

Nitrilek szelektív hidratálása amidokká Rh(I)(NHC)-komplexszel

Selective hydration of nitriles to amides with Rh(I)(NHC) complex catalyst

Dr. CZÉGÉNI Csilla Enikő^{1,2}, Dr. UDVARDY Antal¹, Dr. PAPP Gábor¹,

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Fizikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1., web: www.fizkem.unideb.hu

² Debreceni Egyetem, Műszaki Kar, Gépészmérnöki Tanszék, 4028 Debrecen, Ótemető u. 2-4., web: www.mecheng.unideb.hu

ABSTRACT

[RhCl(cod)(NHC)] (cod = η^4 -cyclo-1,5-diene; NHC = N-heterocyclic carbene) type complexes were synthesized in a one-step procedure without formation of the free NHC ligands or silver(I)-NHC transmetalation complexes^[1]. The structures of Rh(I)-NHC complexes were characterized in solution by ¹H and ¹³C NMR spectroscopy. In contrast, the solid-state structures of complexes were additionally confirmed by single-crystal X-ray diffraction analysis (SCXRD). We describe an efficient catalytic system for the selective hydration of aromatic nitriles to the corresponding amides in water/2-propanol solvent mixture, with tolerance of air and several functional groups. The Rh(I)-NHC complexes showed excellent catalytic activity in the hydration of aromatic nitriles, with efficient turnover frequencies (TOF, h⁻¹).

Keywords: nitrile hydration, N-heterocyclic carbene complexes, rhodium, solvent-free synthesis, homogeneous catalysis

KIVONAT

A [RhCl(cod)(NHC)] (cod = η^4 -ciklo-1,5-dién; NHC = N-heterociklusos karbén) típusú komplexeket egylépéses eljárással szintetizáltuk a szabad NHC karbén vagy a transzmetalláláshoz szükséges ezüst(I)-NHC komplexek előállításával nélkül^[1]. A Rh(I)-NHC komplexek oldatbeli szerkezetét ¹H és ¹³C NMR spektroszkópiával jellemeztük, míg a komplexek szilárd fázisú szerkezetét egykristály röntgendiffrakciós mérésekkel is megerősítettük. Az alkalmazott katalitikus rendszer hatékony különböző funkciós csoportot tartalmazó aromás nitrilek amidokká történő szelektív hidratálásában víz/2-propanol oldószerkeletben, a levegő oxigénjének kizárása nélkül. A Rh(I)-NHC komplexek kiváló katalitikus aktivitást mutattak aromás nitrilek hidratálásában, nagy óránkénti katalitikus ciklusszámokkal (TOF, h⁻¹).

Kulcsszavak: nitril hidratálás, N-heterociklusos karbén komplexek, ródium, oldószermentes szintézis, homogén katalízis

Köszönetnyilvánítás: A kutatás az RRF-2.3.1-21-2022-00009, azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg.

Hivatkozás:

[1] Czégéni, C.E.; De, S.; Udvardy, A.; Derzsi, N.J.; Papp, G.; Papp, G.; Joó, F. *Catalysts* **2020**, *10*, 125. <https://doi.org/10.3390/catal10010125>;