

β -Oxoészterek ciklizációs reakciójának vizsgálata

Benda Zsuzsanna, III. évf. Kémia BSc

Témavezetők: **Stirling András** tudományos tanácsadó
MTA TTK Szerves Kémiai Intézet
Daru János doktorandusz
ELTE TTK Fizikai Kémiai Tanszék

Furán részletet tartalmaz számos gyógyszer, továbbá széleskörűen alkalmaznak furánszármazékokat vegyipari szintéziseknél is, ezért fontos minél gazdaságosabb és hatékonyabb módszereket kifejleszteni az előállításukra.

β -oxoészterek acetilénszármazékokkal gyűrűzáródással járó oxidatív C-H/C-H funkcionálizációs reakcióba léphetnek ezüst-karbonát jelenlétében.¹ Ennek során egy lépésben, jó kitermeléssel és kitűnő szelektivitással triszubsztituált furán termék keletkezik. Az irodalomban számos átmenetifém katalizált C-H/C-H funkcionálizáció ismert 1,3-oxovegyületek és fenil-alkének illetve fenil-alkinek közt, a kísérleti tapasztalatok alapján azonban az ezüst-karbonát hatására végbemenő reakció mechanizmusa valószínűleg ezektől különböző.

A dolgozatomban elméleti kémiai módszerek segítségével vizsgálom ezt a reakciót, és kísérletet teszek a reakció mechanizmusának meghatározására.

Számításaim során a sűrűségfunktional-elmélet segítségével, M06 hibrid meta-GGA kicserélődési-korrelációs funkcionál használatával határozom meg a feltételezett intermedierek és átmeneti állapotok képződési szabadentalpiáját a kísérleti munkáknál alkalmazott hőmérséklet és oldószer figyelembevételével.

A számolt reakció szabadentalpia-változások és gátmagasságok alapján kiválasztom a legkedvezőbbet a feltételezett reakció utak közül.

¹ Chuan He, Sheng Guo, Jie Ke, Jing Hao, Huan Xu, Hongyi Chen, and Aiwen Lei, *Journal of the American Chemical Society* **2012** 134 (13), 5766-5769