

イリジウム触媒による 2-(ピロリジン-1-イル)アルキルベンゼンの タンデム脱水素化-分子内 C-H/C-H カップリング

(京都大学) ○大北 凱勢・八木 魁人・大村 智通・杉野目 道紀
Iridium-Catalyzed Tandem Dehydrogenation-Intramolecular C-H/C-H Coupling of
2-(Pyrrolidin-1-yl)alkylbenzenes (*Kyoto University*) ○Kaisei Okita, Kaito Yagi, Toshimichi
Ohmura, Michinori Suginome

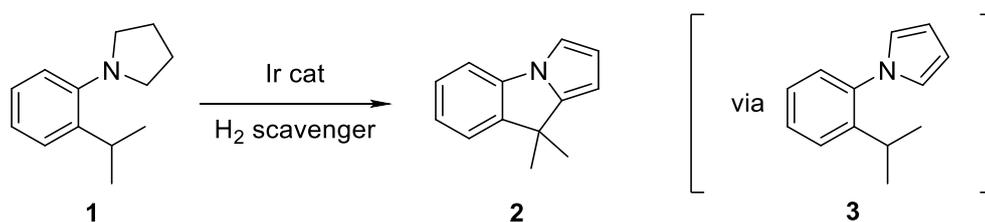
We have previously reported an iridium-catalyzed intramolecular C-H/C-H coupling of 2-(dimethylamino)alkylbenzenes to afford *N*-methylindoles and *N*-methylindolines. This reaction proceeds through dehydrogenation of the alkyl group to form carbon-carbon double bond, which then undergoes intramolecular addition of the *N*-methyl C(sp³)-H bond. Here, we report a related conversion of 2-(pyrrolidin-1-yl)alkylbenzenes.

Isopropylbenzene **1** bearing a pyrrolidin-1-yl group at the *ortho*-position was heated in mesitylene in the presence of an iridium catalyst and a hydrogen scavenger. The C-C bond-forming cyclization took place to afford *N*-containing tricyclic compound **2** in good yield. This reaction proceeded through dehydrogenation of the pyrrolidine ring to form **3**, which underwent intramolecular C-H/C-H coupling, resulting the formation of **2**.

Keywords : C-H activation; oxidative coupling; dehydrogenation; cyclization; *N*-containing heterocycles

我々は、2-(ジメチルアミノ)アルキルベンゼンから *N*-メチルインドールおよび *N*-メチルインドリンが生成するイリジウム触媒 C-H/C-H カップリングを報告している¹⁾。この反応では、アルキル基の脱水素化による炭素-炭素二重結合の形成と、これに対する *N*-メチル C(sp³)-H 結合の分子内付加が連続的に進行する。今回、ジメチルアミノ基をピロリジン-1-イル基に置き換えた 2-(ピロリジン-1-イル)アルキルベンゼンの変換に研究を展開した。

イリジウム触媒と水素捕捉剤の存在下、オルト位にピロリジン-1-イル基を有するイソプロピルベンゼン **1** をメシチレン中で加熱したところ、含窒素三環式化合物 **2** が効率よく生成することを見出した。ピロリジン環の脱水素化によりピロール **3** が形成された後、分子内 C-H/C-H カップリングが進行し、**2** に至ったと考えられる。



1) T. Ohmura, K. Yagi, S. Kusaka, M. Suginome, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 3152.