

## 八環性 C<sub>60</sub> 断片メテリケンの新規合成

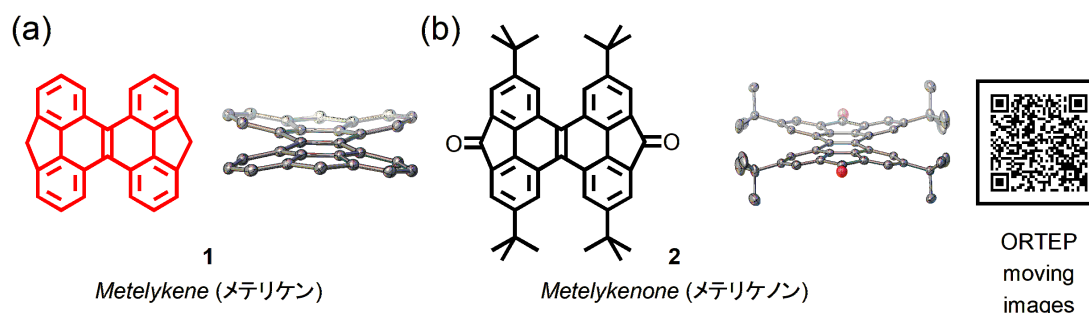
(龍大院理工) ○吉田 匠完・岩澤 哲郎

Synthesis of Metelykene, a C<sub>60</sub>-Fragmentary Octacycle (*Graduate School of Science and Technology, Department of Materials Chemistry, Ryukoku University*) ○Naruhiko Yoshida, Tetsuo Iwasawa

Fragments of buckminsterfullerene include the three most well-known compounds of corannulene, sumanene, and truxene, those are arguably monumental achievement. Although there are other ways to create patterns of fragment, few molecules except the aforementioned three are easily obtainable. Here, we explored the solution-phase synthesis of an octacyclic hydrocarbon that is an unexplored C<sub>60</sub>-fragment, **1** of C<sub>28</sub>H<sub>16</sub> which we named “Metelykene”. Our synthetic strategy focuses on a solution-compatible approach to **1**, wherein the important starting precursor is a soluble hexacyclic dibenzo[*g,p*]chrysene. This precursor enabled straightforward formation of double pentagons right beside hexagons for giving a key diketone intermediate **2** that easily lead to make a cardo-typed aromatic molecule as well as **1**.

**Keywords** : C<sub>60</sub> fragment; Metelykene; Dibenzo[*g,p*]chrysene; Polyarenes

六環性のコランニユレン・七環性のトルキセン・七環性のスマネンのこれら三分子は、機能的な構造美を備えた C<sub>60</sub> 断片の金字塔として知られている。一方、C<sub>60</sub> 断片の切り取り方は多種多様であるが、前述の三分子ほど印象的で実際的な構造は他に知られていない。今回我々は、八環性の新規 C<sub>60</sub> 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))。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、**1** の合成を量的供給とともに達成した (Figure 1(b))。X線とDFT計算を用いて構造を解析した結果、ツイスト型とサドル型の反転障壁が水素結合一つ分程度 (約 1.9 kcal/mol) であった。このことから、溶液状態では反転を繰り返していることが示唆された。この様子が蝶の舞う姿を彷彿とさせることから、ウクライナ語で蝶を意味する Metelyk に因み、**1** を Metelykene (メテリケン) と名付けた<sup>1)</sup>。



**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, e202300407. Doi: 10.1002/ejoc.202300407