

金触媒を用いた有機蛍光分子 1,3a,6a-トリアザペンタレンの短段階合成

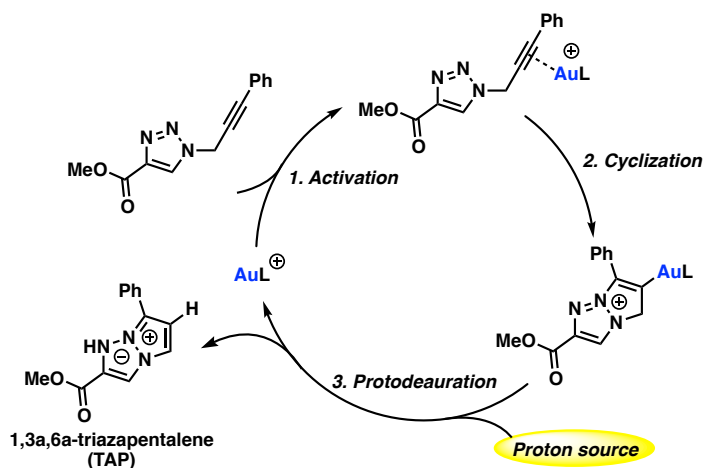
(東京農大院生命) ○スートゥアン, 大原 駿也, 矢島 新, 斉藤 竜男

The short step synthesis of organic fluorophore 1,3a,6a-triazapentalene via gold catalysis

(Graduate school of Life Science Tokyo University of Agriculture) ○Thuc Anh Su, Shunya Ohara, Arata Yajima, Tatsuo Saito

金触媒のアルキン π 電子との高い親和性を活かしたヘテロ環合成は、近年急速に研究が進み、複雑な構造を構築する重要な手法となっている。金触媒による環形成反応は、1. 金触媒によるアルキンの活性化、2. 環化付加、3. プロトン化による金触媒の再生 (protodeauration) の3段階からなると理解されている。しかし反応機構の詳細については不明な点も多く存在するため、理論計算を行ったところ、プロトン源の添加により金の再生段階が大きく安定化される経路を見出した。そこで有機蛍光分子 1,3a,6a-トリアザペンタレン (TAP) を標的分子と設定し、トリアゾールの環化付加反応について研究を行なった。その結果、金触媒のみでは反応は全く進行せず、プロトン源を添加することで TAP を 97% で得られることを見出した。本講演では詳細な条件検討、および基質適用範囲について紹介する。

Gold catalysis has been recognized as a powerful tool for the π -activation of unsaturated C-C bonds and also evolved a general method for constructing complex molecules in organic chemistry. The gold-catalyzed cyclization mechanism consists: 1. activation of alkyne by gold catalyst, 2. cyclization addition, 3. protodeauration (PDA) via protonation. However, there are still some mechanistic details are remained unpredictable. We revealed the cyclization pathway and the key role of the proton source by DFT calculation. We utilized this theoretical information to extend the cycloaddition of low nucleophilic species, and accomplished the short step synthesis of 1,3a,6a-triazapentalene (TAP). We will discuss in detail the investigation of the optimal conditions and reaction scope.



- 1) Namba, K.; Osawa, A.; Ishizaka, S.; Kitamura, N.; Tanino, K. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 11466-11460.