

イソチアナフテン骨格を有するピロール縮環ヘテロアザコロネン類の合成

(愛媛大院理工¹・愛媛大 ADRES²) ○佐川愛輝¹・高瀬雅祥¹・森 重樹²・奥島鉄雄¹・宇野英満¹

Synthesis of Pyrrole-Fused Heteroazacoronenes with an Isothianaphthene Skeleton

(¹Graduate School of Science and Engineering and ²Advanced Research Support Center (ADRES), Ehime University)

○Aiki Sagawa,¹ Masayoshi Takase,¹ Shigeki Mori,² Tetsuo Okujima,¹ and Hidemitsu Uno¹

Hexapyrrolohexaazacoronene (HPHAC) shows a multistep reversible oxidation process and exhibits global aromaticity based on macrocyclic conjugation, especially in dicationic species. In this study, we designed the heteroazacoronene that incorporates an isothianaphthene skeleton into HPHAC, and synthesized them with the aim of elucidating the changes in ring conjugation and global aromaticity of both neutral and oxidized species.

Compound **4** was synthesized by aromatic nucleophilic substitution reaction with pyrrole and successive oxidative transannulation reaction from a known compound **2**. Then, compound **1** was obtained by treatment with acid anhydride (Scheme). The structure of **1** was determined by X-ray crystal structure analysis. In this presentation, we will report the synthesis, redox properties, and aromaticity of the targets along with by-products.

Keywords : Azacoronene; Pyrrole; Redox property; Aromaticity; Mixed acid anhydride

ヘキサピロロヘキサアザコロネン (HPHAC) は多段階の可逆な酸化過程を示し、特にジカチオン種では大環状共役に基づく芳香族性を発現する。本研究では HPHAC にイソチアナフテン骨格を組み込んだヘテロアザコロネン類を設計・合成し、中性種や酸化種の環状共役、グローバル芳香族性の変化について明らかにすることを目的とした。

既知化合物 **2** に対してピロールによる芳香族求核置換反応と酸化的渡環反応を順に行うことで **4** を合成し、その後、混合酸無水物と作用させることで **1** を合成した(スキーム)。目的化合物 **1** の構造は単結晶 X 線構造解析により決定した。また、化合物 **1** の電気化学測定を行ったところ、3 つの可逆な酸化波が観測された。発表では、副生成物を含めた目的化合物の合成ならびに酸化還元特性、芳香族性について報告する。

