

イリジウム触媒による多重脱水素化/環化反応 (1): 2-アルキルシクロヘキサノールからベンゾフラン誘導体の直接合成

(京都工芸繊維大学) ○嶋田 千珠子・丸谷 知寛・鳥越 尊・大村 智通

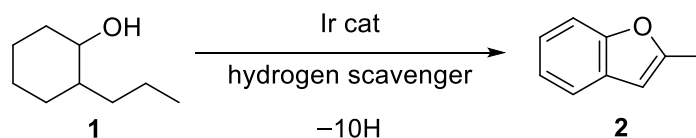
Multidehydrogenation/Cyclization Catalyzed by Iridium (1): Direct Synthesis of Benzofuran Derivatives from 2-Alkylcyclohexanols (*Kyoto Institute of Technology*), ○Chizuko Shimada, Chihiro Maruya, Takeru Torigoe, Toshimichi Ohmura

A mesitylene solution of 2-propylcyclohexanol (**1**) was heated in the presence of an iridium catalyst and a hydrogen scavenger. The C–O bond forming cyclization took place with multidehydrogenation to afford 2-methylbenzofuran (**2**). We assume that **2** was formed through the following steps. First, dehydrogenation of **1** occurred to produce 2-propylcyclohexanone. Next, 2-propylcyclohexanone underwent double dehydrogenation to afford 2-propylphenol. Finally, 2-propylphenol was converted to **2** by intramolecular C(sp³)–H/O–H coupling.

Keywords : *Dehydrogenative Coupling; Iridium Catalyst; C–H Activation; Benzofuran; Cyclohexanol*

ベンゾフラン骨格は、天然物や生物活性化合物、機能性材料分子に含まれることから、その効率的な構築法の開発は重要な課題である。特に、近年顕著に発展した遷移金属触媒による炭素–水素結合の変換手法に基づき、ベンゾフランに直接変換できる新たな出発物質の開拓に注目が集まりつつある。我々はこれまでに、2-アルキルフェノールや 2-アルキルシクロヘキサノンから直接ベンゾフランを得るイリジウム触媒反応を明らかにしてきた^{1),2)}。今回、2-アルキルシクロヘキサノールを出発物に用いるベンゾフランの直接合成に研究を展開した。

イリジウム触媒と水素捕捉剤の存在下、2-プロピルシクロヘキサノール(**1**)をメシレン中で加熱したところ、2-メチルベンゾフラン(**2**)が生成することを見出した。**1**の脱水素化によりまず 2-プロピルシクロヘキサノンが生成し、これがさらに二重脱水素化を受けて 2-プロピルフェノールに変換された後、分子内 C(sp³)–H/O–H カップリングを経て **2** に至ったと考えられる。



1) 丸谷, 八木, 鳥越, 大村, 日本化学会第 103 春季年会(2023), K406-2am-13

2) 丸谷, 鳥越, 大村, 日本化学会第 104 春季年会(2024), E1112-1am-14