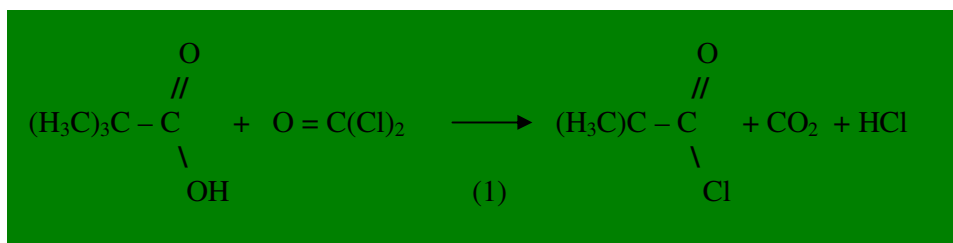


## Eine hochselektive und umweltschonende Synthese von Pivalinsäurechlorid

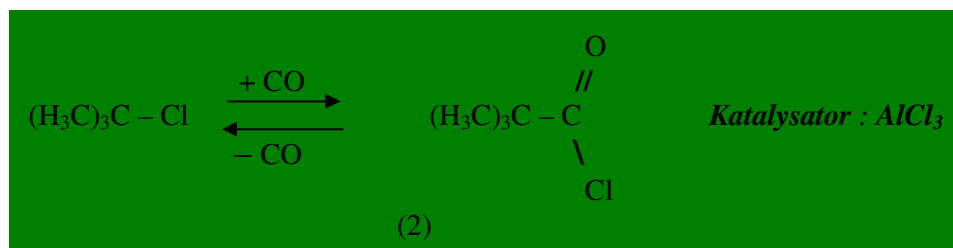
**Abstract:** Insertion of carbon monoxide into tert-butyl chloride, catalyzed by aluminum chloride, provides a process for the generation of pivaloyl chloride, which is excellently satisfying the requirements both of economy and of ecology.

Industrielle Zwischenprodukte der Organischen Chemie sind natürlicherweise tragende Glieder einer Wertschöpfungskette. Die ausgeübten Verfahren zu ihrer Herstellung folgen oft dem Kalkül *abgeschriebener* Anlagen und berücksichtigen daher weniger die Wohlfeilheit der Eingangsstoffe oder die Umweltverträglichkeit der Koppelprodukte. Dieser Trend kann eine Verstärkung erfahren, wenn das Produktionsvolumen eine kritische Größe nicht überschreitet und sich die vergleichsweise hohen Investitionskosten dann innovationshemmend auswirken.

Ein Beispiel hierfür ist die Synthese von Pivalinsäurechlorid (Pivaloylchlorid) aus Pivalinsäure und Phosgen oder Thionylchlorid, bei der neben Chlorwasserstoff noch Kohlendioxid bzw. Schwefeldioxid freigesetzt wird (Gleichung 1).



