

異なるパネルを交互に連結した剛直なキラル筒状分子

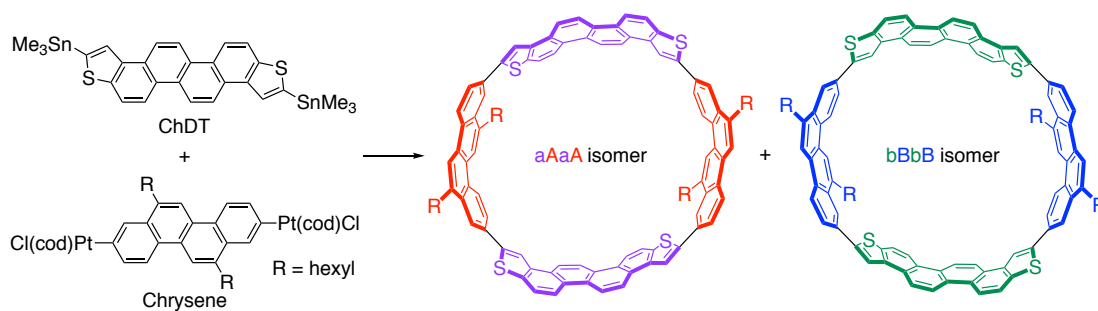
(東大院理¹・東大院新領域²・OPERANDO-OIL³・NIMS⁴・JST さきがけ⁵) ○福永 隼也¹・沢辺 千鶴²・松野 太輔¹・竹谷 純一^{2,3,4}・岡本 敏宏^{2,3,5}・磯部 寛之¹

Alternate arrangement of two different panels in chiral cylindrical molecules with belt persistency (¹*Department of Chemistry, The University of Tokyo*, ²*Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo*, ³*OPERAND-OIL*, ⁴*NIMS*, ⁵*JST PRESTO*) ○Toshiya M. Fukunaga,¹ Chizuru Sawabe,² Taisuke Matsuno,¹ Jun Takeya,^{2,3,4} Toshihiro Okamoto,^{2,3,5} Hiroyuki Isobe¹

We synthesized a belt-persistent cylindrical molecule by combining two different arylene panels, chrysenodithiophene and chrysene, in an alternate manner. Depending on orientations of the arylene panels, there exist nine possible atropisomers. However, a pair of enantiomers was selectively obtained. Single crystal X-ray diffraction analysis of the racemate revealed oval-shaped tubular structures. Chiroptical properties of each enantiomer were investigated, which allowed structure-property relationship studies.

Keywords : cycloarylene, macrocycles, atropisomer, cylindrical structure, chiroptical property

剛直な筒状構造を持つシクロアリーレンは、独特な分子構造に由来しキラル光学に特異性が見られる点で興味が持たれている。¹しかし、キラル筒状分子の合成はホモカップリングを活用した手法に依存してきており、構造多様化に難があった。我々は、硫黄原子を導入すべく検討するなかで、クロスカップリング法によりクリセノジチオフェン (ChDT) とクリセンの 2 種類のパネルが交互に配置されたキラルな筒状分子を合成できることを見いだした。二種のパネルが交互に配置された構造は、ChDT のジスタニル体とクリセンの二核白金錯体とのクロスカップリング反応により実現した。原理的に本筒状分子には、パネルの表裏に由来する 9 種類の立体異性体が存在し得るが、¹そのうち 2 種類のエナンチオマーのみを選択的に得た。筒状分子ラセミ混合物の単結晶 X 線構造解析により、分子構造詳細を明確にし、筒状構造が楕円形に歪み、その楕円率が 1.22 であることを明らかにした。また、エナンチオマーをキラルカラムにより分離し、キラル光学特性を明らかにした。



The formation of other 7 atropisomers were not detected.

1) Z. Sun, T. Matsuno, H. Isobe, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2018**, *91*, 907.