

THÔNG TIN LUẬN ÁN

TÊN LUẬN ÁN: **NGHIÊN CỨU SỬ DỤNG Cu-MOFs: $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$, $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{BPY})$, $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$ LÀM XÚC TÁC TRONG MỘT SỐ PHẢN ỨNG GHÉP ĐÔI C-C, C-N**

Chuyên ngành: **Kỹ thuật hóa học**

Mã số: **62520301**

Họ tên NCS: **Lê Thị Ngọc Hạnh**

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

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

Những đóng góp chính của luận án

Mục tiêu của luận án là sử dụng các vật liệu Cu-MOFs gồm $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$, $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$, $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{BPY})$ làm xúc tác cho các phản ứng ghép đôi trực tiếp C-C và C-N nhằm tổng hợp các hợp chất aryl dị vòng, ynamide, α -amino carbonyl. Các hợp chất này là các hợp chất trung gian quan trọng trong việc tổng hợp nhiều hợp chất có hoạt tính sinh học. Những đóng góp chính của luận án:

- Vật liệu $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$, $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$, $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{BPY})$ 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, AAS, ICP/AAS và khả năng hấp phụ khí nitrogen.
- Đây là lần đầu tiên sử dụng những vật liệu Cu-MOF này làm xúc tác dị thể cho các phản ứng sau: i) $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$ được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ghép đôi C-C giữa dị vòng và aryl halide; ii) $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{BPY})$ được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ghép đôi C-N giữa các amine có H linh động với alkyne đầu mạch; iii) $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$ được dùng làm xúc tác dị thể cho phản ứng ghép đôi C-N giữa α -carbonyl với amine bậc hai.
- Vật liệu $\text{Cu}_3(\text{BTC})_2$, $\text{Cu}_2(\text{BPDC})_2(\text{BPY})$, $\text{Cu}_2(\text{BDC})_2(\text{BPY})$ 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 hoạt tính xúc tác giảm không đáng kể. Cấu trúc của các Cu-MOF trước và sau khi sử dụng làm xúc tác không có sự thay đổi nhiều khi đo PXRD và FT-IR.

- Tất cả các sản phẩm chính của các phản ứng trên được xác định bằng ^1H NMR, ^{13}C NMR và xác định hiệu suất sản phẩm cô lập được.
- Đặc biệt, phản ứng giữa α -carbonyl với amine bậc hai chỉ qua một giai đoạn trong khi các quy trình truyền thống thì phản ứng phải qua nhiều giai đoạn và xúc tác không có khả năng thu hồi, tái sử dụng. Theo hiểu biết của chúng tôi thì trên thế giới chưa có công bố nào sử dụng chất xúc tác là dị thể trong phản ứng này

Tập thể hướng dẫn

Nghiên cứu sinh

GS. TS. Phan Thanh Sơn Nam

Lê Thị Ngọc Hạnh