

THÔNG TIN TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SỸ

- Tên đề tài: Application of Cu-MOF-74, $\text{Cu}_2(\text{OBA})_2(\text{BPY})$, MOF-235 as catalysts for carbon–heteroatom bond forming reactions.
- Chuyên ngành: Kỹ thuật Hóa học
- Mã chuyên ngành: 62520301
- Nghiên cứu sinh: TRẦN BỘI CHÂU
- Cán bộ hướng dẫn khoa học:
 1. GS.TS. Phan Thanh Sơn Nam
 2. PGS.TS Trương Vũ Thanh
- Tên cơ sở đào tạo: Trường Đại học Bách Khoa Thành phố Hồ Chí Minh, Đại học Quốc Gia Thành phố Hồ Chí Minh

NỘI DUNG***Mục tiêu tổng quát của luận án:***

Vật liệu khung cơ kim sở hữu nhiều đặc tính quan trọng để có thể ứng dụng làm xúc tác trong tổng hợp hữu cơ như diện tích bề mặt riêng lớn, kích thước, hình dạng và tính chất lỗ xốp có thể điều chỉnh được, cấu trúc có độ tinh thể cao. Luận án đã sử dụng Cu-MOF-74, $\text{Cu}_2(\text{OBA})_2(\text{BPY})$ và MOF-235 làm xúc tác cho tổng hợp các dẫn xuất của benzazole, quinazoline, 4*H*-3,1-benzoxazine và aryl ether. Các hợp chất này được biết đến như những hợp chất có hoạt tính sinh học quan trọng trong lĩnh vực dược phẩm, hóa chất nông nghiệp. Tuy nhiên, việc nghiên cứu sử dụng các vật liệu khung cơ kim làm xúc tác cho phản ứng tổng hợp các hợp chất này vẫn còn rất hạn chế.

Các đóng góp chính của luận án

- Lần đầu tiên các phản ứng chuyển hóa hữu cơ sau được báo cáo. (i) Vật liệu MOF-235 được ứng dụng làm xúc tác dị thể cho phản ứng oxy hóa cộng vòng giữa alcohols và 2-aminophenols/2-aminothiophenols để tổng hợp 2-arylbenzoxazoles/ 2-arylbenzothiazoles (ii) Phản ứng tổng hợp các dẫn xuất của 4*H*-3,1-benzoxazine, quinazoline được thực hiện qua 2 bước: đầu tiên là phản ứng ngưng tụ của 2-

aminobenzylamines/2-aminobenzyl alcohols và aldehydes; sau đó $\text{Cu}_2(\text{OBA})_2(\text{BPY})$, TEMPO được thêm vào hỗn hợp để thực hiện phản ứng oxy dehydrogen hóa liên kết C–N. (iii) Vật liệu Cu-MOF-74 được sử dụng làm xúc tác dị thể cho phản ứng alkoxy/phenoxyl hóa *N*-(quinolin-8-yl)benzamides với alcohols/phenols.

- Ảnh hưởng của các nhóm thế khác nhau đến hiệu suất phản ứng cũng được khảo sát.
- Hoạt tính xúc tác của của các vật liệu MOF-235, $\text{Cu}_2(\text{OBA})_2(\text{BPY})$ và Cu-MOF-74 hầu như không thay đổi sau ít nhất 5 lần tái sử dụng. Cấu trúc của các vật liệu trước và sau khi sử dụng làm xúc tác không có sự thay đổi nhiều khi đo P-XRD.
- **Điểm nổi bật của luận án:**
 - + $\text{Cu}_2(\text{OBA})_2(\text{BPY})$ được sử dụng làm xúc tác rắn cho phản ứng tổng hợp các dẫn xuất của 4*H*-3,1-benzoxazine và quinazoline trong điều kiện êm dịu. Kết quả cho thấy, các nhóm thế như chloro, bromo, fluoro, nitro, methoxy, các dị vòng, olefin, alkyne có trên tác chất không bị ảnh hưởng bởi điều kiện phản ứng. Sự kết hợp của xúc tác rắn và dung môi có nguồn gốc sinh học trong phản ứng tổng hợp các dị vòng chứa 2 dị tố *N,N*-; *N,O*- vẫn chưa được báo cáo trong các tài liệu trước đây.
 - + Mặc dù Cu-MOF-74 đã được sử dụng làm xúc tác trong nhiều phản ứng hình thành liên kết carbon–dị tố, nhưng đây là lần đầu tiên phản ứng ghép đôi dehydrogen hóa giữa alcohols/phenols với vòng arenes tạo liên kết C–O được thực hiện bởi xúc tác dị thể. Bằng phương pháp alkoxy hóa trực tiếp liên kết $\text{C}_{sp^2}\text{–H}$ kết hợp với việc sử dụng xúc tác dị thể đã tạo ra một hướng mới để tổng hợp các hợp chất có hoạt tính sinh học như ethenzamide, được biết đến như một loại thuốc chống viêm hoặc 2-(2-hydroxyethoxy)benzoic acid là loại thuốc ức chế insulin. Quy trình tổng hợp này mang tính hiệu quả, đặc biệt trong công nghệ dược phẩm, do việc tránh nhiễm các kim loại tạp trong sản phẩm cuối là vấn đề cần thiết.

Cán bộ hướng dẫn khoa học

Nghiên cứu sinh

GS.TS. Phan Thanh Sơn Nam

PGS.TS Trương Vũ Thanh

Trần Bội Châu