

СИНТЕЗ АНГІДРИДІВ 2-(9H-КАРБАЗОЛ-9-ІЛ)БЕНЗОЙНИХ КИСЛОТ

Аксьонова М. В., Дуда Д.-М. І., Литвин Р. З., Обушак М. Д.

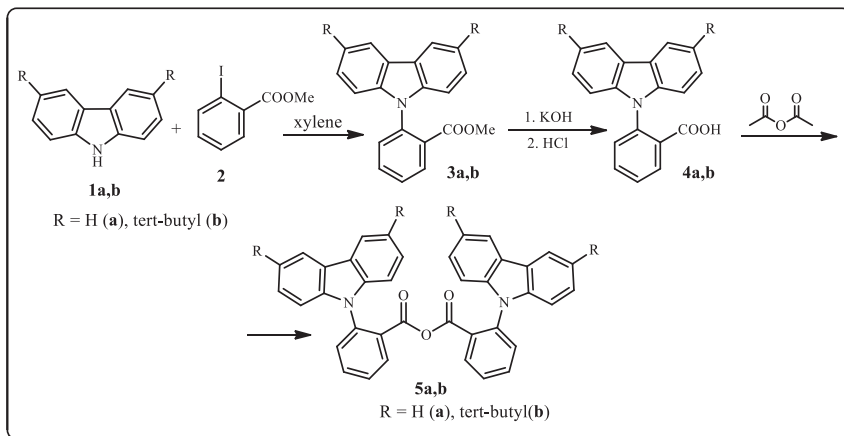
Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна

Myroslava.Aksonova@lnu.edu.ua

Досліджуючи реакції хлорангідриду кислоти **4a**, ми спостерігали окрім очікуваних продуктів реакцій, утворення ще однієї речовини, яку зрештою одного разу виділили колонковою хроматографією. Будову синтезованої сполуки з'ясували за допомогою ЯМР-спектроскопії. Це був ангідрид **5a**, який виявився напрочуд стійким та яскраво люмінесценціював у твердому стані, що спонукало нас до цільового синтезу подібних сполук. Адже ангідриди бензойних кислот, згідно наших попередніх DFT розрахунків, мають показувати феномен термоактивованої уповільненої флуоресценції (TADF) і тому є перспективними сполуками як емітери для конструювання вискоєфективних OLED-пристроїв.

Отож, визріла задача розробити практично зручний метод синтезу ангідридів **5**. Крім того, через високу реакційну здатність положень 3 і 6 карбазольного фрагменту, для створення сполук для оптоелектроніки часто використовують 3,6-дитретбутилкарбазол, що дозволяє екранувати реакційні положення, збільшити зовнішню квантову ефективність та підвищити стабільність і час роботи OLED-у.

З цією метою ми розробили синтетичні підходи до отримання ангідридів 2-(9H-карбазол-9-іл)бензойних кислот (**5a,b**): реакцією Ульмана з карбазолів **1a,b** та метилового естеру 2-йodobензойної кислоти синтезували сполуки **3a,b**, які перевели в кислоти **4** лужним гідролізом. Як показали наші експерименти, ангідриди **5a,b** найкраще отримувати кип'ятінням кислот **4a,b** у невеликій кількості оцтового ангідриду, протягом 5–6 год. Отримані ангідриди **5a,b** очищали колонковою хроматографією (елюент – гексан/дихлорометан, 1:1) та перекристалізовували зі суміші гексану та толуену.



Будову отриманих сполук надійно підтвердили ІЧ-спектрами та спектрами ядерного магнітного резонансу (^1H і ^{13}C).

Робота підтримана фінансово Міністерством освіти і науки України та Simons Foundation (Award No: "PD-Ukraine-00014574").