrűségére. Reaktív intermedierek és sajátosságai. A Hammond-posztulátum és alkalmazási lehetőségei. Részecskeközi kölcsönhatások, oldószeres és oldatok sajátosságai, oldószeres csoportosítása. Oldószerhatások a szerves kémiai reakciókban.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató ismétlődő jelleggel áttekinti és rendszerezi a kémiai kötéselméleteket, az elektroneltolódási jelenségeket, és az oldószeres hatásait szerves kémiai reakciókban.</p>
2. hét	<p>A kémiai reakciók perturbációelméleti megközelítése, a Klopman–Salem-egyenlet és értelmezése. A sztereoelektronhatás fogalma, megnyilvánulásai, a Baldwin-szabályok. A legkisebb mozgás elve, felhasználásai kémiai reakciók értelmezésében.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri két molekula egymásra hatásának perturbációelméleti leírását, a határmolekulapályák szerepét a reakciók értelmezésében, ezek összefüggését a sztereoelektron effektusokkal, valamint a legkisebb mozgás elvét.</p>
3. hét	<p>Szubsztitúció tetraédres szénatomon. Az alifás nukleofil szubsztitúció. Nukleofilek és távozó csoportok jellemzése. A bimolekulás mechanizmus kinetikai és sztereoekémiai jellegzetességei, sztereoelektron feltétele, ezek bizonyítása. Gyűrűzárás S_N2 reakcióval. A monomolekulás mechanizmus kinetikai és sztereoekémiai jellegzetességei. Ionpárok hatása a sztereoekémiára, szomszédcsoport részvétel és következményei. A Walden ciklus. A nukleofil, az oldószer, és a szubsztrátum szerkezetének hatása. Ambidens és α-effektusú nukleofilek.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató részletes áttekintést kap az alifás nukleofil szubsztitúciókról, képessé válik a kurzus általános szempontjai alapján a reakciók jellegzetességeinek értelmezésére.</p>
4. hét	<p>Eliminációk. Tipizálás: α- és β-elimináció, 1,n-eliminációk. β-Eliminációs reakciók mechanizmusai. Szűn és anti elimináció. A bimolekulás mechanizmus kinetikai és sztereoekémiai jellegzetességei, sztereoelektron feltétele, ezek bizonyítása. A monomolekulás mechanizmusok kinetikai és sztereoekémiai jellegzetességei. A szubsztrátum, a támadó bázis és a távozó csoport hatása az eliminációs reakciókra; a kettős kötés orientációja. Oldószerhatások, szubsztitúció és elimináció aránya.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató részletes áttekintést kap az eliminációkról, képessé válik a kurzus általános szempontjai alapján a reakciók jellegzetességeinek értelmezésére.</p>
5. hét	<p>Szubsztitúció trigonális szénatomon. Nukleofil szubsztitúció acil szénen. Karbonsavszármazékok reaktivitási sora és ennek értelmezése. Tetraédres mechanizmus és bizonyítása. A nukleofil és a szubsztrátum szerkezetének hatása a reakciókra. Sztereoelektron feltételek (Bürgi-Dunitz trajektória és értelmezése, tetraédres köztitermék bomlása) és következményeik. Aktiválás és katalízis az acil nukleofil szubsztitúciókban. Gyűrűzárások acil szénen.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató részletes áttekintést kap az acil nukleofil szubsztitúciókról, képessé válik a kurzus általános szempontjai alapján a reakciók jellegzetességeinek értelmezésére.</p>
