

OTKA. ny. szám: INT 67404

Témavezető: Dr. Szatmári István

Vezető kutatók: Dr. Fülöp Ferenc és Dr. Erich Kleinpeter

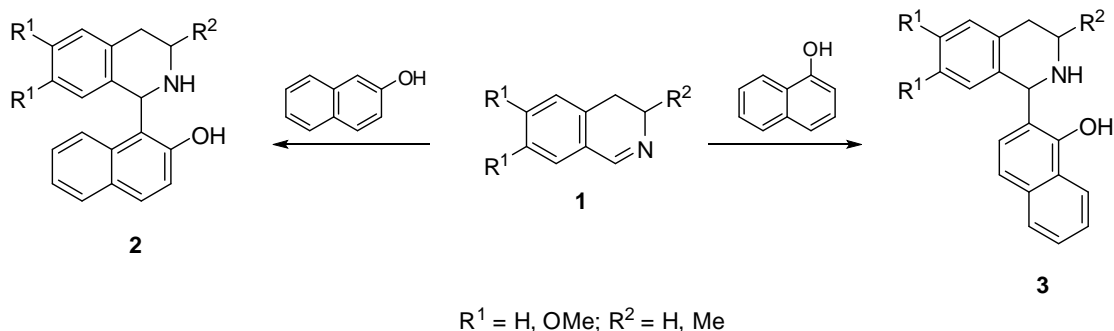
## **Szakmai zárójelentés**

A Betti reakció egy olyan egyszerű módosított háromkomponensű Mannich reakció, amelynek segítségével aminonaftolok (1- $\alpha$ -aminobenzil-2-naftol = Betti bázis) állíthatók elő jó hozammal (Szatmári, I.; Fülöp, F. *Curr. Org. Synth.* **2004**, *1*, 155-165.). Korábbi kutatásaink során a gyűrű-lánc tautóméria jelenségének vizsgálata érdekében különböző szubsztituált 1- $\alpha$ -aminobenzil-2-naftolokat és aldehides gyűrűzárásukkal 1,3-diaril illetve 3-alkil,1-aril naftoxazinszármazékokat állítottunk elő (Szatmári, I.; Martinek, T. A.; Lázár, L.; Koch, A.; Kleinpeter, E.; Neuvonen, K.; Fülöp, F. *J. Org. Chem.* **2004**, *69*, 3645-3653.). Vizsgálatainkat kiterjesztettük a 2- $\alpha$ -aminobenzil-1-naftol, valamint 2,4-diaril naftoxazinok szintézisére (Szatmári, I.; Martinek, T. A.; Lázár, L.; Fülöp, F. *Eur. J. Org. Chem.* **2004**, 2231-2238.), illetve néhány gyűrűzárási reakción keresztül tanulmányoztuk az  $\alpha$ -aminobenzil-naftol-származékok reaktivitását (Szatmári, I.; Hetényi, A.; Lázár, L.; Fülöp, F. *J. Heterocyclic Chem.* **2004**, *41*, 367-373.), valamint elvégeztük az új policiklusos vegyületek konformációanalízisét (Heydenreich, M.; Koch, A.; Klod, S.; Szatmári, I.; Fülöp, F.; Kleinpeter, E. *Tetrahedron*, **2006**, *62*, 11081-11089).

A nemzetközi együttműködésben (Potsdami Egyetem, Szerkezetanalitika Tanszék, vezető kutató: Prof. Dr. Erich Kleinpeter) végzett posztdoktori kiegészítő kutatómunka keretében, új, izokinolinnal kondenzált naftoxazin-származékok szintézisét, valamint konformációanalízisét tűztük ki célul.

