

CAPÍTULO REIVINDICATORIO

1. Un método para formar un areno borilado, en donde el método comprende:
proporcionar un sustrato que comprende un anillo areno sustituido compuesto por entre 1 y 4 sustituyentes, donde el anillo areno no está sustituido en una primera posición electrónicamente favorecida para activación con CH y no está sustituido en una segunda posición estéricamente favorecida para la activación con CH, en donde el anillo areno sustituido se selecciona de:
un anillo fenilo sustituido por un grupo electroceptor seleccionado del grupo que consiste de -F y CF₃, no está sustituido en una posición orto con respecto al grupo electroceptor y no está sustituido en una posición meta con respecto al grupo electroceptor; o
un anillo piridina seleccionado del grupo que consiste en un anillo piridina 2-,4-distituido, un anillo piridina 2-,6-disustituido, un anillo piridina 2-,4-,6-trisustituido y un anillo piridina 2-sustituido;
y
poner en contacto el sustrato adecuado con un complejo precursor de iridio, un ligando bidentado deficiente de electrones que comprende al menos un heteroátomo de nitrógeno, y un reactivo de borilación en condiciones eficaces para formar un primer areno borilado y opcionalmente un segundo areno borilado,
donde el primer areno borilado comprende un anillo areno sustituido que comprende entre 1 y 4 sustituyentes y un ácido borónico o derivado de ácido borónico en la primera posición,
donde, cuando se forma, el segundo areno borilado comprende un anillo areno sustituido que comprende entre 1 y 4 sustituyentes y un ácido borónico o derivado de ácido borónico en la segunda posición y
donde la relación molar del primer areno borilado al segundo areno borilado es de al menos 1:1, según se determina mediante GC-FID.
2. El método de reivindicación 1, donde el anillo areno comprende entre 1 y 3 sustituyentes.
3. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-2, donde el anillo areno está sustituido con un grupo electroceptor seleccionado del grupo que consiste en -F y -CF₃.

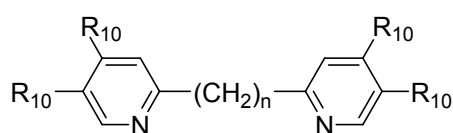
4. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-3, donde el sustrato comprende un anillo fenilo sustituido con un grupo electroceptor seleccionado del grupo que consiste en -F y -CF₃, no está sustituido en una posición *orto* con respecto al grupo electroceptor y no está sustituido en una posición *meta* con respecto al grupo electroceptor.

donde el primer areno borilado comprende un anillo fenilo sustituido con un grupo electroceptor seleccionado del grupo que consiste en -F y -CF₃ y un ácido borónico o un derivado de ácido borónico en una posición *orto* con respecto al grupo electroceptor, y

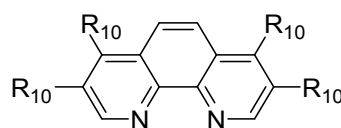
donde, cuando se forma, el segundo areno borilado comprende un anillo fenilo sustituido con un grupo electroceptor seleccionado del grupo que consiste en -F y -CF₃ y un ácido borónico o un derivado de ácido borónico en una posición *meta* con respecto al grupo electroceptor.

5. El método de la reivindicación 1 a 4, donde el ligando bidentado comprende 2,2'-bipiridina sustituida con uno o más sustituyentes electroceptores.

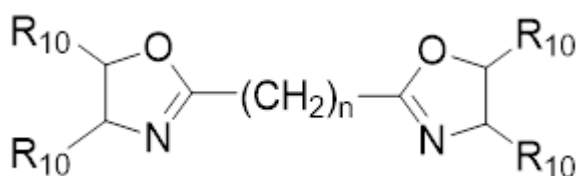
6. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1 a 5, donde el ligando bidentado comprende un compuesto definido por la Fórmula IVa, la Fórmula IVb o la Fórmula IVc.



Fórmula IVa



Fórmula IVb



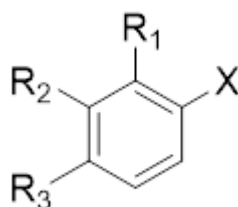
Fórmula IVc

donde n es 0, 1, 2 o 3 y R₁₀ es, independientemente para cada aparición, hidrógeno, un halógeno, un grupo nitrilo, un grupo nitro, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo perfluoroalquilo C₁-C₆, con la condición de que uno o más de R₁₀ no sea hidrógeno cuando el ligando bidentado comprende un compuesto definido por la Fórmula IVa o Fórmula IVb.

7. Un método para formar un areno borilado, en donde el método comprende:
- proporcionar un sustrato que comprende un anillo aromático sustituido con un resto que se selecciona de un grupo electroaceptor y un grupo director de metalación, donde el anillo aromático no está sustituido en una posición *orto* con respecto al resto y no está sustituido en una posición *orto* con respecto al resto, y
- poner en contacto el sustrato con un complejo precursor de iridio, un ligando monodentado piridina y un reactivo de borilación en condiciones eficaces para formar un primer areno borilado y un segundo areno borilado,
- donde el primer areno borilado comprende un anillo aromático sustituido con un resto que se selecciona de un grupo electroaceptor y un grupo director de metalación, y un ácido borónico o un derivado de ácido borónico en una posición *orto* con respecto al resto;
- donde el segundo areno borilado comprende un anillo aromático sustituido con un resto que se selecciona de un grupo electroaceptor y un grupo director de metalación, y un ácido borónico o un derivado de ácido borónico en una posición *meta* con respecto al resto; y
- donde la relación molar del primer areno borilado al segundo areno borilado es de al menos 1:1, según se determina mediante GC-FID.