6. hét	<p>Addíciók. Addíció szén-szén többszörös kötésekre. Cisz- és transz-addíciók, sztereoespecifikus és -szelektív jelleg. Elektrofil addíciók ónium- és karbeniumion típusú köztitermékeken át, sztereoekémiai- és oldószeres effektusok. Nukleofil addíció karbonilsoporra. Reakciók összefoglalása, csoportosítása: heteroatomos, hidrid és fémorganikus nukleofilek addíciói. Nukleofil addíció szén-szén többszörös kötésekre. Előfeltételek, 1,2- és 1,4- addíció, a regio szelektivitás befolyásolása. Gyűrűzárás trigonális szénatomok reakcióival.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató részletes áttekintést kap az addíciókról, képessé válik a kurzus általános szempontjai alapján a reakciók jellegzetességeinek értelmezésére.</p>
7. hét	<p>Periciklusos reakciók fogalma, típusai és az értelmezésükre alkalmazott módszerek (korrelációs diagramok szerkesztése; az FMO módszer alkalmazása). Elektrociklusos reakciók. Cikloaddíciós reakciók: normál- és fordított elektronszükségletű reakciók; a regio- és a sztereo szelektivitás értelmezése. Lewis-sav katalízis; pozíció- és periszelektivitás.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a periciklusos reakciókat általában, illetve elsajátítja a korrelációs diagramok és a határmolekulapályák módszer alkalmazását az elektrociklusos és a cikloaddíciós reakciók kiválasztási szabályainak értelmezésére.</p>
8. hét	<p>1,3-Dipoláris cikloaddíció. Keletróp reakciók; szigmatróp átrendeződések. Oldószeres effektusok periciklusos reakciókban.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató általában és számos konkrét példán keresztül megismerkedik az 1,3-dipoláris</p>

	cikloaddíciókkal és fontosabb alkalmazási területeikkel, valamint a keletrop reakciók és a szigmatrop átrendeződések jellegzetességeivel.
9. hét	Periciklusos reakciók biológiai rendszerekben, alkalmazásuk biortogonális jelölésre. <hr/> TE: A hallgató áttekinti a biológiai rendszerekben, illetve bioszintézisekben előforduló periciklusos reakciók néhány típusát.
10. hét	A periciklusos reakciók értelmezése az átmeneti állapot aromás jellege alapján. A periciklusos reakciók értelmezési módszereinek összevetése. <hr/> TE: A hallgató elsajátítja a periciklusos mechanizmusok értelmezését az átmeneti állapot aromás jellegének vizsgálata segítségével.
11. hét	A szabad gyökök fogalma, előállításuk módszerei. Kémiai iniciátorok. A szabad gyökök szerkezete és elemi reakcióik. Láncreakciók és nem lánccmechanizmusú átalakítások. A szén gyökök termodinamikai és kinetikai stabilitása; a gyökcentrum szubsztituenseinek hatása. <hr/> TE: A hallgató rendszerezetten elsajátítja a szabad gyökös reakciókra vonatkozó általános megfontolásokat, megismerkedik a legfontosabb gyökös mechanizmusokkal és reakciókkal, a gyökök stabilitási viszonyait befolyásoló tényezőkkel.
12. hét	Szabad gyökök absztrakciós reakciói: termokémiai-, poláros-, sztereoelektron- és sztérikus effektusok. <hr/> TE: A hallgató a kurzus általános szempontjainak alkalmazásával képessé válik az absztrakciós reakciók jellemzésére.
13. hét	Szabad gyökök addíciós reakciói: termokémiai-, poláros-, sztereoelektron- és sztérikus effektusok. <hr/> TE: A hallgató a kurzus általános szempontjainak alkalmazásával képessé válik az addíciós reakciók jellemzésére.
14. hét	Szabad gyökök fragmentációja és átrendeződései. Gyökkeltés funkciós csoportok helyén. Gyökök szintetikus alkalmazása; a szelektivitási és a reaktivitási feltétel. Gyökös és ionos reakciók összehasonlítása a szintézis szempontjából. A SET mechanizmus. Reakciók gyökös jellegének megállapítása. <hr/> TE: A hallgató áttekinti a gyökös reakciók további típusait, módszereket sajátít el a gyökreakciók tervezésére és a gyökök előfordulásának megállapítására adott átalakításokban.