

# Szerves Kémiai Tanszék

Tantárgy: **SZERVES KÉMIA ELMÉLET I.**

Év, szemeszter: 1. évfolyam - 2. félév

Óraszám:

Előadás: **56**

## 1.hét:

**Előadás:** A szerveskémiaelhelyezéseésdefiníciója, történelmi alapok. Vegyületcsaládokésfunkcióscsoportjaikismertetése. A nevezéktan alaprendszerei, szubsztitúcióscsoportfunkciósnomenklatúraalapvető szabályai.

## 2.hét:

**Előadás:** A szénhidrogének csoportosítása, kötésrendszere: A kovalens kötés elméleteinek rövid összefoglalása. LCAO-MO elmélet alapjai, atom-és molekulapályák típusai. Bi-és polycentrumos molekulapályák, delokalizáció. VB-módszer, határszerkezetek és felírásuk szabályai. *Hibridizáció.*

## 3.hét:

**Előadás:** A kémiai kötések polaritását és erősségét befolyásoló tényezők: elektroneltolásjelenségek, induktív és mezomereffektus, konjugáció és hiperkonjugáció. Másodlagos kötések, intermolekuláris kölcsönhatások, hidrogénkötés, dipól-dipól, dipól-indukált dipól és dipól-dipól kölcsönhatások.

## 4.hét:

**Előadás:** Alkánok és cikloalkánok konformációs viszonyai. Az izoméria alapjai: konstitúciós, konformációs és konfigurációs izomerek jellemzése. Kiralitás, királis molekulák típusai. Enantiomerek és diastereomerek fogalma, kémiai és fizikai tulajdonságaik összehasonlítása. Abszolút és relatív konfiguráció. Optikai aktivitás.

Szerves molekulák térszerkezetének ábrázolása. Királis vegyületek abszolút konfigurációjának megadása, Fischer- és Cahn-Ingold-Prelog-konvenció. Kiralitás szerepe a gyógyszerkémiaiában.

## 5.hét:

**Előadás:** Szerves vegyületek szerkezet meghatározásának alapjai. Elemanalízis, atomviszonyképlet meghatározása. Spektroszkópiai módszerek áttekintése: UV, IR, NMR, MS; a módszerek leveles információ tartalma. Alkalmazásuk a vegyületek szerkezet felderítésében.

## 6.hét:

**Előadás:** A kémiai reakciók alapvető típusai, és jellemző paramétereik. Szerves kémiai reakciók osztályozása a támadóágens és a reakció típusa alapján. Elemi reakciók. Átmeneti állapot és jellemzése, aktiválás szabadentalpia fogalma, kinetikai és termodinamikai paraméterek. Több lépéses reakciók (sorozatreakciók), intermedierek. Hammond-elv. Párhuzamos (versengő) reakciók. Termodinamikai és kinetika kontroll. Reaktivitás és szelektivitás. Reagens és reaktív intermedierek. Önellenőrző teszt

## 7.hét:

**Előadás:** Az alkánok fizikai és kémiai sajátosságai. Az alkánok fizikai tulajdonságait és befolyásoló tényezőit. Az alkánok kémiai tulajdonságai, gyökösszubsztitúció, láncreakció. Statisztika termékarány,

regioszelektívhalogénezésértelmezése a gyökstabilitásokalapjánazalkánokhalogénezésében. Alkánokszulfonálása, szulfoklórozása, nitrálása, oxidációja, azégesfolyamata. Petrolkémiaialapfolyamatok (pirolízis, krakkolás, izomerizáció) ésvegyiparijelentőségük. Előfordulásukéslegfontosabbelőállításaik. Savbázistulajdonságok, Bronsted-, Lewis-fele savbáziselméletalapjáiésszerveskémiai vonatközösai, „hard” és „soft” savakésbázisok. Sztteroidok.

