

1

Acilación de Friedel-Crafts

Andres Martinez

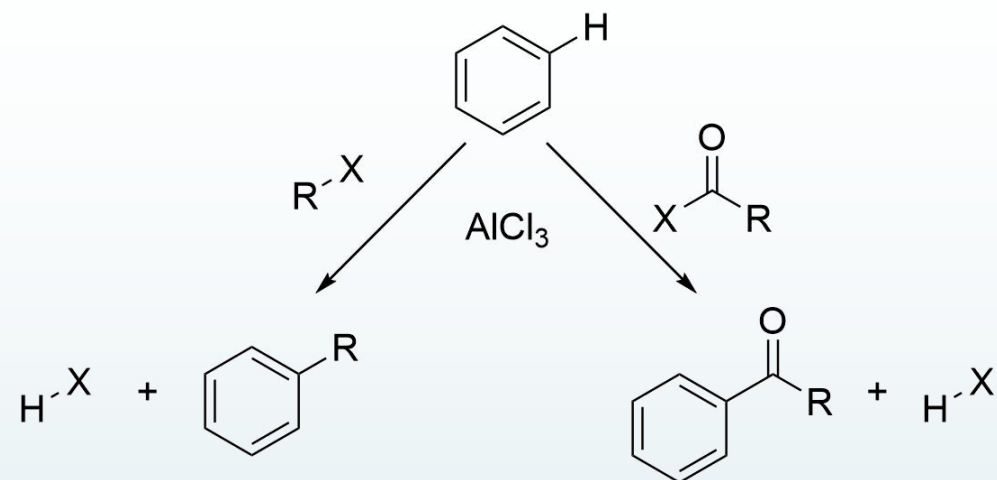
Juan Barbosa

Universidad de los Andes

Índice

- Introducción
- Sección experimental
- Resultados y discusión
- Conclusiones

Introducción

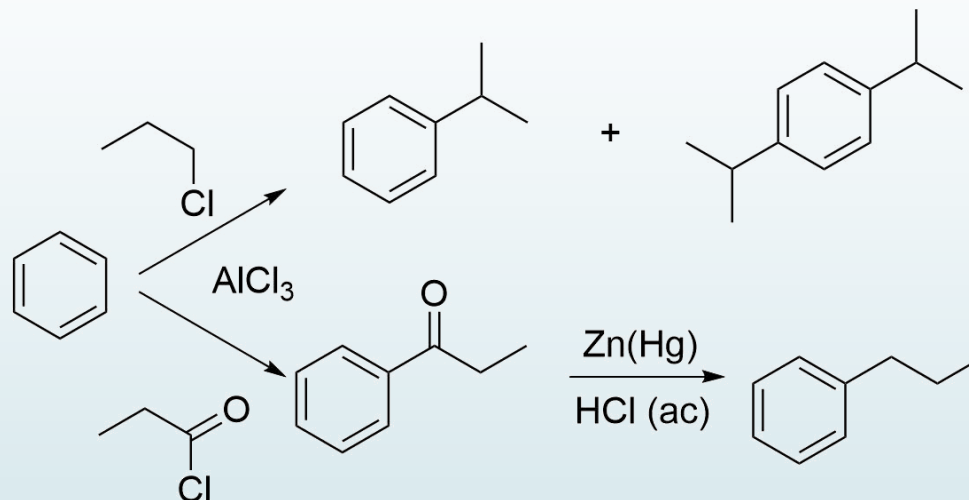


Esquema 1: Alquilación y acilación de Friedel-Craft.
(**R**): alquil o aril, (**X**): Cl, Br, I.

- Sustitución sobre anillos aromáticos activados.
- Formación de un nuevo enlace C-C
- Existen al menos 20 mil referencias a productos que involucren reacciones de FC.

