

Fotokatalitikus rendszerek fejlesztése és optimalizálása szén–szén kapcsolási reakciókban

Development of photocatalytic systems for C-C bond formation reactions

GÉMES Gergő¹, RICHTER Dóra¹, KISSZÉKELYI Péter², KUPAI József¹

¹Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

kupai.jozsef@vbk.bme.hu, www.kupaigroup.com

²Comenius University Bratislava, Department of Organic Chemistry, 842 15 Bratislava,
Ilkovičova 6.

ABSTRACT

Today, photocatalysis is experiencing a renaissance, as it is an excellent tool for environmentally friendly chemical transformations. The biggest advantage is that it can be used to carry out reactions under particularly mild conditions, which can be useful for the late-stage functionalization of pharmaceuticals. In this field it is essential to have a robust reaction setup, to obtain repeatable and reproducible results. Hence, I built an open-source 3D printed reactor plan. It allows fine adjustment over the light intensity and the internal temperature. It also features multiple sample holders, and enables parallel reactions. During my work, I also synthesized the photocatalyst 4CzIPN, and then applied it in a known C-C bond formation reaction. After that, I attempted to expand the substrate scope of the reaction. So far, I carried out successful reactions with seven new substrates. This research was funded by the National Research, Development, and Innovation Office (FK138037), the Excellence PhD Scholarship of the Richter Gedeon Talentum Foundation. National Research, Development and Innovation Fund (RRF-2.3.1-21-2022-00015) has been implemented with the support provided by the EU.

Keywords: photocatalysis, C-alkylation, radical reaction, photoreactor

ÖSSZEFOGLALÓ

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli, mivel remek eszköze a környezetbarát kémiai átalakításoknak. A legnagyobb előnye, hogy alkalmazásával kifejezetten enyhe körülmények közt végezhetünk reakciókat. Ezen a területen elengedhetetlen egy robusztus kísérleti elrendezés az ismételhető és reprodukálható eredményekhez. Ebből a célból megvalósítottam egy nyílt forráskódú, 3D nyomtatott fotoreaktor tervet, amely biztosítja a szükséges feltételeket. A reaktor pontosan beállítható fényintenzitással rendelkezik, lehetőséget ad párhuzamos reakciók kivitelezésére, illetve képes a reakcióelegyek termosztálására. Munkám során előállítottam egy fémionmentes fotokatalizátort is, a 4CzIPN-t. A katalizátort alkalmaztam egy irodalomban ismert C–C kapcsolási reakcióban, illetve megkísértem a reakció kiterjesztését további vegyületekre. Eddig hét új szubsztráttal végeztem sikeres reakciót. A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (FK138037), a Richter Gedeon Talentum Alapítvány Kiválósági PhD Ösztöndíja finanszírozta. A Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap (RRF-2.3.1-21-2022-00015) projektje az EU támogatásával valósult meg.

Kulcsszavak: fotokatalízis, C-alkilezés, gyökös reakció, fotoreaktor