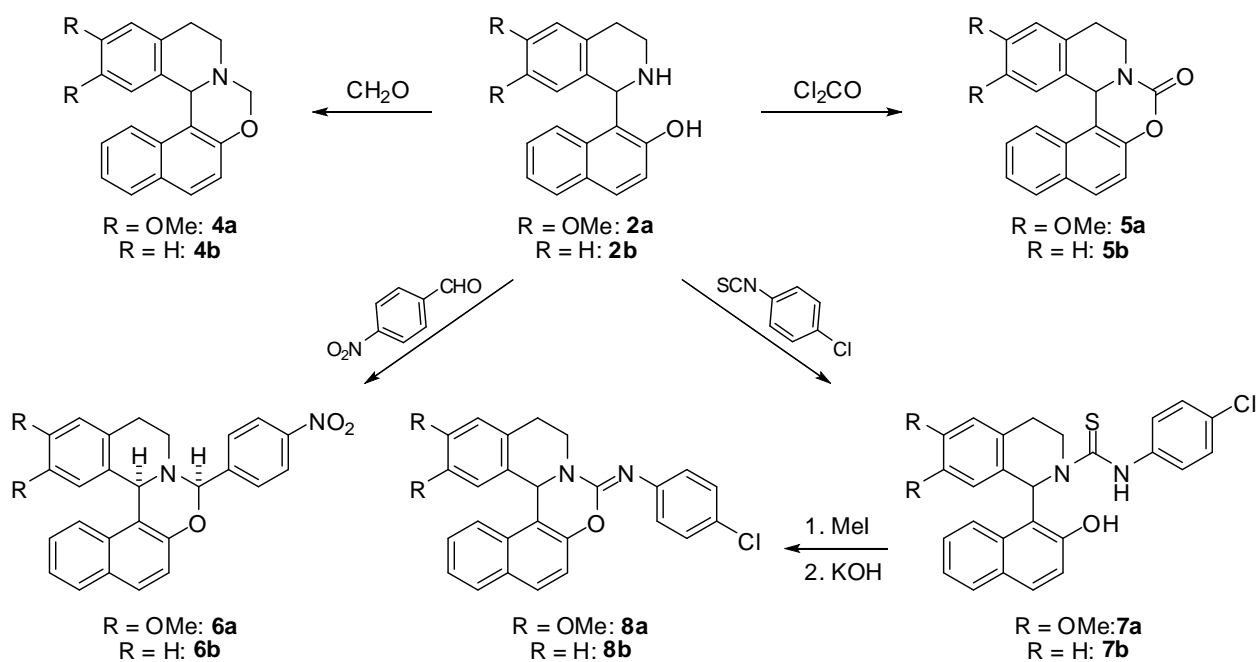
### **Eredmények**

A módosított háromkomponensű Mannich reakcióban az ammóniából és aldehidből *in situ* képződött iminre addicionál a 2-naftol, mint C-H-sav. Ilyen megfontolásban iminkomponensként különböző szubsztituált dihidroizokinolin-származékokat (1. ábra, **1**) alkalmaztunk, mint gyűrűs imineket, melynek eredményeképpen a 1-(hidroxinaftil)-izokinolin származékokat (**2**) állítottunk elő. A reakciót kiterjesztve az 1-naftolra a **3**-as 1-(1-hidroxi-2-naftil)-izokinolin származékokat szintetizáltuk. (Szatmári, I.; Lázár, L.; Fülöp, F. *Tetrahedron Lett.* **2006**, *47*, 3881-3883.)



