

Egy új szerves molekula előállítása és jellemzése

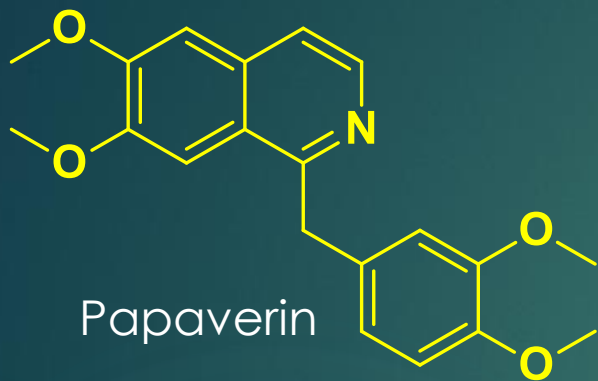
ELŐADJA: SZABÓ RENÁTA ÉS OROSZ MÁTÉ

Témavezetőink: Ábrányi-Balogh Péter, Sóvári Dénes



Izokinolin származékok - miért?

2

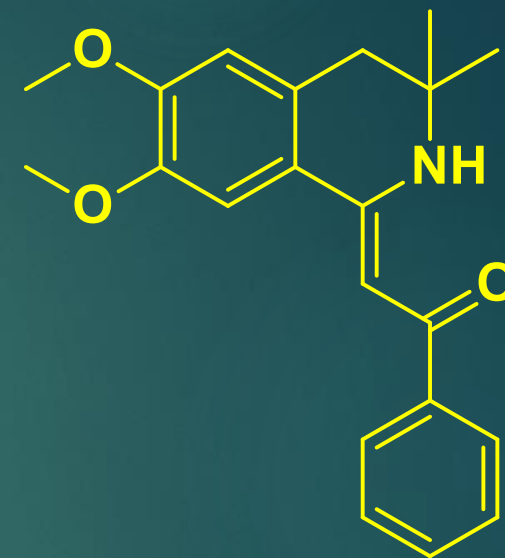


Papaverin

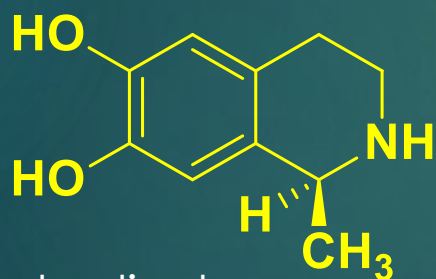
- **Simaizom-görcsoldó hatás**



Mákgubó



US20030333591, 2002



(S)-szalszolinol

- **Antidepresszáns**



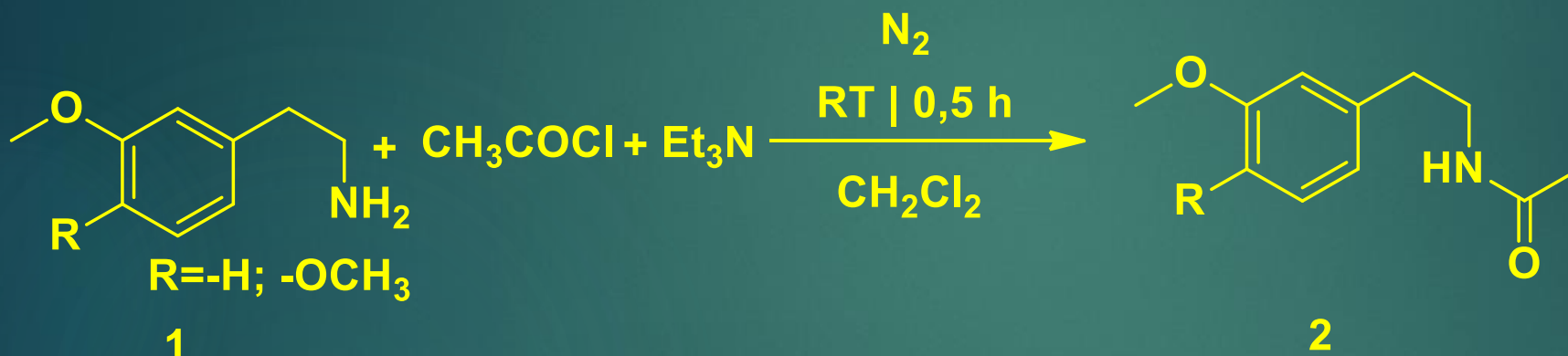
Kakaóbab

- **CB2 receptorra hat**
- **Autoimmun betegségek**
- **Reumás ízületi gyulladás**
- **Karcinómás fájdalom**

