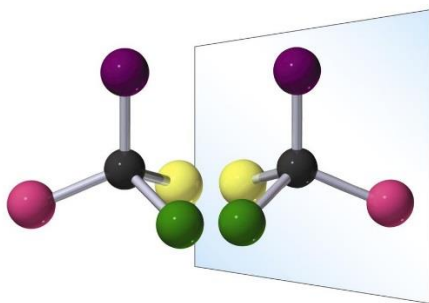


Enantioszelektív szintézisek

Az egymással tükörképi viszonyban lévő, ám fedésbe nem hozható molekulákat enantiomereknek nevezzük. Az ilyen viszonyban lévő vegyületek fizikai és termodinamikai állandói megegyeznek, fajlagos forgatóképességük nagysága is egyezik, de iránya ellentétes, kémiai tulajdonságaik akirális reagensekkel szemben azonosak, királis reagensekkel szemben viszont eltérőek. Emiatt biológiai hatásuk gyakran jelentősen eltér: míg az egyik gyógyhatású, addig a másik akár toxikus is lehet. Ennek köszönhetően az egyes enantiomerek szelektív előállítása kulcsfontosságú a szerves kémiában.

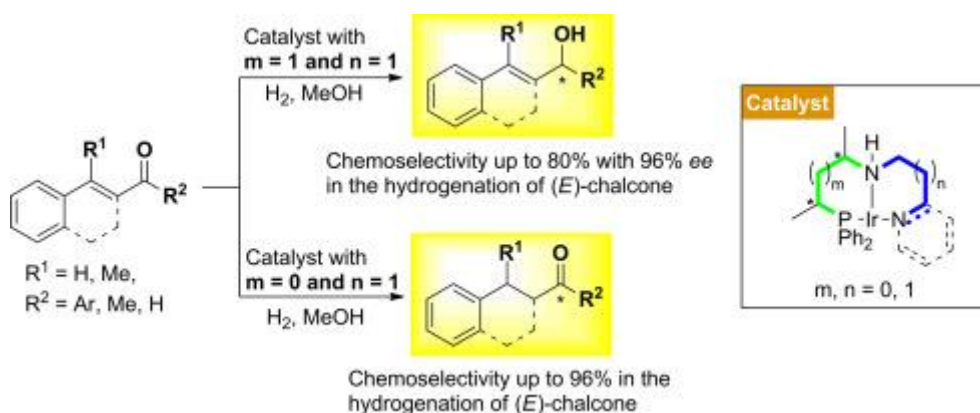


Az enantioszelektív reakciók számos módszerrel megvalósíthatók, de az utóbbi évtizedekben a kutatók figyelme a sztöchiometrikus reakciók helyett a zöld kémia számos igényét kielégítő aszimmetrikus katalitikus szintézisek felé irányult. Az aszimmetrikus katalitikus reakciók nagy előnye, hogy a királis információt kis mennyiségű katalizátor képes átadni nagy mennyiségű kiindulási anyagnak. Ilyen aszimmetrikus katalitikus reakciók megvalósíthatók homogén átmenetifém-komplexekkel, heterogén katalizátorokkal, immobilizált komplexekkel és enzimekkel egyaránt. A királis, kétfogú ligandumok szerkezeti finomhangolásával kiváló aktivitást és szelektivitást biztosító átmenetifém-tartalmú katalitikus rendszerek állíthatók elő. E vegyületek között kiemelkedőek a foszfor, nitrogén vagy kén donoratomokat tartalmazó ligandumok, melyek egyedülálló sztereo-elektronikus tulajdonságokkal rendelkeznek. Kutatómunkánk során ilyen aszimmetrikus katalitikus rendszerek fejlesztését végezzük, különös tekintettel az alábbi témákra.

Homogénkatalitikus aszimmetrikus hidrogénezés

A prokirális ketonok aszimmetrikus hidrogénezése az egyik leghatékonyabb módszer optikailag aktív szekunder alkoholok előállítására. Kiemelt jelentőségűek az α,β -telítetlen ketonok hidrogénezésével előállítható királis allil-alkoholok, melyek a gyógyszer- és agrokémiai ipar fontos intermediereiként szolgálnak. E vegyületek hatékony, enantioszelektív előállítása megvalósítható háromfogú, királis foszfin-diamin ligandumokkal

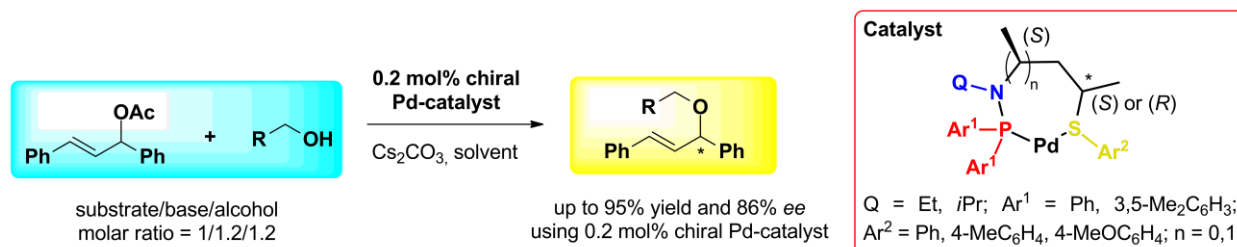
módosított irídium-katalizátorokkal. A királis ligandum sztérikus és elektronikus tulajdonságainak finomhangolásával növelhető a katalitikus reakció aktivitása és szelektivitása.



Császár Z., Szabó E. Z., Bényei A. C., Bakos J., Farkas G.: Chelate ring size effects of Ir (P, N, N) complexes: Chemoselectivity switch in the asymmetric hydrogenation of α , β -unsaturated ketones. *Catalysis Communications*, **2020**, 146, 106128. DOI: 10.1016/j.catcom.2020.106128.

Enantioszelektív szén-szén és szén-heteroatom kapcsolási reakciók

Királis észterek, éterek és aminok megfelelő szén-szén, illetve szén-heteroatom kötésének sztereoszelektív kialakítása rendkívüli jelentőséggel bír a szintetikus szerves kémiában, hiszen számos biológiailag aktív vegyület, például gyógyszer- vagy növényvédőszer-hatóanyag tartalmaz aszimmetrikus szénatomhoz kapcsolódó észter-, alkoxi- vagy amino-csoportot. Fosfor és kén donoratomot tartalmazó királis ligandumok palládium-komplexeivel kiemelkedően hatékony katalizátorok állíthatók elő.



Major M. M., Guóth M., Balogh S., Simon J., Bényei A., Bakos J., Farkas G.: Novel Pd(PN,S)-complexes: Highly active catalysts designed for asymmetric allylic etherification. *Molecular Catalysis*, **2021**, 512, 111763. DOI: 10.1016/j.mcat.2021.111763.

Nem-nemesfém komplexek katalitikus alkalmazása aszimmetrikus szintézisekben

Prokirális ketonok karbonilcsoportjának aszimmetrikus hidrogénezése megvalósítható királis ligandummal módosított átmenetifém-katalizátorok segítségével. Korábban e katalizátorok a földkéregben relatíve kis mennyiségben fellelhető, drága átmenetifémek (pl. irídium, ródium, ruténium) komplexeit jelentették. Az utóbbi néhány év folyamán azonban egyre inkább előtérbe került a nagy mennyiségben előforduló, olcsóbb és sok esetben alacsonyabb toxicitású átmenetifémekkel (pl. mangán, vas, kobalt, nikkel vagy réz) alkotott katalizátor-komplexek alkalmazása.

7 VIIB 7B	8	9 VIII 8	10	11 IB 1B
25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546