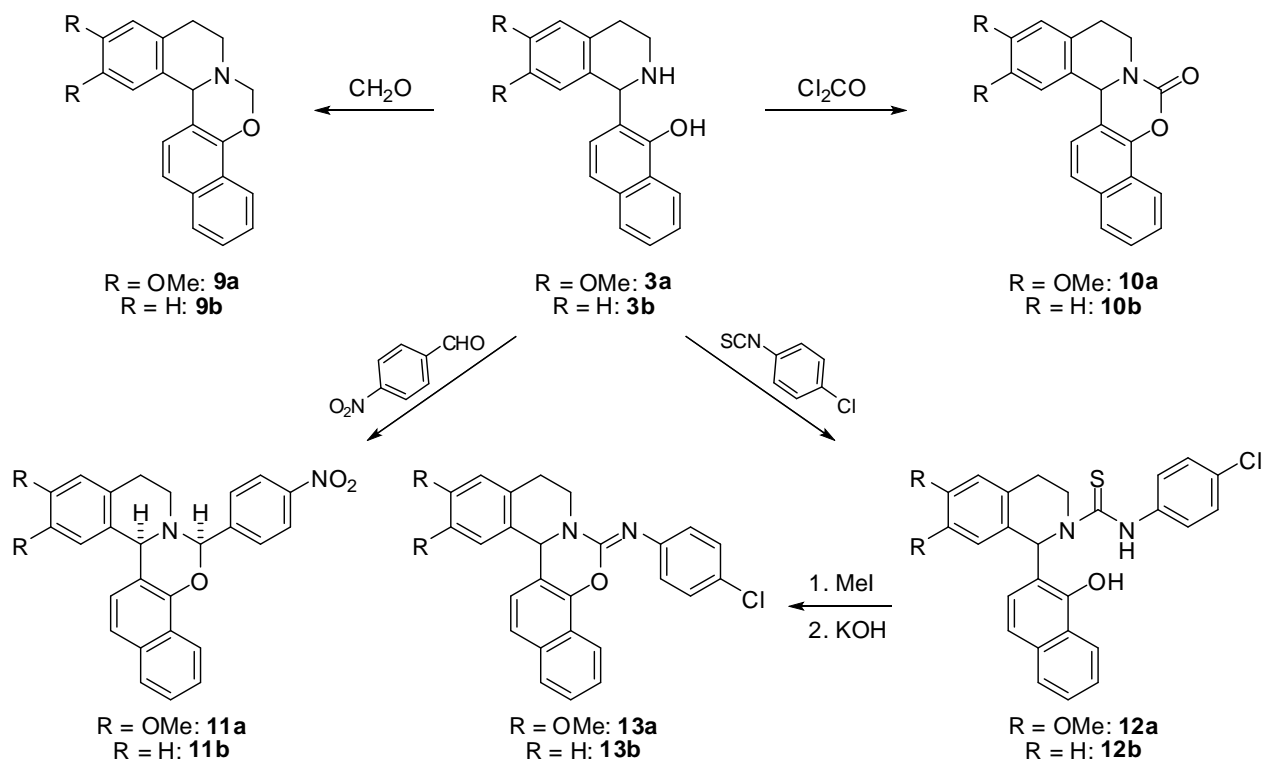
**1. ábra**

Az 1-(2-hidroxi-1-naftil)-izokinolin származékok (2), illetve az 1-(1-hidroxi-2-naftil)-izokinolin származékok (3) formaldehides, foszfénés, *p*-nitro-benzaldehides valamint *p*-klór-fenilizotiocianátos gyűrűzárásával különböző 8-szubsztituált naft[1,2-*e*][1,3]oxazino[4,3-*a*][1,3]izokinolinok (4-8, 2. ábra) illetve 8-szubsztituált naft[2,1-*e*][1,3]oxazino[4,3-*a*][1,3]izokinolinokat (9-13, 3. ábra) állítottunk elő.



**2. ábra**

2D-NMR mérésekkel megállapítottuk, hogy mind a két, a naftil gyűrű annihilációjában különböző, gyűrűrendszer esetében a telített oxazin gyűrű „csavart kád” konformációjú, melyet *ab initio* globális minimum-konformer kereséssel, HF/6-31G\* bázis alkalmazásával támasztottunk alá. (Heydenreich, M.; Koch, A.; Szatmári, I.; Fülöp, F.; Kleinpeter, E. *Eur. J. Org. Chem.* közlésre előkészítve).



**3. ábra**

Szeged, 2008. február 21.

Dr. Szatmári István  
tudományos munkatárs