

テトラセンとビフェニルとのドミノ Scholl 反応

(阪工大工¹・阪工大院工²) ○坪井 由衣¹・三嶋 太將²・村岡 雅弘¹・村田 理尚¹
 Domino Scholl Reaction between Tetracene and Biphenyl (¹*Faculty of Engineering, Osaka Institute of Technology*, ²*Graduate School of Engineering, Osaka Institute of Technology*)
 ○Yui Tsuboi,¹ Daisuke Mishima,² Masahiro Muraoka,¹ Michihisa Murata¹

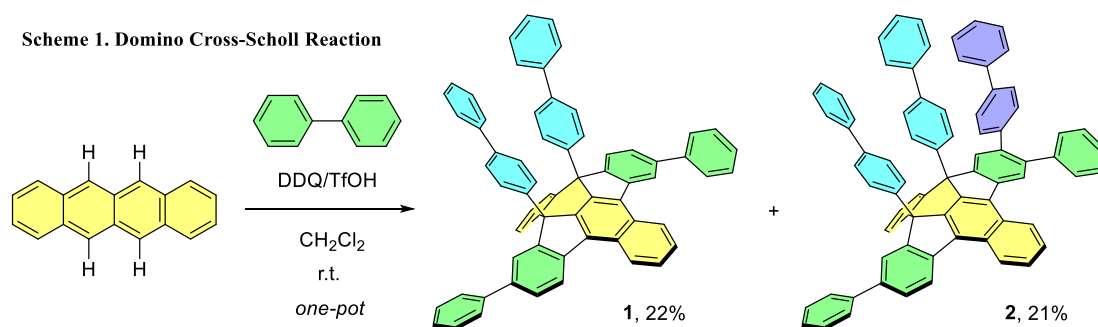
Oxidative aromatic C–H/C–H coupling is an ideal and powerful method to synthesize π -conjugated systems, which include functional organic materials and biologically active compounds. We have recently reported that a domino cross-Scholl reaction occurs between tetracene and six molecules of benzene in one pot to furnish an aromatic compound with a curved π -system. In this study, we studied a reaction between tetracene and biphenyl under the typical conditions of the Scholl reaction. The reaction gave a unique tetracene derivative via domino-type direct arylation reactions. The structure of the product was unambiguously determined by a single-crystal X-ray diffraction analysis.

Keywords: Tetracene; Scholl Reaction; Dehydrogenative Coupling; Direct Coupling

多環芳香族炭化水素 PAH を合成する強力な手法として、酸化的 C–H カップリング (Scholl 反応) が広く利用されている。とくに Scholl 反応を用いた分子内環化により、炭素 π ネットワークの構築が多数報告されてきた。一方、異種分子間における Scholl 反応は、一般的に位置選択性および効率が低く、研究例は限られている。

我々の研究グループでは、5 員環を組み込んだ電子受容性 π 共役系に関する研究に取り組んでいる^{1,2)}。その過程で、テトラセンに対して 6 個のベンゼン分子がワンポットで連結されるドミノ Scholl 反応を最近見出した³⁾。本研究では、この反応の汎用性に関して知見を得ることを目的に、テトラセンとビフェニルとの反応を検討した (Scheme 1)。その結果、4 個のビフェニルがワンポットで連結された **1** に加えて、さらにビフェニルが反応した **2** が生成することが単結晶 X 線構造解析により明らかとなった。DFT 計算を用いた反応機構の解析および固体発光特性についても発表する。

Scheme 1. Domino Cross-Scholl Reaction



- 1) Chaolumen, M. Murata, A. Wakamiya, Y. Murata, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2017**, 56, 5082.
- 2) M. Murata, M. Togo, D. Mishima, A. Harada, M. Muraoka, *Org. Lett.* **2020**, 22, 4162.
- 3) D. Mishima, H. Nakanishi, Y. Tsuboi, Y. Kishimoto, Y. Yamanaka, A. Harada, M. Togo, Y. Yamada, M. Muraoka, M. Murata, *Org. Lett.* **2021**, 23, 7921.