

# Pretvorbe elektronsko bogatih aromатов pri alternativnih pogojih



Zoja Žnidarič

Mentor: prof. dr. Marjan Jereb

✉ [zoja.znidaric@gmail.com](mailto:zoja.znidaric@gmail.com)

## POVZETEK

V svojem diplomskem delu sem testirala pretvorbo elektronsko bogatih aromатов s karboksilnimi anhidridi in trifluoroocetno kislino (TFA).

Reakcija je trajnostna alternativa klasični reakciji Friedel-Craftsovega aciliranja, saj omogoča sintezo brez uporabe toksičnega in nevarnega katalizatorja  $\text{AlCl}_3$ .

TFA deluje kot katalizator in topilo hkrati, prav tako pa jo lahko po reakciji ponovno uporabimo in se tako izognemo nepotrebnemu odpadku. Aciliranje sem izvajala na spojinah z različno sterično zahtevnimi funkcionalnimi skupinami. Raziskovala sem tudi vpliv strukture elektronsko revnejših oziroma elektronsko bogatejših aromатов na potek aciliranja aromatskega obroča.

## METODOLOGIJA

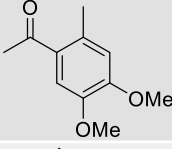
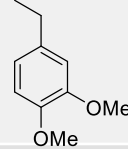
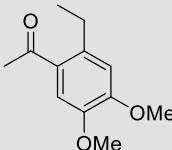
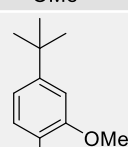
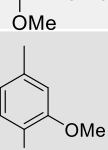
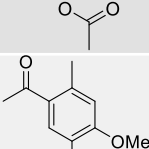
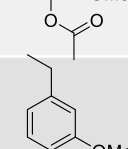
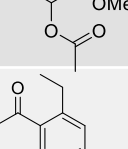
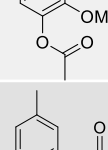
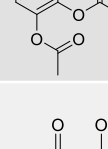
- Mešanje na sobni temperaturi
- Prekinitev reakcije z dodatkom  $\text{NaHCO}_3$
- Ekstrakcija in odstranitev topila
- Analiza z  $^1\text{H}$  NMR spektroskopijo
- Čiščenje: prekristalizacija, kolonska kromatografija
- Potrditev strukture s HRMS in IR spektroskopijo

Tabela 1: Primerjava TFA in  $\text{AlCl}_3$

Lastnost	TFA	$\text{AlCl}_3$
Vloga	Katalizator in topilo	Katalizator
Nevarnost	Korozivna, vendar manj nevarni stranski produkti	Zelo koroziven, hitro reagira z vlago do $\text{HCl}$
Okoljski vpliv in recikliranje	Možnost recikliranja z destilacijo; manj odpadkov	Težko recikliramo zaradi hidrolize; več odpadkov
Uporaba v sintezi	Primerna za zeleno kemijo	Pogosta v klasičnih sintezah

## REZULTATI

Tabela 2: Pregled produktov

Strukturna formula	Izkoristek [%]
	74,93 %
	92,02 %
	77,14 %
	65,55 %
	91,29 %
	45,05 %
	81,29 %
	2,72 %
	82,56 %
	13,38 %

## ZAKLJUČEK

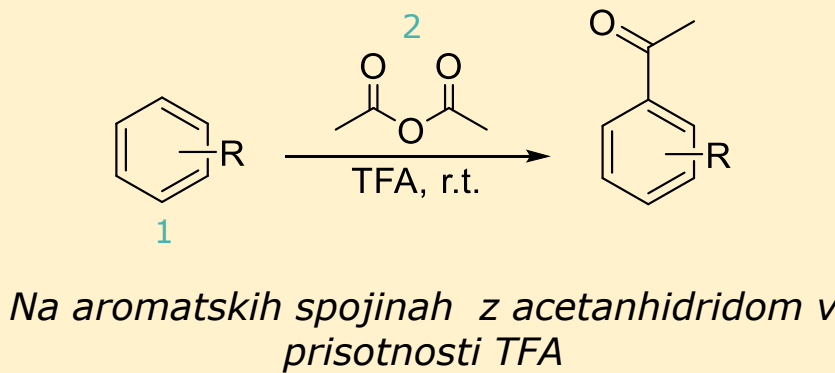
Aciliranje je bilo uspešno na manj sterično zahtevnih spojinah. Izkoristki so bili dokaj visoki, med 50 in 90 %.

Za manj uspešno se je izkazalo na spojinah, ki vsebujejo estrsko funkcionalno skupino. Čeprav lahko estrska skupina, vezana preko kisika, donira elektrone, je resonančni učinek omejen zaradi elektron-privlačnega učinka karbonylna skupine. Tako se posledično zmanjša tudi aktiviranost aromata.

Temeljna literatura: G. Liu, B. Xu: Hydrogen bond donor solvents enabled metal and halogen-free Friedel-Crafts acylations with virtually no waste stream. *Tetrahedron Lett.* **2018**, 59, 869–872.

 = število ekvivalentov

### PRVI TIP REAKCIJE



### DRUGI TIP REAKCIJE

