

# THÔNG TIN LUẬN ÁN

Tên luận án: **TỔNG HỢP VẬT LIỆU KHUNG HỮU CƠ TÂM ĐỒNG LÀM XÚC TÁC CHO CÁC PHẢN ỨNG GHEP ĐÔI C-C VÀ C-N**

Chuyên ngành: **Công Nghệ Hóa Học Các Chất Hữu Cơ**

Mã số: **62527505**

Họ tên NCS: **Đặng Huỳnh Giao**

Người hướng dẫn khoa học: **1. GS. TS. Phan Thanh Sơn Nam**

**2. TS. Lê Thành Dũng**

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Bách Khoa, Đại học Quốc Gia TP. HCM**

## Những đóng góp chính của luận án

Mục tiêu chung của luận án là sử dụng bốn vật liệu Cu-MOF làm xúc tác cho các phản ứng ghép đôi C-C và C-N trực tiếp tổng hợp các hợp chất propargylamine và quinoxaline. Những hợp chất này đóng vai trò là các hợp chất trung gian quan trọng trong việc tổng hợp nhiều hợp chất có chứa nitơ có hoạt tính sinh học. Ở đây, những đóng góp chính của luận án là:

- $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$ ,  $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{DABCO})$ ,  $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$  và  $\text{Cu}(\text{BDC})$  đã được tổng hợp thành công bằng phương pháp nhiệt dung môi. Những Cu-MOF này đã được phân tích đặc trưng cấu trúc bằng các phương pháp hiện đại như PXRD, FT-IR, SEM, TEM, TGA, ICP-MS,  $\text{H}_2$ TPR và khả năng hấp phụ khí nitơ.
- Đây là lần đầu tiên sử dụng những vật liệu Cu-MOF này làm xúc tác dị thể cho các phản ứng sau: i) Vật liệu  $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$  được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ghép đôi trực tiếp C-C thông qua hoạt hóa nhóm C-H giữa các *N,N*-dimethylaniline và các alkyne đầu mạch (phản ứng 1); ii) Vật liệu  $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{DABCO})$  được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ghép đôi trực tiếp C-C thông qua hoạt hóa nhóm C-H giữa các *N*-methylaniline và các alkyne đầu mạch (phản ứng 2); iii) Vật liệu  $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$  được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ba tác chất là tetrahydroisoquinoline, các aldehyde và các alkyne (phản ứng 3); iv) Vật liệu  $\text{Cu}(\text{BDC})$  được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng đóng vòng giữa  $\alpha$ -hydroxyacetophenone và các dẫn xuất phenylenediamine (phản ứng 4).
- Vật liệu  $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$ ,  $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{DABCO})$ ,  $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$  và  $\text{Cu}(\text{BDC})$  thể hiện hoạt tính xúc tác cao cho các phản ứng ghép đôi C-C và C-N đã đề cập ở trên và điều kiện tối ưu của các phản ứng cũng đã được tìm ra.

- Những vật liệu Cu-MOF này có thể thu hồi và tái sử dụng nhiều lần mà không làm mất đi hoạt tính xúc tác. Cấu trúc của các Cu-MOF trước và sau khi sử dụng làm xúc tác không có sự thay đổi nhiều sau khi xác định bằng PXRD và FT-IR.
- Tất cả các sản phẩm chính của các phản ứng **1**, **2**, **3**, **4** đã được xác định bằng  $^1\text{H}$  NMR và  $^{13}\text{C}$  NMR. Bên cạnh đó, hiệu suất tinh chế của phản ứng cũng được tính toán.
- Điểm nổi bật nhất của luận án chính là phản ứng giữa các *f* *N*-methylaniline và các alkyne đầu mạch (phản ứng **2**). Theo hiểu biết của chúng tôi, phản ứng **2** chưa từng được công bố trên thế giới. Vì vậy, phản ứng này góp phần mở rộng con đường tổng hợp trực tiếp hợp chất propargylamine từ các amine bậc hai và các alkyne đầu mạch trong điều kiện không có sự hiện diện của aldehyde. Cơ chế của phản ứng này cũng được đề nghị.

Tập thể hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

GS. TS. Phan Thanh Sơn Nam

TS. Lê Thành Dũng

Đặng Huỳnh Giao