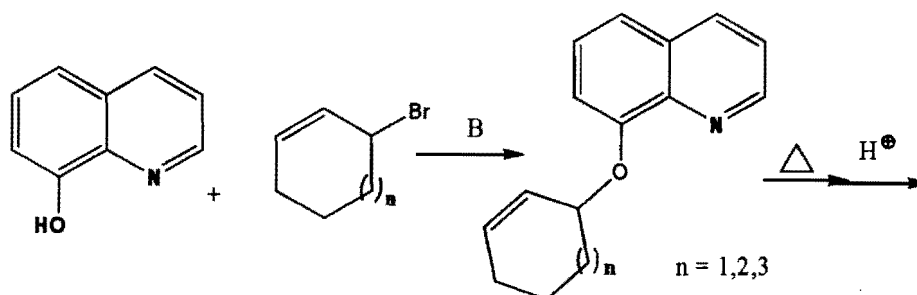


## Beszámoló a 2012.02.01 és 2012.11.30 között végzett kutatómunkáról

**Dr. Novák Lajos:**

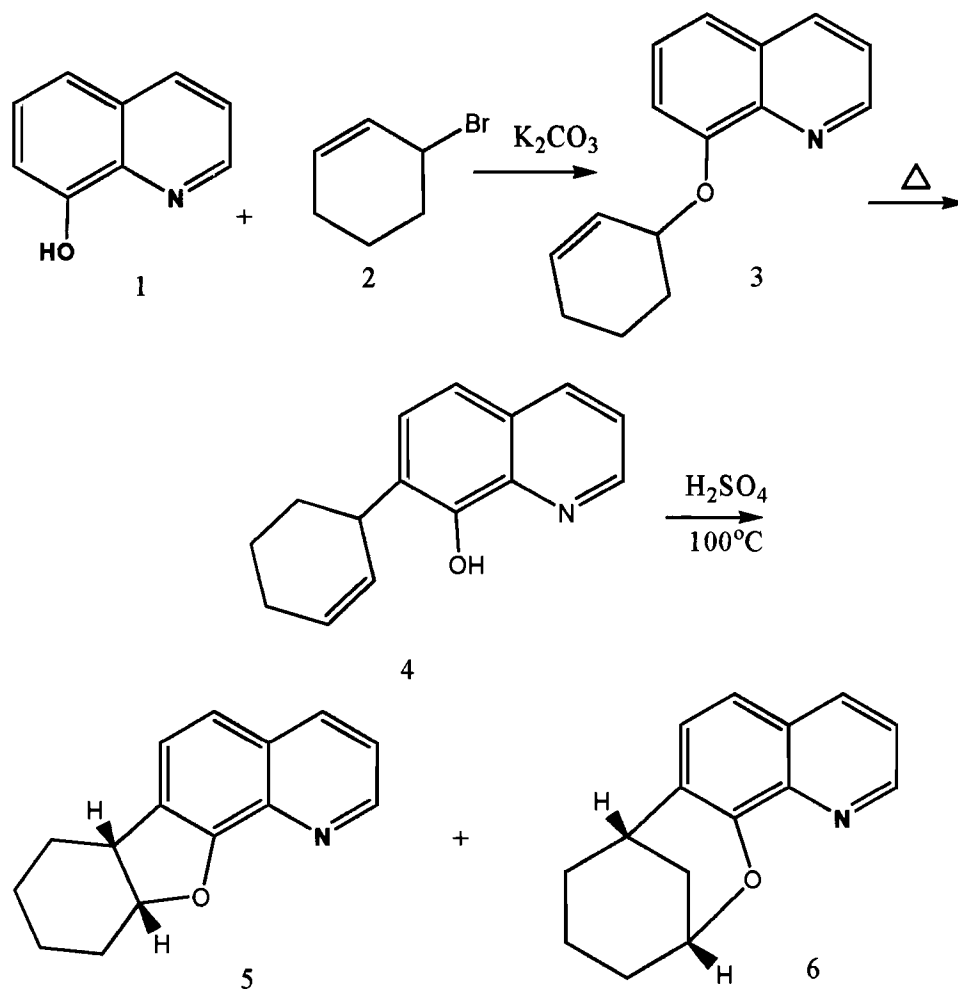
### „Átrendeződési reakciók vizsgálata”

Korábbi sikeres kutatómunkánk folytatásaként foglalkoztunk új összetett átrendeződési reakciók vizsgálatával és azok alkalmazásával új heterociklusos vázrendszerek előállítására. Munkánk során a 8-hidroxi-kinolinok gyűrűs allil étereinek termikus és mikrohullámú reaktorban kiváltott átrendeződéseit és a termékek savkatalizált intramolekuláris gyűrűzárását tanulmányoztuk.



