



I. FKF Szimpórium

Fiatal Kémikusok Fóruma

Debrecen, 2019. április 3-5.

www.fkf.mke.org.hu



POSZTEREK

	Szerzők <i>Munkahely</i>	Cím
P1	Németh Csaba, Németh Zoltán, Penksza Péter, Tóth Adrienn, Hidas Karina, Ayari Emna, Pajor Ferenc, Póti Péter <i>Capriovus Kft.</i>	Probiotikus tojásfehérje alapú tejtermék analógok porlasztvaszárításának fejlesztése
P2	<u>Németh Anita</u> , Szecskás Tamás, Mezei Roland <i>Kischemicals Gyártó és Kereskedelmi Kft</i>	EPTC növényvédőszerben megjelenő ismeretlen szennyező analizálása
P3	<u>Jay Trivedi</u> , Mezei Roland <i>Kischemicals Gyártó és Kereskedelmi Kft</i>	TBIC: A project case study
P4	<u>Krámos Balázs</u> <i>Richter Gedeon Nyrt.</i>	Számítógépekkel a gyógyszerkutatásban
P5	<u>Tóth Nóra</u> , Hümpfner Evelyn, Rávai Bettina, Tajti Ádám, Bálint Erika <i>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem</i>	Kabachnik-Fields- és Biginelli-reakciók tanulmányozása mikrohullámú reaktorban
P6	<u>Majoros István</u> , Szabó-Szentjóbi Hajnalka, Tóth Tünde, Huszthy Péter <i>Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem</i>	18-korona-6-éter típusú foszfin ligandumok előállítása

KABACHNIK–FIELDS- ÉS BIGINELLI-REAKCIÓK TANULMÁNYOZÁSA MIKROHULLÁMÚ REAKTORBAN

Tóth Nóra, Hümpfner Evelyn, Rávai Bettina, Tajti Ádám, Bálint Erika

*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest,
Budafoki út 8.*

Kutatómunkánk során különféle foszfonát oldalláncot tartalmazó *N*-heterociklusok előállítását tanulmányozzuk mikrohullámú (MW) besugárzással elősegített multikomponensű reakciókkal. A többkomponensű reakciók számos előnyös tulajdonságnak köszönhetően, a szerves szintetikus kémiában nagy érdeklődésre tartanak számot. Ily módon egy lépésben bonyolultabb vázat tartalmazó molekulák is könnyen, gyorsan, atomhatékonyan állíthatók elő [1]. A reakciók hatékonysága tovább növelhető MW besugárzás hatására, melyet kutatócsoportunkban is sikeresen alkalmaztak már különféle kondenzációk során [2].

Tanulmányozni kívántuk különféle izoindolin-foszfonátok szintézisét a 2-formil-benzoészav, dialkil-foszfátok és primer aminok Kabachnik–Fields-reakciójával. Elsőként a 2-formil-benzoészav, a dietil-foszfát és a butil-amin modellreakcióját vizsgáltuk. A kondenzációkat katalizátor és oldószer nélkül MW reaktorban valósítottuk meg. Vizsgáltuk a hőmérséklet, a reakcióidő és a reagensek mólarányának hatását az átalakulás mértékére. Az optimálisnak talált körülmények között további dialkil-foszfátokkal és aminokkal is végeztünk kísérleteket.

Célul tűztük ki továbbá β -ketofoszfonátok Biginelli-reakciójának vizsgálatát a dietil-(2-oxopropil)-foszfonát, a benzaldehid és a karbamid modellreakcióján keresztül. Az irodalmi előzményeket alapul véve tanulmányoztuk különböző katalizátorok, oldószer, a hőmérséklet, a reakcióidő, valamint a reagensek mólarányának hatását. A legjobb eredményt MW reaktorban, oldószer nélkül érték el. Ezután az optimálisnak talált paramétereket alkalmazva, a β -ketofoszfonát, a benzaldehid és a karbamid változtatásával további származékokat szintetizáltunk. Oszlopkromatográfiás tisztítás után 45-80%-os termeléssel 13 dihidropirimidinon-foszfonát-származékot izoláltunk, melyek közül 9 új vegyület.

[1] M. Haji; *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, **2016** (12) 1269-1301.

[2] G. Keglevich, E. Bálint; *Molecules*, **2012** (17) 12821-12835.

A kutatás az NKFIH FK123961 és FIEK_16-1-2016-0007 pályázat részfinanszírozásával, a Servier-Beregi Ösztöndíj, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00278/17/7), az Új Nemzeti Kiválóság Program (ÚNKP-18-4-BME-131), valamint a Nemzeti Tehetség Program (NTP-NFTÖ-18-B-0375) támogatásával készült.