

Cp*Ru(II)触媒を用いたエステルの水素化反応

(北大院総合化学¹・北大院工²・北大フロンティアセ³) ○尾崎一真¹・新井則義²・大熊毅^{2,3}

Hydrogenation of esters catalyzed by Cp*Ru(II) complexes (¹*Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University*, ²*Faculty of Engineering, Hokkaido University*, ³*Frontier Chemistry Center, Hokkaido University*)○Kazuma Ozaki¹, Noriyoshi Arai², Takeshi Ohkuma^{2,3}

Catalytic hydrogenation of esters is a reaction with 100% atomic efficiency using hydrogen as a reductant, and is suitable for large-scale synthesis. In recent years, highly active catalysts have been reported, but the synthesis is often complicated. Therefore, it is required to realize a reaction in a simpler catalyst system. We focused on Cp*Ru(II) catalysts, which do not have phosphines as ligands common in hydrogenation reactions. Using Cp*Ru(II) complex (**1**) as a catalyst precursor, hydrogenation of methyl benzoate (**3**) was examined. High catalytic activity was achieved when 2-(1-isoquinolyl)benzimidazole (**2**) was employed as a ligand. Desired benzyl alcohol (**4**) was obtained in 99% yield, when the reaction was conducted with an S/C of 10000 in base-containing THF under 50 atm of H₂ at 80 °C for 10 h.

Keywords : Hydrogenation; Esters; Primary Alcohols; Ru (II)

エステルの水素化反応は触媒の存在下、水素分子を付加させる原子効率 100% の反応であり、大量合成に適している。近年、高活性な触媒例が報告されているが、合成が困難な場合が多い。故に、より簡便な触媒系での反応の実現が求められている。そこで、我々は Cp*Ru(II)型触媒に着目した。この触媒は水素化反応に一般的なホスフィン配位子をしなくても活性を示すことが知られており、従来とは異なる特徴を示す反応の実現が期待される。そこで、安息香酸メチル(**3**)の水素化において、Cp*RuCl(cod)(**1**)を触媒前駆体として用いて配位子の検討を行ったところ、2-(1-イソキノリル)-ベンズイミダゾール(**2**)を添加した場合に優れた活性が認められた。S/C = 10000 において、*t*-BuOK 存在下、THF 中で水素 50 気圧、80 °C の条件で 10 時間反応させたところ、目的のベンジルアルコール(**4**)が 99% の収率で得られた。

