

## A TANTÁRGY ADATLAPJA

### 1. A képzési program adatai

1.1 Felsőoktatási intézmény	Babes-Bolyai Tudományegyetem
1.2 Kar	Kémia és Vegyészmérnöki Kar
1.3 Intézet	Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézet
1.4 Szakterület	Neveléstudományok
1.5 Képzési szint	Magiszteri képzés
1.6 Szak / Képesítés	Didaktikai Mesteri – Kémia

### 2. A tantárgy adatai

2.1 A tantárgy neve	<b>Retroszintetikus analízis</b>						
A tantárgy kódja	<b>CMM6113</b>						
2.2 Az előadásért felelős tanár neve	<b>Lector dr. Lovász Tamás</b>						
2.3 A szemináriumért felelős tanár neve	<b>Lector dr. Lovász Tamás</b>						
2.4 Tanulmányi év	<b>II</b>	2.5 Félév	<b>III</b>	2.6. Értékelés módja	<b>C</b>	2.7 Tantárgy típusa	<b>Fakultatív, SSP</b>

### 3. Teljes becsült idő (az oktatási tevékenység féléves óraszama)

3.1 Heti óraszám	<b>3</b>	melyből: 3.2 előadás	<b>2</b>	3.3 szeminárium/labor	<b>1</b>
3.4 Tantervben szereplő össz-óraszám	<b>42</b>	melyből: 3.5 előadás	<b>28</b>	3.6 szeminárium/labor	<b>14</b>
A tanulmányi idő elosztása:					óra
A tankönyv, a jegyzet, a szakirodalom vagy saját jegyzetek tanulmányozása					28
Könyvtárban, elektronikus adatbázisokban vagy terepen való további tájékozódás					28
Szemináriumok / laborok, házi feladatok, portofóliók, referátumok, esszék kidolgozása					20
Egyéni készségfejlesztés (tutorálás)					3
Vizsgák					4
Más tevékenységek: .....					-
3.7 Egyéni munka össz-óraszama	<b>83</b>				
3.8 A félév össz-óraszama	<b>125</b>				
3.9 Kreditszám	<b>5</b>				

### 4. Előfeltételek (ha vannak)

4.1 Tantervi	<ul style="list-style-type: none"> <li>Szerves vegyületek sztereokémiája</li> <li>Szerves kémia és reakciómechanizmusok</li> </ul>
4.2 Kompetenciabeli	<ul style="list-style-type: none"> <li>nincs</li> </ul>

### 5. Feltételek (ha vannak)

5.1 Az előadás lebonyolításának feltételei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Az interaktív részvételt ösztönzése</li> <li>A hallgatók hozzáférhetnek az adatbázisokhoz (egyetemi, valamint a központi könyvtár által előfizetett szakirodalmi adatbázisok)</li> <li>Az előadásokhoz szükséges technikai eszközök (számítógép, szükséges szoftver, video kivetítő)</li> <li>A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg az előadáson</li> </ul>
5.2 A szeminárium / labor lebonyolításának feltételei	<ul style="list-style-type: none"> <li>Kötelező a hallgatói részvétel a szemináriumon. Elvárt a pontos megjelenés. A hallgatók kikapcsolt mobiltelefonnal jelenjenek meg a szemináriumon</li> <li>Szükséges az előző szemináriumokon feltüntetett bibliográfia használata.</li> </ul>

## 6. Elsajátítandó jellemző kompetenciák

Szakmai kompetenciák	<ul style="list-style-type: none"> <li>A többlépéses szintézis utak racionális elemzésének elméleti alapjainak elsajátítása.</li> <li>A célvegyületek molekuláris komplexitásának szisztematikus csökkentése a szerves kémiai ismeretek alapján</li> <li>Gyakorlatban is kivitelezhető reakciók kiválasztása bonyolult szerkezetű szerves vegyületek szintetikus stratégiái esetében.</li> <li>Kreatív megoldások kidolgozása és alkalmazása szerves vegyületek szintetikus stratégiái esetében</li> </ul>
Transzverzális kompetenciák	<ul style="list-style-type: none"> <li>A szakmai feladatok megoldása a munkacsoporton belül meghatározott általános célokkal összhangban, amelyhez fontos: az elemző gondolkodás, az alkalmazkodóképesség, a rugalmasság és a csapat tagokkal való együttműködés</li> <li>Információ és dokumentáció magyar, román és angol nyelven, modern információs és kommunikációs módszerek felhasználásával (adatbázisokban való keresés), a javasolt bibliográfia felhasználásával.</li> </ul>

