

1B-06

新規C₆₀断片メテリケンの液相合成

(龍大院理工) ○吉田 ^{なるひろ} 匠完・岩澤 哲郎

1. 緒言

バックミンスターフラレン (C₆₀) の部分構造には、代表的な3分子が知られている。六環性のコランニュレンと七環性のトルキセンとスマネンである。これら分子がもつ機能的な構造美は化学者の耳目を集め、昨今の多環芳香族炭化水素の分子化学を牽引してきたと言っても過言ではない。これら3分子はコンパクトな形状をとっており、その合成と物性の追究を通して新物質を創出したり、新機能を発掘したりできるのではないかと目されてきた。一方で、C₆₀断片の選び方は数多く考えられるが、印象的で実際的な断片はこの3分子くらいである。これらに比肩する鮮烈で現実に即した断片体のさらなる登場が期待される。

今回我々は、過去に報告例のない八環性の C₆₀ 断片であるジヒドロジインデノクリセン (1) の合成に臨んだ (Figure 1(a))。我々の取った経路は、6つの六員環からなるジベンゾクリセンを前駆体に据え、二つの Bay 領域の増炭と閉環を経て五員環を形成する方法である。この狙いは、液相下による高い生産性の確保である。その結果、中間体 (2) の辺縁部の置換基を除去する工程を経て、望みの (1) を首尾よく得ることができた (Figure 1(b))。 (1) の構造について、X線とDFT計算とを用いて調べたところ、反転障壁が水素結合一つ分程度 (約1.9 kcal/mol) であることがわかり、溶液状態では難なく反転を繰り返していると推察された。この様子が蝶の舞う姿を想起させることから、ウクライナ語で蝶を意味する Metelyk にちなみ、(1) を Metelykene (メテリケン) と名付けた。

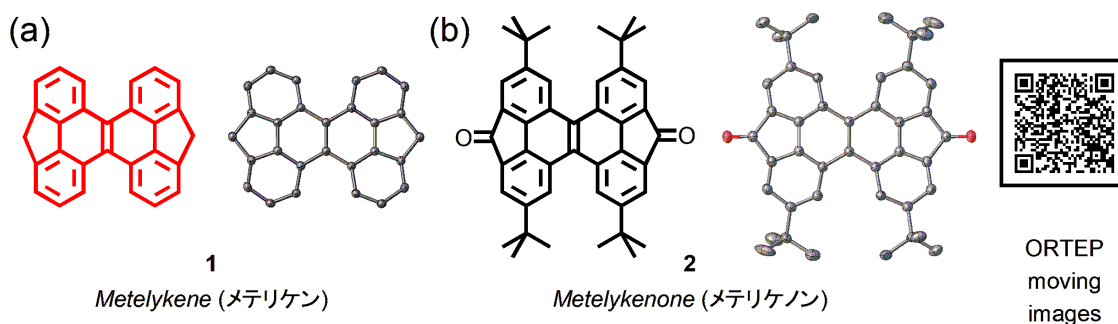


Figure 1. (a) 4,11-dihydrodiindeno[7,1,2-ghi:7',1',2'-pqr]chrysene (**1**), namely “Metelykene”; (b) **2** that is named “Metelykenone”, QR cord for moving images of ORTEP of **1** and **2**.

[1] N. Yoshida, R. Akasaka, T. Imai, M. P. Schramm, Y. Yamaoka, T. Amaya, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2023**, 26 (33), e202300407. DOI: 10.1002/ejoc.202300407

○よしだ なるひろ, いわさわ てつお