

Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

Institut für Biowissenschaften / Chemie / Mathematik / Physik

Fachgebiet: siehe Webseite bzw. Promotionsordnung

Betreuer: Prof. Dr. Peter Huy

Ihr Name: Djavid Mohammadi

(e-mail: djavid.mohammadi@uni-rostock.de)

Titel Ihrer Arbeit

Development and Application of Gas Surrogates in Organic Synthesis

Deutsche Zusammenfassung

Die organische Synthese unter Verwendung gasförmiger Verbindungen weist ein signifikantes Potenzial auf und ermöglicht atomökonomische Reaktionswege. In Forschungslaboren werden derartige Reaktionen jedoch oft vermieden, da die Handhabung und Lagerung von unter Druck stehenden, giftigen und hochentzündlichen Gasen schwierig und mit Gesundheitsrisiken verbunden sind. Dennoch hat sich die Verwendung von Kohlenstoffmonoxid und Wasserstoff als Reaktionspartner für eine Vielzahl von organischen Synthesen etabliert. Der Fokus der vorliegenden Doktorarbeit liegt auf der Anwendung von sichereren Gassurrogaten in der Synthese von komplexen Molekülen. Hierbei wurden $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ und NaBH_4 als Gasersatzstoffe für die Bildung von CO- und H_2 -Gas eingesetzt. Die Erzeugung beider Gase erfolgt bei Bedarf in geschlossenen Reaktionsbehältern, die als Ein- oder Zweikammersysteme aufgebaut sind. Das erhaltene CO ist für Palladium-katalysierte Kreuzkupplungen eingesetzt worden, während H_2 für die Reduktion von Alkenen und Alkinen sowie für reduktive Aminierung mittels palladiumkatalysierter Hydrierung verwendet worden ist. Die Implementierung dieser Methoden resultiert in einer signifikanten Verbesserung der Laborsicherheit. Des Weiteren sind Reduktion von C=O- und C=N-Doppelbindungen in einer speziellen Lösungsmittelmischung durchgeführt worden, wobei substöchiometrische Mengen an NaBH_4 zum Einsatz kommen. Die Bildung von hochentzündlichem H_2 -Gas wird durch dieses Verfahren verringert, was zu einer Verbesserung in Bezug auf Laborsicherheit führt.

Englisch Zusammenfassung

Organic synthesis with gaseous molecules has significant potential and enables atom-economical reaction pathways. However, such reactions are often avoided in research laboratories due to the perceived difficulty and health risks associated with handling and storing of pressurised, toxic and flammable gases. Nevertheless, the use of carbon monoxide and dihydrogen as reactants in a variety of organic reactions is well established. This doctoral thesis focuses on for the application of safer gas surrogates in the synthesis of complex molecules. The gas substitutes $\text{Fe}_2(\text{CO})_9$ and NaBH_4 were harnessed for the formation of CO and H_2 gas. The synthesis of both gases has been accomplished in closed reaction vessels, which are configured as either single- or dual-chamber systems. The CO obtained has been engaged in three different palladium-catalysed cross-couplings, while H_2 has been employed for the reduction of various alkenes and alkynes as well as in the reductive amination by means of palladium-catalysed hydrogenation. The implementation of this methodology

has been demonstrated to result in a significant optimisation of laboratory safety. Furthermore, the reduction of C=O and C=N double bonds has been achieved through the use of NaBH₄ in substoichiometric amounts in a distinct solvent mixture, which allows for a more effective use of the four hydride equivalents. This process has been shown to reduce the formation of highly flammable H₂ gas, thereby ensuring a safe method.