

アセチレンコバルト錯体を利用したジベンゾアザシクロオクチン誘導体の簡便合成法の開発

(東医歯大生材研) ○鍋倉 涼斗・坂田 優希・細谷 孝充

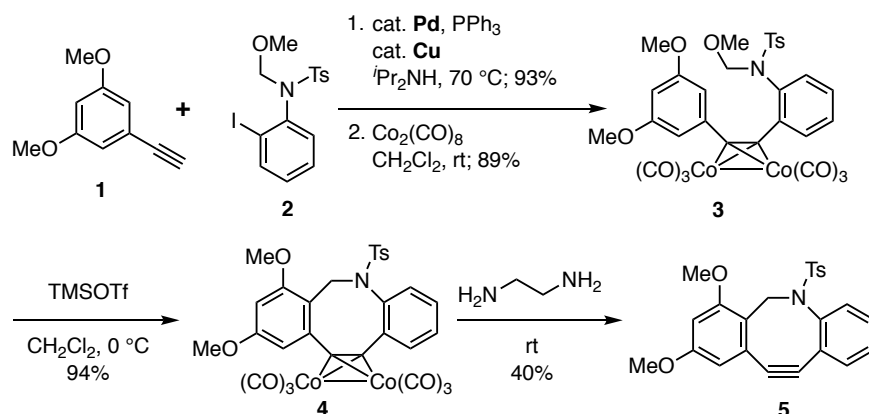
Facile Synthesis of Dibenzazacyclooctynes Utilizing Acetylene–Cobalt Complex

(IBB, Tokyo Med. & Dent. Univ.) ○Ryoto Nabekura, Yuki Sakata, Takamitsu Hosoya

Strained cycloalkynes such as cyclooctynes are widely used in various research fields owing to their clickability with azide compounds including azido-installed biomacromolecules. However, it is not easy to prepare multifunctionalized cycloalkynes by the conventional synthetic methods due to various limitations. Herein, we report a concise method for preparation of dibenzazacyclooctyne derivatives by intramolecular cyclization of diarylacetylene–cobalt complex and subsequent decomplexation, which would be applicable to the synthesis of multifunctional cycloalkynes.

Keywords : Cycloalkyne, Acetylene–Cobalt Complex, Click Reaction, Cyclization, Nitrogen–Containing Compound

シクロオクチン等の環状アルキンは、アジド化合物と触媒なしで効率的に反応することから生体分子の化学修飾等に広く利用されている¹。しかし、既存の環状アルキン合成法は機能拡張性に乏しいため、多機能性環状アルキンの合成は容易ではない。今回、アセチレンコバルト錯体の性質を利用することで、ジベンゾアザシクロオクチン誘導体の簡便合成に成功した。すなわち、入手容易なフェニルアセチレン誘導体 **1** と *o*-ヨードアニリン誘導体 **2** を菌頭カップリングにより連結した後、 $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ を作用させることで、ジアリールアセチレンコバルト錯体 **3** へと変換した。これを TMSOTf で処理することで環化反応が進行し、八員環成績体 **4** を得た。この環化体 **4** をエチレンジアミン中、室温で攪拌することで、ジベンゾアザシクロオクチン誘導体 **5** を合成することに成功した。本手法は、多機能性環状アルキン合成への応用が期待される。



References: (1) N. J. Agard, J. A. Prescher, C. R. Bertozzi, *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 15046.