## 7. A tantárgy célkitűzései (az elsajátítandó jellemző kompetenciák alapján)

7.1 A tantárgy általános célkitűzése	Elméleti szakismeretek megszerzése: a szintetikus út racionális elemzésével kapcsolatos koncepciók megértése, alkalmazása bonyolult szerkezetű szerves molekulák előállítása esetében.
7.2 A tantárgy sajátos célkitűzései	<ul style="list-style-type: none"> <li>Értse meg a szerves vegyületek molekuláris komplexitásának csökkentésére alkalmas elméleti módszereket.</li> <li>Szerves vegyületek szintézisének tervezésében használható készségek fejlesztése, a retroszintetikus elemzés fogalmainak felhasználásával.</li> </ul>

## 8. A tantárgy tartalma

8.1 Előadás	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
8.1.1. A retroszintetikus analízis alapfogalmainak ismertetése, meghatározása: target, transzformáció, retron, szinton	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.2. A transzformációk osztályozása. A szintonok osztályozása. A Corey-Seebach modell.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.3 Szerves vegyületek reaktivitásának elmélete. A Lapworth-Evans modell.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.4. A molekulaváz diszkonnekcióján alapuló szerkezetegyszerűsítő transzformációk: - lánc diszkonnekció (szénláncok kialakítására alkalmas szintonok)	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.

8.1.5. A molekulaváz diszkonnekcióján alapuló szerkezetegyszerűsítő transzformációk: - gyűrűk diszkonnekciója (3-6 tagszámú gyűrűk kialakítására alkalmas szintenok)	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.6. A molekulaváz diszkonnekcióján alapuló szerkezetegyszerűsítő transzformációk: - a funkciós csoportok diszkonnekciója (1-6 difunkcionalizált vegyületek regio szelektív előállítására alkalmas szintenok)	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.7. A molekulaváz egyszerűsítését nem eredményező transzformációk: - a molekulaváz transzpozíciók	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.8. A molekulaváz egyszerűsítését nem eredményező transzformációk: - funkciós csoport transzpozíciók - sztereocentrumok konfigurációjának inverziója	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.9. Reakciómechanizmus alapú szintetikus stratégiák	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.10. Az intermedierek vagy a nyersanyagok szerkezeti típusain alapuló szintetikus stratégiák.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.11. Topológiai stratégiák: - aciklusos vegyületek esetében - policiklusos vegyületek esetében (spiránok és más kondenzált gyűrűs, vagy áthidalt gyűrűs policikloalkánok)	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.12. Sztereokémiai szempontokból jelentős, a funkciós csoportok átalakításán, cseréjén alapuló stratégiák.	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.13. A retroszintetikus stratégiák kombinációja (I) - makrociklusok retroszintetikus analízise	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.
8.1.14. A retroszintetikus stratégiák kombinációja (II) - hetreociklusok retroszintetikus analízise - policiklusos vegyületek retroszintetikus analízise	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	Előadás (2 óra) A kurzus anyagával kapcsolatos beszélgetésekben, vitában való részvétel. Válaszok a diákok kérdéseire.

8.2. Szeminárium	Didaktikai módszerek	Megjegyzések
8.2.1. A szerves kémiai reakciómechanizmusok átvételése, összefoglalása	Előadás, leírás, magyarázat, beszélgetés	2 óra/ szeminárium
8.2.2. Aromás vegyületek retroszintetikus analízise és a megfelelő szintézis stratégiák kiválasztása	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.3. 1,2-Bifunkciós vegyületek (1,2-diolok, $\alpha$ -hidroxikarbonil származékok, $\alpha$ -diketon, $\alpha$ -keto-karbonsavak) retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.4. 1,3-Bifunkciós vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái (Claisen kondenzáció, hidroxikarbonil származékok, 1,3-diketonok, keto-karbonsavak)	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.5. 1,4-, 1,5-, 1,6- Bifunkciós vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái (hidroxikarbonil vegyületek, hidroxisavak, telítetlen savak).	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.6. Monociklusos vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái (ciklopropán, ciklobután, ciklopentán, ciklohexán)	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.7. Szintetikus stratégiák – adatbázisok alkalmazása: Reaxys SciFinder	Magyarázat, beszélgetés, esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.8. Fontosabb transzformációk, a retron azonosítása	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.9. Reakciómechanizmus alapú szintetikus stratégiák	példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.10. Szerkezet alapú szintetikus stratégiák.	Példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.11. Topológiai stratégiák.	Példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.12. Bonyolult szerkezetű szerves vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái I.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.13. Bonyolult szerkezetű szerves vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái II.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium
8.2.14. Bonyolult szerkezetű szerves vegyületek retroszintetikus elemzése és szintézis stratégiái III.	Magyarázat, beszélgetés, példák megoldása esettanulmány	2 óra/ szeminárium

