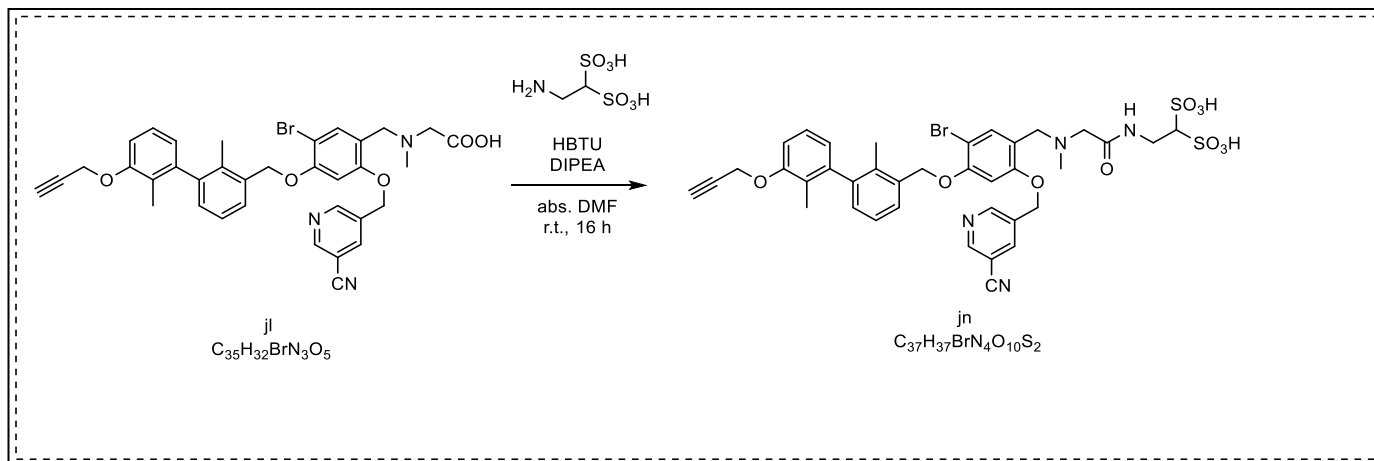


FK_409: Br-CN: Sulfon-Kupplung



Edukt	Summenformel	M [g/mol]	m [mg]	n [μmol]	ρ [g/cm ³]	V [ml]	eq.
Carbonsäure jl	$\text{C}_{35}\text{H}_{32}\text{BrN}_3\text{O}_5$	574.66	120.0	208.8			1.00
Amin IB	$\text{C}_{14}\text{H}_{34}\text{N}_2\text{O}_6\text{S}_2$	390.57	407.8	1044.1			5.00
HBTU	$\text{C}_{11}\text{H}_{16}\text{F}_6\text{N}_5\text{OP}$	379.25	174.2	459.4			2.20
DIEPA	$\text{C}_8\text{H}_{19}\text{N}$	129.25	54.0	417.6			2.00
abs. DMF						3.00	
	mg/μmol		m 100 % [mg]	n 100 % [μmol]	Ausbeute [mg]	Ausbeute [μmol]	Ausbeute [%]
Produkt	$\text{C}_{37}\text{H}_{37}\text{BrN}_4\text{O}_{10}\text{S}_2$	841.76	175.78	208.8	110.0	130.7	62.6

Versuchsdurchführung

- Carbonsäure **jl** und Amin **IB** in abs. DMF unter Ar vorgelegt und abs. DIPEA hinzu, Zugabe von HBTU, rühren lassen über Nacht
- RK (analyt. RP-HPLC, 10-90%) -> Rkt beendet
- Filtriert über Celite, LM entfernt, Rückstand in 1:1 MeCN/H₂O aufgenommen
- RP-HPLC, C18 semi-präp. (35-60% MeCN, Rt = 9 min)
- Lyophilisation, rühren lassen mit Amberlyst WET 15 H über Nacht, filtriert, Lyophilisation
- FK_409-X** (DMSO-d₆), farbloses Pulver, schlecht in wässri/MeCN Lösung löslich