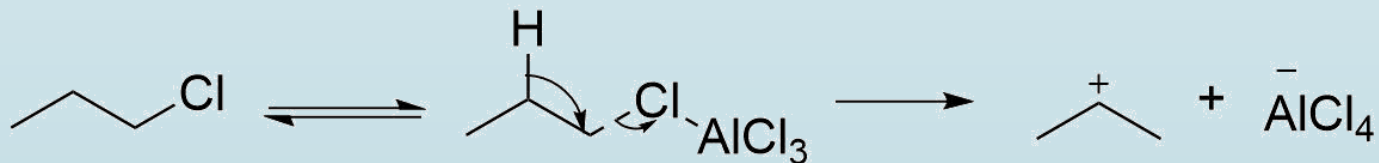
Introducción

- La acilación, permite que la reacción se lleve a cabo una única vez.



Esquema 2: Productos de alquilación y acilación.

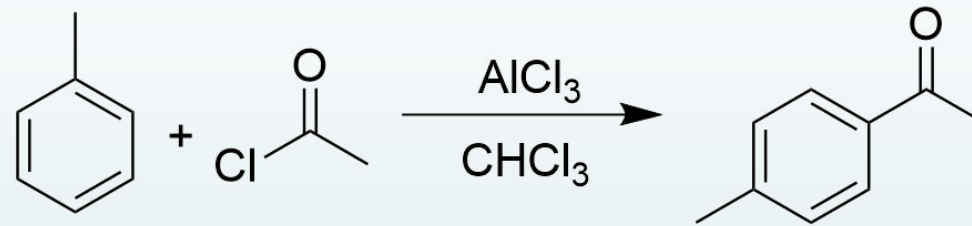
- La acilación impide el reordenamiento del sustrato.



Wade, L. *Organic Chemistry*, eight ed.; Pearson: New York, 2015; pp 328–390.

Sartori, G.; Maggi, R. *Advances in Friedel-Crafts acylation reactions*; CRC Press, 2010.

Introducción



Esquema 2: Preparación de la 4-metilacetofenona.

- Compuesto clasificado como agente saborizante.

Sección experimental

2.5 mL (23.04 mmol) – cloroformo
0.4 mL (3.86 mmol) – tolueno

0.480 g (3.60 mmol) – cloruro de aluminio
0.267 g (3.40 mmol) – cloruro de acetilo

