

ジインデノクリセン型バッキーボウルの合成と構造解析

(龍大理工) ○赤阪龍平・吉田尚樹・岩澤哲郎

Relevant Structural Analysis to the Multi-Substituted Buckybowl of Diindeno(1,2,3,4-*defg*:1',2',3',4'-*mno*)chrysene (*Ryukoku University*) ○Ryuhei Akasaka, Naoki Yoshida, Te tsuo Iwasawa.

Herein we present new synthesis of the solution-processable and multi-substituted buckybowl, namely diindeno(1,2,3,4-*defg*:1',2',3',4'-*mno*)chrysene. Crystallographic analysis revealed the gently curved buckybowl is featured with interesting bond lengths and angles and bowl-depth as well as significant packing views. With the aid of DFT calculation based on B3LYP/6-31G (d,p), definite values of POAV (pi-orbital axis vector) and HOMO/LUMO levels were clarified. Of important note was that the states of HOMO were obviously different between the substituted buckybowl and unsubstituted one: Substitution effect would clearly appear on the 6:6-bond, centered olefinic bond, where no coefficient of HOMO orbitals was observed (**Figure 1**).

Keywords : Buckybowl; Diindeno(1,2,3,4-*defg*:1',2',3',4'-*mno*)chrysene; Polycycles; POAV; Bowl-depth

今回我々は、多置換化されたジインデノクリセン型バッキーボウルを創製した¹⁾。最大の特徴は、アルキル基とメトキシ基をそれぞれ4つ持ち、溶解性に優れている点である。得られたバッキーボウルの構造をX線により解析し、結合距離や結合角だけでなく、湾曲構造やパッキングの様子についても詳しい情報を得ることができた。また、DFT 計算 (B3LYP/6-31G (d,p)) を用いて構造の最適化を行なった結果、HOMO/LUMO のマッピングやエネルギーレベルだけでなく、ボウルの深さや POAV (pi-orbital axis vector) も確認することができた。興味深いことに、アルキル基とメトキシ基が結合した構造と無置換の構造それぞれの HOMO/LUMO マッピングを比較したところ、HOMO が互いに大きく異なることが明らかになった (**Figure 1**)。

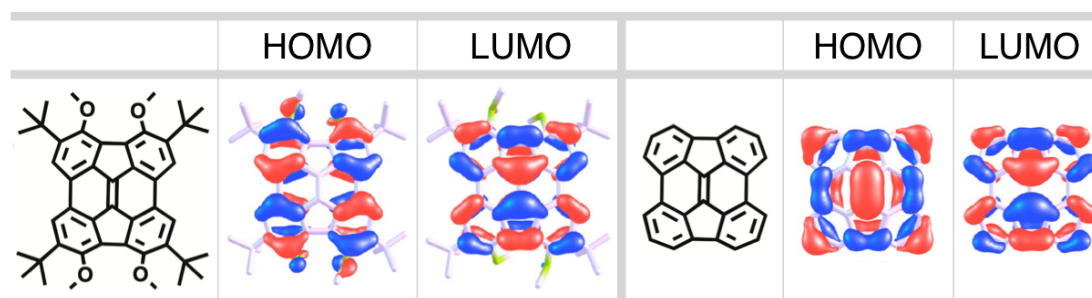


Figure 1. HOMO/LUMO of the substituted buckybowl (left) and unsubstituted one (right).

- 1) N. Yoshida, R. Akasaka, Y. Awakura, T. Amaya, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, 5343-5347.