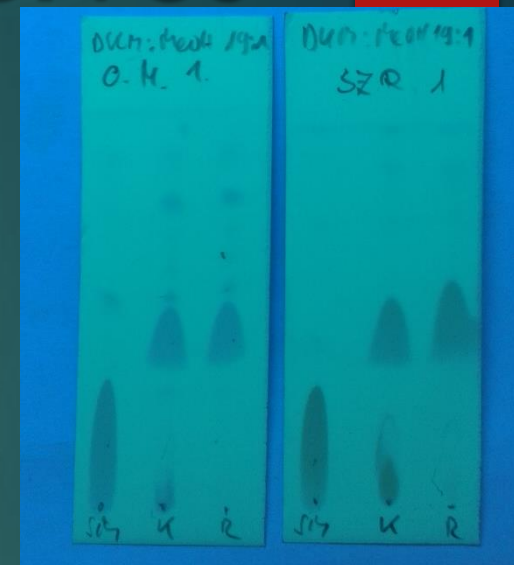
Hogyan állítottuk elő az új szerves molekulát?

3

► I. lépés: N-acilezés



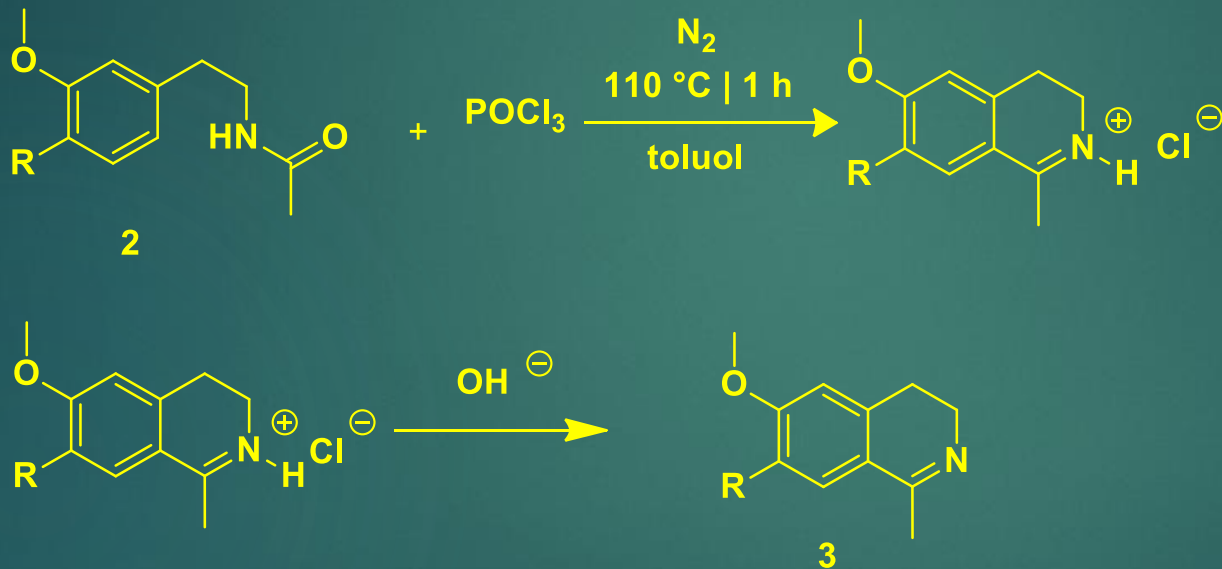
- Extrahálás vízzel, 1 M HCl-oldattal, 5%-os Na_2CO_3 -tal, majd ismét vízzel
- Szárítás MgSO_4 -tal
- Szűrés
- Bepárlás
- Vékonyréteg-kromatográfiával ellenőrizzük a reakció végbemenetelét
- Termelés: R = -H : 94% , R = -OCH₃ : 81%



Hogyan állítottuk elő az új szerves molekulát?

