



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR
OLÁH GYÖRGY DOKTORI ISKOLA

1-Arilpirrol-származékok előállítása és alkalmazása regio- és sztereoszelektív reakciókban

Tézisfüzet

Szerző:

Bodnárné Deák Szilvia

Témavezető:

Dr. Faigl Ferenc

Konzulens:

Dr. Mátravölgyi Béla

Szerves Kémia és Technológia Tanszék

2017

1. Bevezetés

A pirrol-származékok széles körben ismertek, mint biológiailag aktív anyagok.¹ A természetben is megtalálhatók pirrolgyűrűt tartalmazó vegyületek, melyek figyelemreméltó biológiai és farmakológiai tulajdonságokkal rendelkeznek.² Ennek köszönhetően igen széleskörű a pirrol-származékok szintézisének szakirodalma. A közleményekben számos hatásterületen több biológiailag aktív vegyületet ismertetnek, ezek között találhatók rák- és vírusellenes, véralvadásgátló, antimikrobiális és gyulladáscsökkentő hatásúak is. A pirrolvegyületek nemcsak gyógyszerkémiailag jelentőséggel bírnak, hanem növényvédőszer-ipari területen is kiemelt kutatási irányt képviselnek a különböző *N*-heterociklusok, mivel több vegyület rovarölő hatású.

A BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékén működő kutatócsoportban az elmúlt években jelentős sikereket értek el az 1-arilpirrolok kémiájának kutatásában. Többek között hatékony szintézismódszereket dolgoztak ki a gyűrűk regio szelektív funkcionalizálására metallálási reakciókkal.³ Az így keletkező vegyületek között számos axiális kiralitású, mivel az egyszeres C-N kötés körüli rotáció gátolt a bevitt nagy térkitöltésű csoportok miatt. Az atropizomériát mutató vegyületek közül több származékot enantiomertiszta formában is előállítottak diasztereomer sóképzéses rezolválással,⁴ valamint ezekből kiindulva bifunkciós katalizátorligandumokat és organokatalizátorokat szintetizáltak, amelyekkel enantioszelektív átalakítások hatékonyan megvalósíthatók.⁵

Doktori kutatómunkám egyik célja a csoportban korábban előállított aminoalkoholok regioizomer származékainak szintézise volt, melyeket benzaldehid és dietil-cink enantioszelektív addíciójában terveztük tesztelni katalizátorligandumként. A funkciók alapvázhoz való kapcsolódásának felcserélésével – ez által a ligandum elektronikus és szterikus tulajdonságainak módosításával – vizsgálni kívántuk a modellreakcióban kapható aszimmetrikus hatás változását. A kapott eredmények és megszerzett ismeretek alapján a minél jobb szelektivitás elérése érdekében a ligandum szerkezetének optimalizálására is törekedtünk.

Hátrányt jelenthet, hogy az új 1-arilpirrol alapvázú ligandumok, illetve organokatalizátorok csak soklépéses preparatív munka után tesztelhetők az adott

¹ Bhardwaj, V.; Gumber, D.; Abbot, V.; Dhiman, S.; Sharma, P. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 15233.

² Bellina, F.; Rossi, R. *Tetrahedron* **2006**, *62*, 7213.

³ Faigl, F.; Vas Feldhoffer, B.; Thurner, A. *Synth. Commun.* **2006**, *36*, 2841.

⁴ Faigl, F.; Mátravölgyi, B.; Holczbauer, T.; Czugler, M.; Madarász, J. *Tetrahedron: Asymmetry* **2011**, *22*, 1879

⁵ Faigl, F.; Mátravölgyi, B.; Szöllősy, Á.; Czugler, M.; Tárkányi, G.; Vékey, K.; Kubinyi, M. *Chirality* **2012**, *24*, 532.; Faigl, F.; Erdélyi, Z.; Holczbauer, T.; Mátravölgyi, B. *Arkivoc* **2016**, *3*, 242.

aszimmetrikus modellreakciókban. A reakcióutak lerövidítésével szintézisük olcsóbbá válhat, mely a vegyületek szélesebb körű alkalmazhatóságának is lehetőséget adhat.

Ebből kiindulva munkám másik célja az *N*-szubsztituált pirrolok funkcionálálásának vizsgálata fémorganikus úton, azon belül is bróm/lítium cserén keresztüli reakcióval. Brómtartalmú heteroaromás vegyületekből fémorganikus reakcióval változatos funkciókat alakíthatunk ki, többek között az aminoalkohol típusú katalizátorligandumoknál alapvető fontosságú difenilkarbinol molekulárszt. Azt tapasztaltuk, hogy a lítiumorganikus pirrol és benzofenon reakciójából keletkező származék nem stabil, könnyen egy konjugált rendszert tartalmazó vegyületté, az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-onná alakul. Vizsgálni szándékoztuk az átalakulás körülményeit és a reakció kiterjeszhetőségét többféle *N*-szubsztituált pirrolra és különböző karbonilcsoportot tartalmazó elektrofilekre, továbbá célunk volt az endociklusos kettős kötés szelektív funkcionálálásának megvalósítása is. Az α,β -telítetlen γ -laktám struktúra előállításán kívül annak felhasználási területe is felkeltette az érdeklődésünket, például olyan szerkezeti egység előállítása, amely biológiai hatású vegyületekben is megtalálható.

