

ジベンゾ[*g,p*]クリセン・C₂₆H₁₆の非平面性を制御する合成研究

(龍大院理工) ○吉田匠完・赤阪龍平・岩澤哲郎

組成式 C₂₆H₁₆ のジベンゾ[*g,p*]クリセン (以下、DBC) は、六環性の比較的小さな非平面性の π 共役系を有する縮環分子である。その非平面性は、DBC のベイ領域およびフィヨルド領域それぞれに位置する水素原子どうしの立体反発に由来する。典型的な多環芳香族炭化水素であるが、有機溶媒に溶けにくいいため、液相での取り扱いが難しい。また、非平面性のねじれは立体障害を伴うため、効率の高い化学変換が元来容易ではない。さらに、どのくらいのねじれ角をもって歪むのか、どのくらいの程度で物性が変化するのかについても、よくわかっていない。今回我々は、有機溶媒によく溶ける DBC を題材とし、ベイ領域にさまざまな置換基を導入してどのくらいの範囲でねじれ角が動くのか、定量的に評価する実験研究に臨んだ。適切に置換基を導入できれば、単なる反応性の調査に終わることなく、非平面性を合成的に制御して新しい分子軌道の分布を作り出すことも可能であると考えた。その結果、ねじれ角が最大で 57 度・最小で 31 度、すなわちおよそ 26 度の範囲で稼動することを、実験と計算の両面から明らかにした。

Relevant Synthesis to Manipulating Non-Planarity in a Dibenzo[*g,p*]chrysene

Naruhito Yoshida, Ryuhei Akasaka, and Tetsuo Iwasawa

Graduate School of Science and Technology, Ryukoku University.