

イリジウム触媒 C–H/C–H カップリング (3) : エチルアレーンとベンゾフランの反応による π 共役分子合成

(京都大学) ○大谷 直樹・大村 智通・杉野目 道紀

Iridium-Catalyzed C–H/C–H Coupling. Part 3. Synthesis of π -Conjugated Molecules by Reaction of Ethylarenes with Benzofuran (*Kyoto University*) ○Naoki Ohtani, Toshimichi Ohmura, Michinori Suginome

We report a new synthetic access to π -conjugated molecules starting from ethylarenes and benzofurans. In the presence of an iridium catalyst and a hydrogen scavenger, dehydrogenative carbon–carbon bond formation between terminal methyl group of **1** and C2 position of **2** took place efficiently to afford benzofuran **3** bearing (*E*)- β -styryl group at the C2 position in stereoselective manner. The reaction proceeded through dehydrogenation of the ethyl group of **1** followed by C–H addition of the C(sp²)–H of **2** to the double bond formed by dehydrogenation.

Keywords : C–H Activation; Dehydrogenative Coupling; Dehydrogenation Reaction; Ethylbenzene; Benzofuran

ビニルアレーンの水素化体であるエチルアレーンは、安定で保管や輸送が容易であり、市販品も多い。このため、ビニルアレーンを用いる合成反応をエチルアレーンで代替することができれば、利用可能な基質が大幅に拡張し効率的な分子創出に資すると期待できる。今回、エチルアレーンとベンゾフランから π 共役分子を合成する反応を開発したので報告する。

イリジウム触媒と水素補足剤の存在下、エチルベンゼン **1** とベンゾフラン **2** を *p*-キシレン中で加熱したところ、**1** のエチル基末端と **2** の 2 位で脱水素を伴う炭素–炭素結合形成が進行し、2 位に(*E*)- β -スチリル基を有するベンゾフラン **3** が立体選択的に生成した。**1** のエチル基の脱水素化と、生じた炭素–炭素二重結合に対する **2** の 2 位 C(sp²)–H の付加を経て **3** に至ったと考えられる。