2. Irodalmi háttér

2.1. Aminoalkoholok katalizálta enantioszelektív reakciók

Az aminosavakat nem csak királis építőelemekként használják a szintézisekben, hanem királis segédanyagként vagy királis kiinduló anyagként is. Az aminosavakból egyszerű redukcióval származtatható aminoalkoholok, az egyik leggyakoribb királis ligandumcsoport vagy ligandum prekursor család az aszimmetrikus katalízisekben. Oguni és Omi már több mint 30 évvel ezelőtt publikálta a benzaldehid (**27**) és dietil-cink aszimmetrikus reakcióját katalitikus mennyiségű királis aminoalkohol jelenlétében, melyeket természetes α -aminosavakból előállítottak elő (1. ábra).⁶ Az (*S*)-leucinol (**29**) alkalmazása során mérsékelt enantioszelektivitással (49% *ee*) jutottak az (*R*)-1-fenilpropán-1-olhoz (**28**). Ezt követően több kutatócsoport is tanulmányozta az addíciós reakciót különböző aminoalkoholokkal.⁷

⁶ Oguni, N.; Omi, T. *Tetrahedron Lett.* **1984**, 25, 2823.

⁷ Noyori, R.; Kitamura, M. *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1991**, 30, 49.

röntgendiffrakciós módszereket alkalmaztunk. Az elméleti számításokat Dr. Ábrányi-Balogh Péter és Dr. Mucsi Zoltán végezte, melyekhez Gaussian 09 programcsomagot használtak, a H, C, N, O és F atomokra B3LYP-6-31g(d,p) bázist, a Zn atomokra pedig B3LYP-SDD-MDF10 bázist alkalmazva. Az aszimmetrikus modellreakció és az aktív katalizátor molekula esetén a rotációs, illetve kötési energiákra vonatkozó számításokban figyelembe vették a hexán oldószerhatását. Továbbá az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on vegyület (**76a**) keletkezésének mechanizmusának számítása során a reakcióközeget implicit-explicit oldószermodellel vették figyelembe. Implicit oldószermodellként a PCM (Polarizable Continuum Model, $\epsilon=8,31$, DKM) módszert alkalmazták.

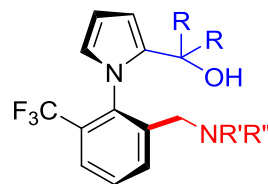
4. Eredmények

4.1. Enantiomertiszta, atropizomer aminoalkoholok szintézise és alkalmazása

Doktori kutatómunkám során előállítottunk 13 új 1-fenilpirrol alapvázú aminoalkoholt, melyek közül a *tercier* aminocsoportot tartalmazókat benzaldehyd és dietil-cink enantioszelektív addíciós reakciójában alkalmaztuk katalizátorligandumként. A ligandumoknak mind az amin-, mind az alkoholrészét módosítottuk, és vizsgáltuk a szerkezet finomhangolásának hatását a modellreakció enantioszelektivitására. A reakció optimális körülményeinek megtalálása érdekében részletesen tanulmányoztuk a hőmérséklet, a reakcióidő, valamint a ligandum/szubsztrát arány hatását.

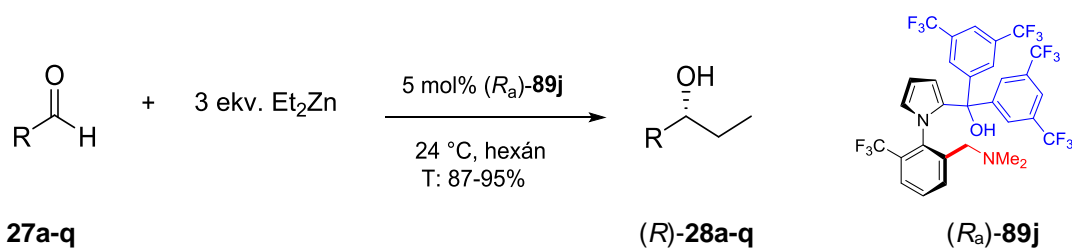
A ligandumon lévő funkciós csoportok optimalizálását először az aminocsoport módosításával kezdtük el. Rövid, illetve hosszabb alkiláncot tartalmazó aminocsoport mellett a szterikusan kisebb gyűrűs pirrolidinrészt is kialakítottuk. Benzaldehyd és dietil-cink reakciójában ekkor a legjobb szelektivitást (82% *ee*) az (*R*_a)-**89a** ligandummal értük el. Az difenilkarbinol alkoholrész változtatása során *primer* hidroxilcsoportú ((*R*_a)-**85a,b**), valamint elektronszívó-csoporttal (trifluormetil) szubsztituált difenilkarbinol molekularészű származékokat ((*R*_a)-**89g-k**) is előállítottunk. Amikor az (*R*_a)-**89a,d** ligandumok hidroximetil-csoportjának savasságát növeltük az elektronszívó trifluormetilcsoport(k) bevitelével a fenilcsoportokra, akkor az új ligandumokkal ((*R*_a)-**89g,h,j,k**) jobb szelektivitásokat (86–94% *ee*) értünk el. A benzaldehyd szubsztrát esetén a leghatékonyabb ligandumnak az (*R*_a)-**89j** (94% *ee*, termelés: 92%) bizonyult.