8. El método de cualquiera de las Reivindicación 7, donde el resto es un grupo electroaceptor seleccionado del grupo que consiste en -F y -CF₃

9. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1a 6 o 7 y 8, donde el sustrato comprende un compuesto definido por la Fórmula I.



Fórmula I

donde

X es F o CF₃;

R₁ es hidrógeno, un halógeno, -OR₄, -NR₅R₆, -C(=O)R₇, un grupo nitrilo, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo haloalquilo C₁-C₆;

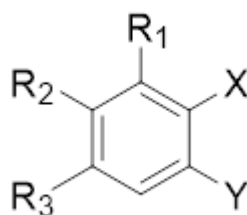
R₂ es hidrógeno, un halógeno, -OR₄, -NR₅R₆, -C(=O)R₇, un grupo nitrilo, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo haloalquilo C₁-C₆;

R₃ es hidrógeno, un halógeno, -OR₄, -NR₅R₆, -C(=O)R₇, un grupo nitrilo, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo haloalquilo C₁-C₆;

cada uno de R₄, R₅ y R₆ es, de forma individual para cada aparición, hidrógeno o un grupo alquilo C₁-C₆; y

R₇ es, de forma individual para cada aparición, hidrógeno, -OR₄, -NR₅R₆ o un grupo alquilo C₁-C₆,

el primer areno borilado comprende un compuesto definido por la Fórmula II

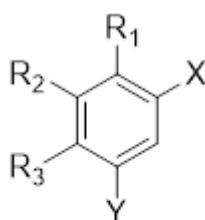


Fórmula II

donde

X, R₁, R₂, y R₃ son como se describió anteriormente, e Y es un ácido borónico o un derivado de ácido borónico, y

el segundo areno borilado, cuando se forma, comprende un compuesto definido por la Fórmula III



Fórmula III

donde

X, R₁, R₂, y R₃ son como se describió anteriormente, e Y es un ácido borónico o un derivado de ácido borónico.

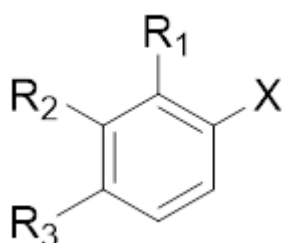
10. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-6 o 7-9, donde el sustrato comprende un benceno 1-cloro-3-fluoro-2-sustituido.

11. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-6 o 7 a 10, donde el sustrato comprende 1-cloro-3-fluoro-2-metoxibenceno y donde el primer areno borilado comprende ácido (4-cloro-2-fluoro-3-metoxifenil)borónico o un derivado de ácido (4-cloro-2-fluoro-3-metoxifenil)borónico.

12. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-11, donde el complejo precursor de iridio comprende un complejo de iridio seleccionado del grupo que consiste en un complejo precursor de Ir(I)-ciclooctadieno, un complejo precursor de Ir(I)-cicloocteno, un complejo precursor de Ir(I)-mesitileno, un complejo precursor de Ir(I)-fosfina, un complejo precursor de Ir(I)-1,2,3,4,5-metilciclopentadienilo y combinaciones de estos.

13. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1- 12, donde el sustrato, el primer areno borilado y el segundo areno borilado, cuando se forma, comprenden un sustituyente seleccionado del grupo que consiste en –Cl y–Br.

14. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-13, donde el sustrato comprende un compuesto definido por la fórmula a continuación



donde

X es un resto que se selecciona de un grupo electroaceptor o un grupo director de metalación,

R₁ es hidrógeno, un halógeno, -OR₄, -NR₅R₆, -C(=O)R₇, un grupo nitrilo, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo haloalquilo C₁-C₆;

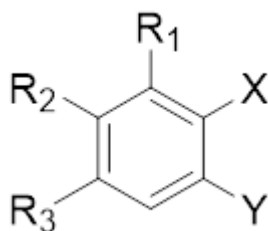
R₂ es hidrógeno, un halógeno, -OR₄, -NR₅R₆, -C(=O)R₇, un grupo nitrilo, un grupo alquilo C₁-C₆ o un grupo haloalquilo C₁-C₆;

R₃ es –Cl y –Br;

cada uno de R₄, R₅ y R₆ es, de forma individual para cada aparición, hidrógeno o un grupo alquilo C₁-C₆; y

R₇ es, de forma individual para cada aparición, hidrógeno, -OR₄, -NR₅R₆ o un grupo alquilo C₁-C₆,

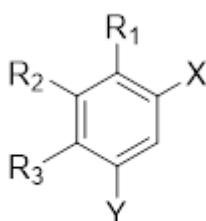
el primer areno borilado comprende un compuesto definido por la fórmula a continuación



donde

X, R₁, R₂, y R₃ son como se describió anteriormente, e Y es un ácido borónico o un derivado de ácido borónico, y

el segundo areno borilado, cuando se forma, comprende un compuesto definido por la fórmula a continuación



donde

X, R₁, R₂, y R₃ son como se describió anteriormente, e Y es un ácido borónico o un derivado de ácido borónico

donde la relación molar del primer areno borilado al segundo areno borilado es de al menos 25:1, según se determina mediante GC-FID.

15. El método de cualquiera de las reivindicaciones 13-14, donde el método comprende adicionalmente deshalogenar de forma reductiva el primer areno borilado para obtener un areno borilado deshalogenado.

16. El método de cualquiera de las reivindicaciones 1-15, que comprende adicionalmente poner en contacto el primer areno borilado o el areno borilado deshalogenado con un reactivo seleccionado del grupo que consiste en un haluro de arilo, un pseudohaluro de arilo, un haluro de vinilo y un pseudohaluro de vinilo y un catalizador

de metal de transición para acoplar de forma cruzada el primer areno borilado o el areno borilado deshalogenado y el reactivo.

SAR\SAR\ID-535584\WPC22683