Reacción a temperatura ambiente.
1.50 horas, con adición de hielo

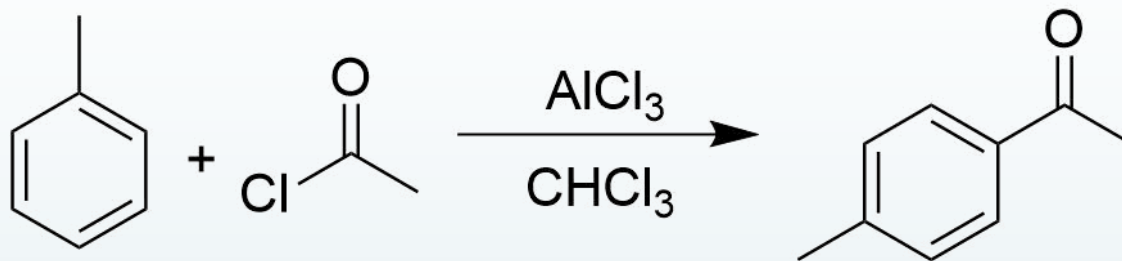
Extracción líquido-líquido.
Con DCM

Lavado con solución saturada de NaHCO_3 , y secado

Presión reducida

Producto

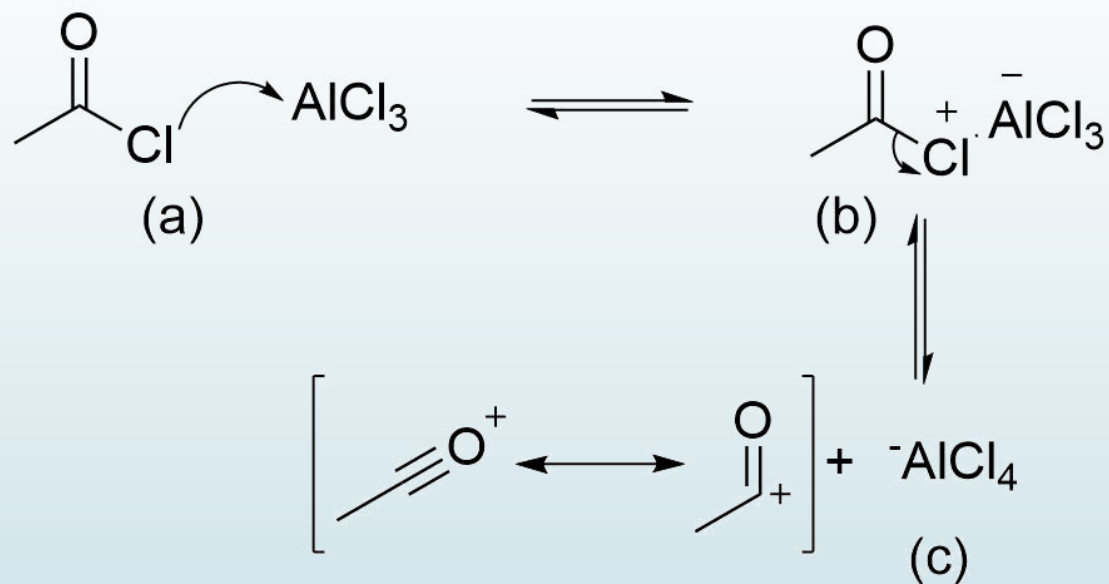
Resultados y discusión



Esquema 2: preparación de la 4-metilacetofenona.

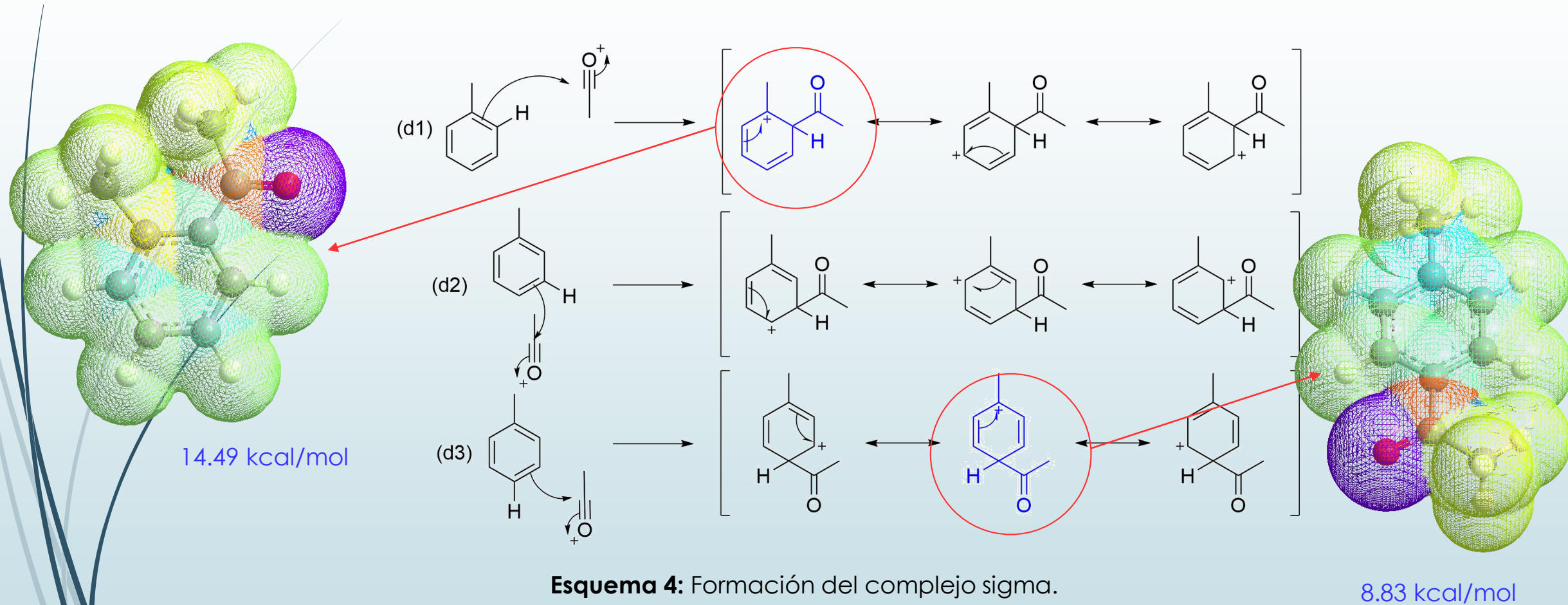
- Producto puro.
- Reacción estereoselectiva, producto *para*.
- Porcentaje de rendimiento: 41 %.

