

# Aril-trifluoretil éterek előállítása palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban

Csenki János Tivadar, III. évf. vegyész

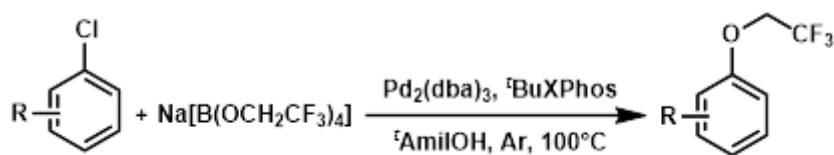
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Novák Zoltán** egyetemi adjunktus  
ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék  
**Pethő Bálint** doktorandusz  
ELTE Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

A fluortartalmú vegyületek széles körben elterjedtek az anyagtudományban, az agrokémiában, valamint a gyógyszeriparban is. Ezt mutatja az is, hogy napjainkban a gyógyszermolekulák 20-25%-a tartalmaz fluort. Hatását elsősorban a metabolikus stabilitás és a biohasznosulás növelésében fejt ki.

Fluortartalmú csoport aromás magba történő bevitelére egy lehetőség a trifluoretokilezés. Aril-trifluoretil éterek előállítására számos lehetőség kínálkozik a „klasszikus” nukleofil szubsztitúciótól kezdve, a réz segített vagy réz katalizált reakciókon keresztül, a palládium-katalizált keresztkapcsolásokig. Mindegyiknek vannak előnyei és hátrányai, mind árban, mind hatékonyságban.

Munkám során aromás, illetve heteroaromás klórszármazékokat alakítottam át palládium-katalizált keresztkapcsolási reakciókban borátsók segítségével aril-trifluoretil éterré. A kutatócsoport a korábbiakban kifejlesztett egy új típusú metoxilező eljárást tetrametoxi borátsók felhasználásával. Ezt terjesztettük ki trifluoretokilezésre: optimáltuk a reakciót, teszteltük az alkalmazhatóságát.



Az új típusú trifluoretokilezési eljárás optimált változata

Az ábrán látható módon a kiindulási aril-kloridot átalakítottuk nátrium tetrakis(2,2,2-trifluoretoksi)borát felhasználásával *tert*-amil alkohol oldószerben, 100°C-on, Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (Trisz(dibenzilidénaceton)dipalládium(0)) katalizátor és egy kereskedelmi forgalomban kapható foszfán-ligandum, a <sup>t</sup>BuXPhos mellett.

A kidolgozott eljárásról általánosságban elmondható, hogy elektronszívó csoportot tartalmazó szubsztrátum esetén a reakció könnyebben végbemegy, míg elektronszállító csoportot tartalmazó aril kloridok esetében, magasabb reakcióhőmérséklettel, illetve hosszabb reakcióidővel kell számolnunk a hatékony kapcsolat megvalósításához.