#### 8.hét:

**Előadás:** Alkének, cikloalkének, diéspoliénekszerkezete, kötésrendszere. Gátoltrotáció, *E/Z*izoméria. Alkénekés cikloalkénekfizikaiéskémiai tulajdonságai. Elektrofilés gyökösaddíciósreakciókés gyakorlati jelentőségük. Markovnyikovszabályésértelmezése. *Anti*-Markovnyikovorientáció. Polimerizációéstípusai. Allilhelyzetűszubsztitúció, alliltípusúreaktívintermedierekstabilitása.

#### 9.hét:

**Előadás:** Alkének  $\pi$ -kötésfelszakadásával, illetve lánchasadássaljáró oxidációsreakciói. Konjugáltdiénekaddíciósreakciói, részlegesesteljesaddíció. 1,2- és 1,4-addíció ésértelmezésekinetikaiéstermodinamikaikontrollalajján. Diels-Alder cikloaddíció. Alkének, cikloalkének, diénekelőállítása.

#### 10.hét:

**Előadás:** Alkinekkötésrendszere, stabilitásukés kémiai tulajdonságaik. C-H savasság, azabból eredőreakciók (pl.: etinilezes). Addíciósreakciókés jelentőségük. Az acetilénvegyipariszerepe, kőszénbázisúvegyipar. Alkinekelőállítása. Aromaticitásésértelmezésé, feltételei. Semlegeséstöltésselrendelkező homoésheteroaromásrendszerek.

#### 11.hét:

**Előadás:** Aromáselektrofil szubsztitúcióalapesetei (halogénezés, nitrálás, szulfonálás, Friedel-Crafts acilezésés -alkilezés) ésreakciomechanizmusa. Szubsztituensekhatása az aromáselektrofil szubsztitúciósreakciók sebességviszonyaira (reaktivitás) ésazirányítás szabályok (regioszelektivitás).

túciósreakciók sebességviszonyaira (reaktivitás) ésazirányítás szabályok (regioszelektivitás).

#### 12.hét:

**Előadás:** Öt- és hatlagúheteoaromásalapvegyületekelektrofil szubsztitúciósreakciói. Monociklusosaromászénhidrogénekaddíciósreakciói. Alkiloldalláncot tartalmazóaromászénhidrogénekreakciói, a benziltípusúreaktívintermedierekstabilitásánakértelmezésé. Policiklusosaromászénhidrogénekfontosabbképviselei.

#### 13.hét:

**Előadás:** Szénhidrogénekhalogénszármazékainak csoportosítása, kötésrendszerük jellemzése. Fizikai tulajdonságaik. A szénhidrogén csoport szerkezetének és a halogénminőségének szerepe a CH<sub>3</sub> kötéserősségében, kapcsolata a reakciókészséggel és a jellemző kémiai reakciókkal. Csökkent, normális és fokozott reakciókészségű halogénidek. Nukleofil szubsztitúció és alapmechanizmusai (S<sub>N</sub>1 és S<sub>N</sub>2), alkalmazásuk különböző funkció csoportok kialakítására. Eliminációsreakciók,  $\alpha$ - és  $\beta$ -elimináció,  $\beta$ -elimináció alapmechanizmusai (E1, E2 és E1cB).

#### 14.hét:

**Előadás:** Halogénvegyületek reakciója fémekkel. Alifás és aromás halogénvegyületek előállítása. Fémorganikusvegyületek kémiaiájának alapjai. Kötésrendszerük, az „umpolung” fogalma. Fémorganikusvegyületek reaktivitása, előállításuknál alkalmazandó körülmények. Karbanionok, mint bázisok és C-nukleofilek, jelentőségük a C-C kötéskiépítésében. Grignardvegyületek és alkalmazásuk. Fémorganikusvegyületek előállítása és egymásbaalakítása, transzmetallálás.

## **Követelmények**

Követelményszint: Az előadáson elhangzott ismeretekkelégszintű elsajátítása.

Index aláírás: Az aláírásfeltétele a kollokviumsikeresteljesítése.