

A tantárgy neve:	magyarul:	Sztereokémiai szerkezetvizsgáló módszerek						Kódja:	TTKME0322	
	angolul:	Stereochemical structural elucidation methods								
A képzés 4. féléve (2. 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	2	Heti	0	Heti	0	kollokvium	3	magyar
Levelező		Féléves		Féléves		Féléves				
Tantárgyfelelős oktató		neve:		Dr. Kurtán Tibor				beosztása:	egyetemi tanár	
A kurzus célja, hogy a hallgatók										
gyakorlatban is alkalmazható ismereteket szerezzenek a természetes és szintetikus, királis nem racém vegyületek sztereokémiájának meghatározásában, megismerjék az erre alkalmazható szerkezetvizsgáló módszereket és ki tudják választani a leginkább célravezető módszert az abszolút konfiguráció és konformáció meghatározására.										
Tanulás eredmények, kompetenciák: a hallgató										
<i>Tudás:</i>										
Ismeri a királítás típusait és jelentőségét, a Cahn-Ingold-Prelog nomenklaturát az abszolút konfiguráció megadására, a különböző szerkezetvizsgáló módszereket a sztereokémia meghatározására, és birtokában van annak szemléletnek, ami az optikailag aktív vegyületek abszolút konfigurációjának meghatározásához szükséges.										
<i>Képesség:</i>										
Képes az optikailag aktív vegyületek sztereokémiai vizsgálatával kapcsolatos adatgyűjtésre, az adatok feldolgozására, valamint a feldolgozáshoz szükséges kémiai szakirodalom használatára. Képes a megtanult elmélet és elvek alkalmazására a sztereokémiai vizsgálatok szakterületen. Képes a kiroptikai módszerek hatékony alkalmazására abszolút konfiguráció meghatározására.										
<i>Attitűd:</i>										
Elkötelezett új ismeretek, kompetenciák elsajátítására és belső késztetést érez folyamatos szakmai továbbképzésre. Fogékony a hatékony sztereokémiai vizsgáló módszerek alkalmazására az abszolút konfiguráció meghatározására.										
<i>Autonómia és felelősség:</i>										
Tisztában van a sztereokémiai vizsgálatok során felmerülő közvetett és közvetlen nehézségekkel, és ennek megfelelő körültekintéssel jár el. Képes önállóan végiggondolni alapvető szakmai kérdéseket a sztereokémia témakörben, és képes erről érdemi összeállításokat készíteni.										
A kurzus tartalma, témakörei										
<ul style="list-style-type: none"> - Aszimmetria és kiralitás jelentősége és sztereokémiai alapfogalmak. - Kiralítás típusai. Konformációs és konfigurációs enantiomerek és diasztereomerek. - Abszolút konfiguráció megadása: R/S és D/L jejlők használata, Cahn-Ingold-Prelog rendszer. - Királis gyógyszerhatóanyagok és előállításuk enantioszelektív szintézissel. - Abszolút és relatív konfiguráció meghatározásának lehetőségei. Kémiai korreláció és kinetikus rezolválás. - NMR módszerek az abszolút konfiguráció meghatározására. Mosher módszer és módosításai. - Fény és anyag kölcsönhatása. Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőstörés. Kiroptikai módszerek - Optikai forgatás, optikai rotációs diszperziós és cirkuláris dikroizmus spektroszkópia - Félempirikus ECD szabályok és exciton csatolt cirkuláris dikroizmus - Vibrációs cirkuláris dikroizmus és Raman optikai aktivitás 										
Tervezett tanulási tevékenységek, tanítási módszerek										
<ul style="list-style-type: none"> - A tananyag bemutatása interaktív előadás formájában PowerPoint ábrákkal - Kiegészítő ismeretek bemutatása táblán 										
Értékelés										
Kollokvium (100 %)										
Jeles: 90 %, jó: 75 %, közepes 60 %, elégséges: 50 %, 50 % alatt elégtelen										
A kollokvium sikertelensége esetén javítás utóvizsga keretében történhet a TVSZ-ben meghatározottak szerint.										

Kötelező olvasmány:

1. A Szerves Kémiai Tanszék honlapján elérhető oktatási segédanyag az előadás ábráival
2. Hollósi Miklós, Laczkó Ilona, Majer Zsuzsa: A sztereokémia és kiroptikai spektroszkópia alapjai, Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004, Budapest.

