

イリジウム錯体触媒による含窒素複素環上のメチル基のアルコールによる C-C 結合形成反応

(京大院人環¹) ○小野田 光貴¹・藤田 健一¹

Iridium Catalyzed C-C Bond Formation of Methyl Groups of N-Heterocyclic Compounds with Alcohols (¹*Graduate School of Human and Environmental Studies, Kyoto University*)

○Mitsuki Onoda¹, Ken-ichi Fjita¹

N-Heterocyclic compounds have been widely used in the fields of medicine, fragrance, and functional materials. The method of extending alkyl chain using a methyl group is useful but difficult, and the reaction of methyl groups of N-heterocyclic compounds with *n*-BuLi followed by reaction with an alkyl halide is the traditional method. However, this method suffers from formation of undesired stoichiometric amounts of wasteful byproducts. We present here, catalytic performance of iridium complexes for the C-C bond formation of methyl groups of heterocyclic compounds with alcohols was investigated.

For example, the reaction of 4-methylpyridine with benzyl alcohol in the presence of base and a catalytic amount of an Ir complex at 120 deg. in THF gave 4-phenethylpyridine in high yield. This catalytic system was applicable for the synthesis of various alkylated heterocyclic compounds from alcohols.

Keywords : Coordination Chemistry; Iridium; Alcohol; N-Heterocyclic Compounds; C-C Bond Formation

ピリジン、ピラジンを始めとした、含窒素複素環式化合物及び、それらの誘導体は、薬剤や天然物など、広範に使用されている。含窒素複素環式化合物の環上にアルキル鎖を導入する反応は有用性が高い一方で難易度が高い。古典的な手法においては、メチル基を有する芳香族含窒素複素環式化合物に対して、*n*-BuLi とアルキルハライドを作用させる手法が使われてきたが、原子効率に難があり、近年では、原子効率のよい、アルコールを反応剤として用いた、錯体触媒による C-C 結合形成反応に注目が集まっている。本研究では、アルキル化剤として第一級アルコールを用いることにより、原子効率の良いイリジウム錯体触媒による含窒素複素環化合物上のメチル基の C-C 結合形成反応について調査した。

例えば、触媒量のイリジウム錯体と塩基存在下、4-メチルピリジンとベンジルアルコールの反応を THF 溶媒中、120 °Cで行ったところ、4-フェネチルピリジンが高収率で得られた。本触媒系は、メチル基を有する含窒素複素環化合物とアルコールから様々なアルキル化体を得る手法として有用である。

