

Aszimmetriás szintézisek

A kurzus részletes tematikája:

1. hét: A kiralitás jelentősége az élő szervezetekben. Biopolimerek. Sztereoizoméria. A relatív és az abszolút konfiguráció meghatározása. Eltérő hatású enantiomerek / diasztereomerek az élővilágból ill. szintetikus gyógyszerhatóanyagok köréből. Enantiomer-tiszta anyagok előállításának lehetőségei. Nagy mennyiségben rendelkezésre álló enantiomer-tiszta természetes források.

TE: A hallgató elmélyíti a kiralitás jelentőségéről, a relatív és abszolút konfiguráció meghatározásáról tanult ismereteit. Konkrét példákon keresztül képes a gyógyszer- ill. agráripár szempontjából sok esetben fontos enantiomer-tiszta megközelítés fontosságát megérteni és alkalmazni.

2. hét: „Chiral pool” szintézisek előnye, hátránya, példák. Sztereoszelektivitás, sztereospecifitás. Aszimmetriás szintézisek alapfogalmai. Topicitás (csoportok, felületek). Prokiralitás. Felületek szimetriaviszonyai.

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 sztereoszelektív reakciók értelmezésére.

3. hét: 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.

TE: A hallgató megismerkedik a reakciók sztereokémiáját leíró fontosabb modellekkel, melyek segítségével képes értelmezni és jóslani sztereoszelektív reakciókat. Megismerkedik az aszimmetriás szintézisek csoportjaival, ezek előnyeivel és hátrányaival, mely alapján képes aszimmetriás reakciók osztályozására.

4. hét: Példák első és második generációs eljárásokra.

TE: A hallgató képes első- és második generációs eljárásokat felhasználni sztereoszelektív reakciók végrehajtására.

5. hét: Szén-szén kötés kialakítására alkalmas reakciók (aszimmetriás alkilezés, aszimmetriás Michael-reakció, karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója).

TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás alkilezés, aszimmetriás Michael-reakciók, karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója esetén.

6. hét: Szén-szén kötés kialakítására alkalmas reakciók (karbonil vegyületek aszimmetriás nukleofil addíciója, aszimmetriás [2+2] cikloaddíció, aszimmetriás Diels-Alder-reakció).

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.

7. hét: Aszimmetriás oxidációs reakciók, epoxidálási reakciók.

TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás oxidációs reakciók és epoxidálási reakciók esetén.

8. hét: Aszimmetriás redukációs reakciók.

TE: A hallgató képes harmadik- és negyedik generációs eljárásokat felhasználni aszimmetriás redukációs reakciók esetén.

9. hét: Többszörös aszimmetriás indukció.

TE: A hallgató képes többszörös aszimmetriás indukció felhasználására aszimmetriás szintézisekben.

10. hét: Organokatalízis. „Memory of chirality”.

TE: A hallgató képes a környezetkímélő organokatalizátorok, valamint a „memory of chirality” módszer alkalmazására aszimmetriás szintézisekben.

11. hét: Kinetikus rezolválás. Dinamikus kinetikus rezolválás. Enzimatis reakciók.

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).

12. hét: Aszimmetriás totálszintézisek.

TE: A hallgató bonyolultabb esetek megismerése révén képes mélyebben megérteni a sztereoszelektív szintézisek nehézségeit és lehetőségeit.

13. hét: Önállóan feldolgozott forrásirodalom rövid bemutatása, megvitatása.

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.

14. hét: Önállóan feldolgozott forrásirodalom rövid bemutatása, megvitatása.

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.