

## イリジウム触媒によるマロン酸アミドを用いた単純アルケンへのヒドロアルキル化反応の反応機構

(青学大理工<sup>1</sup>・東邦大薬<sup>2</sup>) 澤野 卓大<sup>1</sup>・小野 真輝<sup>1</sup>・岩佐 安美<sup>1</sup>・吉川 武司<sup>2</sup>・坂田 健<sup>2</sup>・武内 亮<sup>1</sup>

Mechanistic Study on Iridium-Catalyzed Hydroalkylation of Simple Alkenes with Malonic Amides (<sup>1</sup>*Department of Chemistry and Biological Science, Aoyama Gakuin University*, <sup>2</sup>*Faculty of Pharmaceutical Sciences, Toho University*) Takahiro Sawano,<sup>1</sup> Masaki Ono,<sup>1</sup> Ami Iwasa,<sup>1</sup> Takeshi Yoshikawa,<sup>2</sup> Ken Sakata,<sup>2</sup> Ryo Takeuchi<sup>1</sup>

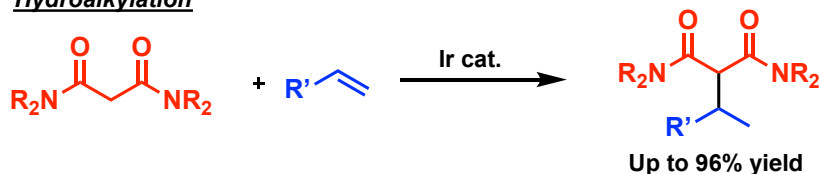
Hydroalkylation of simple alkenes with 1,3-dicarbonyl compounds is an important reaction for the formation of a carbon-carbon bond in a highly atom-economical manner. Our laboratory has recently reported iridium-catalyzed hydroalkylation of simple alkenes with malonic amides.<sup>1), 2)</sup> In the presentation, we report the mechanistic study of the hydroalkylation with a combination of DFT calculation and experimental evidence including deuterium labeling experiments.

**Keywords :** Iridium Catalyst; Hydroalkylation; Malonic Amides; Mechanistic Study; DFT Calculation

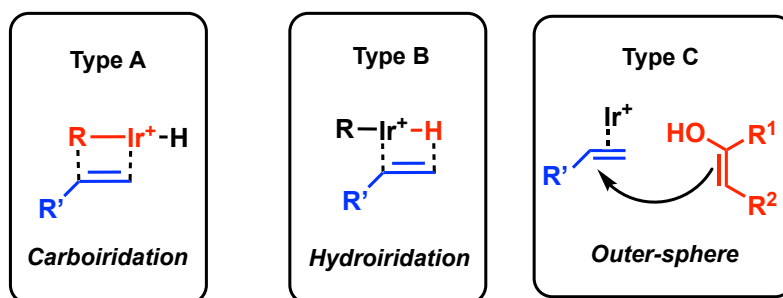
1,3-ジカルボニル化合物を用いた単純アルケンのヒドロアルキル化反応は原子効率的に炭素-炭素結合を構築できる重要な反応である。我々の研究室では最近、イリジウム触媒によるマロン酸アミドを用いた単純アルケンへのヒドロアルキル化反応を報告している<sup>1), 2)</sup>。

本発表で我々はヒドロアルキル化反応の反応機構を DFT 計算と重水素化実験を含めた実験的知見を用いることで明らかにしたことについて述べる。

### Hydroalkylation



### Possible Reaction Mechanisms



1) 澤野 卓大, 岩佐 安美, 船附 珠里, 小野 真輝, 早瀬 雅哉, 武内 亮 日本化学会第 101 春季年会 A15-3am-10

2) Sawano, T.; Ogihara, K.; Sagawa, J.; Ono, M.; Takeuchi, R. *Org. Lett.* **2020**, 22, 6187-6191.