

イリジウム触媒 C-H/C-H カップリング (2) : (2-アルキルフェニル) メチルエーテルの環化によるベンゾフラン誘導体の合成

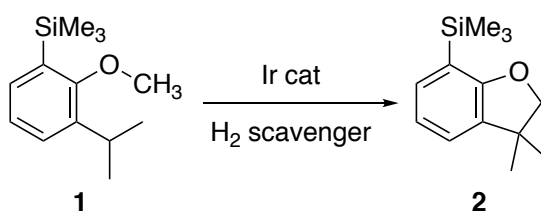
(京都大学) ○宋 ユンハオ・日下 智史・八木 魁人・大村 智通・杉野目 道紀
 Iridium-Catalyzed C-H/C-H Coupling. Part 2. Synthesis of Benzofuran Derivatives through Cyclization of 2-Alkylphenyl Methyl Ethers (*Kyoto University*) ○Yunhao Song, Satoshi Kusaka, Kaito Yagi, Toshimichi Ohmura, Michinori Suginome

We report an intramolecular C-H/C-H coupling of 1-alkyl-2-methoxybenzenes for the synthesis of oxygen-containing heterocycles. We found that the intramolecular C-H/C-H coupling of 1-isopropyl-2-methoxybenzene took place efficiently in the presence of an iridium catalyst and a hydrogen scavenger. The reaction proceeded through dehydrogenation of the isopropyl group to form carbon-carbon double bond, which underwent intramolecular addition of the methoxy C(sp³)-H bond.

Keywords : C-H Activation; Dehydrogenative Coupling; Dehydrogenation Reaction; Cyclization; Dihydrobenzofuran

我々はこれまでに、2-アルキル-*N*-メチルアニリンのアルキル基と *N*-メチル基の間に炭素-炭素結合が形成され、含窒素環状化合物を与える分子内 C-H/C-H カップリングを報告している¹⁾。今回、1-アルキル-2-メトキシベンゼン誘導体を基質に用い、含酸素環状化合物が生成する分子内 C-H/C-H カップリングに研究を展開した。

イリジウム触媒と水素捕捉剤の存在下、1-イソプロピル-2-メトキシベンゼン **1** をメシチレン中で加熱したところ、イソプロピル基での脱水素化による炭素-炭素二重結合の形成と、これに対するメトキシ C(sp³)-H 結合の分子内付加が進行し、2,3-ジヒドロベンゾフラン **2** が収率よく生成した。発表では、オルト位にエチル基や 1-シロキシエチル基が置換したメトキシベンゼンの検討結果についても述べる。



1) T. Ohmura, K. Yagi, S. Kusaka, M. Suginome, *ACS Catal.* **2020**, *10*, 3158.