

ナノグラフェン内部における酸化的開裂によるねじれ分子の合成

(名大院工¹・JST さきがけ²) ○坂本 祐樹¹・高柳 蓮¹・田島 慶太¹・忍久保 洋¹・福井 識人^{1,2}

Synthesis of Twisted Molecules by Inner Oxidative Cleavage of Nanographenes (¹*Graduate School of Engineering, Nagoya University*, ²*JST PRESTO*) ○Yuki Sakamoto,¹ Ren Takayanagi,¹ Keita Tajima,¹ Hiroshi Shinokubo,¹ Norihito Fukui^{1,2}

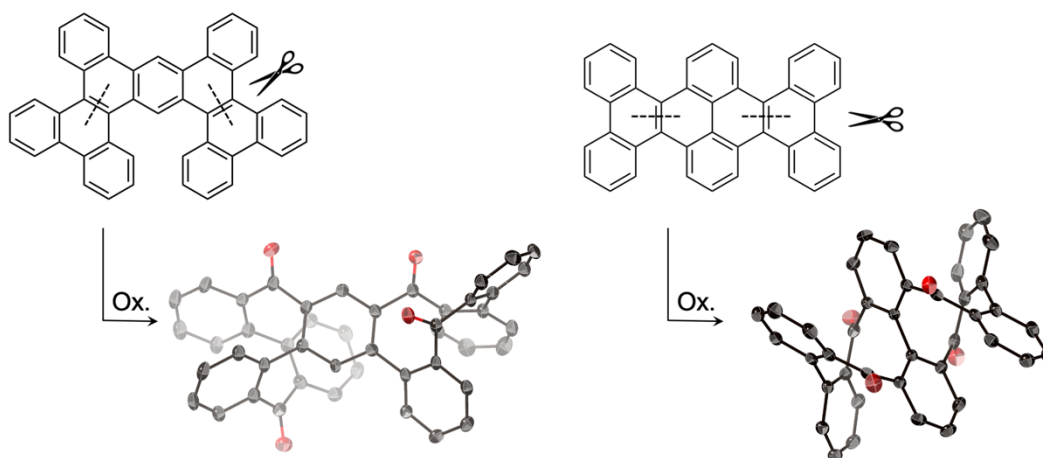
Figure-of-eight molecules are fascinating due to the chirality, which brings to unique chiroptical properties and chirality-based molecular recognition. However, synthetically accessible figure-of-eight structures are limited because conventional bottom-up approach requires multi-step transformations.

Treatment of dibenzo[*g,p*]chrysene with sodium dichromate results in inner-selective oxidative bond cleavage, affording cyclobisbiphenylenecarbonyl (CBBC): a twisted molecule adopting a figure-of-eight structure. In this work, we subjected other polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) to this oxidative cleavage, synthesizing new nonplanar π -systems.

Keywords : *Figure-of-eight Molecule; Dibenzo[*g,p*]chrysene; Sodium Dichromate; Inner Oxidation; Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*

8の字型分子は共役系のねじれの向きに応じて異なるキラリティーを示す。そのため、キラリティーに由来する光学特性や分子認識に注目が寄せられ、広く研究されている。しかし、これまでの例では8の字型構造をボトムアップ的に構築するため、多段階の変換が必要となり、合成できる骨格に限りがあった。

ジベンゾ[*g,p*]クリセンの骨格内部の二重結合を酸化的に開裂することで8の字型分子であるシクロビスビフェニレンカルボニル (CBBC) が簡便に合成できることが1934年に報告されている¹⁾。本研究では、この骨格内部における酸化的開裂が8の字型骨格を与える合理的な合成戦略になると期待し、適用可能な多環芳香族炭化水素 (PAH) のスクリーニングを実施した。その結果、下図に示す2つのPAHからそれぞれ複雑な骨格を持つねじれ分子を創出した。



1) J. Suszko, R. Schilak, *Roczniki Chemii* **1934**, 14, 1216.