

BIOMASSZÁBÓL ELŐÁLLÍTOTT OPTIKAILAG AKTÍV PLATFORM MOLEKULA STABILITÁSÁNAK ÉS ALKALMAZÁSÁNAK VIZSGÁLATA

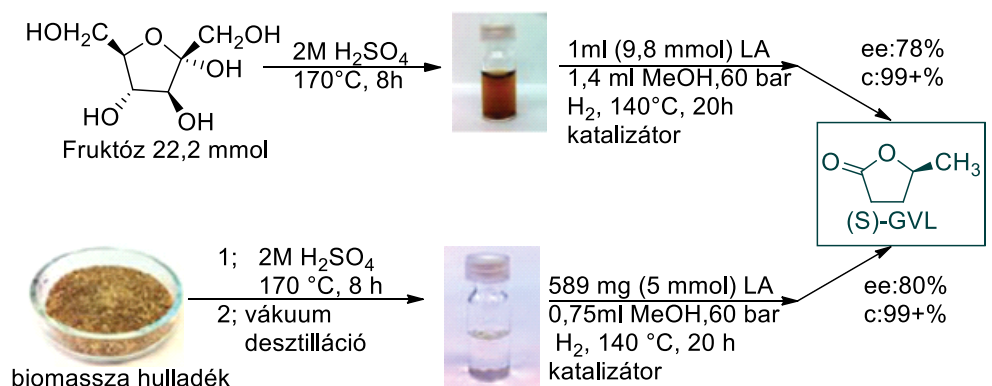
Fridrich Bálint¹, Tukacs József Márk¹, Mika László Tamás¹

¹1. BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék 1111 Budapest, Budafoki út 8.

A földgáz, a kőolaj, illetve a kőszén, azaz a fosszilis energiahordozók felhasználása az emelkedő népességszámmal, illetve a rohamosan növekvő emberi igényekkel látszólag megállíthatatlanul emelkedik. Mivel az energiahordozók kitermelése egyre nagyobb költséget jelent, amely egyben emelkedő alapanyagárat is jelent a vegyiparnak, a megújuló források nyersanyagként történő alkalmazási lehetőségének kutatása egyre sürgetőbb.

Kutatómunkám során megvizsgáltam a biomassza eredetű hulladékok optikailag aktív gamma-valerolaktonná, mint javasolt királis platform molekulává történő átalakításának lehetőségét és az előállított termék kiralitáscentrumának stabilitását. Kísérleteim igazolták, hogy a korábban kidolgozott eljárások alapján D-fruktózból savkatalizált dehidratációval előállított levulinsavból 100%-os konverzióval, kemoszelektivitással és 78%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) sikerült (S)-gamma-valerolaktont (GVL) előállítani, azaz a levulinsavban található esetleges szennyezők nem befolyásolják az alkalmazott katalizátor aktivitását és szelektivitását. További kísérlettel igazoltam, hogy nem ehető mezőgazdasági hulladékból (búzaszalma, napraforgóhéj stb. keveréke), azonos technológiával előállított majd vákuumdesztillációval tisztított levulinsavat szintén 100%-os kemoszelektivitással és 80%-os enantiomertöbbslettel (*ee*) lehetett (S)-gamma-valerolaktonná redukálni. ^[1]

1. ábra (S)-GVL előállítása fruktózból illetve biomassza hulladékból



katalizátor: (S)-[(RuCl(SEGPHOS))₂(μ-Cl)₃][NH₂Me₂]

Az optikailag aktív GVL további felhasználása (gyűrűnyitás/zárás) szempontjából kulcskérdés a molekula kiralitáscentrumának stabilitása. Az előbbiként előállított (S)-GVL sztereo centrumának stabilitását 1-13-mas pH- és 25-100 °C hőmérséklet tartományban

vizsgáltam. A GVL gyűrű felnyílását majd visszazáródását ^{18}O izotópjelzéses technika segítségével igazoltam. Eredményeim szerint a vizsgált tartományban a GVL királis szénatomjának abszolút konfigurációja nem változott meg. A stabilitásvizsgálat után az optikailag aktív GVL felhasználásával előállítottam további két optikailag aktív vegyületet, amelyeknek szerkezetét NMR-el és/vagy királis állófázisú gázkromatográf segítségével igazoltam. A preparált ionos folyadék (tetrabutylammonium-(S)-4-hidroxivalerát [TBA](S)-[4HV]) királis reakció-közegeként használható, míg a GVL további redukciójával nyert optikailag aktív 1,4-pentándiol (1,4-PDO) építőköként kerülhet felhasználásra további szerves kémiai szintézis sémákban. Továbbá bemutatom az optikailag aktív 1,4-PDO általunk alkalmazott szintézisének zöldkémiai szempontok alapján elvégzett elemzését. Egy korábbi értékelés adta az ötletet, amelyben a racém GVL transzferhidrogénezéssel történő előállítását értékelte ki a szerző.^[2]

- [1] J. M. Tukacs, B. Fridrich, G. Dibó, E. Székely, L. T. Mika, *Green Chemistry*, **2015**
DOI: 10.1039/C5GC01099C
- [2] I. T. Horvath; *Chimica Oggi - Chemistry Today* - **2014**, 32 (5), 76-79