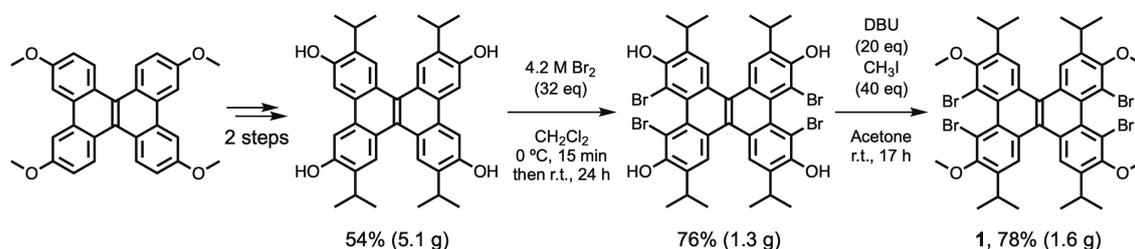


(龍谷大院理工) ○吉田匠完・赤坂龍平・岩澤哲郎

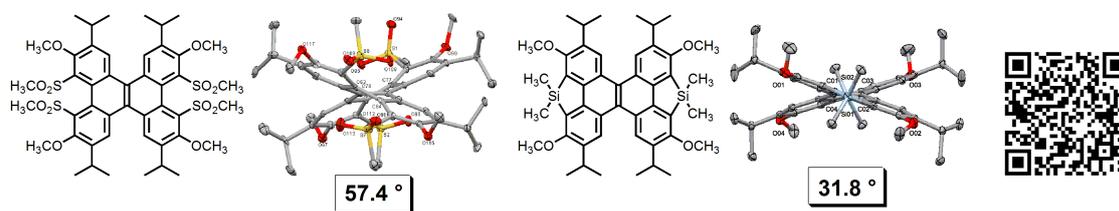
## 1. 緒言

組成式・ $C_{26}H_{16}$ のジベンゾ[*g,p*]クリセン（以下、DBC）は、非平面性 $\pi$ 共役系を内在する六環性縮環分子であり、典型的な多環芳香族炭化水素の一種である。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。DBCは比較的小さい分子であるにもかかわらず、四環性のピレンや五環性のペリレンに比べて合成の報告が極端に少ない。その理由は、DBCが有機溶媒に溶けにくく、液相条件下での取り扱いが難しいためである。また、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、液相での取り扱いが可能な DBC (**1**) を足場分子に設定し、ベイ領域の酸素原子をさまざまな置換基へ誘導し、どの程度のねじれ角の範囲で $\pi$ 共役系の非平面性が変化するのか、定量的に評価する実験研究に臨んだ (**Scheme 1**)。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 57 度から最小 32 度までの約 25 度の範囲で DBC 骨格がしなることを、X線構造解析と DFT 計算の両面から明らかにした (**Figure 1**) [1]。



**Scheme 1.** Synthesis of a DBC scaffold **1** bearing fourfold bromine atoms at the bay.



**Figure 1.** With the aid of DFT calculations and crystallographic analyses, the DBC core turned out to be flexibly movable in a range of from 57° to 32° ([QR code for the ORTEP drawing](#)).

[1] S. Kamiguchi, R. Akasaka, N. Yoshida, T. Imai, Y. Yamaoka, T. Amaya, T. Iwasawa, *Tetrahedron Lett.* **2022**, 92, 153664. Doi: 10.1016/j.tetlet.2022.153664

○よしだ なるひろ, あかさか りゅうへい, いわさわ てつお