

A tantárgy neve:		magyarul:	<b>Aszimmetriás szintézisek</b>					Kódja:	<b>TTKME0312</b>	
		angolul:	<b>Asymmetric syntheses</b>							
<b>A képzés 3. féléve (2. őszi félév)</b>										
Felelős oktatási egység:		<b>DE TTK, Szerves Kémiai Tanszék</b>								
Kötelező előtanulmány neve:							Kódja:			
Típus		Heti óraszámok						Követelmény	Kredit	Oktatás nyelve
		Előadás		Gyakorlat		Labor				
Nappali	x	Heti	2	Heti	0	Heti	0	<b>kollokvium</b>	<b>3</b>	<b>magyar</b>
Levelező		Fél- éves		Féléves		Fél- éves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		<b>Dr. Mándi Attila</b>				beosztása:	<b>egyetemi adjunktus</b>	
<b>A kurzus célja, hogy a hallgatók</b>										
<p>megismerjék a sztereoselektív (enantioszelektív és diasztereoselektív) szintézisek alapjait, a biológiailag aktív szintetikus és természetes vegyületek szintézisének alkalmazott legfontosabb módszereket, képessé váljanak sztereoselektív reakciók értelmezésére, az iparban és a gyógyászatban sok esetben alapvető sztereoselektív szintézislépek felhasználására, forrás irodalom önálló feldolgozására és bemutatására.</p>										
<b>Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató</b>										
<i>Tudás:</i>										
<p>Ismeri a sztereokémia és az aszimmetriás szintézisek alapfogalmait, az enantiomer-tiszta anyagok előállításának lehetőségeit, fontosabb szintézismódszereit. Ismeri a kémia tudományos eredményein alapuló, a sztereoselektív reakciók értelmezéséhez szükséges fontosabb elméleteket, modelleket. Anyanyelvén tisztában van a tudományterületre vonatkozó fogalomrendszerrel és terminológiával, idegen nyelven pedig megérti a forrásirodalmak lényegét.</p>										
<i>Képesség:</i>										
<p>Képes a sztereokémia és az aszimmetriás szintézisek megértésére, az azokkal kapcsolatos adatgyűjtésre, az adatok feldolgozására, valamint a feldolgozáshoz szükséges kémiai szakirodalom használatára. Képes a megtanult elmélet, paradigmák és elvek alkalmazására. Ismeretei alapján rendelkezik a természettudományos alapokon nyugvó érvelés képességével a vonatkozó tudományterületen. Képes elsajátítani azt az idegen nyelvű szókinccset, amellyel forrásirodalmak önálló feldolgozását el tudja végezni.</p>										
<i>Attitűd:</i>										
<p>Hatékony sztereoselektív reakciók megismerése révén környezettudatosan jár el, törekszik a kis környezetterheléssel járó módszerek alkalmazására. Nyitott a szakmai eszmecserére.</p>										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
<p>Képes önállóan végiggondolni a sztereokémia és az aszimmetriás szintézisek alapvető szakmai kérdéseit, képes erről felettesének/kollégáinak érdemi összeállításokat készíteni. Eredményeit hasonló szakmai beosztásban dolgozó munkatársak (hallgatók) eredményeivel összeveti.</p>										
<b>A kurzus tartalma, témakörei</b>										
<ul style="list-style-type: none"> <li>- Kiralítás, sztereoizomeria, relatív és az abszolút konfiguráció meghatározása</li> <li>- Biopolimerek, nagy mennyiségben rendelkezésre álló enantiomer-tiszta természetes források</li> <li>- Enantiomer-tiszta anyagok előállításának lehetőségei</li> <li>- „Chiral pool” szintézisek</li> <li>- A reakciók sztereokémiáját leíró fontosabb modellek</li> <li>- Első- (szubsztrát kontrollált), második- (segédanyag kontrollált), harmadik- (reagens kontrollált) és negyedik generációs (katalizátor kontrollált) eljárások</li> <li>- Szén-szén kötés kialakítására alkalmas reakciók</li> <li>- Aszimmetriás oxidációs reakciók, epoxidálási reakciók</li> <li>- Aszimmetriás redukációs reakciók</li> </ul>										

- Többszörös aszimmetriás indukció
- Organokatalízis
- „Memory of chirality”
- Kinetikus rezolválás, dinamikus kinetikus rezolválás
- Enzimatis reakciók
- Aszimmetriás totálszintézisek

#### Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek

- A tananyag frontális magyarázata
- Önálló forrásirodalom feldolgozás és bemutatás
- A bemutatók / irodalmak közös megvitatása

#### Értékelés

Forrás irodalom önálló feldolgozása és bemutatása (20 %)

Kollokvium (80 %)

Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen

- A hallgatók egy forrásirodalmat önállóan feldolgoznak, és rövid összefoglaló előadásban ismertetnek
- A hallgatók egymás előadását megvitatják, kérdéseket tesznek fel
- A tantárgyat kollokvium zárja

A kollokvium sikertelensége esetén javítás utóvizsga keretében történhet a TVSZ-ben meghatározottak szerint.

#### Kötelező olvasmány:

1. R. A. Aitken, S. N. Kilényi: *Asymmetric Synthesis*, Springer Science+Business Media Dordrecht, 1992.
2. R. E. Gawley, J. Aubé: *Principles of Asymmetric Synthesis*, Second Edition, Elsevier, 2012, Kidlington, Oxford.

