

ケルシュラジカルをアセチレンで架橋した化合物の合成検討

(阪大院理) ○藤井 匠平・西内 智彦・久保 孝史

Synthesis of a compound having subunits with a long C–C bond based on fluorenyl scaffold.
(Graduate School of Science, Osaka University) ○Fujii Shohei, Nishiushi Tomohiko, Kubo Takashi

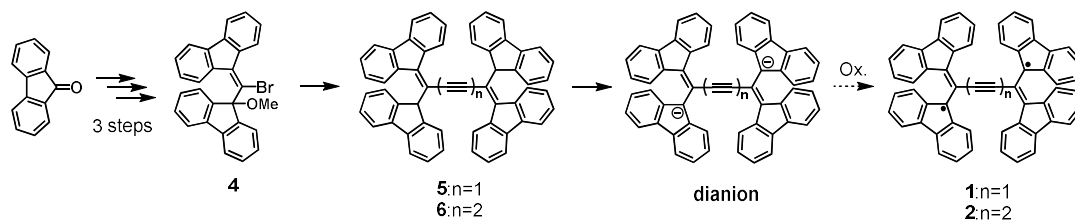
Koelsch radical (BDPA) is known as remarkably stable due to resonance delocalization. In this work, we designed a new compound **1** and **2** in which two BDPA are connected with acetylene linker. We expected the interaction between the BDPA and the stabilization by the new resonance structure. In addition, compound **3** having structure like DBPA possesses a C–C inter-atomic distance of about 2 Å in crystal by the intermolecular interaction between fluorenyl moieties having an unpaired electron. We also expected **1** and **2** possess the unique C–C bond.

The reaction scheme of **1** and **2** was shown in Scheme 1. At first, compound **4** was synthesized from 9-fluorenon by 3 steps. Next, compound **5** and **6** were obtained from **4** by coupling reaction. We have attempted to generate **1** and **2** by oxidation. In this presentation, we will report the synthesis of **1** and **2**.

Keywords : Long C–C bond, Fluorenyl, Interbond interaction

ケルシュラジカル(BDPA)は、その共鳴安定化により安定なラジカル種として知られている。本研究では、BDPA 同士をアセチレンで架橋した化合物 **1**、**2** の合成を試みた。**1**、**2** では、新たな共鳴構造による安定化と BDPA 間の相互作用が期待される。また、BDPA の類似構造を有する化合物 **3** は、結晶中化合物内に約 2 Å の炭素間結合を有し、**1**、**2** においてもこの特異な結合の発現が期待される。

合成経路を Scheme1 に示した。まず、9-フルオレノンを出発物質として、3 ステップで化合物 **4** を合成した。続いて、カップリング反応により前駆体 **5**、**6** を合成した。現在は、**1**、**2** の発生条件について検討している。本発表では、これらの内容について詳細に報告する。



Scheme 1

1) 須賀勇貴・西内智彦・久保孝史、日本化学会第 99 春季年会(2019)、3H2-02

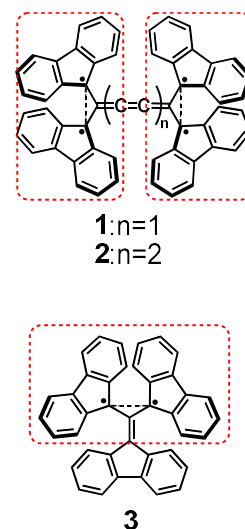


Figure 1