Aminoalkohol	NR'R''	R
(<i>R</i> _a)- 85a	NMe ₂	H
(<i>R</i> _a)- 85b	morfolin	H
(<i>R</i> _a)- 89a	NMe ₂	Ph
(<i>R</i> _a)- 89b	NEt ₂	Ph
(<i>R</i> _a)- 89c	NBu ₂	Ph
(<i>R</i> _a)- 89d	pirrolidin	Ph
(<i>R</i> _a)- 89e	NHBn	Ph
(<i>R</i> _a)- 89f	NH ^{<i>i</i>} Pr	Ph
(<i>R</i> _a)- 89g	NMe ₂	3-CF ₃ -C ₆ H ₄
(<i>R</i> _a)- 89h	pirrolidin	3-CF ₃ -C ₆ H ₄
(<i>R</i> _a)- 89i	morfolin	3-CF ₃ -C ₆ H ₄
(<i>R</i> _a)- 89j	NMe ₂	3,5-(CF ₃) ₂ -C ₆ H ₃
(<i>R</i> _a)- 89k	pirrolidin	3,5-(CF ₃) ₂ -C ₆ H ₃



4. ábra Az előállított aminoalkohol vegyületek

Az (*R*_a)-**89j** alkalmazhatóságának feltérképezése érdekében számos szubsztituált aromás aldehiddel és fahéjaldehiddel is végeztünk további tesztreakciókat (5. ábra). A legtöbb esetben kiváló enantiomerfeleslegű (91–96%) *szekunder* alkoholokat ((*R*)-**28a-q**) állítottunk elő, melyek felhasználhatók királis építőelemként nagy enantiomertisztaságú királis vegyületek előállításához.

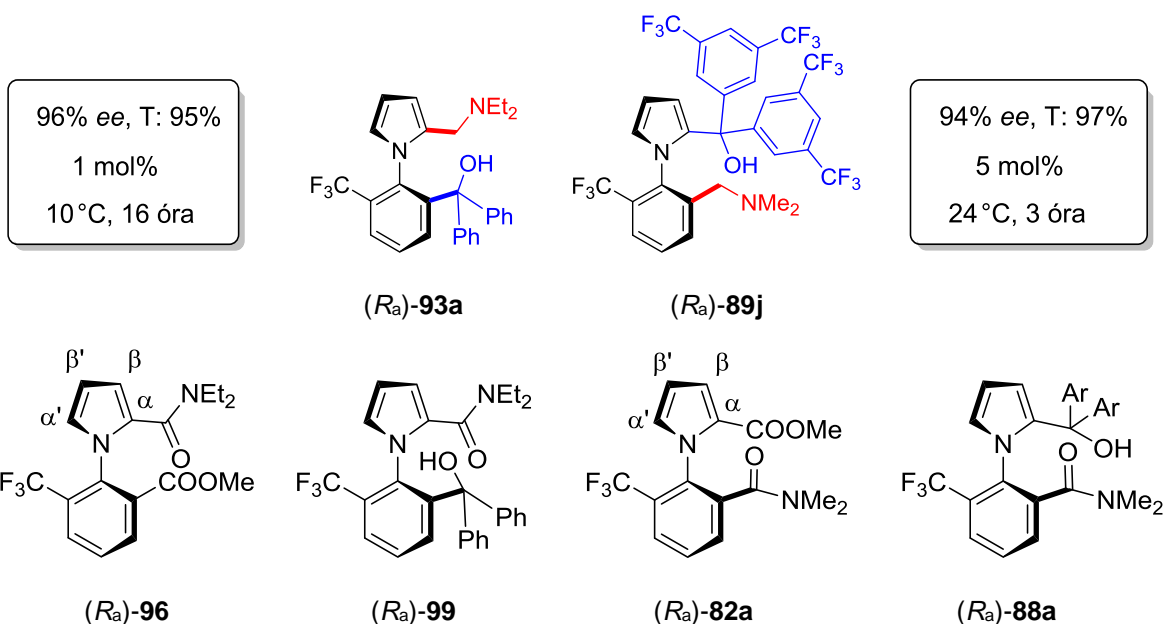


5. ábra Az (*R*_a)-**89j** ligandum alkalmazása a modellreakcióban

A kísérletekben kapott enantioszelektivitási értékek és a ligandumok szerkezete (elektronikus és sztérikus tulajdonságok) között összefüggéseket kerestünk, melyhez meghatároztuk az aminoalkoholok proton-disszociációs állandóinak számított és mért értékeit (pK_b), valamint kvantumkémiai számítások segítségével az aminoalkoholokból keletkező cinkkomplex szerkezetét (kötésviszonyok) és az enantioszelektív reakció átmeneti állapotainak entalpiáját.

4.2. Brómozott aminoalkoholok előállítása

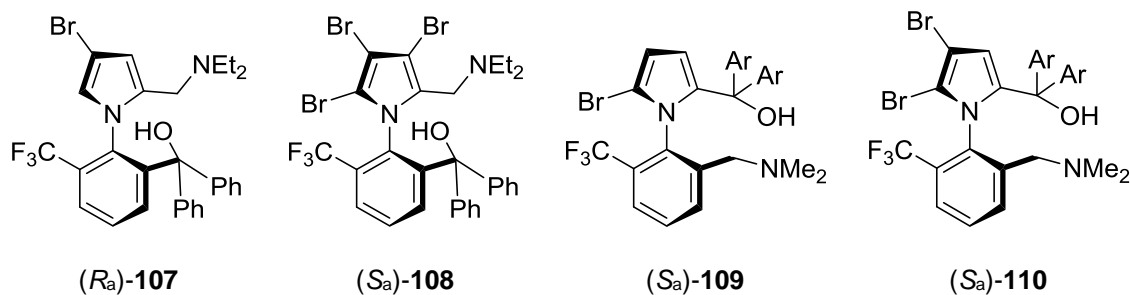
Vizsgáltuk mindkét ligandumcsalád leghatékonyabb képviselőinek ((*R*_a)-**93a** és (*R*_a)-**89j**, 6. ábra) és néhány intermedierjüknek a pirrolgyűrűn történő brómozását, és a halogénatomok bevitelének regioszelektivitását.



