

NHC ボランを用いたボロール誘導体の合成

(山口大院創成科学¹・阪公大院理²) ○小松 稜¹・松原 浩²・川本 拓治¹

Synthesis of borol derivatives using NHC borane (¹*Yamaguchi University*, ²*Osaka Metropolitan University*) ○Ryo Komatsu¹, Hiroshi Matsubara², Takuji Kawamoto¹

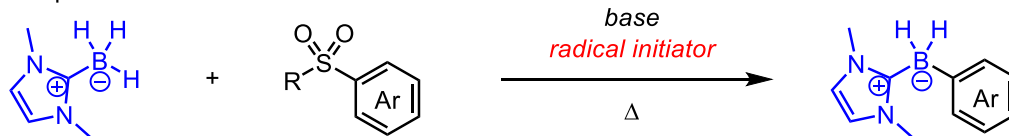
Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are widely used in electronic materials due to their low HOMO-LUMO gap and high electronic conductivity. As exemplified by 9-borfluorenes, doping PAHs with boron can enhance their potential utility in molecular devices by utilizing the vacant orbitals of boron. Although the synthesis of 9-borfluorenes has been reported for decades, the available methods remain rather limited. Recently, we discovered the radical borylation of aryl sulfones via the nucleophilic addition of a boryl radical. In this work, we investigated the synthesis of 9-borfluorenes from dibenzothiophene dioxide through a ring-opening radical borylation reaction, followed by intramolecular cyclization.

Keywords : NHC borane; sulfone; radical reaction; borfluorene

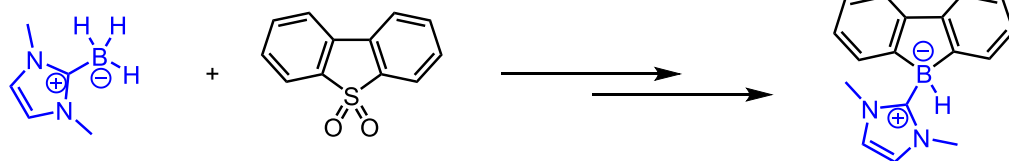
多環芳香族炭化水素 (PAHs) はその低い HOMO-LUMO ギャップと高い導電性により、電子材料に広く用いられている。9-ボラフルオレン類などに代表されるように、PAHs にホウ素をドーピングすると、ホウ素の空軌道により分子デバイスにおける潜在的な有用性を高めることができる¹⁾。9-ボラフルオレン類の合成は古くから報告されているが、その手法は限定的である^{2,3)}。例えば、ジリチオビフェニル試薬とホウ素試薬との反応により 9-ボラフルオレンの合成が報告されている⁴⁾。

最近、当研究室では NHC ボランとアリールスルホンを用いたボリルラジカルの求核付加を鍵とするホウ素化反応を見いだした⁵⁾。本研究では、ジベンゾチオフェンジオキサイドと NHC-ボランを用いた、開環ラジカルホウ素化反応に続く分子内環化反応を経た 9-ボラフルオレン合成を検討した。

Our previous work



This work



- (1) Su, X.; Bartholome, T. A.; Tidwell, J. R.; Pujol, A.; Yruegas, S.; Martinez, J. J.; Martin, C. D. *Chem. Rev.* **2021**, *121*, 4147–4192.
- (2) van Veen, R.; Bickelhaupt, F. J. *Organomet. Chem.* **1973**, *47*, 33–38.
- (3) Narula, C. K.; Nöth, H. J. *Organomet. Chem.* **1985**, *281*, 131–134.
- (4) Biswas, S.; Oppel, I. M.; Bettinger, H. F. *Inorg. Chem.* **2010**, *49*, 4499–4506.
- (5) Komatsu, R.; Morioka, T.; Kamimura, A.; Matsubara, H.; Curran, D. P.; Kawamoto, T. *ChemRxiv* **2024**, 10.26434/chemrxiv-2024-zbfbj.