4

► II. lépés: Gyűrűzárás foszforoxikloriddal



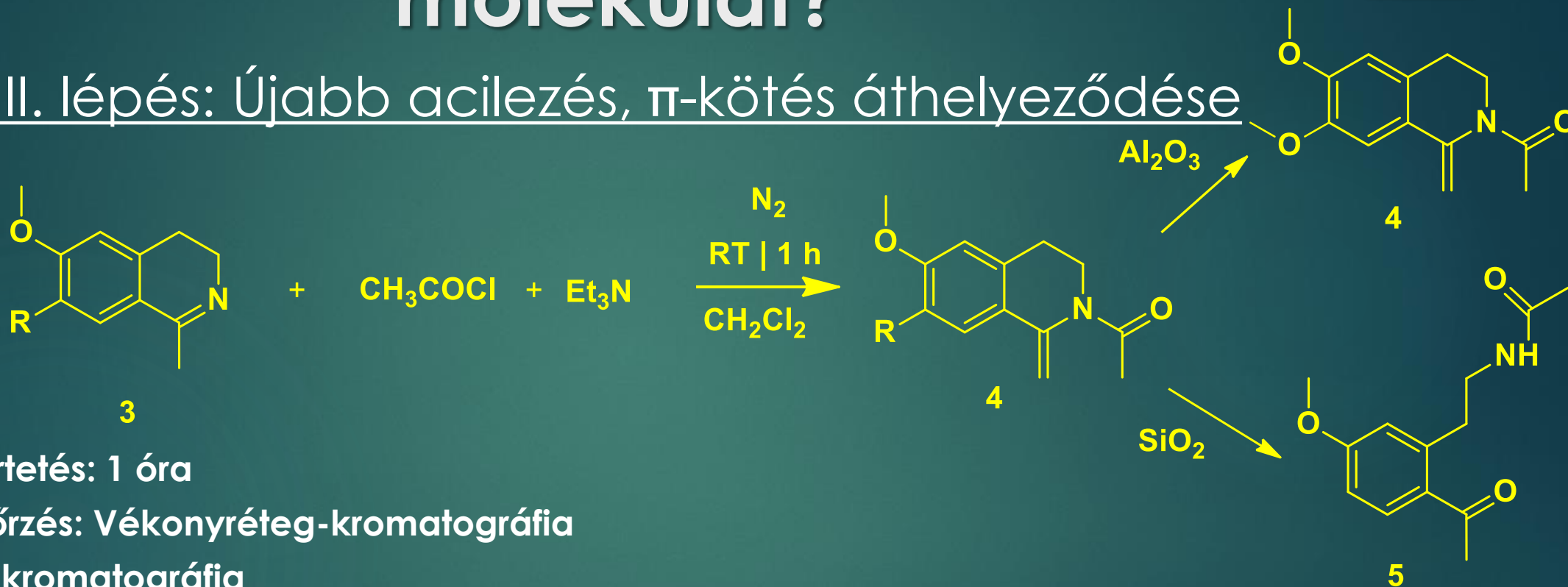
- Bepárlás
- Maradék szerves oldószer eltávolítása dietil-éterrel, közben szűrés
- Hidroklorid-só bontása tömény nátrium-karbonát oldattal
- Extrahálás
- Szárítás
- Termelés: $\text{R} = -\text{H}$: 97%, $\text{R} = -\text{OCH}_3$: 85%



Hogyan állítottuk elő az új szerves molekulát?