6. ábra A két ligandumcsalád leghatékonyabb képviselője (Ar= 3,5-(CF₃)₂-C₆H₃) és azok intermedierjei, melyek brómozását vizsgáltuk

Megállapítottuk, hogy a pirrolgyűrűn amidcsoportot tartalmazó vegyületek esetén ((*R*_a)-**96** és **99**) a monobrómozást főként a benzolgyűrű *ortho*-pozíciójához kapcsolódó molekularész sztérikus hatása befolyásolta (észtercsoport – nem regioszelektív, difenilkarbinolrész – β'-regioszelektív). A korábbi tapasztalatokkal megegyezően, a pirrolgyűrű α-helyzetében elektronszívó-funkciót tartalmazó vegyületnél (észtercsoport: (*R*_a)-**82a**) szelektív β'-pozícióba sikerült a halogénatomot bevinni. Amennyiben a pirrolgyűrű α-helyzetében semleges vagy elektronküldő molekularész (például szubsztituált diarilkarbinol, (*R*_a)-**88a**) helyezkedett el, akkor α'-helyzetű brómozás értünk el.

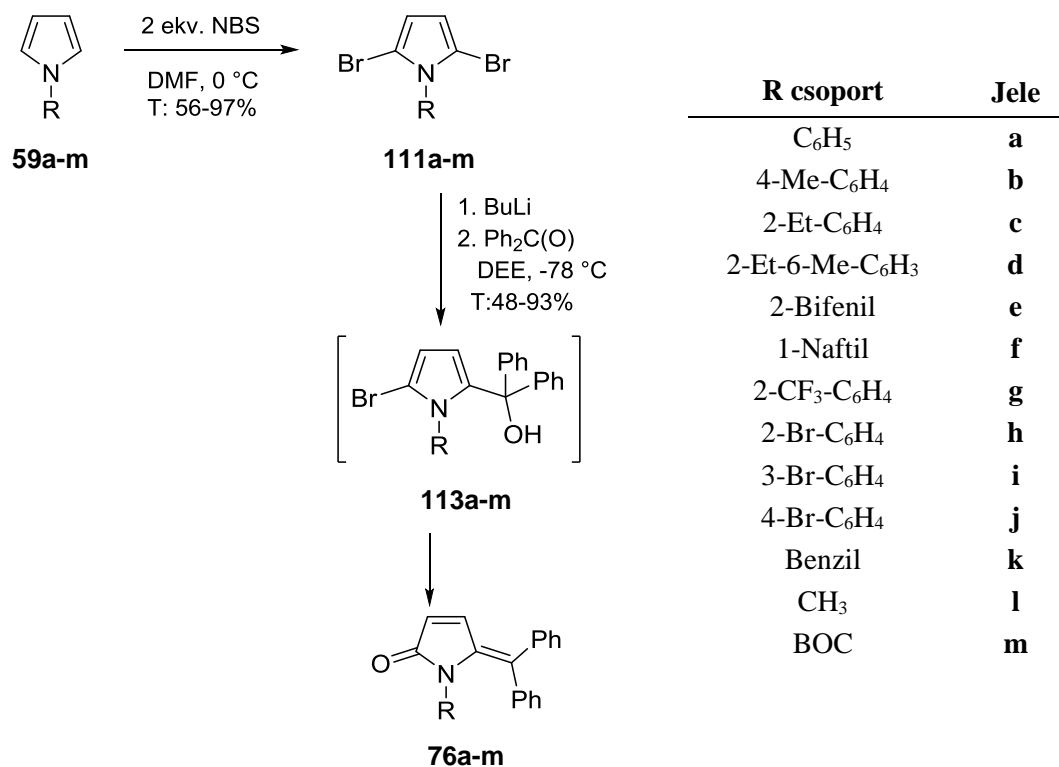
A brómtartalmú amid-alkohol származékok redukciójával további 4 új, királis brómozott aminoalkoholt állítottunk elő (7. ábra), melyek közül három esetben ((*R*_a)-**107**, (*S*_a)-**109**, **110**) tovább javította a bevitt halogénatom az aszimmetrikus indukciót (97% ee) a benzaldehyd és dietil-cink addíciós reakciójában. Az előállított optikailag aktív, brómozott intermedierek és a belőlük szintetizált új aminoalkoholok jó kiindulási alapot biztosítanak a ligandumok szilárd hordozóhoz kötéséhez. Ezáltal a modellreakcióban történő felhasználás után könnyen, gazdaságosan visszanyerhetők és újrafelhasználhatók lehetnek a katalizátorligandumok.



