

1B-06

新規C₆₀断片メテリケンの液相合成

(龍大院理工) ○吉田 ^{なるひろ} 匠完・岩澤 哲郎

1. 緒言

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。六環性のコランニュレンと七環性のトルキセンとスマネンである。これら分子がも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と言っても過言ではない。これら3分子はコンパクトな形状をとっており、そ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目されてきた。一方で、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、過去に報告例のない八環性の 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、6つの六員環からなるジベンゾクリセンを前駆体に据え、二つの Bay 領域の増炭と閉環を経て五員環を形成する方法である。この狙いは、液相下による高い生産性の確保である。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) を首尾よく得ることができた (Figure 1(b))。 (1) の構造について、X線とDFT計算と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。

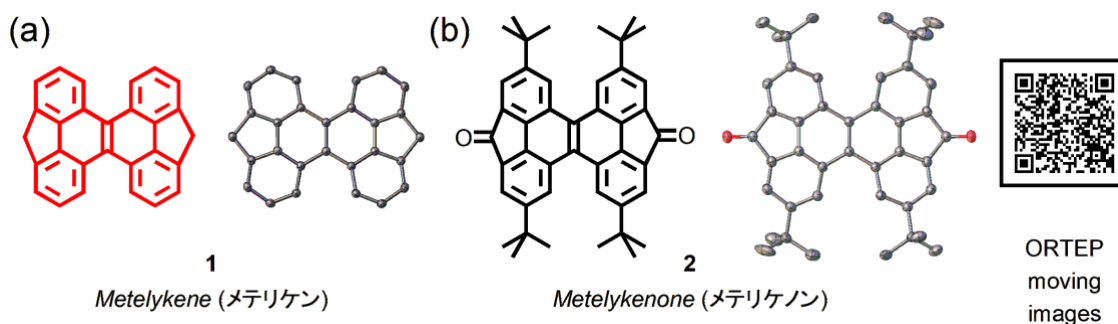


Figure 1. (a) 4,11-dihydrodiindeno[7,1,2-ghi:7',1',2'-pqr]chrysene (1), namely “Metelykene”; (b) 2 that is named “Metelykenone”, QR cord for moving images of ORTEP of 1 and 2.

[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

○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）

（山口大院創成1・常盤大理2）○山口太郎1・常盤花子2・
宇部次郎1,2（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：Times New Roman）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35 mm，下30 mm，左右30 mm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3 MB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、講演番号と名前間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29日（金）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）

○やまぐち たろう，ときわ はなこ，うべ じろう

（発表者名をひらがなで記載して下さい）この注意は消去してください。