
Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportja és a
Magyar Kémikusok Egyesülete rendezvénye

XLI.
KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

Előadás összefoglalók



Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza

Szeged, 2018. október 15-17.

Szerkesztették:

Ádám Anna Adél,

Kocsis Marianna

SZTE TTIK Szerves Kémia Tanszék

Ziegenheim Szilveszter

SZTE TTIK Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Lektorálta:

Dr. Pálinkó István, egyetemi tanár

a Magyar Kémikusok Egyesületének főtitkára

SZTE TTIK Szerves Kémia Tanszék

ISBN 978-963-9970-95-3

2018. október 17. szerda

Helyszín: Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza, díszterem

08.00 – 09.15 **Fizikai kémia II.**

Elnök: Dr. Czakó Gábor, egyetemi adjunktus

08.00 – 08.15 Iminek autokatalitikus hidrolízise

Előadó: Lantos Emese

08.15 – 08.30 Diffúzióvezérelt kadmium-hidroxid csapadékmintázat vizsgálata

Előadó: Papp Paszkál

08.30 – 08.45 Csapadékmintázatok mágneses térben

Előadó: Takács Dóra

08.45 – 09.00 Áramlásvezérelt csapadékképződés vékony folyadékrétegben

Előadó: Balog Edina

09.00 – 09.15 Induction period determination of fast precipitation reactions

Előadó: Zahorán Réka

09.15 - 9.30 Szünet

09.30 – 11.30 **Szerves kémia III.**

Elnök: Dr. Kovács Lajos, tudományos főmunkatárs

09.30 – 09.45 P-oldalláncot tartalmazó N-heterociklusok előállítása multikomponensű reakciókkal

Előadó: Tóth Nóra

FOSZFONÁT OLDALLÁNCOT TARTALMAZÓ N-HETEROCIKLUSOK ELŐÁLLÍTÁSA MULTIKOMPONENSŰ REAKCIÓKKAL

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

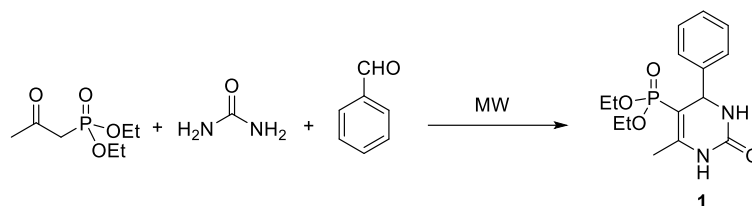
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8.

Szerves foszforvegyületekkel az élet számos területén találkozhatunk. Előfordulnak a mezőgazdaságban, a műanyagiparban és a gyógyászatban is.^[1] Az α -aminofoszfónátok és származékaik – az α -aminosavak szerkezeti analógjaiként – sokrétű bioaktivitással rendelkeznek (antibiotikumok, enziminhibitorok, antimetabolitok, vírusellenes-, tumorelles-, rovarellenes szerek).^[2] Kutatócsoportunkban is foglalkoznak α -aminofoszfónátok és α -aminofoszfín-oxidok előállításával Kabachnik–Fields-reakción keresztül.^[3] Hatékony eljárást dolgoztak ki mikrohullámú (MW) reaktorban katalizátor és sok esetben oldószer nélkül.

Az elmúlt években a heterociklusos aminofoszfónátok iránt is megnőtt az érdeklődés, melyekhez leghatékonyabban multikomponensű reakciókon keresztül juthatunk. A többkomponensű reakciók előnyei közé tartozik a nagy atomhatékonyság, a gyors, egyszerű és környezetbarát megvalósíthatóság, valamint az idő- és energiatakarékosság.^[4]