7. ábra Az új halogéntartalmú aminoalkohol ligandumok (Ar= 3,5-(CF₃)₂-C₆H₃)

4.3 Az 5-ilidénpirrol-2(5H)-on-származékok előállítása

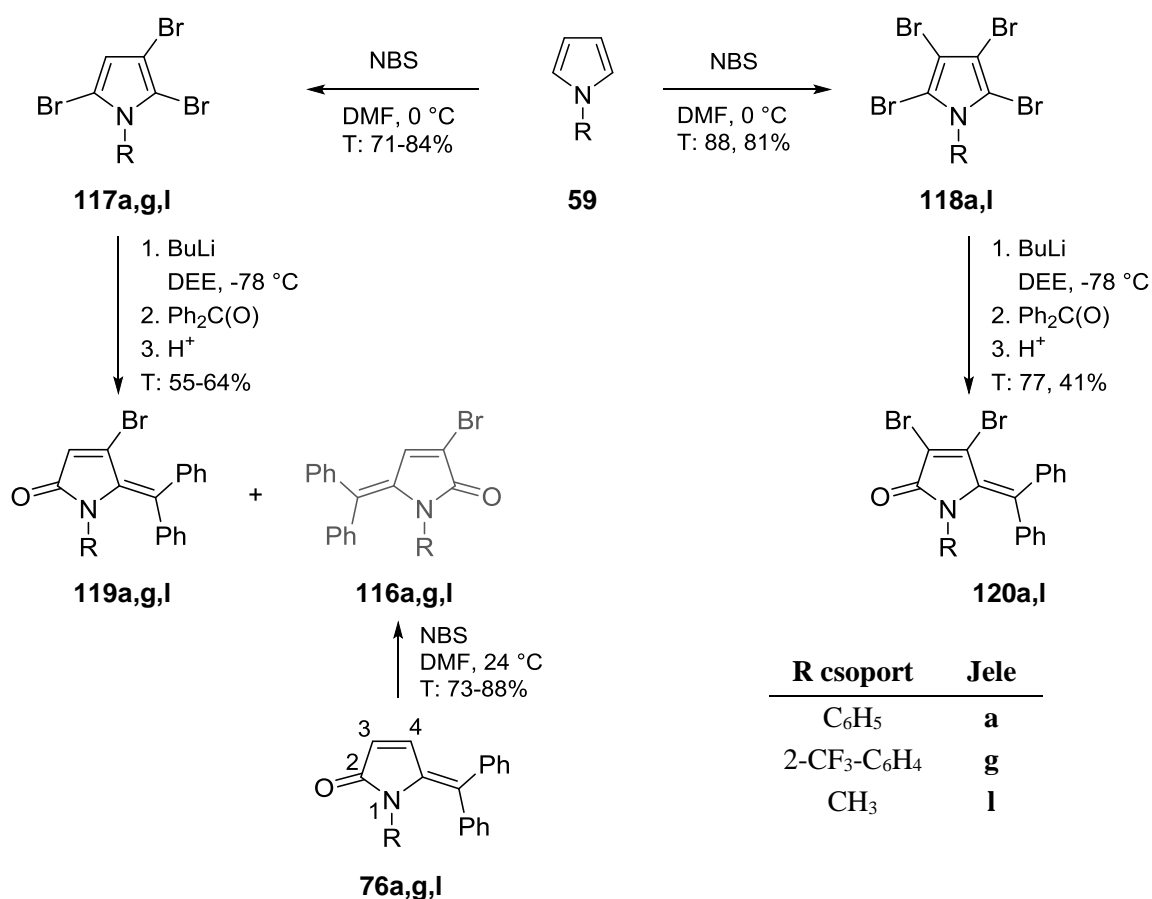
Az 1-arilpirrolok bróm/lítium cserén keresztüli funkcionálisálásának vizsgálatakor a korábbi munkánk során kidolgozott szelektív bromozási eljárást kiterjesztettük 12 *N*-szubsztituált pirrolra (**59a-m**, 8. ábra), majd a brómvegyületekből kiindulva fémorganikus úton különböző csoportok (karbonsav, *szekunder* és *tercier* alkohol molekularész) bevitelét is megvalósítottuk. A 2,5-dibróm-pirrolok monolítálásával nyert lítiumorganikus intermedierek benzofenonos reakciójával kapott termékek (**113a-m**) azonban instabilnak bizonyultak, és spontán 5-ilidénpirrol-2(5H)-on típusú vegyületté (**76a-m**, termelés: 48-93%, 8. ábra) alakultak. A felfedezett új reakció részletes vizsgálata alapján javaslatot tettünk az átalakulás mechanizmusára.



8. ábra Az α,α' -dibróm-pirrolok előállítása és fémorganikus átalakítása

További érdekessége az átalakulási reakciónak, hogy ha enantiomertiszta brómozott atropizomerből (pl.: (*S_a*)-**109**, 7. ábra) indultunk ki, akkor a belőle keletkező 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on-származék optikailag aktív maradt.

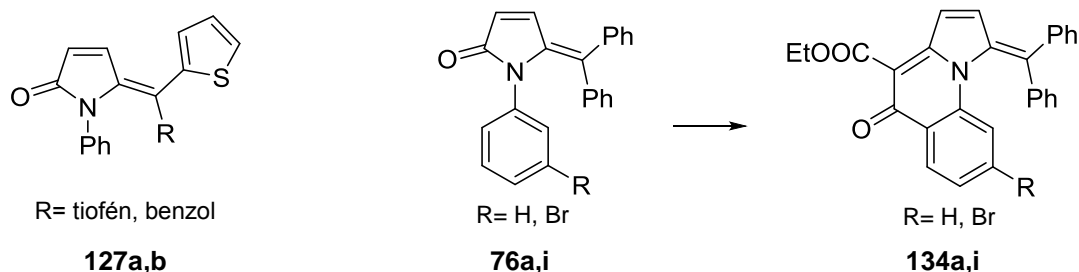
Módszert dolgoztunk ki az α,β -telítetlen γ -laktámok (**76a,g,l**) további funkcionizálására is, ugyanis a reakcióúttól függően regioszelektív módon sikerült az endociklusos kettős kötés pillératomjaira (a gyűrű 3-, illetve 4-helyzetébe) brómatomot beépíteni (**116a,g,l** és **119a,g,l**), sőt a 3,4-dibróm származékokat is (**120a,l**) elő tudtuk állítani (9. ábra).



