

Válasz

Dr. Hell Zoltán egyetemi docens bírálataiban feltett kérdéseire

Először szeretném megköszönni dr. Hell Zoltán egyetemi docensnek dolgozatom gondos áttanulmányozását és segítő észrevételeit.

A kérdésekre adott válaszaim a következők:

1. „A jódferrrocén előállításánál nem próbálták meg a hexil-lítium használatát? Van példa arra, hogy ez utóbbi használata esetén nem kell $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$ -os hőmérsékleten dolgozni, ami egyszerűsíti a reakció kivitelezését.”

Jódferrrocén előállítása a kutatócsoportban bevált recept alapján történt. Ez alapján a ferrrocén lítálását $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ alatt végezzük és ezt követően hűtjük a reakcióelegyet $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$ alá. Erre azért van szükség, hogy a keletkező jódferrrocén ezen a hőmérsékleten kiváljon az oldatból és ne lépjen reakcióba az oldatban jelen lévő ferrocenil-lítiummal. A tapasztalatom az volt, hogy ha a hőmérsékletet nem csökkentjük le ennyire, akkor az 1,1''-biferrrocén keletkezése kerül előtérbe. Így a $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$ alkalmazását mindenképp szükségszerűnek érzem, de a hexil-lítium alkalmazásának lehetőségét a jövőben nem vetjük el.

2. „A jódferrrocén és a 2-amino-4-hidroxi-6-metilpiridin reakciójában az értekezésben leírtak szerint „optimális reakciókörülmények között” főként a nem várt 7-O-acil-származék keletkezett. Ha nem ennek a terméknek az előállítása volt a cél, mitől optimális a reakciókörülmény?”

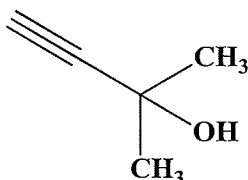
A reakció olyan szempontból optimális, hogy a jódferrrocén átalakulása ilyen körülmények között vált teljessé. Igaz, hogy a nem várt 7-O-acil-termék keletkezése volt a nagyobb mértékű, azonban e vegyület is jó kiindulási anyag lehet további kutatásra. A szabad $-\text{NH}_2$ -csoport továbbépíthető karbamiddá, így egy három helyett négy kötőhellyel rendelkező vegyületet kaphatunk.

3. „A jódferrrocén és a klór-pirimidinek reakciójában a 2.1 táblázat szerint ötszörös klórprimidin-felesleget használtak. Ekkor a II melléktermék is keletkezett, amely két pirimidin egységet tartalmaz. Vizsgálták, hogy mi történik, ha a felesleg kisebb?”

Ilyen vizsgálatok nem történtek.

4. „A 2.12 ábrán a **13h** vegyületnél az R csoportra az iPrOH jelölés van megadva. Ez a 2-propanol szokásos jelölése. Végül is akkor mi a szubsztituens?”

Valóban helyesebb lett volna a $-\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{OH}$ megjelölés, az alkin reakciópartber a 2-metil-but-3-in-2-ol:



5. „Nincs rá esély, hogy a **2I** pirimidin-származékok biológiai hatását megvizsgálják?”

Tudjuk, hogy a **21a** származék esetében nem mutatkozott antibakteriális hatás.

G.S. Rashinkar, S.B. Pore, K.B. Mote, R.S. Salunkhe An efficient synthesis of novel 2-amino-4-aryl-6-ferrocenyl pyrimidines *Indian J. Chem. B*, 48, 2009, 606.

A kutatócsoportban előállított vegyületek közül jelenleg szteroidok biológiai hatását vizsgálják. Ha a jövőben együttműködés keretében felmerül ilyen lehetőség a ferrocénszármazékokkal kapcsolatban, akkor elképzelhető, hogy ezek a vegyületek is vizsgálatra kerülnek.

6. „A **27** vegyületek előállításánál nem lehetett volna az izocianát-felesleget a kromatografálás előtt eltávolítani (pl. desztillálással), vagy mondjuk vízzel elbontani? Ezzel könnyebb lehetett volna a vegyületek tisztítása.”

A desztillációra ugyan nem gondoltam, azonban a vízzel történő elbontás nem működik, ugyanis a víz hatására a keletkező amin gyorsabban reagál az izocianáttal, mint a víz, így N,N'-diszubsztituált karbamid keletkezik, ami a kromatografálásnál problémát okoz, ugyanis ennek a retenciós faktora nagyon közel esik a termékünkhöz.

Tisztelettel még egyszer megköszönöm dr. Hell Zoltánnak opponensi munkáját.

Veszprém, 2017. november 21.



Fehér Csaba