5

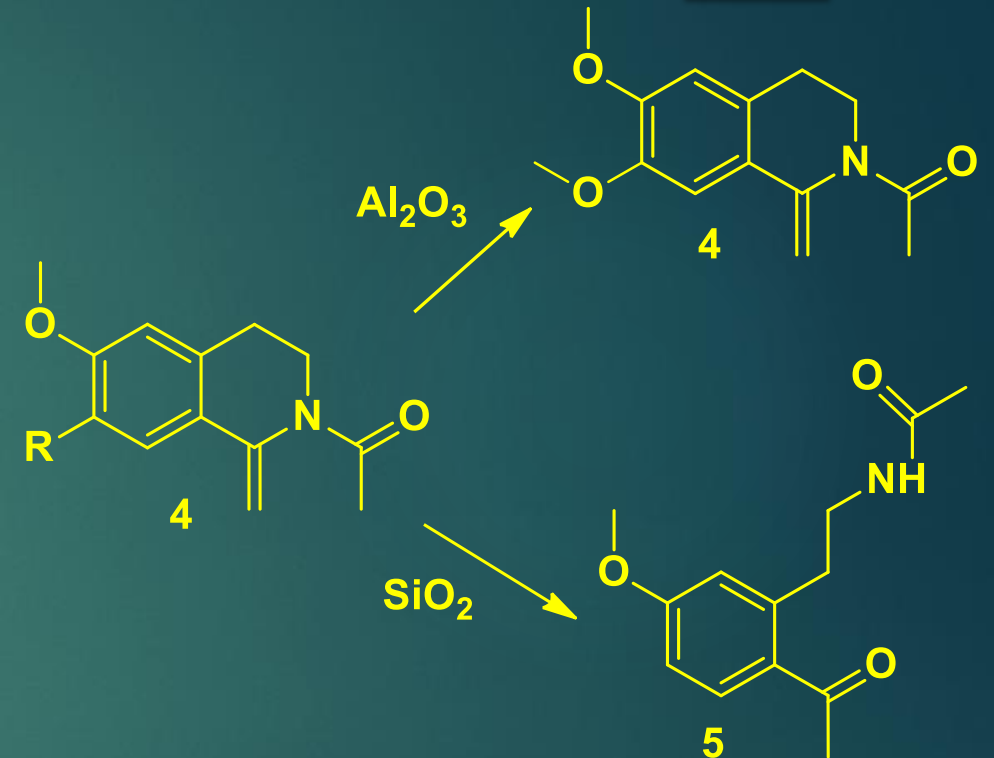
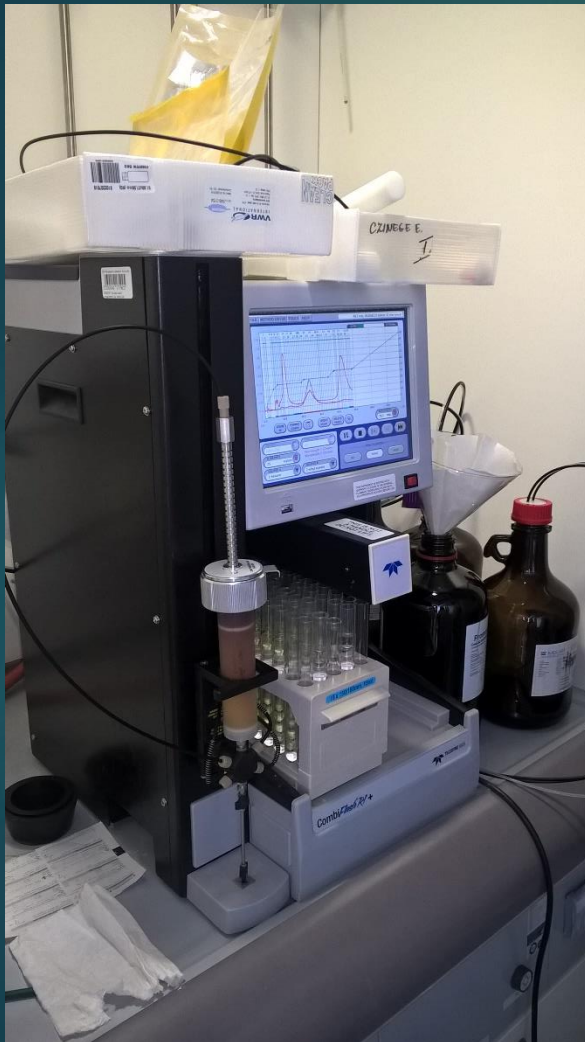
► III. lépés: Újabb acilezés, π -kötés áthelyeződése



- Kevertetés: 1 óra
- Ellenőrzés: Vékonyréteg-kromatográfia
- Flash kromatográfia
- Termelés: $\text{R} = -\text{OCH}_3$: 82%
- 5. vegyület termelése: 80%

Hogyan állítottuk elő az új szerves molekulát?