Resultados y discusión

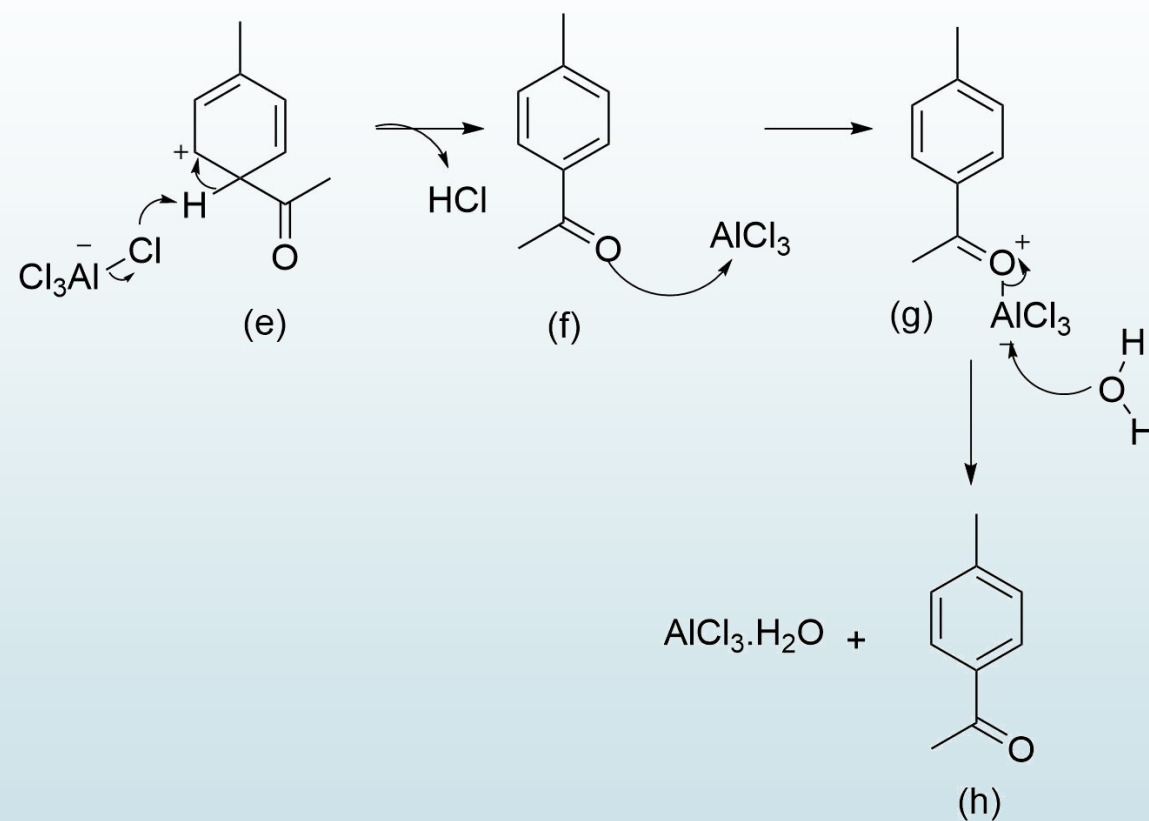


Esquema 3: Formación del carbocatión.