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.

Heti bontott tematika	
1. hét	<p>Aszimmetria és kiralitás jelentősége és sztereokémiai alapfogalmak. Kiralítás típusai. Konformációs és konfigurációs enantiomerek és diasztereomerek.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató elsajátítja a sztereokémiai alapfogalmakat, és megismeri a kiralitás jelentőségét a bennünket körülvevő makro- és mikroszkópikus világban. A hallgató képes azonosítani a kiralitás típusát és felismeri a sztereogén elemet vizsgálendő molekulákban.</p>
2. hét	<p>Abszolút konfiguráció megadása: R/S és D/L jejlők használata, Cahn-Ingold-Prelog rendszer.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes a sztereokémia ábrázolására, és ismeri az abszolút konfiguráció megadására vonatkozó szabályokat.</p>
3. hét	<p>Biarilok és allénok axiális kiralitása. Planáris kiralitás.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes az axiális és planáris kiralitáselemek felismerésére és az atropizomerek abszolút konfigurációjának hozzárendelésére.</p>
4. hét	<p>Királis gyógyszerhatóanyagok. Enantiomerek eltérő farmakológiai hatása.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató konkrét példákon keresztül megismeri a eutomer és disztomer fogalmakat, és értelmezni tudja a sztereoizomerek eltérő farmakológiai hatását.</p>
5. hét	<p>Királis nem racém gyógyszerhatóanyagok előállítása sztereoselektív szintézissel.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri az enantioszelektív szintézisek alkalmazási lehetőségeit optikailag aktív gyógyszerhatóanyagok előállítására.</p>
6. hét	<p>Abszolút és relatív konfiguráció meghatározásának lehetőségei. Kémiai korreláció.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató átfogó képpel bír az abszolút konfiguráció meghatározásának lehetőségeiről. Megismeri a kémiai korreláció alkalmazását az abszolút konfiguráció meghatározására.</p>
7. hét	<p>Kinetikus rezolváláson alapuló módszerek az abszolút konfiguráció meghatározására. Horeau és Prelog módszer.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a kinetikus rezolváláson alapuló módszerek előnyeit és hátrányait az abszolút konfiguráció meghatározására.</p>
8. hét	<p>NMR módszerek az abszolút konfiguráció meghatározására. Mosher módszer és módosításai.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes a Mosher féle NMR módszer alkalmazására alkoholok és aminok abszolút konfigurációjának meghatározására.</p>
9. hét	<p>Fény és anyag kölcsönhatása. Cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató elsajátítja a fény és anyag kölcsönhatásának elméletét és képes a cirkuláris dikroizmus és cirkuláris kettőtörés jelenségek értelmezésére.</p>
10. hét	<p>Optikai forgatás és optikai rotációs diszperziós spektroszkópia a konfiguráció meghatározására.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a fajlagos forgatóképesség és az ORD nyújtotta lehetőséget a sztereokémiai vizsgálatokban.</p>
11. hét	<p>Elektronikus cirkuláris dikroizmus spektroszkópia. Rotátorerősség, ellipticitás.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri a cirkuláris dikroizmus spektroszkópia alapelveit és a hozzá kapcsolódó fogalmakat.</p>
12. hét	<p>Exciton csatolt cirkuláris dikroizmus elmélete és alkalmazása.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes az exciton csatolt cirkuláris dikroizmusmódszer alkalmazására az abszolút konfiguráció meghatározására, és tisztában van annak lehetőségeivel és korlátaival.</p>
13. hét	<p>Helicitási szabályok, szektorszabályok és alkalmazásuk az abszolút konfiguráció meghatározására.</p>

	<p>zására.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató képes a helicitási és szektorszabályok alkalmazására benzol kondenzált heterociklusok és gyűrűs ketonok sztereokémiai vizsgálatában.</p>
14. hét	<p>A vibrációs cirkuláris dikroizmus és Raman optikai aktivitás alkalmazási lehetőségei sztereokémiai vizsgálatokban.</p> <hr/> <p>TE: A hallgató megismeri vibrációs cirkuláris dikroizmus és Raman optikai aktivitás spektroszkópiai módszerek nyújtotta lehetőségeket az abszolút konfiguráció és konformáció meghatározására.</p>