

Sylabus předmětu:

Struktura a symetrie molekul

- 1.) Molekulární geometrie – základní parametry. Chemická vazba. Model kovalentní vazby. Pevnost a délka vazby, vazebné úhly, torzní a dihedralní úhly. Limitní oblasti.
- 2.) Molekuly v prostoru. Elektronový strukturní vzorec a odvození prostorového uspořádání – metoda VSEPR.
- 3.) Teorie AO, HAO a MO.
- 4.) Symetrie. Prvky symetrie. Bodové grupy symetrie. Prostorové grupy symetrie. Vztah mezi molekulární a makroskopickou chiralitou – filosofické aspekty.
- 5.) Chemické modely.
- 6.) Chiralita. Pasteur versus Vant Hoff, optická čistota a racemické modifikace. Další necentrální typy chirálních útvarů: axiální a planární chiralita, helicity
- 7.) Aplikace symetrie molekul při interpretacích spektrálních charakteristik (s důrazem na NMR).
- 8.) Konformace – konformační analýza a rovnováhy.
- 9.) Teorie hraničních orbitalů, LUMO, HOMO, symetrie HO.
- 10.) Reakce řízené symetrií orbitalů. Woodwardova – Hoffmannova pravidla. Korelační diagramy.
- 11.) Cykloadiční reakce.
- 12.) Elektrocyklizační reakce.
- 13.) Sigmatropní přesmyky.
- 14.) Migrace skupin atomů.

Podmínky zápočtu:

- Na semináři je povinná účast, toleruje se jedna neomluvená absence.
- Na konci semestru se bude psát zápočtový test z problematiky probírané dle sylabu.
- Podmínkou udělení zápočtu je minimálně 70% úspěšnost.
- V průběhu testu jsou povoleny jakékoliv vlastní pomůcky a učebnice.

Literatura:

- John McMurry: Organická chemie VUTIUM Brno 2007, ISBN 978-80-214-3291-8 (nebo 978-80-7080-637-1).
- Jiří Fišer: Úvod do molekulové symetrie SNTL Praha 1980.
- Ian Fleming: Hraniční orbitály a reakce v organické chemii SNTL Praha 1983.
- Ian Fleming: Pericyclic Reactions Oxford University Press 2004, ISBN 0-19-850307-5.
- Otakar Červinka – Chiralita a pojmy s ní související: *Chem. Listy* **1999**, 93, 294-305.
- J. K. Lee, D. J. Tantillo – Reaction Mechanism Part (ii) Pericyclic reactions: *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. B* **2008**, 104, 260-283.
- D. J. Tantillo, J. K. Lee – Reaction Mechanism Part (ii) Pericyclic reactions: *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. B* **2007**, 103, 272-293.