#### Ajánlott szakirodalom:

1. J. P. Riehl: *Mirror-Image Asymmetry - An Introduction to the Origin and Consequences of Chirality*, John Wiley & Sons, 2010, Hoboken, New Jersey.
2. E. L. Eliel, S. H. Wilen: *Stereochemistry of Organic Compounds*, Wiley, New York, 1994.
3. Y. Izumi, A. Tai: *Stereo-Differentiating Reactions - The Nature of Asymmetric Reactions*, Kodansha Scientific Books & Academic Press, 1977, New York.
4. R. S. Ward: *Selectivity in Organic Synthesis*, Wiley, Chichester, 1999.
5. G. Q. Lin, Y. M. Li, A. S. C. Chan: *Principles and Applications of Asymmetric Synthesis*, Wiley-Interscience, New York, 2001.
6. D. Enders, K. E. Jaeger: *Asymmetric Synthesis with Chemical and Biological Methods*, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.
7. M. Christmann, S. Bräse: *Asymmetric Synthesis - The Essentials*, Wiley-VCH, Weinheim, 2008.
8. Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: *A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai*, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004, Budapest.

### Heti bontott tematika

1. hét	<p>A kiralitás jelentősége az élő szervezetekben. Biopolimerek. Sztereoizoméria. A relatív és az abszolút konfiguráció meghatározása. Eltérő hatású enantiomerek / diasztereomerek az élővilágból, ill. a szintetikus gyógyszerhatóanyagok köréből. Enantiomer-tiszta anyagok előállításának lehetőségei. Nagy mennyiségben rendelkezésre álló enantiomer-tiszta természetes források.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató elmélyíti a kiralitás jelentőségéről, a relatív és abszolút konfiguráció meghatározásáról tanult ismereteit. Konkrét példákon keresztül képes a gyógyszer- ill. agráripár</p>
--------	--

	szempontjából sok esetben fontos enantiomer-tiszta megközelítés fontosságát megérteni és alkalmazni.
2. hét	<p>„Chiral pool” szintézisek előnye, hátránya, példák. Sztereoselektivitás, sztereospecifitás. Aszimmetriás szintézisek alapfogalmai. Topicitás (csoportok, felületek). Prokiralitás. Felületek szimetriaviszonyai.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató néhány példán keresztül megismerkedik a „chiral pool” módszerrel és képes azt megfelelő nagy mennyiségben rendelkezésre álló olcsó enantiomer-tiszta kiindulási anyag esetén alkalmazni. A hallgató elsajátítja az aszimmetriás szintézisek alapfogalmait, melyek segítségével képes sztereoselektív reakciók értelmezésére.</p>
3. hét	<p>Cram-szabály, Bürgi-Dunitz trajektória, Felkin-Anh modell, Conforth-Evans modell, Cram-féle kelát modell, Prelog szabály. Első- (szubsztrát kontrollált), második- (segédanyag kontrollált), harmadik- (reagens kontrollált) és negyedik generációs (katalizátor kontrollált) eljárások.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismerkedik a reakciók sztereokémiáját leíró fontosabb modellekkel, melyek segítségével képes értelmezni és előre jelezni sztereoselektív reakciókat. Megismerkedik az aszimmetriás szintézisek csoportjaival, ezek előnyeivel és hátrányaival, mely alapján képes aszimmetriás reakciók osztályozására.</p>
4. hét	<p>Példák első és második generációs eljárásokra.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes első- és második generációs eljárásokat felhasználni sztereoselektív reakciók végrehajtására.</p>
5. hét	<p>Szén-szén kötés kialakítására alkalmas reakciók (aszimmetriás alkilezés, aszimmetriás Michael-reakció, karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója).</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás alkilezés, aszimmetriás Michael-reakciók, karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója esetén.</p>
6. hét	<p>Szén-szén kötés kialakítására alkalmas reakciók (karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója, aszimmetriás [2+2] cikloaddíció, aszimmetriás Diels-Alder-reakció).</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója, aszimmetriás [2+2] cikloaddíciók és aszimmetriás Diels-Alder-reakciók esetén.</p>
7. hét	<p>Aszimmetriás oxidációs reakciók, epoxidálási reakciók.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás oxidációs reakciók és epoxidálási reakciók esetén.</p>
8. hét	<p>Aszimmetriás redukációs reakciók.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás redukációs reakciók esetén.</p>
9. hét	<p>Többszörös aszimmetriás indukció.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes többszörös aszimmetriás indukció felhasználására aszimmetriás szintézisekben.</p>
10. hét	<p>Organokatalízis. „Memory of chirality”.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes a környezetkímélő organokatalizátorok, valamint a „memory of chirality” módszer alkalmazására aszimmetriás szintézisekben.</p>
11. hét	<p>Kinetikus rezolválás. Dinamikus kinetikus rezolválás. Enzimatis reakciók.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismerkedik a kinetikus rezolválás, a dinamikus kinetikus rezolválás és az enzimatis reakciók lehetőségeivel. A környezetkímélő és költséghatékony enzimatis reakciók megvalósításának érdekében kész együttműködni más szakterületek szakembereivel (pl. biológusokkal).</p>

12. hét	<p>Aszimmetriás totálszintézisek.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató bonyolultabb esetek megismerése révén képes mélyebben megérteni a sztereoszelektív szintézisek nehézségeit és lehetőségeit.</p>
13. hét	<p>Önállóan feldolgozott forrásirodalom rövid bemutatása, megvitatása.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes idegen nyelvű forrásirodalom önálló feldolgozására, rövid bemutatására, megvitatására. Képes a kurzus során elsajátított alapfogalmak és megközelítések felhasználására a reakciók értelmezése céljából.</p>
14. hét	<p>Önállóan feldolgozott forrásirodalom rövid bemutatása, megvitatása.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes idegen nyelvű forrásirodalom önálló feldolgozására, rövid bemutatására, megvitatására. Képes a kurzus során elsajátított alapfogalmak és megközelítések felhasználására a reakciók értelmezése céljából.</p>