9. ábra A 3-, illetve 4-monobrómozott és 3,4-dibrómozott **76** vegyületek szintézise

Az átalakulási reakció alkalmazási lehetőségeinek felderítéséhez összesen 14 féle oxovegyülettel (pl.: szubsztituált benzaldehydek, alkil-fenil-ke-tonok, tienil-fenil-ke-ton, triciklusos ke-tonok) vizsgáltuk, hogy a fémorganikus reakcióban keletkező alkohol-származékokból végbemegy-e az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on szerkezetté alakulás. Azt tapasztaltuk, hogy olyan oxovegyületekkel játszódik le az átalakulás, amelyek szerkezete biztosítja a képződő *tercier* alkohol protonálódását és vízkilépést követően a keletkező karbokation megfelelő stabilitását (delokalizáció), és olyan mezomer határszerkezetekkel leírható intermedier jöhet létre, melyre a hidroxidion képes támadni. A vizsgálatok során a **111a** vegyületből előállítunk olyan tioféntartalmú

vegyületeket (**127a,b**), melyeknek többszörösen konjugált rendszere értékes szerkezeti elem lehet a szerves festéket szenzibilizátorként tartalmazó napelemek fejlesztéséhez is, mivel a tiofén egyszerűen halogénezhető az α' -pozícióban, valamint keresztkapcsolási reakcióval könnyen tovább építhető (10. ábra).



10. ábra A dibróm-pirrolokból előállított értékes vegyületek

Foglalkoztunk a **76** struktúra más irányú felhasználásával is, melyből néhány lépés után előállítottunk triciklusos kinolon-származékokat (**134a,i**, 10. ábra). Ezeknek a vegyületeknek a szerkezete hasonló az antibakteriális hatású pefloxacin analógjaihoz. A **134i** brómatomját kapcsolási reakció segítségével különböző gyűrűs aminocsoportra cserélhetjük (például *N*-metil piperazin), mivel kutatások kimutatták, hogy a biológiai hatáshoz elengedhetetlen az a molekularész.

5. Tézisek

1. Elsőként állítottunk elő a pirrolgyűrűn diarilkarbinol és a benzolgyűrűn aminometil-csoportot tartalmazó 1-fenilpirrol vázú aminoalkoholokat enantiomertiszta formában az (R_a)-1-[2-metoxikarbonil-6-(trifluormetil)fenil]-1*H*-pirrol-2-karbonsav-metil-észterből kiindulva, az észter-funkciók közötti reaktivitásbeli különbség kihasználásával. Az új vegyületek abszolút konfigurációját két intermedier molekula és egy aminoalkohol általunk előállított egykristályainak röntgendiffrakciós méréseivel igazoltuk. [1, 2, 5]
2. A szakirodalomban elsőként alkalmaztuk az előállított bifunkciós 1-fenilpirrolokat benzaldehid és dietil-cink aszimmetrikus reakciójában. [1, 2, 5] Felderítettük az aminoalkoholok szerkezete és a modellreakció enantioszelektivitása közötti kapcsolatokat kvantumkémiai számításokkal és a funkciók pK_a , pK_b számított és mért értékei alapján.
3. Megállapítottuk, hogy a legjobb aszimmetrikus indukciót adó ligandum, az (R_a)-2-bisz[(3,5-bisz(trifluormetil)fenil]hidroximetil-1-[2-(*N,N*-dimetilaminometil)-

6-(trifluormetil)fenil]-1*H*-pirrol (94% *ee*, termelés: 92%) volt. Kísérletileg bizonyítottuk, hogy ez a ligandum nemcsak a benzaldehid, hanem 15 szubsztituált aromás aldehid és fahéjaldehid esetén is közel kvantitatív termelést (87–95%) és jó, illetve kiváló enantioszelektivitást (58–96% *ee*) indukál az addíciós reakcióban. [1, 2, 5]

4. Új, királis brómozott aminoalkoholokat állítottunk elő és kísérletekkel igazoltuk, hogy a halogénatom bevitele javítja az aszimmetrikus indukciót (97% *ee*) a benzaldehid és dietil-cink addíciós reakciójában.
5. Kísérletekkel igazoltuk, hogy *N*-szubsztituált pirrolok α,α' -helyzetben *N*-brómszukcinimiddel történő dihalogénezési módszerével kiváló termeléssel és nagy tisztasággal állíthatók elő dibrómozott pirrolok. A módszer kiterjeszhetőségét bizonyítottuk 12 különböző (*N*-aril és alkil) pirrol esetén. [3, 4]
6. Elsőként fejlesztettünk ki egy hatékony módszert az *N*-alkil, -aril és szubsztituálatlan 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on struktúra kialakítására, mely több természetből ismert, illetve biológiailag aktív vegyületnek alkotóeleme. A kidolgozott módszerrel 12 irodalomból nem ismert vegyületet állítottunk elő, és jellemeztük azokat, valamint javaslatot tettünk az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on szerkezet kialakulásának mechanizmusára. [3, 4]
7. Regioszelektív módszert dolgoztunk ki az új 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on származékok endociklusos kettős kötése pillératomjainak szelektív 3- és 4-helyzetben mono-, illetve dihalogénezésére. [3]