6

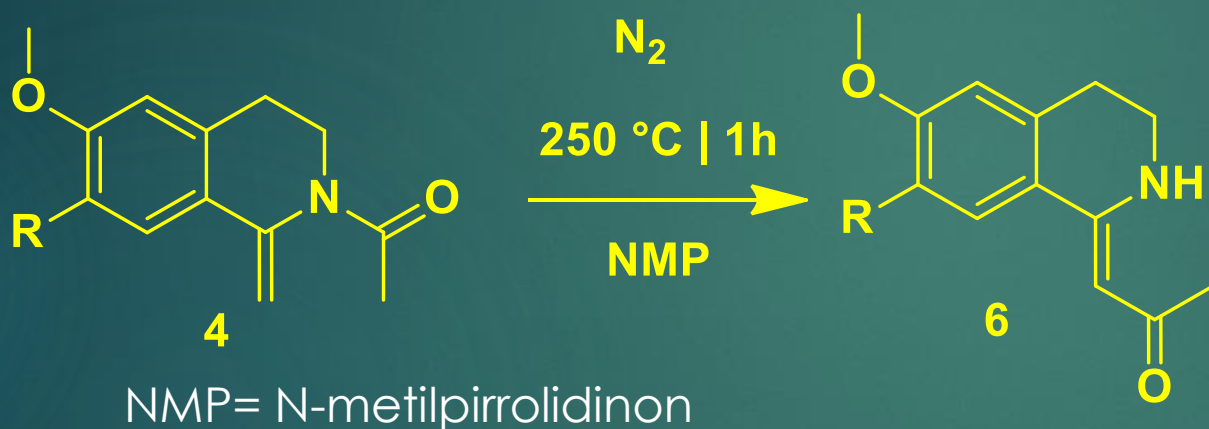


- Kevertetés 1 órán keresztül
- Flash kromatográfia
- Vékonyréteg-kromatográfiával ellenőrizzük a reakció végbemenetelét
- Termelés: R= -OCH₃ : 82%
- 5. vegyület termelése: 80%

Hogyan állítottuk elő az új szerves molekulát?