Resultados y discusión



Resultados y discusión

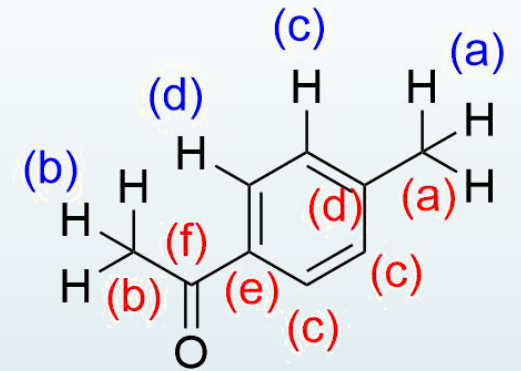
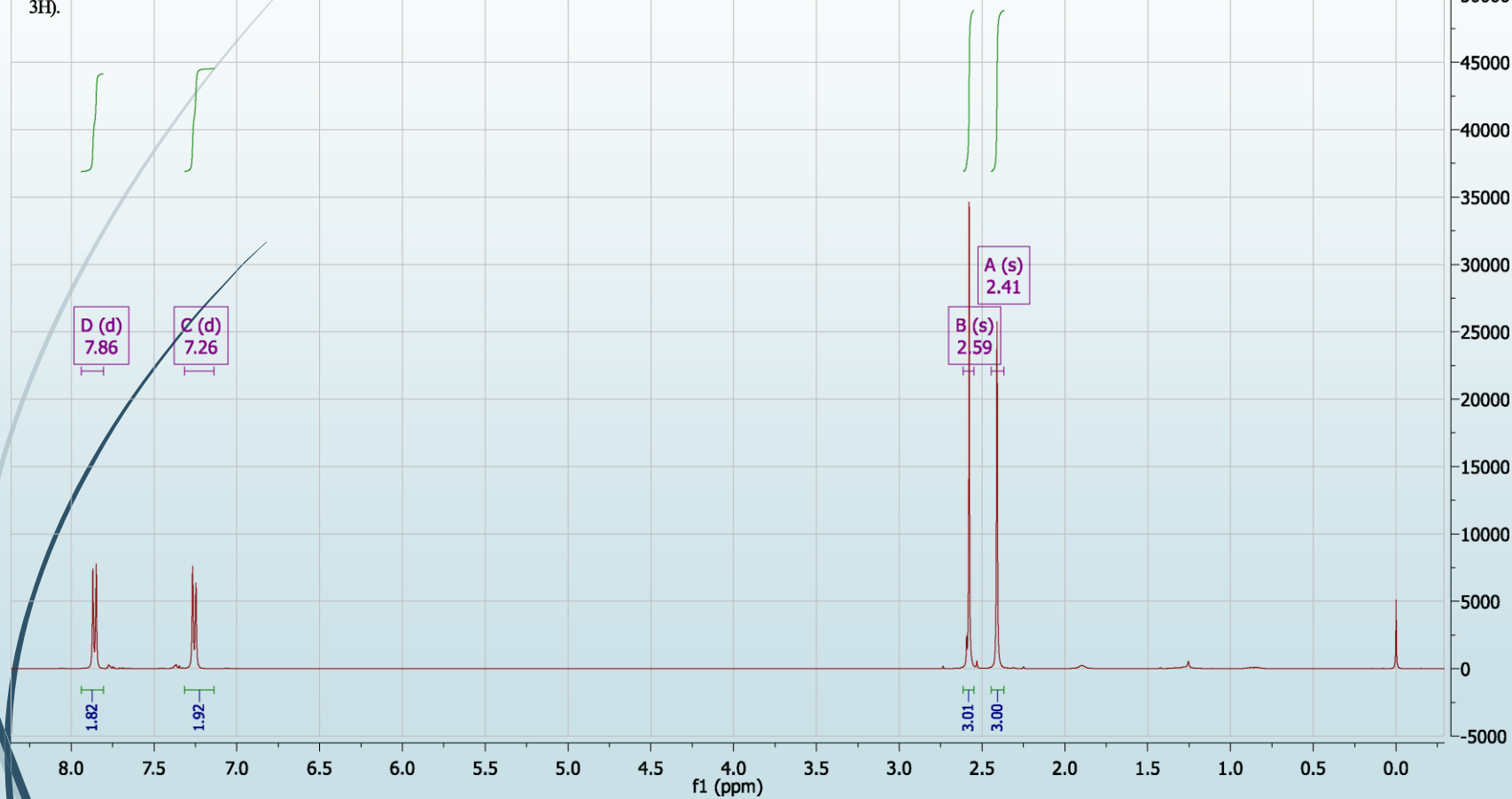


Esquema 4: Regeneración de la aromaticidad y obtención de la cetona libre.