A 8-hidroxi-kinolin (1) reakciója 3-brómciklohexánnal (2) kálium-karbonát jelenlétében jó termeléssel adta az allil-aril étert (3), aminek termikus Claisen átrendeződése klórbenzolban annak forráspontján (131°C) melegítve a kinolin származékhoz (4) vezetett (1. ábra). Az átrendeződést mikrohullámú készülékben végezve rövidebb reakcióidővel és jobb termeléssel jutottunk a kinolin származékhoz. Ez utóbbit kénsavval 100°C-on hevítve két vegyület 2:1 arányú elegyét kaptuk, amelyeket oszlopkromatográfiával választottunk szét. A vegyületek szerkezetét IR, NMR, és MS vizsgálatokkal állapítottuk meg. Az főtermék a várt hexahidro[1]benzofuro[3,2-*h*]kinolin (5) volt, aminek térszerkezetét (*cis*-annelláció) NOESY vizsgálattal tisztáztuk.

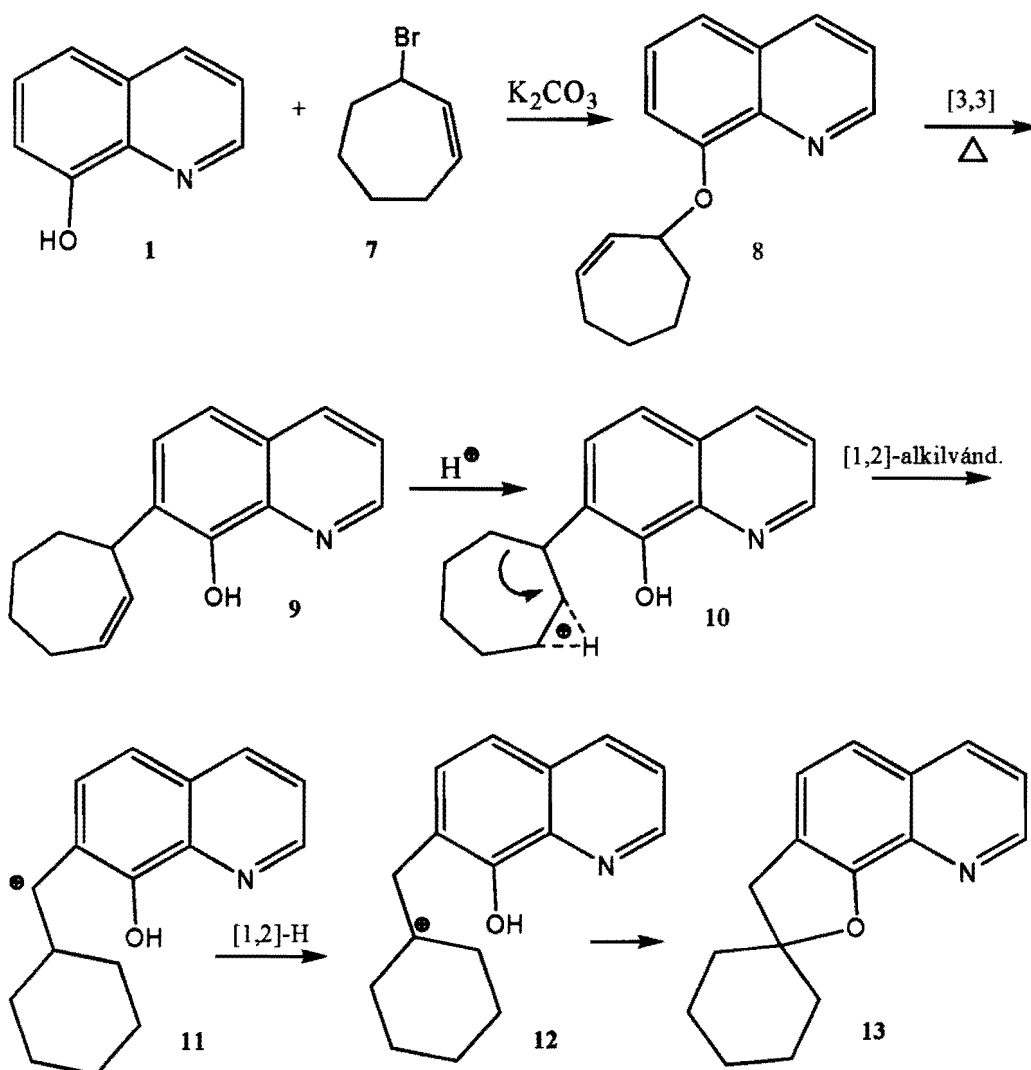
A gyűrűzárási reakcióban kisebb mennyiségben képződött anyag spektroszkópai vizsgálataink alapján tetrahidro-2*H*-2,6-metanooxocino[3,2-*h*]kinolin (6) származék volt.