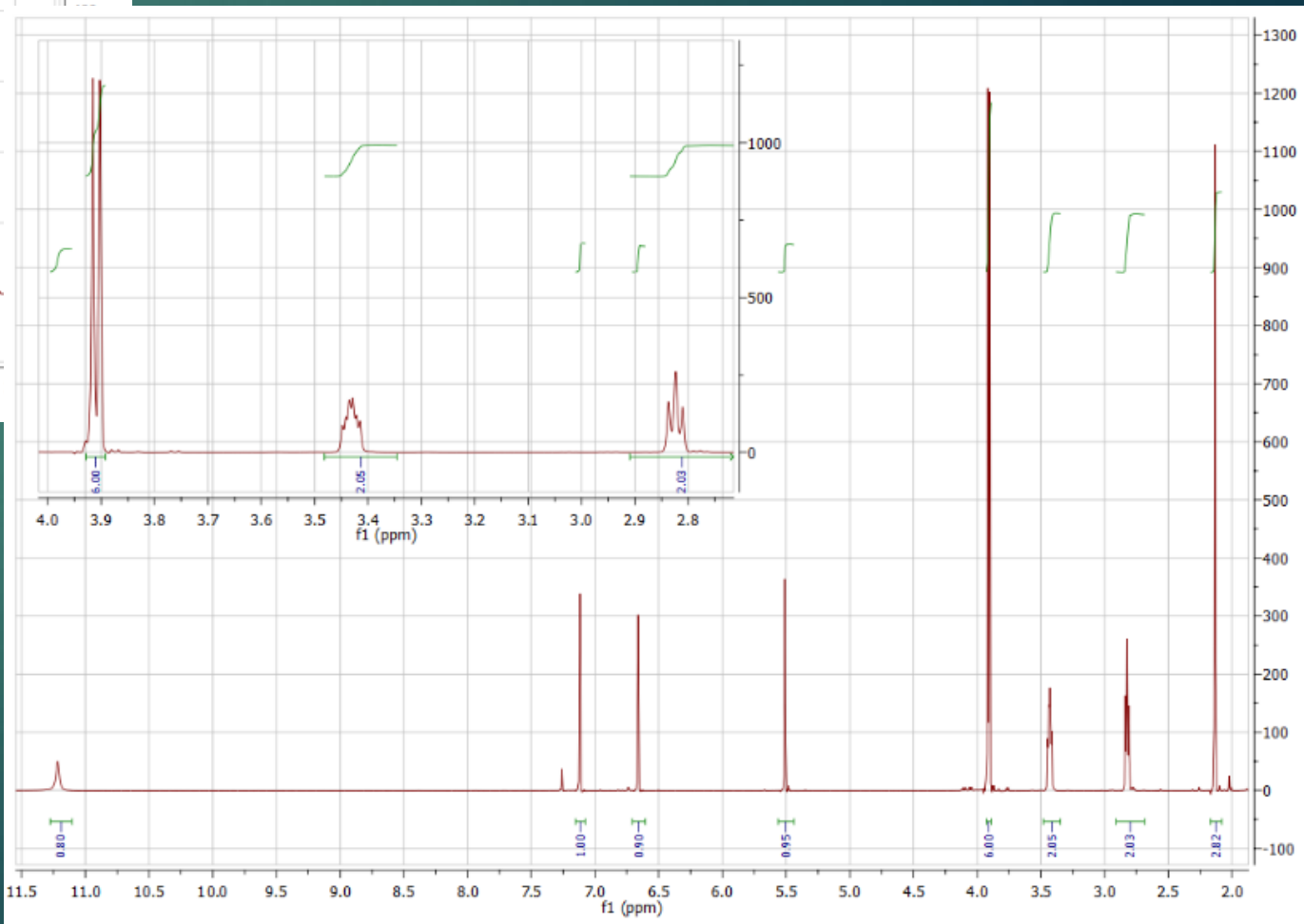
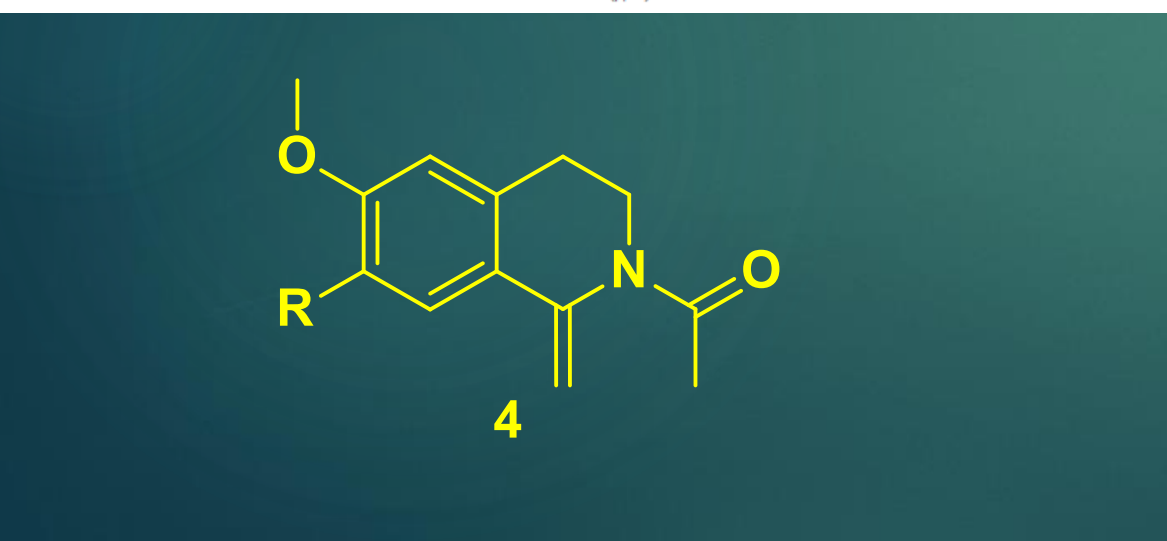
