

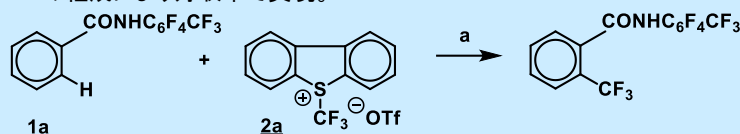
2,3,5,6-Tetrafluoro-4-(trifluoromethyl)aniline

2,3,5,6-テトラフルオ-4-（トリフルオロメチル）アニリン



Purity	97%
CAS Number	651-83-2
Molecular Formula	C7H2F7N
Molecular Weight	233.09

1. トリフルオロメチル化芳香族は医薬の基本構造として検討されている。Pd 触媒や Cu 触媒での活性化（ハロゲン、ホウ素）芳香族と CF₃ 化剤とのクロスカップリング合成例の報告はあるが、芳香族の C-H 結合に直接 CF₃ 基を導入する手段はまだ少ない。酸性芳香族アミドの o-位選択的 CF₃ 基の導入を Pd-Cu 触媒 + CF₃-C₆F₄-配向基導入 + アミド系添加剤 + TFA の組成により好収率で実現。



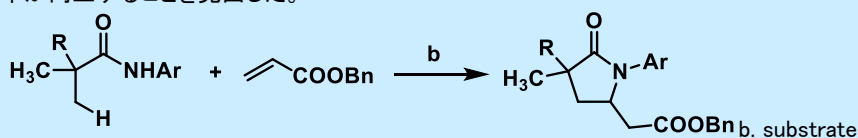
a. 1a; 0.1mmol, 2a; 0.15mmol, Pd(OAc)₂ 10mol%, TFA 1mmol, additive 15eq, DCE 3ml, 130°C*24hr, isolated yield, abb. NMF; N-methylformamide

No.	Aromatic substrates	additives	Cu(OAc) ₂	Yield(%)
2	C ₆ H ₅ CONHC ₆ F ₄ CF ₃	DMF 15eq	1 eq	23
3	C ₆ H ₅ CONHC ₆ F ₄ CF ₃	DMF 15eq	2 eq	57
6	C ₆ H ₅ CONHC ₆ F ₄ CF ₃	NMF 15eq	2 eq	79
3c	CH ₃ C ₆ H ₅ CONHC ₆ F ₄ CF ₃	NMF 15eq	2 eq	94
3e	CH ₃ OC ₆ H ₅ CONHC ₆ F ₄ CF ₃	NMF 15eq	2 eq	89

J. Am. Chem. Soc., 2012, 134, p11948-11951

Application

2. 脂肪族 C-H 結合へのオレフィン付加を Pd(OAc)₂/Cu(OAc)₂ 触媒系、N-アリールピバール酸/ベンジルアクリレートモデルとして検討。アリール基を電子吸引性により収率が向上することを見出した。



0.2mmol, 0.1ml C₆H₅CH₂OCOCH=CH₂, 10mol% Pd(OAc)₂, 2.0eq LiCl, 1.1eq Cu(OAc)₂, 1ml DMF, N₂, 120°C*12hr

No.	R	Ar	AgOAc (eq)	Yd (%)
1a	CH ₃	-C ₆ H ₅	-	1
1b	CH ₃	-C ₆ H ₃ (NO ₂) ₂	-	47
1c	CH ₃	-C ₆ F ₅	-	71
1d	CH ₃	-C ₆ F ₄ CF ₃	-	88
8a	H	-C ₆ F ₅	1.1	55
9a	H	-C ₆ F ₄ CF ₃	1.1	91
10a	CH ₃	-C ₆ F ₄ CF ₃	1.1	94

J. Am. Chem. Soc., 2010, 132, p3680-3681

Properties:

Appearance

Liquid

Boiling point, °C

185-186