

EXLORATORY DBU AND DABCO-CATALYZED SYNTHESIS OF N- HETEROCYCLES USING 2-HYDROXYCYCLOHEXANONE DIMER

Michael Johnathan Tjondrorahardja

21/472589/PA/20309

ABSTRACT

Pyrroles are found in many modern everyday lives, and is especially prominent in the field of pharmaceuticals, material science, food science, and industrial applications due to its bioavailability and biocompatibility. The recent synthesis of pyrroles is producing significant steps in the commercialization of pyrrole products, and efficiency of the synthesis by introducing less harmful reagents and milder conditions, improving from previous methods. This research employed one-pot reaction with 2-hydroxycyclohexanone as the base substrate, 5,5-dimethyl-1,3-cyclohexanedione as the activated methylene and benzylamine to produce 1-(Benzyl)-2,3,4,9-tetrahydro-2-tert-butyl-3-oxo-1H-cyclopenta[b]indole (**1**), 3-oxo-3-phenylpropanenitrile and 1-octylamine as the primary amine to produce N-(Octyl)-2-(phenylmethylidene)-3-cyano-1H-cyclopenta-[b]pyrrole (**2**), and 2,2,6,6-tetramethyl-3,5-heptanedione and benzylamine to produce 2-(tert-Butyl)-3-(cyclopenta[b]indol-3-yl)-1-(benzyl)-pyrrole-3-one (**3**). All reactions used several organic bases as the catalyst. The resulting crude product was separated using column chromatography to isolate the desired product before performing ¹H NMR analysis.

Based on ¹H NMR spectra the compound **1** was yielded at 8.47% and 9.30% for DBU and DABCO-catalyzed reactions, respectively, compound **2** was obtained while the targeted compound **3** was yielded as unidentified products despite attempts to use a variety of bases showed the same peaks as the predicted spectra.

Keyword: carbohydrates, one-pot reaction, pyrrole, synthesis.

EKSPLORASI SINTESIS N-HETEROSIKLUS TERKATALISASI DENGAN DBU DAN DABCO DARI DIMER 2- HIDROKSISIKLOHEKSANON

Michael Johnathan Tjondrorahardja
21/472589/PA/20309

INTISARI

Pirol ditemukan dalam banyak kehidupan modern sehari-hari, dan sangat menonjol di bidang farmasi, ilmu pengetahuan material, ilmu makanan, dan aplikasi industri karena ketersediaan hayati dan biokompatibilitasnya. Sintesis pirol baru-baru ini menghasilkan langkah signifikan dalam komersialisasi produk pirol, dan efisiensi sintesis dengan memperkenalkan reagen yang kurang berbahaya dan kondisi yang lebih ringan, meningkat dari metode sebelumnya. Penelitian ini menggunakan penggunaan reaksi satu pot dengan 2-hidroksisikloheksanon sebagai substrat dasar, 5,5-dimetil-1,3-sikloheksanon sebagai metilen aktif dan benzilamina untuk menghasilkan 1-(Benzil)-2,3,4,9-tetrahidro-2-tert-butil-3-okso-1H-sikloheksana [b] indol (**1**), 3-okso-3-fenilpronanenitril dan 1-oktilamina sebagai amina primer untuk menghasilkan N-(Oktil)-2-(fenilmetiliden)-3-siano-1H-siklopenta-[b] pirol (**2**), dan 2,2,6, 6-tetrametil-3,5-heptanedion dan benzilamina untuk menghasilkan 2-(tert-Butil)-3-(siklopenta [b] indol-3-il)-1-(benzil)-pirol-3-satu (**3**), dengan menggunakan beberapa basa organik sebagai katalis. Produk mentah yang dihasilkan dipisahkan menggunakan kromatografi kolom untuk mengisolasi produk yang diinginkan sebelum melakukan analisis ¹H NMR.

Berdasarkan spektrum ¹H NMR, senyawa **1** dihasilkan pada 8,47% dan 9,30% untuk reaksi yang dikatalisis DBU dan DABCO, masing-masing, senyawa **2** diperoleh sedangkan senyawa **3** yang ditargetkan dihasilkan sebagai produk yang tidak teridentifikasi meskipun upaya untuk menggunakan berbagai macam basa menunjukkan puncak yang sama dengan spektrum yang diprediksi.

Kata kunci: karbohidrat, pirol, reaksi satu-pot, sintesis.