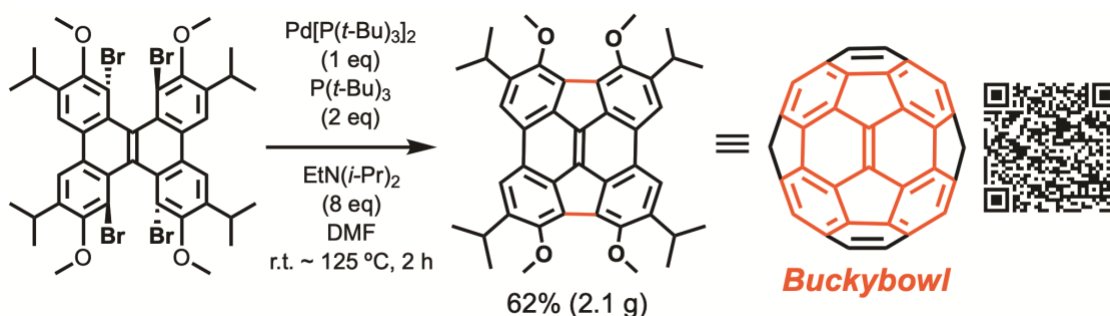


(龍谷大院理工) ○赤坂 龍平・吉田 匠完・岩澤 哲郎

1. 緒言

組成式 $C_{26}H_{12}$ の八環性の縮環化合物である Diindeno(1,2,3,4-*defg*:1',2',3',4'-*mno*)chrysene (以下、ジインデノクリセン) は、バックミンスターフラレン (C60) の断片構造である。こうした断片はバッキーボウルと呼ばれ、その機能的な構造美とともに特徴的な物理化学的性質が大いに注目を集めてきた。特によく知られたバッキーボウルとして、お椀型の湾曲した芳香族化合物であるコランニュレンやスマネンが挙げられる。ジインデノクリセンもお椀型芳香族化合物であり、過去に三例の先駆的な合成報告が行われている。しかし、三例の報告においては目的物が溶けにくいだけでなく、それに至るまでの中間体も有機溶媒に大変溶けにくい。そのため、合成した量は最大でも 37 ミリグラムにとどまり、生産性は低いままである。生産が低い影響を受けて、誘導体の調製はおろか、基本的な物性評価さえも満足に実施できていないのが実際である。これらの点を改善して克服するためには、液相ボトムアップ合成を可能にする経路を開発し、きちんとした最低限の生産性を確保する合成工程が求められる。有機溶媒によく溶けるようになれば、量的供給や官能基の導入などの対応が可能となり、分子多様性の確保も達成できる。

今回我々は、液相ボトムアップ合成に焦点を据えたジインデノクリセン型バッキーボウルの合成研究に臨んだ。具体的には、市販のフルオレノン¹を二量化して得られるジベンゾ[*g,p*]クリセン (以下、DBC) を礎とした合成経路の開発である (Scheme 1)。その結果、4つの臭素原子と4つのイソプロピル基を持つ DBC を鍵前駆体とした経路を見出し、液相で取扱い可能なバッキーボウルの創製に成功した [1]。



Scheme 1. Solution-compatible synthesis of a skeletal bucky bowl, namely diindeno(1,2,3,4-*defg*:1',2',3',4'-*mno*)chrysene ([QR code for the ORTEP drawing](#)).

[1] N. Yoshida, R. Akasaka, Y. Awakura, T. Amaya, T. Iwasawa, *Eur. J. Org. Chem.* **2021**, 5343-5347. Doi: 10.1002/ejoc.202100869