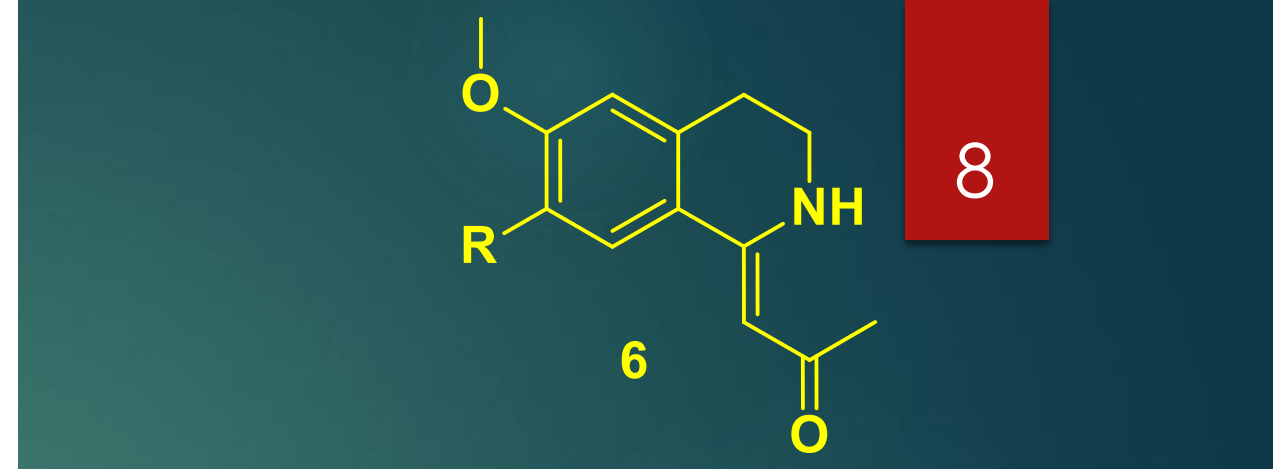
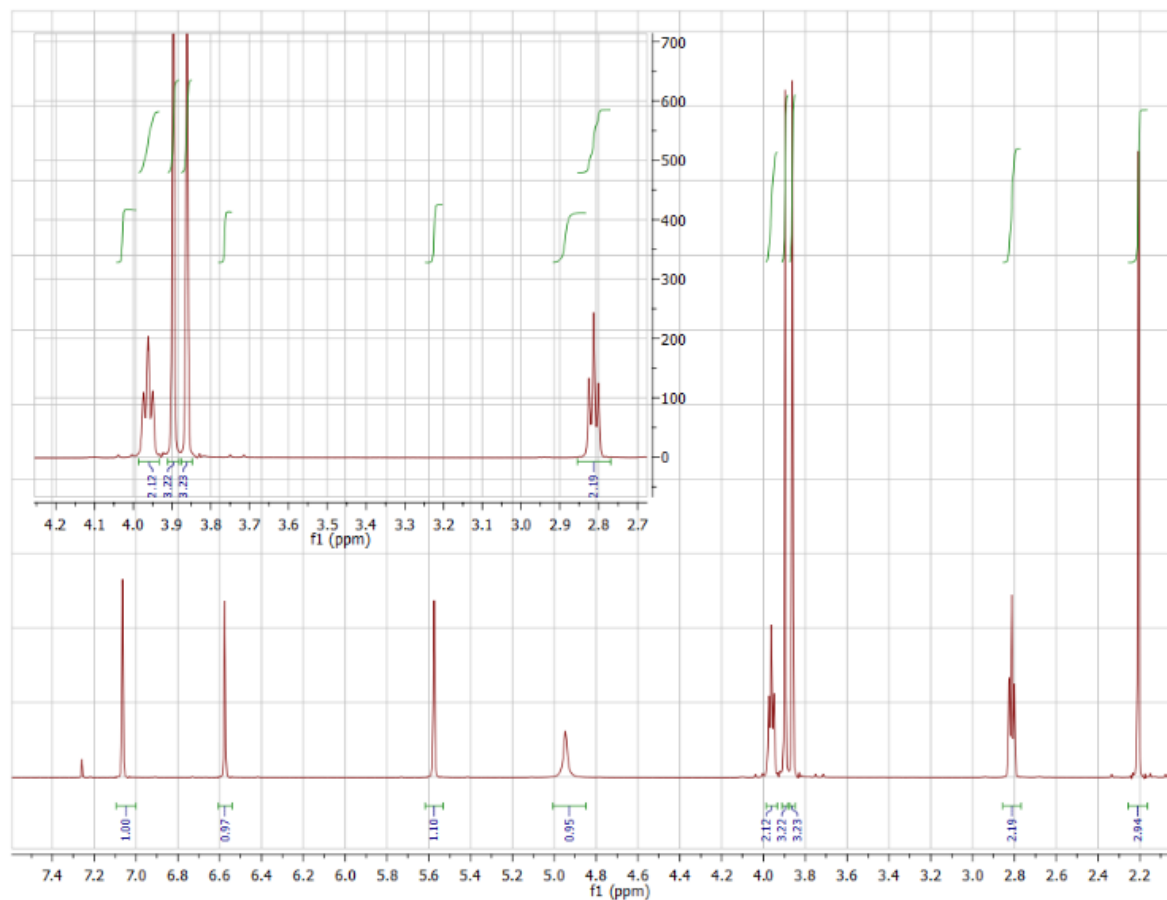
7