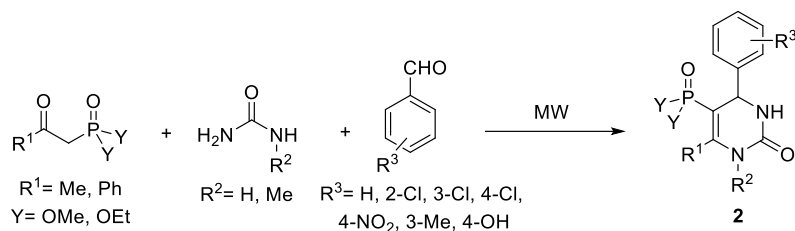
Kutatómunkám során célul tűztük ki β -ketofoszfónátok Biginelli-reakciójának vizsgálatát (1. ábra). Először a dietil-2-oxopropilfoszfónát, a benzaldehid és a karbamid modellreakcióját tanulmányoztuk. Az irodalmi előzmények alapján különféle savkatalízist (PTSA, $\text{Sc}(\text{OTf})_3$, $\text{Yb}(\text{OTf})_2$, vagy $\text{Zn}(\text{OTf})_2$) alkalmazva toluolban vagy acetonitrilben forralva végeztünk kísérleteket. A legjobb eredményeket alapul véve, a reakciót MW besugárzás hatására is megvalósítottuk. A reagensek molarányát, a katalizátor mennyiségét, a hőmérsékletet, valamint a reakcióidőt változtatva maximalizáltuk a konverzió értékét.

3. ábra. A dietil-2-oxopropilfoszfónát Biginelli-reakciója MW körülmények között



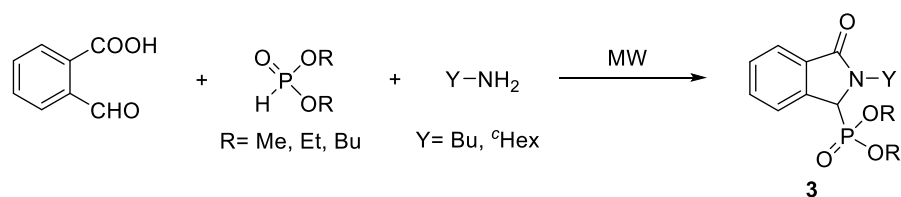
Az optimálisnak talált körülmények között, a β -ketofoszfónát (dimetil-2-oxopropilfoszfónát, dietil-(2-oxo-2-feniletil)foszfónát), a karbamid (*N*-metilkarbamid), illetve a benzaldehid (2-klórbenzaldehid, 3-klórbenzaldehid, 4-klórbenzaldehid, 4-nitrobenzaldehyd, 3-metilbenzaldehyd, 4-hidroxibenzaldehid) változtatásával további származékokat (2) állítottunk elő (2. ábra).

2. ábra. A Biginelli-reakció kiterjesztése további származékok előállítására



Tanulmányoztuk továbbá a formil-benzoészav, dialkil-foszfitek (dimetil-foszfite, dietil-foszfite, dibutil-foszfite) és primer aminok (butil-amin, ciklohexil-amin) Kabachnik–Fields-reakcióját is, mely során izoindolin-gyűrűs vegyületeket (3) állítottunk elő (3. ábra). A kondenzációkat katalizátor és oldószer nélkül, MW besugárzás hatására valósítottuk meg, vizsgáltuk a hőmérséklet és a reakcióidő változtatásának hatását.

3. ábra. Speciális Kabachnik-Fields reakció formil-benzooesavval



Köszönetnyilvánítás: A kutatás az NKFIH FK123961 pályázat részfinanszírozásával, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj (BO/00278/17/7), valamint az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4-BME-131 Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

- [1] *SPR - Organophosphorus Chemistry*; D. W. Allen, D. Loakes, J. C. Tebby, Eds.; Vol. 45, RSC Cambridge, 2016
- [2] *Aminophosphonic and Aminophosphinic acids: Chemistry and Biological Activity*; V. P. Kukhar, H. R. Hudson, Eds.; Wiley: Chichester, 2000
- [3] G. Keglevich, E. Bálint; *Molecules* **2012** (17) 12821-12835
- [4] M. Haji, *Beilstein Journal of Organic Chemistry* **2016** (12) 1269-1301