○あかさか りゅうへい, よしだ なるひろ, いわさわ てつお

1PB-12

上記に講演番号を上書きし、この説明を消去

講演タイトル（ゴシック14 pt、太字）

（注 一行空けて下さい）

（広島大院先進理工¹・鏡山大理²）○西条太郎¹・蔵花子²・
広島次郎^{1,2}・安芸紅葉¹（明朝12pt, 講演者に○）

（注 一行空けて下さい）

1. 緒言

本文：10-11 pt（日本語：明朝，英数字：CenturyまたはTimes），行間隔14～20 pt程度を目安にご作成ください。

これは一般講演，ポスター発表用のテンプレートです。
若手招待講演は別ですのでご注意ください

要旨原稿書式は，このファイルを参考に作成して下さい。

- （1） A4用紙縦1枚に横書きで，余白は，上35mm，下30mm，左右30mm空けて下さい。
- （2） 講演番号の上記見本に，発表者の講演番号を上書きしてください。説明は消去してください。
- （3） 講演者に○印をつけて下さい。単独でのご発表でしたら○印は必要ありません。
- （4） 図，表は鮮明なものを御利用ください。図にカラーを使用して差し支えありませんが，word版の要旨原稿のファイルサイズは3MB以下としてください。
- （5） この原稿ファイルをもとにWordファイルとPDFファイルを作成し，提出してください。ファイル名は，「講演番号_name.docx」「講演番号_name.pdf」（例：1B-12_Yamada.docx 1B-12_Yamada.pdf 講演番号は半角）としてください。nameには**ご自身の名字（姓）を半角英字にしたもの**を用い，講演番号と名前の上に**半角のアンダーバー**を挿入してください。（空白は使わないで下さい。）ファイル名は全体を**半角英数字**で作成し，2つのファイルをアップロードしてください。
- （6） **一般講演・ポスター発表の原稿は1ページ**でご作成ください。
- （7）（締切：9月26日（月）厳守）

（注 一行空けて下さい）

[1] T. Saijo *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **91**, ##### (2018). （参考文献がある場合は記載して下さい）

（注 一行空けて下さい）

○さいじょう たろう，くらはなこ，ひろしま じろう，あき もみじ
（発表者名をひらがなで記載して下さい）

2H-05

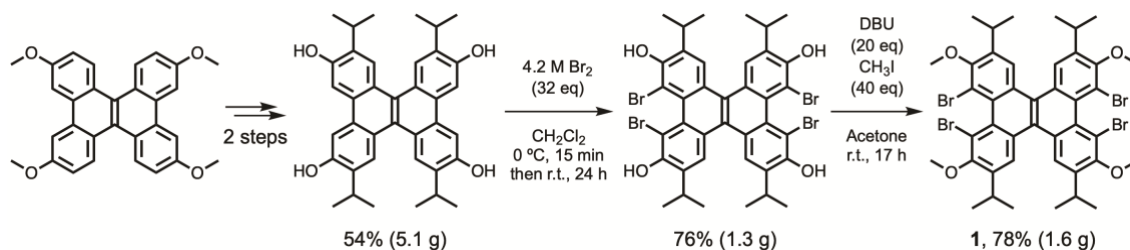
ジベンゾ[*g,p*]クリセンの非平面性の 制御を目的とした合成研究

(龍谷大院理工) ○吉田匠完・赤坂なるひろ・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 π 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、ベイ領域の臭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 π 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.

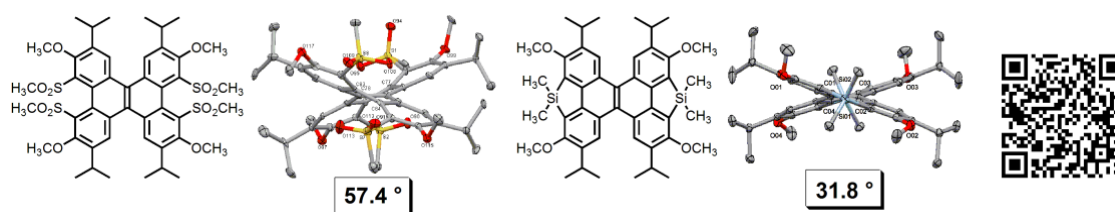


Figure 1. With the aid of DFT calculations and crystallographic analyses, the DBC core turned out to be flexibly movable in a range of from 57° to 32° ([QR code for the ORTEP drawing](#)).

[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