

Srpsko hemijsko društvo
Serbian Chemical Society



**53. SAVETOVANJE
SRPSKOG HEMIJSKOG
DRUŠTVA**

**PROGRAM
i
KRATKI IZVODI RADOVA**

**53nd Meeting of
the Serbian Chemical Society**

**Program
&
Book of Abstracts**

Prirodno-matematički fakultet, Kragujevac 10. i 11. jun 2016.
Faculty of Science, Kragujevac, Serbia, June 10 and 11, 2016

OH P08

Ispitivanje kinetike i mehanizma fenilselenolaktonizacije 4-pentenske kiseline katalizovane trietilaminom

Marina D. Kostić, Vera M. Divac, Nenad Ž. Janković, Jelena M. Petronijević
Prirodno-matematički fakultet Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac

U radu su predstavljeni rezultati ispitivanja kinetike i mehanizma fenilselenolaktonizacije 4-pentenske kiseline pomoću PhSeCl i PhSeBr, katalizovane trietilaminom. Glavni proizvod ove reakcije je γ -lakton koji u bočnom nizu sadrži PhSe-grupu koja posredstvom veoma jednostavnih hemijskih transformacija može lako biti prevedena u veliki broj korisnih funkcionalnih grupa. Takođe, značaj γ -laktone se ogleda i u tome što veliki broj molekula iz ove grupe predstavlja česte strukturne elemente mnogih biološki aktivnih jedinjenja.¹ Kinetika i mehanizam ovih reakcija ispitivani su UV-Vis spektrofotometrijski. Konstante brzine, kao i termodinamički parametri ($\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$) su određeni koristeći UV-Vis metodu na tri različite temperature (288, 298 i 308K), u tetrahidrofuranu kao rastvaraču. Dobijeni rezultati ukazuju na veću efikasnost PhSeCl kao ciklizacionog reagensa u odnosu na PhSeBr. Takođe, visoke negativne vrednosti za entropiju aktiviranja i niske vrednosti entalpije aktiviranja sugerišu S_N2 mehanizam nukleofilne supstitucije.

Kinetic and mechanistic studies of triethylamine-catalyzed phenylselenolactonization of 4-pentenoic acid

Marina D. Kostić, Vera M. Divac, Nenad Ž. Janković, Jelena M. Petronijević
Faculty of Science Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac

The aim of this work is exploration of kinetic and mechanistic aspects of triethylamine-catalyzed phenylselenolactonization of 4-pentenoic acid by means of phenylselenenyl halides (PhSeCl and PhSeBr). The major product of these reactions is γ -lactone with PhSe-functionalized side chain, which can be easily transformed in numerous useful functional groups by very simple chemical reactions. In addition, the importance of γ -lactones is reflected in the fact that a large number of these molecules present structural units of biologically active compounds.¹ The kinetic and mechanism for these reactions have been investigated by the UV-Vis spectrophotometry. The rate constants, as well as thermodynamic parameters ($\Delta H^\ddagger$, $\Delta S^\ddagger$) have been determined using UV-Vis method at three different temperatures (288, 298 and 308K) in THF as solvent. The large negative values for the entropy of activation and low enthalpy of activation with both reagents support the S_N2 mechanism, and obtained values for the rate constants have indicated higher reactivity of PhSeCl as reagent for cyclization.

Ovaj rad je finansijski potpomognut od strane Ministarstva prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije, projekat br. 172011.

1. T. Janecki, Natural Lactones and Lactams: Synthesis, Occurrence and Biological Activity, Wiley VCH, Verlag, 2013.