

# キャビタンド触媒がもつ分子空隙を用いた位置選択的水和反応とその構造活性相関

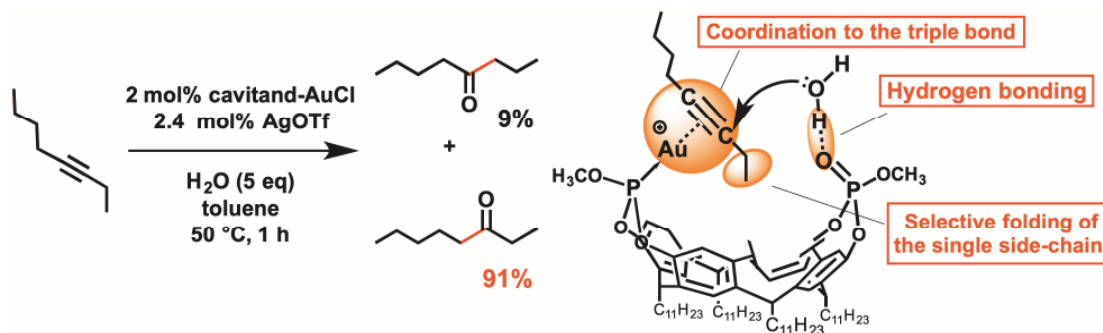
(龍大理工) ○丸山知之・岩澤哲郎

Evaluation of Cavitand-Driven Au-Catalysis for Selective Hydration of Internal Alkynes (Ryukoku University) ○Tomoyuki, Maruyama; Tetsuo, Iwasawa

Our recently reported quinoxaline-walled resorcin[4]arene cavitand provided us an opportunity to install reactive metallo-functional groups pointing inwardly. Herein we present a preparative synthesis of functionalized supramolecular cavitand with inwardly oriented Au(I) and P=O, including a description of its catalytic proclivity in regio-selective hydration of internal alkynes.<sup>1, 2)</sup> In addition, the structure-activity relationships were also surveyed, which revealed that cavity shapes were significant for the reaction activity and selectivity (Figure 1).<sup>3)</sup>

*Keywords: Cavitands; Bifunctional catalysts; Regio-selective hydrations; Supramolecular catalysis; Structure-activity relationships*

当研究室では、レゾルシン[4]アレンとキノキサリンとからなるキャビタンドを母骨格とした金属触媒に関する研究を続けてきた。その過程で、一連の触媒が生成物選択性を高いレベルで実現できることを見出し、空隙の増大に伴う立体障害が反応の進行を阻害させるのではなく促進させることを明らかにした。今回我々は、3-オクチンの位置選択的な水和反応に臨むこととし、キャビタンド触媒がエチル基とブチル基を見分けることができるのかどうかについて、検証する実験研究に着手した。その結果、想定通り、首尾よく分子認識を通して生成物を選択的に与えることを見出した<sup>1, 2)</sup>。また、キャビタンド触媒の構造活性相関を通して、空隙の形の違いが触媒活性と選択性に大きな影響を与えることを明らかになった (Figure 1)<sup>3)</sup>。



**Figure 1.** Evaluation of cavitand-driven catalysis for selective hydration of internal alkynes.

- 1) N. Endo, M. Inoue, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 1136-1140.
- 2) M. Inoue, K. Ugawa, T. Maruyama, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 5304-5311.
- 3) M. Inoue, S. Kamiguchi, K. Ugawa, S. Hikiri, J. Bouffard, D. Sémeril, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2019**, 6261-6268.