Resultados y discusión

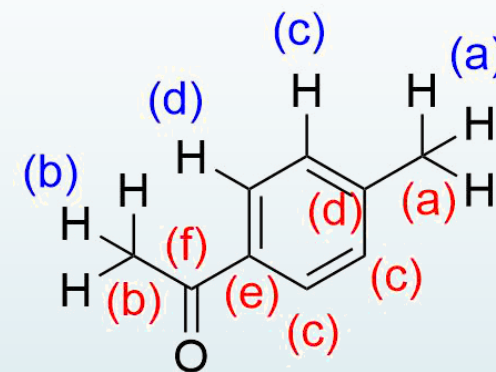
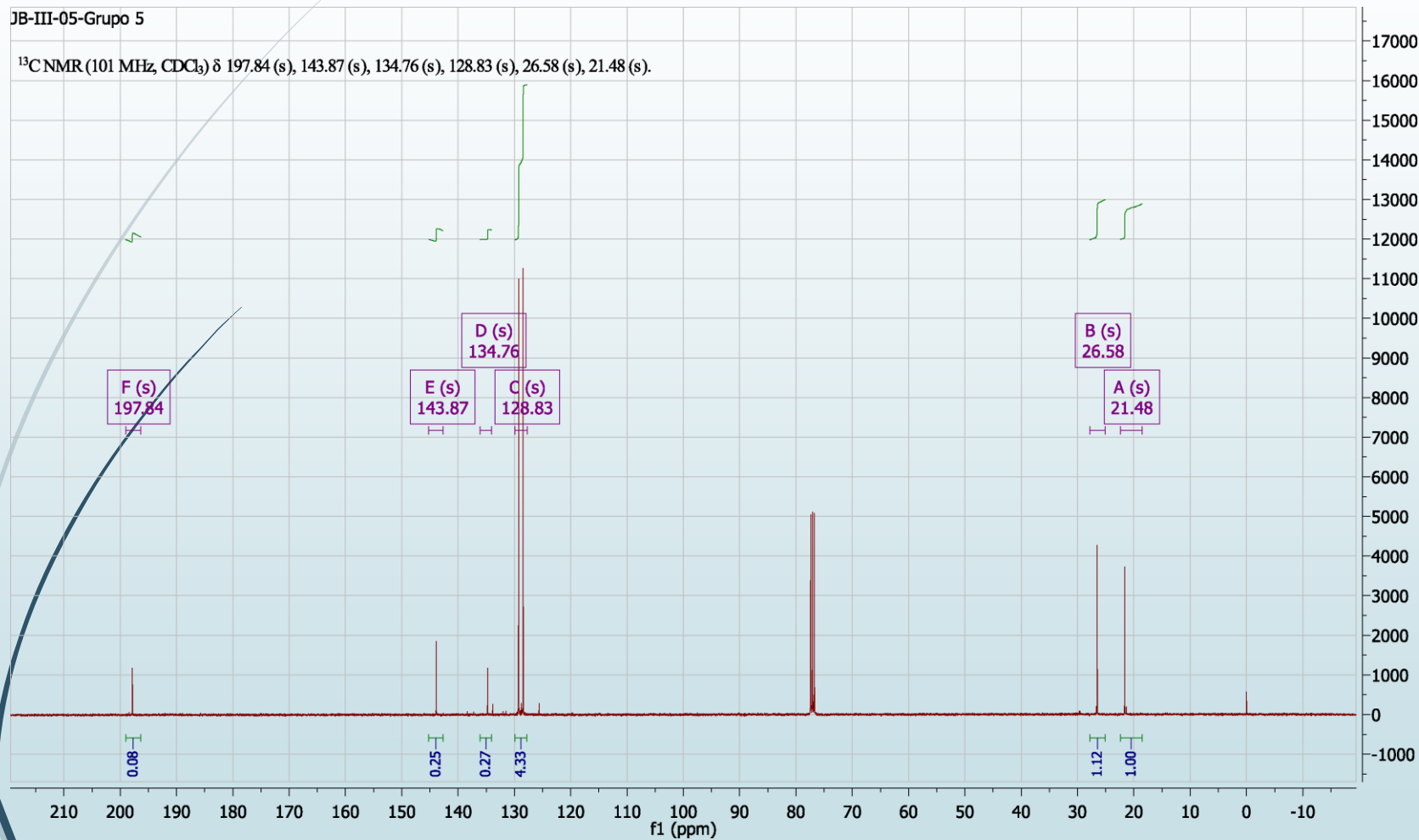
JB-III-05-Grupo 5

