Egy fotokatalitikus C-alkilezési reakció összehasonlítása szakaszos és áramlásos rendszerben

Comparison of a photocatalytic C-alkylation reaction in batch and continuous-flow systems

HANGYA Kinga Imola[1], GÉMES Gergő[1], RICHTER Dóra[1], Dr. habil. KUPAI József[1]

[1]Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
1111, Budapest, Műegyetem rakpart 3.,
kupai.jozsef@vbk.bme.hu

ABSTRACT

Nowadays, photocatalysis is a promising area in sustainable chemistry, enabling reactions under mild conditions, which is especially useful for late-stage functionalization of pharmaceuticals.

In our previous work, we optimized the batch reaction between methyl cyanoacetate and 1,1-diphenylethylene, catalyzed by 4CzIPN, in a home-made 3D-printed photoreactor. Our aim was to implement this reaction in a continuous-flow system and compare the results with those obtained in batch mode. The effects of residence time, substrate concentration, and the quality of the base on the reaction efficiency and yield were investigated in the flow system. Furthermore, two flow modules with different geometries can be used in our photoreactor, and their performances were also comparatively evaluated. Finally, the substrate scope was expanded to include further CH-acidic compounds, and the obtained yield and space-time yield values were compared with the batch results.

Keywords: photocatalysis, visible light, C–C bond formation, photo-flow reactions, optimization

ÖSSZEFOGLALÓ

Napjainkban a fotokatalízis a fenntartható kémia egyik ígéretes területe, amely lehetővé teszi a reakciók enyhe körülmények közötti megvalósítását, ami különösen előnyös a fejlett gyógyszer-intermedierek módosítása során.

Korábbi munkánk során optimalizáltuk a metil-cianoacetát és 1,1-difeniletilén közötti, 4CzIPN által katalizált C-alkilezési szakaszos reakciót a saját fejlesztésű 3D-nyomtatott fotoreaktorunkban. Jelenlegi munkánk során célunk volt a reakció áramlásos rendszerben való megvalósítása és összehasonlítása a szakaszos üzemmódban elért eredményekkel. Vizsgáltuk az áramlásos rendszerben a tartózkodási idő, a koncentráció és a bázis minőségének termelésre gyakorolt hatását. A fotoreaktorunkba két különböző geometriájú áramlásos modul helyezhető, melyek hatékonyságát szintén összehasonlítottuk. Kiterjesztettük a reakciót további különböző CH-savas vegyületekre, majd az elért termelés, és térfogati termelékenység értékeket összehasonlítottuk a megfelelő szakaszos reakcióban elért adatokkal.

Kulcsszavak: fotokatalízis, látható fény, C–C kapcsolás, fotokémiai áramlásos reakciók, optimalizálás

A kutatás az OTKA (FK138037), valamint a Varga József Alapítvány támogatásával jött létre. Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Program (EKÖP-26-1-BME-162) által támogatott projekt a Tudományos és Technológiai Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem támogatása alapján valósult meg.