

## 単純な多環芳香族炭化水素とポリフルオロアレーンの位置特異的脱水素型クロスカップリング反応

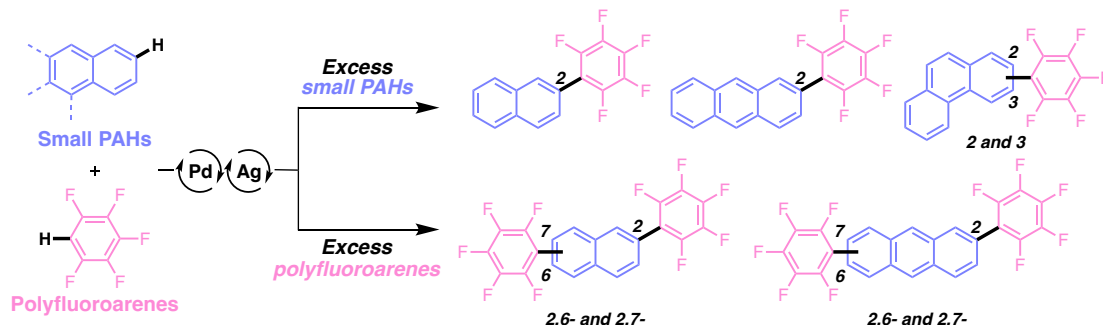
(筑波大院数理物質 TREMS<sup>1</sup>) ○佐藤 亮太<sup>1</sup>・桑原 純平<sup>1</sup>・神原 貴樹<sup>1</sup>

*Regio-specific cross-dehydrogenative coupling reaction of simple polycyclic aromatic hydrocarbons with polyfluoroarenes* (<sup>1</sup>*TREMS, Univ. of Tsukuba*) ○Ryota Sato,<sup>1</sup> Junpei Kuwabara,<sup>1</sup> Takaki Kanbara<sup>1</sup>

Cross-dehydrogenative coupling (CDC) reaction, which uses C-H bonds as reactive sites, is a powerful tool for step and atom economical synthesis. In general, the CDC reaction occurs at electrophilically favored sites. For example, Pd-catalyzed C-H bond activation of naphthalene generally occurs at the 1-position of naphthalene. To the best of our knowledge, there is only one report of Pd-catalyzed 2-position selective C-H bond activation.<sup>[1]</sup> In this research, we discovered 2-position selective CDC reaction of naphthalene and other polycyclic aromatic hydrocarbons with polyfluoroarenes. The study on the reaction mechanism revealed that the *regio*-specificity of this reaction is involved at the reductive elimination step, not at the C-H bond cleavage step. The *regio*-specific CDC reaction can access to conjugated molecules, which are expected to act as *n*-type semiconductor materials, by only one step reaction without complicated introductions of reactive functional groups.

**Keywords :** *Cross-dehydrogenative coupling reaction; Palladium catalyst; C-H bond activation reaction; Reductive elimination; Polyfluoroarene.*

脱水素型クロスカップリング (CDC) 反応は基質の C-H 結合を反応点とするため、短段階合成の有力な反応である。一般的に、Pd 触媒による C-H 結合切断は求電子的に有利な箇所でも優先的に進行し、ナフタレンにおいては通常 1 位で進行する。ナフタレンの 2 位選択的な C-H 結合切断を経たクロスカップリング反応は我々の知る限り 1 例のみである。<sup>[1]</sup> 本研究では、ナフタレン等の多環芳香族炭化水素とポリフルオロアレーンの CDC 反応において、2 位選択的に反応が進行することを見出した。本反応の位置選択性は、C-H 結合切断反応ではなく、還元的脱離の段階で決まることが反応機構に関する調査から明らかになった。本反応により、*n* 型有機半導体材料としての応用が期待できる化合物を、事前官能基化を回避して 1 段階で合成できる。



[1] J. Q. Yu et al., *Nature* **2017**, 551, 489.