^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 7.86 (d, $J = 8.2$ Hz, 2H), 7.26 (d, $J = 7.9$ Hz, 2H), 2.59 (s, 3H), 2.41 (s, 3H).

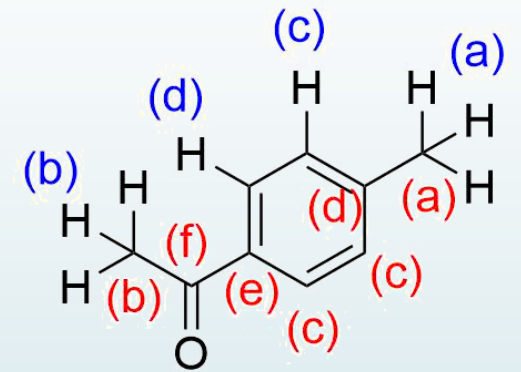
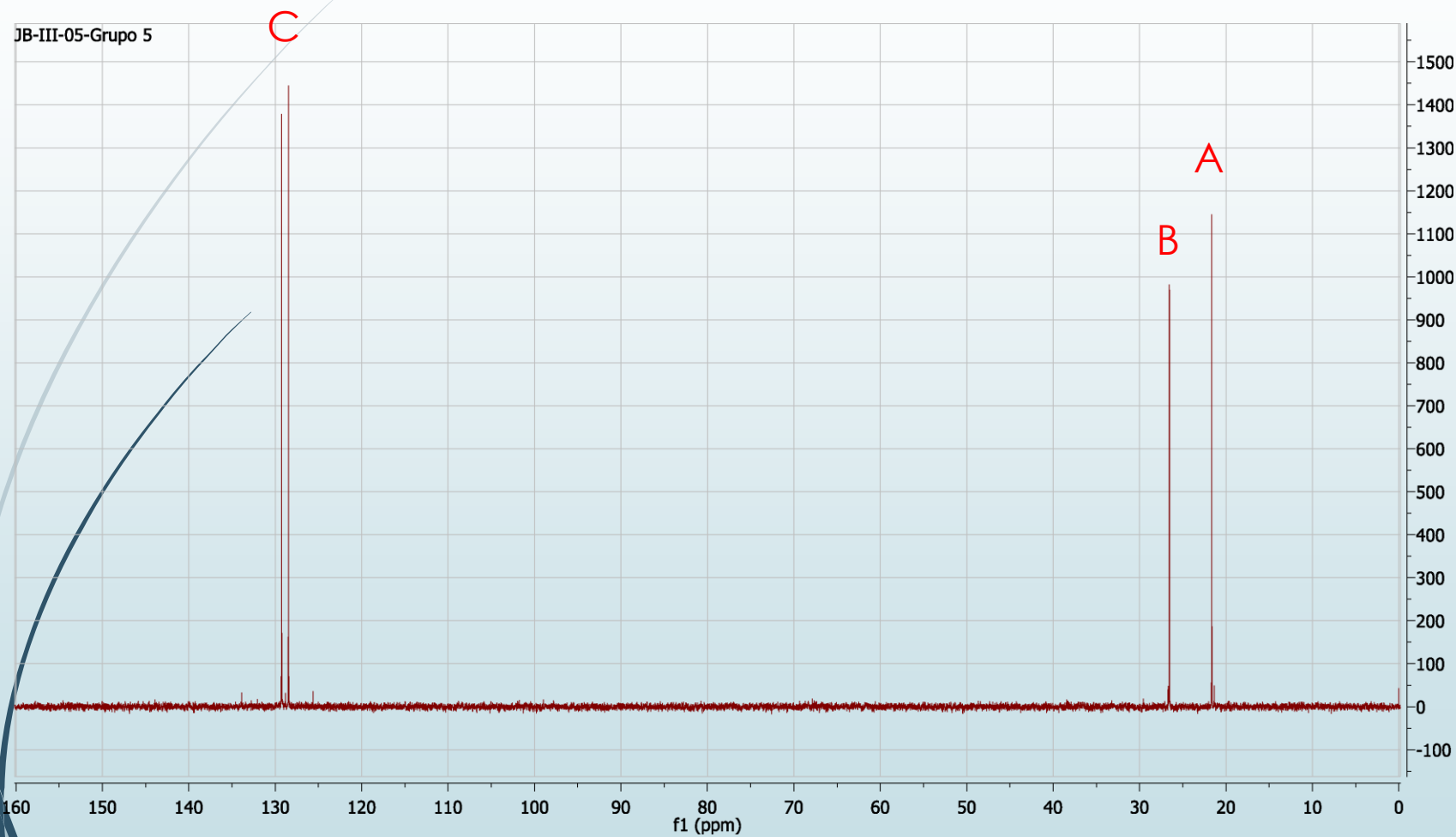


