

P-XX C₆₀断片メテリケンの液相合成

(龍大院理工) ○吉田 匠^{なるひろ}完・岩澤 哲郎

バックミンスターフラーレン(C₆₀)の部分構造には、代表的な3分子が知られている。六環性のコランニユレンと七環性のトルキセンとスマネンである。これらが持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。これら3分子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期待されたからである。一方、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、新規な八環性 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、六環性のジベンゾクリセンを前駆体に据え、液相下で Bay 領域の増炭と閉環を経て五員環を形成するルートである。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**) を合成した (Figure 1(b))。(**1**) の構造について、X 線と DFT 計算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¹⁾。

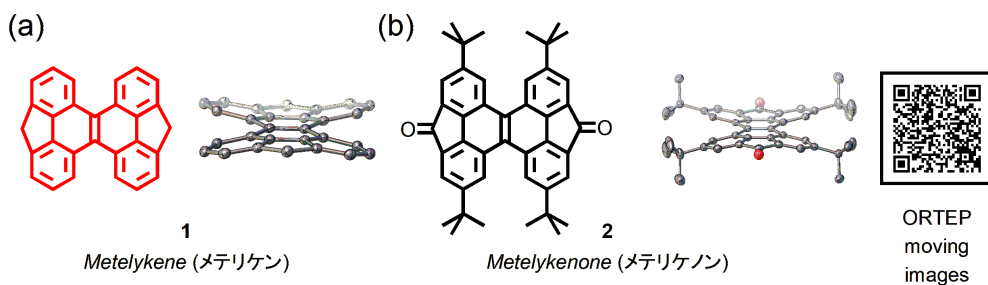


Figure 1. (a) 4,11-dihydrodiindeno[7,1,2-*ghi*:7',1',2'-*pqr*]chrysene (**1**); (b) **2**, QR code for moving images of ORTEP drawings of **1** and **2**.

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