



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Vegyésszmérnöki és Biomérnöki Kar

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

2017

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA

BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar

A szekcióülések kezdete: 2017. november 16. 8:15

Eredményhirdetés: Ch. C. 14., 2017. november 16. 18:30

Polibenzimidazol membránhoz rögzített cinkona-négyzetamid organokatalizátorok szintézise és alkalmazása

Kozma Petra, IV. évf. BSc

Témavezetők: Dr. Kupai József egyetemi adjunktus

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Dr. Huszthy Péter egyetemi tanár, az MTA I. tagja

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

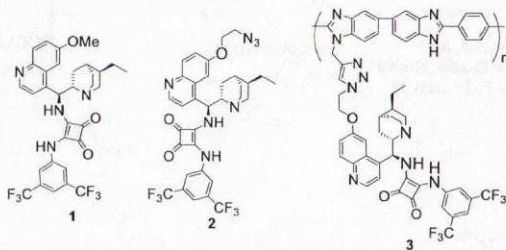
Konzulens: Kisszékelyi Péter PhD-hallgató

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék

Munkám célja volt egy enantioszelektív szintézisek katalízisére alkalmas cinkona-négyzetamid típusú, királis bifunkcionális 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-kaskád reaktorban alkalmaztam.

A katalizátor és a membrán, illetve a katalizátor és a szubsztrát molekulái közötti kölcsönhatások felderítésére kvantumkémiiai 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.



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