Señal	Int	Mul
a	3	s
b	3	s
c	2	d
d	2	d

Resultados y discusión



Resultados y discusión



Conclusiones

- Preparación de la 4-metilacetofenona con un rendimiento del 41 %.
- Determinación de la energía de los productos (*ortho*) y (*para*).
- Estudio del mecanismo de reacción, para dar explicación del producto *meta*.

Referencias

- Wang, Z. *Comprehensive Organic Name Reactions and Reagents*; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2010.
- Zheng, L.; Wei, Q.; Zhou, B.; Yang, L.; Liu, Z.-L. *Anti-Cancer Drugs* **2007**, 18, 1039–1044.
- Mukaiyama, T.; Sato, T.; Hanna, J. *Chemistry Letters* **1973**, 2, 1041–1044.
- Mukaiyama, T.; Shiono, M.; Sato, T. *Chemistry Letters* **1974**, 3, 37–38.
- Villiers, C.; Ephritikhine, M. *Angewandte Chemie International Edition in English* **1997**, 36, 2380–2382.
- Rele, S.; Talukdar, S.; Banerji, A.; Chattopadhyay, S. *The Journal of Organic Chemistry* **2001**, 66, 2990–2994.
- Huang, Y.-m. M.; Chen, W.; Potter, M. J.; Chang, C.-e. A. *Biophysical Journal* **2012**, 103, 342–351.
- Fulmer, G. R.; Miller, A. J. M.; Sherden, N. H.; Gottlieb, H. E.; Nudelman, A.; Stoltz, B. M.; Bercaw, J. E.; Goldberg, K. I. *Organometallics* **2010**, 29, 2176–2179.
- Zhong, J.-J.; Liu, Q.; Wu, C.-J.; Meng, Q.-Y.; Gao, X.-W.; Li, Z.-J.; Chen, B.; Tung, C.-H.; Wu, L.-Z. *Chem. Commun.* **2016**, 52, 1800–1803.
- Richards, I. C. *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*; John Wiley & Sons, Ltd, 2001.
- Uchiyama, M.; Matsumoto, Y.; Nakamura, S.; Ohwada, T.; Kobayashi, N.; Yamashita, N.; Matsumiya, A.; Sakamoto, T. *Journal of the American Chemical Society* **2004**, 126, 8755–8759.
- Barton, D. H. R.; Willis, B. J. *Journal of the Chemical Society D: Chemical Communications* **1970**, 1225.
- Kellogg, R. M.; Wassenaar, S. *Tetrahedron Letters* **1970**, 11, 1987–1990.

Gracias