6. Alkalmazási lehetőségek

Az előállított, új optikailag aktív aminoalkoholok bifunkciós ligandumként vagy organokatalizátorként számos enantioszelektív reakcióban alkalmazhatók a szakirodalom szerint. Erre egyik jó példa az általunk kipróbált aromás aldehidek és dietil-cink enantioszelektív reakciója. A leghatékonyabb és széles körben alkalmazható ligandumnak az (*R*_a)-**89j** bizonyult, melyet szubsztituált aldehidek széles körében is teszteltük. A legtöbb esetben kiváló enantiomerfeleslegű (91-96%) *szekunder* alkoholokat ((*R*)-**28a-q**) állítottunk elő közel kvantitatív termeléssel, melyek felhasználhatók királis építőelemként nagy enantiomertisztaságú királis vegyületek előállításához. [1, 2, 5]

Az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on struktúra kialakítása során előállított **127a,b** (10. ábra) vegyületek többszörösen konjugált rendszere értékes szerkezeti elem lehet a csoport további kutatásaihoz, mivel a tiofényűrű egyszerűen halogénezhető az α -pozícióban, valamint kapcsolási reakcióval könnyen szubsztituálható. A molekula felhasználásának egyik módja lehet a szerves festéket tartalmazó napelemekben, mint a donor- és az akceptorrész összekötőegysége. Emellett triciklusos kinolon-karbonsav-származékok előállítására is felhasználható az 5-ilidénpirrol-2(5*H*)-on szerkezeti egység, mely vegyületek irodalmi analógia alapján antibakteriális hatásúak lehetnek.

7. Közlemények

7.1. Az értekezés alapját képező közlemények

- [1] Faigl F., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Holczbauer T., Czugler M., Nyerges M., Mátravölgyi B.: New Atropisomeric Amino Alcohol Ligands for Enantioselective Addition of Diethylzinc to Aldehydes, *Chirality* **2015**, 27, 216-222. [IF (2015): 2,025, Független idézet: 1, DSz: 80%]
- [2] **Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Feczku Gy., Erdélyi Zs., Nyerges M., Faigl F.: Steric and electronic tuning of atropisomeric amino alcohol type ligands with a 1-arylpyrrole backbone, *Tetrahedron: Asymmetry* **2015**, 26, 593-599. *Open access* [IF (2015): 2,108, DSz: 80%]
- [3] Faigl F., **Deák Sz.**, Mucsi Z., Hergert T., Balázs L., Boros S., Balázs B., Holczbauer T., Nyerges M., Mátravölgyi B.: A novel and convenient method for the preparation of 5-(diphenylmethylene)-1*H*-pyrrol-2(5*H*)-ones; synthesis and mechanistic study, *Tetrahedron* **2016**, 72, 5444-5455. [IF (2015): 2,645, DSz: 75%]
- [4] **Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Faigl F.: Halogénezett pirrolok előállítása és fémorganikus reakcióinak vizsgálata, *XVII. Tavaszi Szél 2014 Konferenciakötet* Debrecen, **2014**, ISBN 978-963-89560-9-5, V. kötet, 175-183. [DSz: 100%]
- [5] Mátravölgyi B., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Faigl F.: 1-Fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus szintézisekben, *Magyar Kémikusok Lapja* **2013**, 68, 143-144. [DSz: 50%]

7.2. Az értekezés témájához közvetlenül nem kapcsolódó közlemények

1. Faigl F., Mátravölgyi B., **Deák Sz.**, Holczbauer T., Czugler M., Balázs L., Hermecz I.: Useful, regioflexible methods for functionalization of 1-phenylpyrrole derivatives, *Tetrahedron* **2012**, 68, 4259-4266. [IF (2012): 2,803, Független idézet: 5, DSz: 30%]

- Mátravölgyi B., Kovács E., Hegedűs L., Jászay Zs., Thurner A., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Pham T. S., Gönczi K., Sólyom Sz., Tőke L., Faigl F.: Synthesis and application of new, optically active compounds as catalysts and ligands in enantioselective reactions, *Periodica Polytechnica Chemical of Engineering* **2015**, 59, 38-50. [IF (2015): 0,460, DSz: 17%]
- Faigl F., Erdélyi Zs., **Deák Sz.**, Nyerges M., Mátravölgyi B.: A new pyrrolidine-derived atropisomeric amino alcohol as a highly efficient chiral ligand for the asymmetric addition of diethylzinc to aldehydes, *Tetrahedron Letters* **2014**, 55, 6891-6894. [IF (2014): 2,391, Független idézet: 7, DSz: 10%]
- Deák Sz.**: *Periodica Polytechnica Chemical of Engineering* **2010**, 54, 48-49. TDK absztrakt. [IF (2010): 0, DSz: 100%]

