

# Aril-perfluoralkil szulfidok szintézise

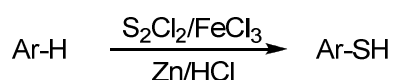
Harsányi Antal, III. évf. Kémia BSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezető: **Dr. Rábai József** egyetemi docens \*  
ELTE Szerves Kémiai Tanszék

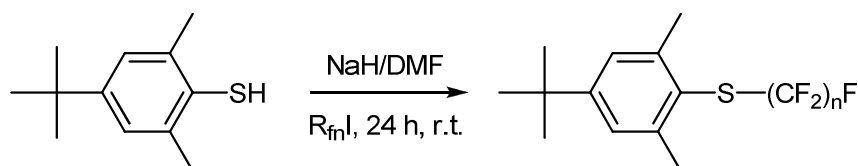
A modern gyógyszer- és növényvédőszer-ipar által tervezett új molekulák egyre nagyobb hányadában találhatunk fluor-tartalmú funkciós csoportokat. A trifluormetiltio csoport egyike ezeknek a csoportoknak, több szabadalmaztatott gyógyszer és növényvédőszer molekulában is megtalálható [1-3].

Munkám során először polialkil-aril-merkaptánok szintézisével foglalkoztam. Új, hatékony és gazdaságos módszert dolgoztam ki (1. ábra) több tri- és tetraalkil-tiofenol szintézisére, a módszert optimalizáltam valamint méretnövelési kísérleteket végeztem. A módszer segítségével közepes/jó hozammal állíthatunk elő aromás merkaptánokat aromás szénhidrogénekből.



1. ábra: Új módszer trialkil- és tetraalkil-tiofenolok előállítására.

Feladatomból volt, hogy az új módszerrel előállított 4-*terc*-butil-2,6,-dimetil-tiofenolból irodalmi recept [4] analógiájára előállítsam a (4-*terc*-butil-2,6,-dimetilfenil)-perfluoralkil-szulfidok teljes sorozatát (2. ábra, n=4,6,8,10), valamint a trifluormetil-származékot is. Az irodalmi módszer alkalmazásával a hosszú láncú aril-perfluoralkil-szulfidokat jó termeléssel (70-86 %) állítottam elő.



2. ábra: (4-*terc*-Butil-2,6,-dimetilfenil)-perfluoralkil-szulfidok szintézise.

A (4-*terc*-butil-2,6,-dimetilfenil)-trifluormetil-szulfid előállítására a hosszabb láncú származékokra alkalmazott módszer módosított változatát használtam. A nátrium-(4-*terc*-butil-2,6-dimetil)tiofenolát DMF-es oldatát tartalmazó lombikot ismert tömegű (1,3 ekvivalens)  $\text{CF}_3\text{I}$ -t tartalmazó léggömbbel lezártam és a reakcióelegyet egy éjszakán át keverttem. A reakcióelegy feldolgozása vízgőz-desztillációval történt, ami 82%-os termeléssel eredményezte a kívánt aril-trifluormetil-szulfidot.

Az előbbi trifluormetil-szulfid előállítására kidolgozott módszerrel számos, különféle funkciós csoportokkal rendelkező aril-trifluormetil-szulfidot állítottam elő jó/kiváló termeléssel (75-89 %). A módszer előnye a korábbi eljárásokhoz képest az, hogy nem igényel semmilyen különleges berendezést (nyomásálló edény, UV-lámpa, stb.) valamint, hogy a vízgőz-desztillációt követően a termék 97-99 %-os tisztaságú (GC), további tisztítást nem feltétlen igényel.

\*Ez a munka az OTKA K 062191 számú "Fenntartható fluoros kémia" program részét képezi

- [1] Becker, A.: *Inventory of Industrial Fluorobiochemicals*, Eyrolles, Paris, 23-32, (1996)
- [2] Kirsch, P.: *Modern Fluoroorganic Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim, 131-135 (2004)
- [3] Boiko, V. N.: *Beilstein J. Org. Chem.*, 6, 880-921 (2010)
- [4] Feiring, A. E.: *J. Fluorine Chem.*, 24, 191-203 (1984)