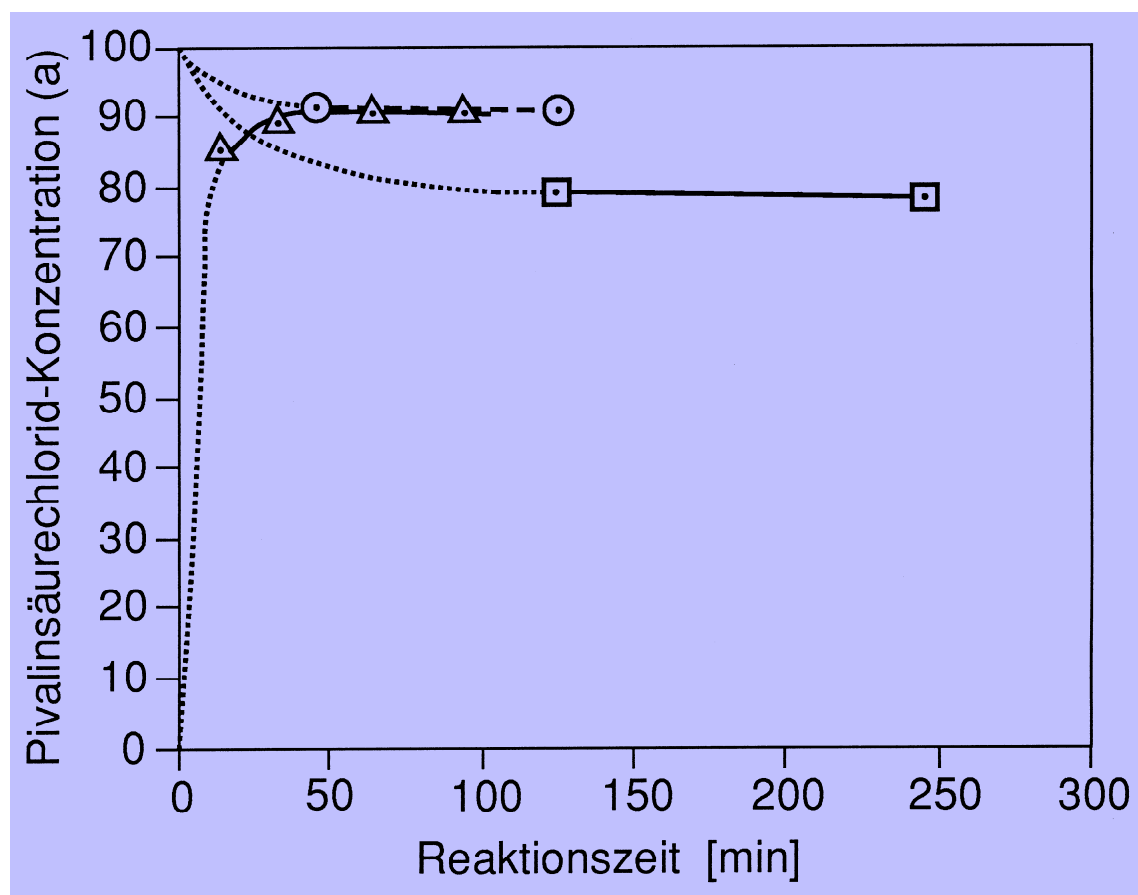
Im Gegensatz dazu bietet die durch *Lewis-Säure* katalysierte Einschubung von Kohlenmonoxid in tert-Butylchlorid eine Verfahrensvariante, die das gewünschte Säurechlorid mit hoher Selektivität (97-99%) und ohne die Erzeugung umweltbelastender Koppelprodukte liefert (Gleichung 2).



Charakteristisch für diesen besonders umweltfreundlichen und wirtschaftlichen Pivalinsäurechlorid-Prozeß, der außerdem die Herstellung von Pivalinsäure überflüssig macht, sind die niedrigen Reaktionstemperaturen unterhalb 10 °C, Kohlenmonoxid-Drucke zwischen 100 und 300 bar sowie die Verwendung von Aluminiumchlorid als Katalysator. Unter den genannten Reaktionsbedingungen stellen sich infolge eines chemischen Gleichgewichts Konzentrationen von Pivalinsäurechlorid und tert-Butylchlorid ein, die gemäß dem Massenwirkungsgesetz vom Kohlenmonoxid-Druck abhängig sind.

In der folgenden Graphik ist der zeitliche Verlauf der Gleichgewichtseinstellung anhand der Pivalinsäurechlorid-Konzentrationen für die Druckstufen von 100 und 300 bar und bei einer Reaktionstemperatur von 7 °C dargestellt. Dabei betragen die Mengen des verwendeten Lösungsmittels (Dichlormethan) und des Katalysators 100 Gewichtsprozent bzw. 1,5 Molprozent

zente, jeweils bezogen auf das Edukt.



**Legende:** (a) Flächenprozentage der gaschromatographischen Analyse ohne Lösungsmittel.

*Dr. Kaspar Bott, Mannheim im Juni 2009*

## References

1. A.T. Balaban, C.D. Nenitzescu, *Liebigs Ann. Chem.*, **1959**, 625, 66-73.
2. J.-J. Brunet, P. Legars, Y. Peres, I. Tkatchenko, S. Lécolier, *Tetrahedron Lett.*, **1988**, 29, 4569-4572.
3. H.U. Blank, E. Wolters (Bayer AG), EP 70 463, **1981**; *Chem. Abstr.* **1983**, 98, 160 275.
4. K. Bott (BASF AG), EP 252 408, **1986**; *Chem. Abstr.* **1988**, 109, 75 703.
5. K. Bott, R. Irnich (BASF AG), EP 301 446, **1987**; *Chem. Abstr.* **1989**, 110, 172 710.