1. Ábra

Vizsgáltuk a nagyobb gyűrű-tagszámú aril-allil-éterek átrendeződéseit is. Közülük példaként a héttagú gyűrűs éter átrendeződését tárgyalom.

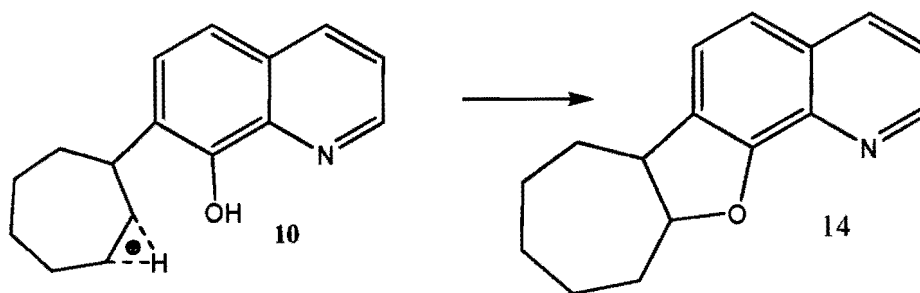
A 8-hidroxikinolint kálium-karbonát jelenlétében 3-brómciklohepténnel (2. ábra, 7) reagáltatva a 8 képletű étert kaptuk, amit mikrohullámú reaktorban  $180^\circ C$ -on tartva a Claisen típusú átrendeződés eredményeként a 9 vegyületet nyertük. Az utóbbit kénsavval kezelve két vegyület 3:1 arányú elegyét izoláltuk. Kromatográfias elválasztás után a főterméket, az NMR vizsgálatok és analízisek alapján, 3'-*H*-spiro[cyclohexane-1,2'-furo[3,2-*h*]kinolinnak (13) azonosítottuk.



## 2. Ábra

A spiro-vegyület (13) képződését az éteren lejátszódó [1,2]-alkilcsoport vándorlással és az azt követő [1,2]-hidrogén vándorlással képződő kationon (10 – 11-12) lejátszódó gyűrűzárási reakcióval értelmezhetjük.

A kisebb mennyiségben képződő vegyület cyclohepta[4,5]furo[3,2-*h*]kinolin volt (3. ábra, 14). A vegyület képződését a 10 képletű vegyületen lejátszódó savkatalizált gyűrűzárással értelmezhetjük.



3. Ábra

A kutatómunkánk során sikerült feltárnunk két összetett átrendeződési reakciót és eljárást kidolgoznunk új heterociklusos gyűrűrendszerek előállítására. Az utóbbiak várhatóan kedvező biológiai hatású vegyületek alapvázai lesznek.

A tárgyidőszakban az alább felsorolt tudományos közleményeink jelentek meg, illetve kerültek közlésre elfogadásra:

- 1) Katalin Kupai, Gergely Banoczi, Gabor Hornyanszky, Pal Kolonits, Lajos Novak. A Convenient Method for the Preparation of Cyclohepta[*b*]indole Derivatives. *Cent. Eur. J. Chem.* **2012**, *10*, 91-95.
- 2) Mercedesz Tőrincsi, Pal Kolonits, Jenő Fekete, Lajos Novak. Rearrangement of Aryl Geranyl Ethers. *Synth. Commun.* **2012**, *42*, 3187-3199.
- 3) Renáta Farkas, Mercedesz Tőrincsi, Pál Kolonits, Lajos Novák. Synthesis of new potential UV-filters. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, **2012**, *56*, 3-7 .
- 4) Katalin Kupai, Gergely Banoczi, Gabor Hornyanszky, Pal Kolonits, Lajos Novak. Facile synthesis of cycloalkanoindole derivatives by aza-Claisen rearrangement. *Monatsh. Chem.* **2012**, közlésre elfogadva.

Budapest, 2012. november 12

*Dr. Novák Lajos*  
 Dr. Novák Lajos  
 professzor emeritus