► IV. lépés: Izomerizáció



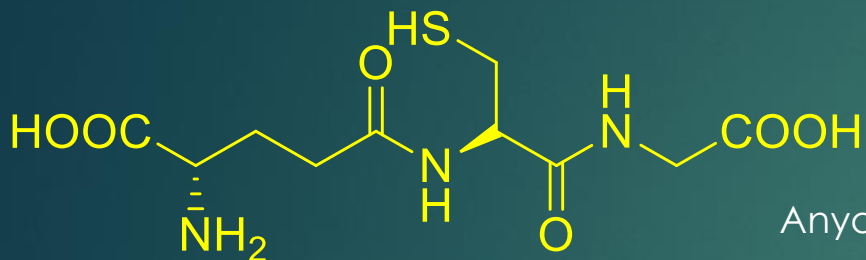
- 250 °C-on melegítés olajfürdő fölött bombacsőben
- Flash kromatográfia
- Termelés: R= -H : 18%, R= -OCH₃ : 56%



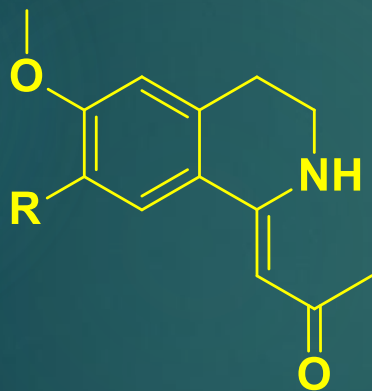


Biológiai teszt az előállított vegyületeinkkel

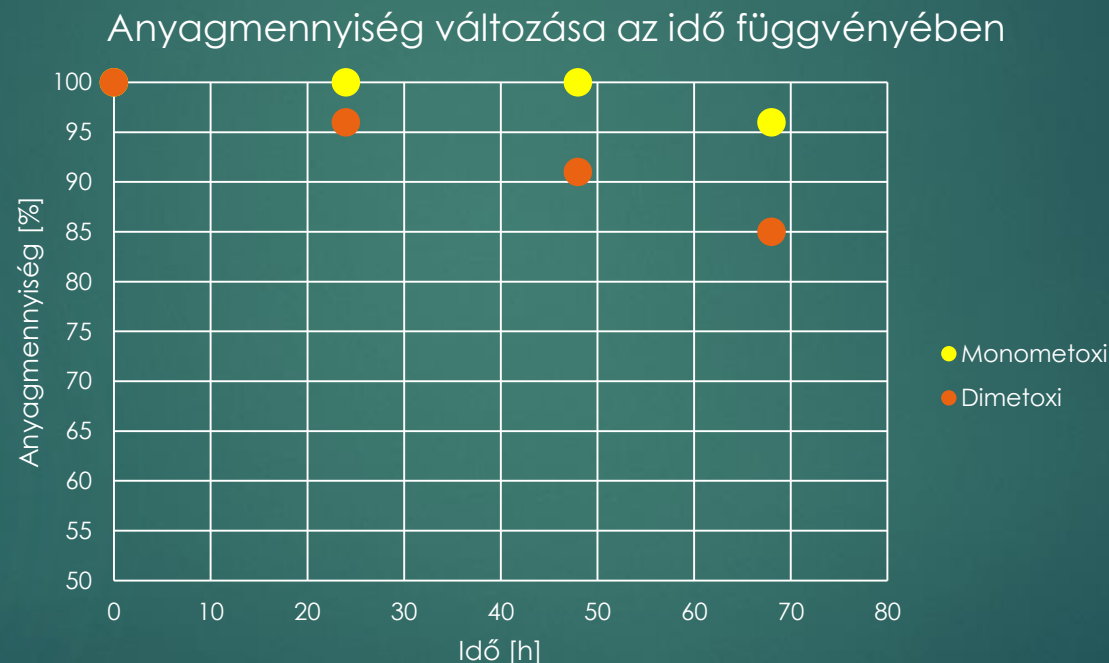
9



GSH, cisztein részlettel



6-es vegyületünk



GSH=tesztvegyület



A kannabinoid receptor tartalmaz ciszteint
A cisztein kötődik-e a 4-es vegyületünkhöz?

Kutatómunkánk összefoglalása

10

- ▶ 4 lépéses szintézis: izokinolin-származékokat állítottunk elő
- ▶ Fontos tanulság: a savas és bázikus közeg hatása a termékekre
- ▶ Biológiai teszt: a 4. vegyületünk 70 óra alatt alig szívódott fel, gyógyszer hatóanyagaként alkalmatlan

Köszönjük!



mta ttk

