

## アリールトリフラートによる直接的アリール化のための高効率触媒の開発

(相模中研<sup>1</sup>・北里大院理<sup>2</sup>) ○坂井駿太<sup>1,2</sup>・花村仁嗣<sup>1</sup>・藤田理恵子<sup>1</sup>・多田賢一<sup>1</sup>・脇岡正幸<sup>1</sup>

Development of A Highly Efficient Catalyst for Direct Arylation Using Aryl Triflates (<sup>1</sup>Graduate School of Science, Kitasato Univ., <sup>2</sup>Sagami Chemical Research Institute) ○Shunta Sakai,<sup>1,2</sup> Hitoshi Hanamura,<sup>1</sup> Rieko Fujita,<sup>1</sup> Ken-ichi Tada,<sup>1</sup> Masayuki Wakioka<sup>1</sup>

In this study, we developed a highly efficient palladium catalyst for the direct arylation of heteroarenes using aryl triflates. Aryl triflates typically exhibit low reactivity in direct arylation, making it challenging to obtain coupling products in high yields. Here, we demonstrated that coupling products could be obtained with yields of up to over 99% by employing a mixed-ligand catalyst system combining two types of phosphine ligands, 2-dicyclohexylphosphino-2',4',6'-triisopropyl-3-methoxybiphenyl (MeO-XPhos) and P(2-EtOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>)<sub>3</sub> (**L2**).

**Keywords** : Direct Arylation; Palladium Catalyst; Mixed-Ligand Catalyst; C-H Bond Activation; C-O Bond Activation

(擬)ハロゲン化アリールによるヘテロアレーンの直接的アリール化は、簡便なクロスカップリング法として注目されている。しかし、その基質適応範囲には制限があり、アリールトリフラートを基質として用いるとカップリング生成物の収率は低くとどまる。今回我々は、MeO-XPhos と P(2-EtOC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>)<sub>3</sub> (**L2**) の 2 種類の支持配位子を合わせた混合配位子触媒を用いることにより、最高 99%以上の収率でカップリング生成物が得られることを見出した(下図)。高効率の発現には、2種類の配位子を同時に用いることが必須であり、MeO-XPhos と **L2** を単独で用いた場合には、パラジウム黒の生成やカップリング生成物の収率低下が認められた(下図)。発表では、配位子効果の詳細と重合反応への応用についても併せて示す。

