

Science of Synthesis

Your expert guide to making molecules

Science of Synthesisは、評価済み合成方法をフルテキストで収録した有機合成化学分野における最大級のコレクションです。化合物・官能基ごとに体系的かつ論理的に編成されており、情報を素早く概観することが可能です。また、著名な化学者により執筆された総説からは信頼性が高く、有用な知識を得ることができます。

6.1.4.2 Fragmentation of Quaternary Center Alcohols with Halogen Trapping
DOI: 10.1055/sos-SD-229-00118

Thullen, S. M.; Ashley, M. A.; Rovis, T., *Science of Synthesis: Photocatalysis in Organic Synthesis*, (2018) 1, 228.

This strategy can also be employed in the presence of other radical trapping reagents, such as halogenation reagents to generate the corresponding alkyl halides 15 after β -scission and subsequent trapping with an electrophilic halide reagent (Scheme 4).^[14] Fluorination, chlorination, and bromination have all been effectively demonstrated to proceed in good to excellent yields.

Scheme 4 Alcohol Fragmentation and Ketone Formation with Distal Halogenation^[14]

14 $\xrightarrow{[Ir(ppy)_3], 5,5\text{-dichloro-2,2'-bipyridine}, \text{NBS}, \text{DCE}, 25^\circ\text{C}}$ 15

X	Halide Source (Equiv)	Catalyst (mol%)	Collidine (Equiv)	Solvent	Time (h)	Yield (%)	Ref
F	Selectfluor (4)	2	1	d_2 -MeCN/ D_2O (1:1)	3	52	[14]
Cl	CCl_4 (20)	5	3	$PhCF_3$	18	98	[14]
Br	$CBrCl_3$ (3)	3	3	CH_2Cl_2	24	95	[14]

5-Fluoro-1-(4-methoxyphenyl)pentan-1-one (15, X = F): Typical Procedure:^[14]
A screw-cap culture tube (16 × 125 mm) fitted with a PTFE/silicone septum was charged with 1-(4-methoxyphenyl)cyclopentan-1-ol (14; 96 mg, 0.5 mmol), redistilled collidine (66 μ L, 0.5 mmol), $[Ir(ppy)_3]$ (5.5 μ L, 0.02 mmol, 2 mol%), and Selectfluor (708 mg, 2 mmol). The vial was then evacuated and backfilled with N_2 (3 \times). Degassed d_2 -MeCN (5 mL) and D_2O (5 mL) were added to form a suspension. The mixture was sparged with H_2 for 20 min. The mixture was irradiated with blue LEDs strips set inside a beaker, and stirred at rt with a fan to cool the reaction setup. After 3 h, the mixture was concentrated, washed with H_2O , extracted with $EtOAc$, and then purified by column chromatography (silica gel); yield: 55 mg (52%).

References
[14] Yajls, H. G.; Wang, H.; Tarantino, K. T.; Orbe, H. S.; Knowles, R. R., *J. Am. Chem. Soc.*, (2016) 138, 10794.

What can I get from SoS?

Science of Synthesis 収録コンテンツ:

- 目標生成物への最適な合成ルート
- 生成物のクラス/サブクラスのバックグラウンド情報
- 推奨される合成方法についての詳しい説明
- 合成スキームや合成方法論の領域/制限に関する情報
- 精査済みの実験手順

What can I use SoS for?

Science of Synthesis ご活用例

- 新たな研究分野でのコンサルティングツールとして
- 文献レビューの編集
- 講演準備
- 論文の執筆
- 高い技術力を持つ化学者育成の教育ツールとして

Why choose Science of Synthesis?

Science of Synthesisの特長:

Science of Synthesisは、専門家による成功率、収率、安全性などの面から推奨される合成方法をフルテキストで収録しています。化学者は、信頼性の高い合成方法に素早くアクセスできるため、合成計画にかかる時間を節約できます。

- 最適な合成ルートを素早く概観することが可能
- 高品質なデータと優れた洞察を提供し、化学者の課題解決に寄与
- 必要な情報がすべてScience of Synthesisに集約
- 精査済み実験手順もフルテキストで収録

トライアル受付中!

sos.thieme.com



We transform synthesis!

