

Tartalmi kivonatok

XXXIV. OTDK Kémiai és Vegyipari Szekció

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2019. március 21-23.



Fővédnökök



EMBERI ERŐFORRÁSOK
MINISZTERIUMA



INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI
MINISZTERIUM



NEMZETI KUTATÁSI,
FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL

Szervezőbizottság

Ügyvezető elnök: **Dr. Józsa János**

Ügyvezető társelnök: **Dr. Hórvölgyi Zoltán**

Ügyvezető titkár: **Mészárosné Dr. Tőrincsi Mercédesz**

A szervezőbizottság elnöke: **Dr. Hegedűs László**

A szervezőbizottság titkára: **Dr. Kormosné Dr. Bugyi Zsuzsanna**

Hallgatói képviselő: **Zeller Bálint**

Helyettes hallgatói képviselő: **Mészáros Dóra Eszter**

Határon túliak részvételéért felelős munkatárs: **Dr. Németh Áron**

Középiskolások részvételéért felelős munkatárs: **Dr. Hornyánszky Gábor**

Roska Tamás Tudományos Előadásért felelős munkatárs: **Dr. Hegedűs László**

Pénzügyi felelős: **Zsigmond Katalin**

Szervezésért felelős munkatárs: **Benkó Rita**

Szervezésért felelős munkatárs: **Gyönki Viktória**

Online felelős: **Laky Sándor**

Sajtó kapcsolatokért és média kommunikációért felelős: **Oros-Klementisz Marianna**

Vlog hallgatói felelősei: **Faragó Dénes, Lovas Levente Balázs**

Kari szervezőbizottság tagjai: **Dr. Csiszár Emília, Dr. Kupai József, Dr. Benkő Zoltán, Mártonné Pakai Márta**

Impresszum

Felelős kiadó: **Dr. Józsa János**

Felelős szerkesztő: **Dr. Hórvölgyi Zoltán, Dr. Hegedűs László**

Tördelés és design: **Faragó Daniella, Faragó Dénes, Pethő Luca, Vitányi Diána**

ISBN 978-963-313-316-3



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Polimerkémia és -technológia	135
Epoxigyanta térhálósítása PET aminolíziséből származó tereftálsav-amid oligomerekkel	136
Epoxidált szója- és lenolaj karakterizálása tömegspektrometriás módszerrel	137
Funkcionalizált makropórusos polimer hordozók 3D nyomtatása enzimrögzítés céljára	138
Kompatibilizáló adalékok alkalmazhatóságának vizsgálata elasztomer típusú hulladék őrlményt tartalmazó HDPE/PP blendekben	139
Különböző moláris tömegű polimerek megkülönböztetése NMR segítségével	140
Polisztirol-l-poli(dimetilsziloxán) polimer kotérhálók előállítása és vizsgálata	141
Lignint és lent tartalmazó hibrid polipropilén kompozitok fejlesztése	142
Poli-β-pinén előállítása és módosítása	143
Cinkonaalapú organokatalizátor rögzítésére alkalmas poli(glicidilmetakrilát) hordozó előállítása diszperziós polimerizációval	144
Reakciókinetika és katalízis I.	145
Organokatalitikus énamin köztermékek kialakulása: Elméleti tanulmányok	146
5-(Hidroximetil)furfural és izopropil-alkohol fotoreakciójának vizsgálata	147
Alkinek és telítetlen oxovegyületek redukciója <i>cis-mer</i> -[IrH ₂ Cl(mtpms) ₃] katalizátorral	148
Iminek autokatalitikus hidrolízise	149
Elemi reakciók sebességi együtthatóinak meghatározása H ₂ /O ₂ /NO _x égési rendszerek mérési adatai alapján	150
Ir(I)-NHC komplexek aktivitása hidrogénezési-dehidrogénezési reakciókban - katalitikus hidrogéntárolás szerves vegyületekben	151
Palládiumtartalmú nanoszerkezetű katalizátorok fejlesztése anilinszintézis céljából	152
Nitrogénvegyületek égéskémiaja szintézisgáz égése során	153
Funkcionális aldehid deformiláz enzimmodellek előállítása	154
Reakciókinetika és katalízis II.	155
Cu(II)-ciklén komplexszel funkcionizált szilika aerogél katalizátor hatásmechanizmusa	156
Butanolégési mechanizmusok összehasonlító vizsgálata	157
Tömegeffektusok elméleti vizsgálata a CH ₃ + HBr → CH ₄ + Br reakció mikroszkopikus mechanizmusának felderítésére	158
Aminokarbonilezési reakciók vizsgálata mágnesesen elválasztható palládiumkatalizátorok jelenlétében	159
A peroxidációk fotokatalitikus bomlásának vizsgálata	160
Vizes közegű hidrogénezési reakciók vizsgálata [Ir(emim)(cod)(mtppts)] komplexszel	161
Nanorészecske-képződési folyamatok kinetikai modellezése	162
Nitrogén-monoxid átalakulásait metán és etán jelenlétében leíró reakciómechanizmusok vizsgálata	163
Szerves kémia I.	164
Kurkumin és származékainak szintézise, szerkezeti tulajdonságaik vizsgálata	165
Újfajta fluoreszcens Ca ²⁺ -indikátormolekulák tervezése, szintézise és vizsgálata	166
P-Sztereogén centrumot tartalmazó aciklusos foszforvegyületek dinamikus rezolválása aminofoszfónium-só intermediéren keresztül	167
1-C szubsztituált glikálszármazékok átalakításainak vizsgálata	168
Bioortogonálisan alkalmazható, kiterjesztett π-rendszerű, kettősen fluorogén rodaminszármazékok szintézise	169
Polibenzimidazol membránhoz rögzített cinkona-négyzetamid organokatalizátorok szintézise és alkalmazása	170
Egy antiaromás [4n+2]π rendszer előállítása és vizsgálata	171
Új, várhatóan biológiailag aktív <i>Vinca</i> alkaloid- és flavonoidszármazékok előállítása	172
Antracén fluorofor egységet tartalmazó foszfinoxido-koronaéterek szintézise és enantiomerfelismerő-képességük vizsgálata	173
Kabachnik-Fields-reakciók amidokkal mikrohullámú körülmények között	174

