

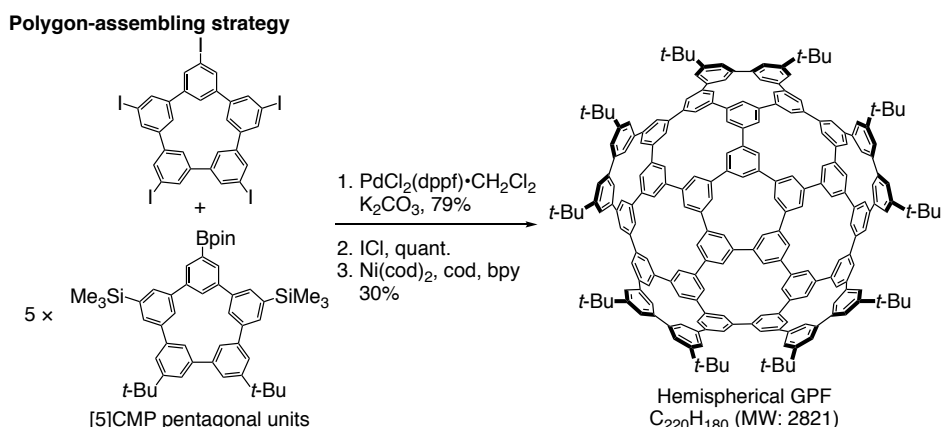
多角形組立戦略による半球型ジオデシックフェナインフレームワークの合成

(東大院理¹・JST ERATO²) ○美尾 樹¹・池本 晃喜^{1,2}・佐藤 宗太^{1,2}・磯部 寛之^{1,2}
 Synthesis of a hemispherical geodesic phenine framework via a polygon-assembling strategy
 (¹Department of Chemistry, The University of Tokyo, ²JST ERATO) ○Tatsuru Mio,¹ Koki Ikemoto,^{1,2} Sota Sato,^{1,2} Hiroyuki Isobe^{1,2}

Our recent synthetic strategy, geodesic phenine frameworks (GPFs), for syntheses of large nanocarbon molecules was expanded. Our new strategy combines multiple phenine polygons and has been named a "polygon assembling strategy". As the first demonstration of this strategy, two types of phenine pentagons were synthesized and, after the "polygon assembly" by Suzuki-Miyaura coupling, the synthesis of gigantic molecules of 2821 Da was accomplished by "stitching" biaryl bonds at the periphery. The GPF molecule of C₁₈₀H₂₂₀ possessed a distorted quasi-C_s symmetry in the crystal but was found to show higher symmetry of C_{5v} symmetry in solution. Dynamic behaviors of the gigantic molecule were revealed with the aid of theoretical calculations.

Keywords : Hemispheres; Polygons; Macrocycles; Coupling Reactions

最近、巨大なナノカーボン分子の設計・合成法として、フェナイン（1,3,5-三置換ベンゼン）を基本単位とした戦略「ジオデシックフェナインフレームワーク(GPF)」を開拓している。本研究では、より巨大な分子の簡便合成法として、フェナイン多角形ユニットを組み合わせる「多角形組立」の新戦略を考案した。新戦略による巨大半球状分子（C₁₈₀H₂₂₀）の合成を下式に示す。五角形二種を個別に合成し、鈴木-宮浦カップリングによる連結後、周縁部を「縫い上げる」ことによる合成であり、分子量 2821 Da の巨大分子を 3 工程収率 24%という効率的な合成法で得ることができた。この巨大分子は、結晶中では歪んだ C_s 対称構造をとっていたが、溶液中の時間平均構造では高い C_{5v} 対称性が実現されていた。この興味深い構造変化についても報告する。



1) T. Mio, K. Ikemoto, S. Sato, H. Isobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 6567.