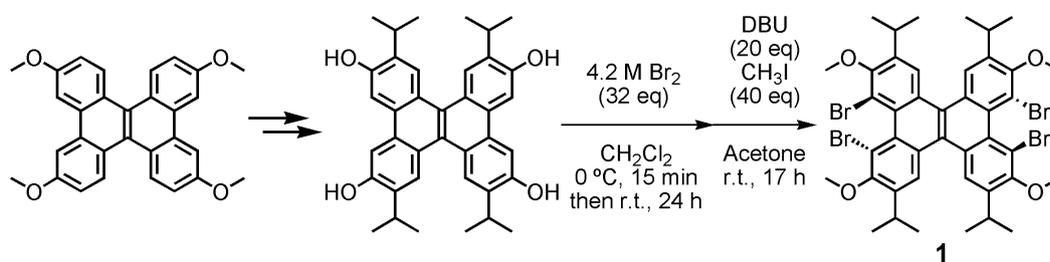


(龍谷大院理工) ○吉田匠完・赤阪龍平・岩澤哲郎

組成式 $C_{26}H_{16}$ のジベンゾ[*g,p*]クリセン (以下、DBC) は典型的な多環芳香族炭化水素の一種である。非平面性 π 共役系を内在した六環性縮環分子である。その非平面性は、DBC のベイ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 はコンパクトな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例が極端に少ない。その理由は、DBC が有機溶媒に溶けにくく、液相での取り扱いが難しいためである。また、ねじれ構造はそもそも大きな立体障害を含むため、効率の高い化学変換が容易ではない。さらに、どのくらいのねじれ角をもって歪むのか、よくわかっていない。

今回我々は、液相下で取り扱い可能な DBC **1** を用いてベイ領域の臭素原子を置換し、どの程度のねじれ角の範囲で π 共役系の非平面性が変化するか、定量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、非平面性を合成的に制御して分子軌道の分布を変化させることができ、ひいては物理化学的な性質も調整できる。種々検討の結果、ねじれ角が最大 57 度・最小 31 度で歪み、約 26 度の範囲で骨格がしなることを、実験と計算の両面から明らかにした (Figure 1) ¹⁾。



Scheme 1. Synthesis of DBC **1**.

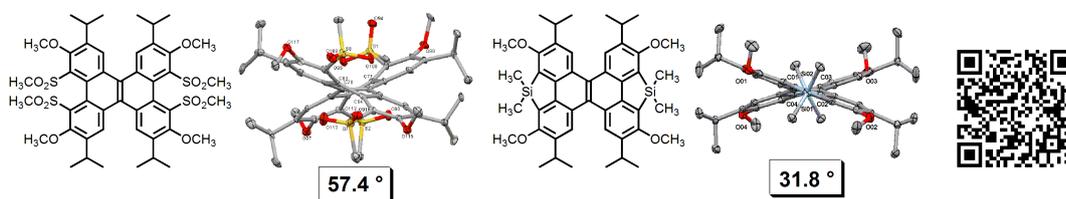


Figure 1. With the aid of DFT calculations and crystallographic analyses, the DBC core turned out to be flexibly movable in a range of from 57° to 31° (QR code for the ORTEP drawing).

- 1) S. Kamiguchi, R. Akasaka, N. Yoshida, T. Imai, Y. Yamaoka, T. Amaya, T. Iwasawa, *Tetrahedron Lett.* **2022**, 92, 153664.