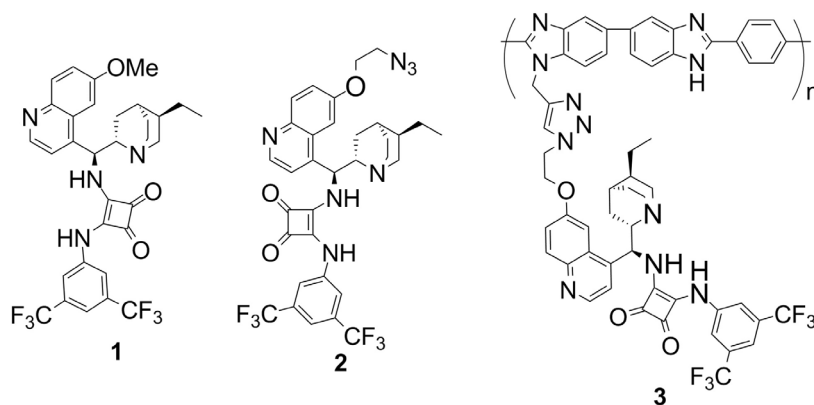
Polibenzimidazol membránhoz rögzített cinkona-négyzetamid organokatalizátorok szintézise és alkalmazása

Munkám célja volt egy enantioszelektív szintézisek katalízisére alkalmas cinkona-négyzetamid típusú, királis bi-funkcionális hidrogénkötés katalizátor (1, ld. 1. ábra) szintézise, valamint aszimmetrikus Michael-addíciókban történő alkalmazása. A reakciókat sikeresen (kiváló termeléssel és enantioszelektivitással) kiviteleztem öt különböző oldószerben, *transz*- β -nitrosztírol, illetve különböző nukleofilek (deprotonált 1,3-dioxovegyületek, indolszármazékok, illetve öttagú *N*-heterociklusok) felhasználásával. A Michael-reakciók oldószerfüggésének értelmezésére termodinamikai számításokat végeztem.

Az **1** cinkona-négyzetamid szintetikus értékét számításba véve az organokatalizátor visszaforgatására és ismételt felhasználására alkalmas módszert igyekeztem kidolgozni. Az **1** katalizátort először azidoetil csoporttal módosítottam (**2**), majd a kutatócsoportunk által előállított, propargilezett polibenzimidazol (PBI) membránhoz rögzítettem (**3**). Az így kapott katalitikus membránt szerves oldószeres nanoszűrősen (OSN) alapuló membrán-kaszád reaktorban alkalmaztam.

A katalizátor és a membrán, illetve a katalizátor és a szubsztrát molekulái közötti kölcsönhatások felderítésére kvantumkémiai számításokat végeztünk. Ezek igazolták, hogy a **3** rögzített cinkona-négyzetamid által katalizált reakciókban a szubsztrátok elég közel kerülnek egymáshoz, hogy a reakció végbemenjen, illetve azt, hogy a **2** katalizátor a kialakított kovalens kötés mellett π - π kölcsönhatással kapcsolódik a membránhoz, ami nem gyakorol negatív hatást a katalitikus reakciókra.

Kulcsszavak: szerves szintézis, enantioszelektív reakciók, katalizátor visszaforgatás, immobilizálás



1. ábra – A cinkona-négyzetamid organokatalizátor (1), az azidoetil csoporttal módosított cinkona származék (2) és a PBI membránhoz rögzített cinkona-négyzetamid (3) szerkezete

Témavezetők:

Dr. Kupai József
adjunktus, BME VBK

Dr. Huszthy Péter
egyetemi tanár, BME VBK