### Ajánlott irodalom

Kötelező:

1. E. J. Corey, Xue-Min Cheng, "The Logic of Chemical Synthesis", Ed. Wiley 1995

Opcionális:

2. Stuart Warren, Paul Wyatt, Organic Synthesis: The Disconnection Approach, 2nd Edition, Ed. Wiley 2008

3. M. B. Smith, "Organic Synthesis", Ed. McGraw-Hill, 1994

4. K. C. Nicolaou, D. Vourloumis, N. Winssinger, P. S. Baran, The Art and Science of Total Synthesis at the Dawn of the Twenty-First Century, Angew. Chem. Int. Ed. 2000, 39, 44-122

5. R. O. C. Norman, "Principles of organic Synthesis", Ed. Chapman and Hall, 1981

6. Antus Sándor, Mátyus Péter, Szerves kémia I-III., Ed. Nemzedékek Tudása Tankönyvkiadó, 2010

### 9. Az epiztemikus közösségek képviselői, a szakmai egyesületek és a szakterület reprezentatív munkáltatói elvárásainak összhangba hozása a tantárgy tartalmával.

- Az összetett struktúrájú szerves vegyületek szintézisével (természetes vegyületek, gyógyszerek, színezékek, aromaanyagok, peszticidek stb.) kapcsolatos fogalmak elsajátításával és a retroszintetikus

analízis tantárgy gyakorlati vonatkozásainak megismerésével, a hallgatók megszerzik a Grila1 - RNCIS –ben szereplő lehetséges foglalkozásokhoz szükséges részleges kompetenciákat, valamint tudásanyagot. Ezek felhasználásával megfelelnek a munkaadók igényeinek a termelés területén. A tudományág tartalma nagyon hasznos a karrierfejlesztésben a tudományos karrier (doktori fokozat, kutatás) irányában.

## 10. Értékelés

Tevékenység típusa	10.1 Értékelési kritériumok	10.2 Értékelési módszerek	10.3 Aránya a végső jegyben
10.4 Előadás	A szerves vegyületek molekuláris komplexitásának csökkentésére alkalmas elméleti módszerek ismerete. A szerves vegyületek szintézisének tervezésében használható képességek fejlesztése a retroszintetikus analízis fogalmainak felhasználásával. Az értékelés: egy írásos jelentés, amelyet szóban be kell mutatni, valamint a feltett kérdésekre adott válaszok alapján. A feladatok helyes megoldása. Feltétel a szemináriumi órák 90%-án való kötelező részvétel. A minősítés 1-10.	Írásos jelentés, amelyben részletesen leírja egy komplex szerves célvegyület retrosztetikus analízisét és a kémiai szintézis lépéseinek tervezését.	30%
		Szóbeli előadás PPT felhasználásával, amely tartalmazza egy bonyolult szerkezetű szerves vegyület retrosztetikus elemzését és a totál szintézisének fontosabb lépéseit.	20%
		A vizsgáztató tanár által megfogalmazott kérdésekre (legalább 2 kérdés) adott válasz.	20%
10.5 Szeminárium / Labor	A feladatok helyes megoldása. Az előadás és a szeminárium témaköreinek elsajátítása és megértése alapján A minősítés 1-10.	Feladatok megoldása.	30%
	Fogalmak és módszerek megfelelő alkalmazása. A szemináriumi tevékenység alapján. A minősítés 1-10.		
10.6 A teljesítmény minimum-követelményei			
<ul style="list-style-type: none"><li>Összetett szerkezetű szerves vegyület molekuláris komplexitásának csökkentése.</li><li>Minimum 5-ös osztályzat elérése a szeminárium esetében. Minimum 5-ös osztályzat elérése a vizsgán a javítókulcs pontozási útmutatója alapján.</li></ul>			

Kitöltés dátuma

6.04.2023

Előadás felelőse

Lector dr. Lovász Tamás

Szeminárium felelőse

Lector dr. Lovász Tamás

Az intézeti jóváhagyás dátuma

11.04.2023

Intézetigazgató