

全フッ素ヨウ化ペリレンの精密合成と構造解析

(分子研¹・総研大²) ○大塚尚哉^{1,2}・大田陽野^{1,2}・藤波 武¹・鈴木敏泰¹・榎山儀恵^{1,2}

Synthesis and Structural Analysis of Perfluoroiodinated Perylene (¹*Institute for Molecular Science*, ²*SOKENDAI*) ○Naoya Ohtsuka^{1,2}, Hino Ota^{1,2}, Takeshi Fujinami¹, Toshiyasu Suzuki¹, Norie Momiyama^{1,2}

Perfluoroiodo aromatic compounds show halogen bond donor ability, because σ hole is occurred on iodine atom by high electron negativity of fluorine atom, and they are utilized as the molecular device in supramolecular material science. In particular, symmetric perfluoropolyiodinated aromatics have been widely used for development of novel functional supramolecular materials. However, these molecules have been focused on benzene derivatives, and their studies have never advanced to polycyclic aromatic compounds. To open the new function by novel perfluoroiodinated aromatics, we established synthetic method of fluorinated naphthalenes and successfully synthesized perfluoroiodinated perylene as the novel halogen bond donor. Here, we report details for the synthesis and three-dimensional structure of perfluoroiodoperylene.

Keywords : *Halogen bond; Perfluoroiodinated Aromatics; Perylene; Fluorinated Naphthalene; Polycyclic Aromatics.*

全フッ素ヨウ化芳香族化合物は中性のハロゲン結合供与体として用いられる分子である¹⁾。フッ素原子の高い電子求引性によって、ヨウ素原子上に σ ホールが生じ、電子豊富な化学種と相互作用することができる。さらに、方向依存性を有することから、超分子材料の分子素子として活用されている²⁾。近年、対称性が高く、複数のハロゲン結合供与部位を持つ全フッ素ヨウ化芳香族化合物が研究対象として汎用されており、液晶、蛍光色素、有機伝導体など、様々な機能性超分子材料の開発に利用されている。しかし、フッ素化芳香族分子の分子修飾の難しさから、その利用はベンゼン誘導体に限られ、多環芳香族分子への展開は行われていない。

本研究では、ハロゲン結合を活用した新しい機能性分子素子の開発と機能開拓に向けて、全フッ素ヨウ化ペリレンを設計した。ジヒドロキシナフタレンを出発原料とし、位置選択的フッ素化反応、ホモカップリング反応によるペリレン骨格の構築、マグネシウム塩基を用いたヨウ素化反応を鍵反応とし、9段階の合成経路を確立することに成功した。本発表では、得られた全フッ素ヨウ化ペリレンの合成と単結晶 X 線構造解析に基づく 3 次元構造について詳細を報告する。

1) G. Cavallo, P. Metrangolo, R. Milani, T. Pilati, A. Priimagi, G. Resnati, G. Terraneo, *Chem. Rev.*, **2016**, *116*, 2478-2601.

2) a) C. L. Gilday, W. S. Robinson, A. T. Barendt, J. M. Langton, R. B. Mullaney, D. P. Beer, *Chem. Rev.*, **2015**, *115*, 7118-7195. b) S. Tsuzuki, A. Wakisaka, T. Ono, T. Sonoda, *Chem. Eur. J.*, **2012**, *18*, 951-960.