

4,4,4-Trifluorocrotononitrile(abb.FMCN)

(4,4,4-トリフルオロクロトノニトリル)

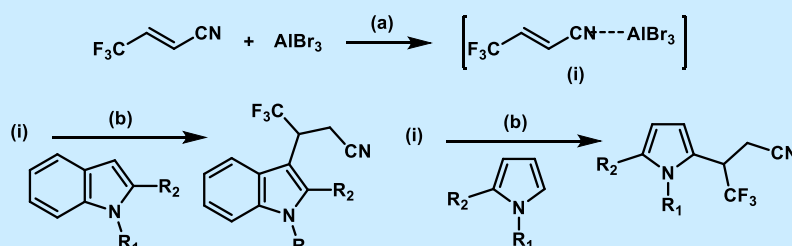


Purity	97%
CAS Number	406-86-0
Molecular Formula	C4H2F3N
Molecular Weight	121.06

官能性トリフルオロアルキル基のヘテロ環への導入法を提案。N-アルキルインドール、N-アルキルピロールのC-アルキル化に於いてはFMCNは各種溶剤中でも高温下の反応条件でも環にはC-アルキル化反応は全く示さなかった。またフリーデルクラフツ触媒存在下でもC-アルキル化は低収率(25%)に留まった。

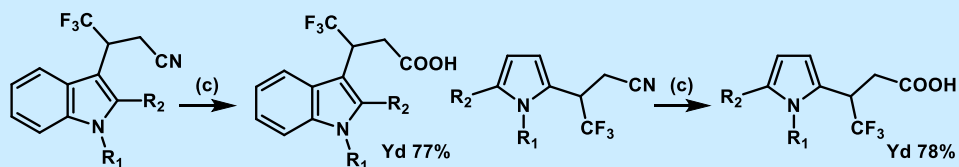
FMCNとAlBr₃とをあらかじめ混合し、均一触媒とすることによりN-アルキルインドール、N-アルキルピロールのC-アルキル化が好収率で進行することを見出した。またこのトリフルオロアルキルニトリル基は容易に対応するカルボン酸に変換できることを示した。

Application



(a) CH₂Br₂, 20°C, (b) CH₂Br₂, 5°C*1hr*20°C*6hr, NaHCO₃/H₂O

No.	R1	R2	Yields Indoles	Yields Pyrroles
1,4	CH ₃	H	73%	70%
2,5	H	H	55%	58%
3,6	H	CH ₃	62%	72%



(c) H₂O 25%KOH 75°C*2hr+HCl/H₂O,EA

Fluorine Notes, August 2023, by A.L.Sigan et al.

Properties:

Appearance	Liquid
Boiling point, °C	84-85

Packing:

UN, PG:	-
---------	---