7.3. Szóbeli előadások

- Mátravölgyi B., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Faigl F.: Újabb eredmények az atropizomer aminoalkoholokkal végzett cinkorganikus enantioszelektív reakciók körében, MKE 2. Nemzeti Konferencia, Hajdúszoboszló, **2015.** augusztus 31-szeptember 2.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Hergert T., Faigl F.: Lítiumorganikus pirrolok reakciói különböző elektrofilekkel, MTA Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése, Balatonszemes, **2015.** május 28.
- Hergert T., **Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Faigl F.: γ -Laktámok előállítása pirrol-származékok fémorganikus reakciójával, XXXVII. Kémiai Előadói Napok, Szeged, **2014.** november 3-5.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Faigl F.: Atropizomer aminoalkoholok alkalmazása katalizátorligandumként, MTA Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése, Balatonszemes, **2014.** május 21.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Faigl F.: Halogénezett pirrolok előállítása és fémorganikus reakcióinak vizsgálata, XVII. Tavasz Szél Konferencia, Debrecen, **2014.** március 21.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Faigl F.: 1-Fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus szintézisben, XI. Oláh György Doktori Iskola PhD konferenciája, Budapest, **2014.** február 6.
- Mátravölgyi B., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Faigl F.: 1-Fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus szintézisben, MKE Vegyészkonferencia, Hajdúszoboszló, **2013.** június 26-28.
- Mátravölgyi B., **Deák Sz.**, Erdélyi Zs., Faigl F.: 1-Fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus szintézisben, Bruckner-termi előadás, Budapest, **2013.** február 22.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Hergert T., Faigl F.: Bifunkciós 1-arilpirrol-származékok szintézise, XVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia, Doktorandusz plénum, Félixfürdő, **2012.** november 22-25.
- Deák Sz.**, Mátravölgyi B., Hergert T., Faigl F.: 1-Arilpirrol-származékok szintézise, XXXV. Kémiai Előadói Napok, Szeged, **2012.** október 29-31.

11. Mátravölgyi B., Deák Sz., Erdélyi Zs., Faigl F.: Új, atropizomériát mutató 1-fenilpirrol-származékok előállítása és szintetikus alkalmazása, MTA Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése, Balatonszemes, **2012.** június 6-8.
12. Deák Sz., Mátravölgyi B., Faigl F.: α,α' -Diszubsztituált 1-fenilpirrol-származékok szintézise, XXXIV. Kémiai Előadói Napok, Szeged, **2011.** november 2-4.
13. Deák Sz., Faigl F.: Bifunkciós 1-[2-(trifluormetil)fenil]pirrol-származékok szintézise, Országos Tudományos Diákköri Konferencia, Pécs, **2011.** április 27.
14. Deák Sz., Faigl F.: Bifunkciós 1-[2-(trifluormetil)fenil]pirrol-származékok szintézise, BME VBK Tudományos Diákköri Konferencia, Budapest, **2009.** november 18. (1. helyezés)

7.4. Poszter előadások

1. Deák Sz., Hergert T., Mátravölgyi B., Mucsi Z., Faigl F.: γ -Laktámok előállítása 2,5-dibróm-*N*-szubsztituált-pirrolokból, MKE 2. Nemzeti Konferencia, Hajdúszoboszló, **2015.** augusztus 31-szeptember 2.
2. Hergert T., Deák Sz., Mátravölgyi B., Mucsi Z., Faigl F.: Triciklusos kinolon analogonok előállítása, MKE 2. Nemzeti Konferencia, Hajdúszoboszló, **2015.** augusztus 31-szeptember 2.
3. Sz. Deák, T. Hergert, B. Mátravölgyi, Z. Mucsi, F. Faigl: Synthesis and mechanism study of unsaturated, conjugated heterocyclic derivatives, 16th Tetrahedron Symposium, Berlin, Németország, **2015.** június 16-19.
4. Sz. Deák, T. Hergert, B. Mátravölgyi, Z. Mucsi, F. Faigl: Synthesis and Organometallic Reactions of Halogenated Pyrroles, 5th EuCheMS Chemistry Congress Isztambul, Törökország, **2014.** augusztus 31-szeptember 4.
5. B. Mátravölgyi, Sz. Deák, Zs. Erdélyi, F. Faigl: Synthesis and Application of 1-Phenylpyrrole Based Amino Alcohols in Asymmetric Catalysis, 15th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry, Olomouc, Csehország, **2013.** szeptember 5-7.
6. Sz. Deák, B. Mátravölgyi, F. Faigl: Atropisomeric amino alcohols as new chiral ligand in asymmetric synthesis, 18th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 2013), Marseille, Franciaország, **2013.** július 7-12.
7. Deák Sz., Mátravölgyi B., Faigl F.: 1-Fenilpirrol alapvázú aminoalkoholok előállítása és alkalmazása, MKE Vegyészkonferencia, Hajdúszoboszló, **2013.** június 26-28.
8. Deák Sz., Mátravölgyi B., Faigl F.: Optikailag aktív aminoalkoholok előállítása és alkalmazása enantioszelektív reakcióban, Oláh György Doktori Iskola X. konferenciája, Budapest, **2013.** február 7.
9. Deák Sz., Mátravölgyi B., Faigl F.: Új 1-arilpirrol-származékok szintézise, Oláh György Doktori Iskola IX. konferenciája, Budapest, **2012.** május 17.
10. B. Mátravölgyi, F. Faigl, Sz. Deák: Synthesis of New Bidentate Atropisomeric Compounds, 12th Belgian Organic Synthesis Symposium (BOSS XII), Namur, Belgium, **2010.** július 11.