

連続した[7-8-7]員環縮環構造を有する湾曲 π 共役化合物の合成と物性評価

(京大院工) ○久田 雅人・清水 大貴・松田 建児

Synthesis and properties of highly curved π -conjugated compounds with a [7-8-7] successive ring-fused structure (*Graduate School of Engineering, Kyoto University*)
 Masato Hisada, Daiki Shimizu, Kenji Matsuda

Nonplanar π -conjugated compounds have attracted attention due to their unique structural and electronic properties different from those of planar π -conjugated molecules. One way to obtain nonplanar compounds is to embed non-hexagonal ring structures into π -systems. Recently we have reported significantly curved molecules **2–4** with two successively incorporated seven-membered rings.^[1] In this study, we synthesized **1** with a [7-8-7] successive ring-fused structure. Single-crystal X-ray analysis revealed the significantly curved structure of **1** with a mean plane deviation (MPD) of 1.53 Å, which is larger than those of **2–4** (MPD: 0.37–1.16 Å). In the crystal, molecules of **1** were packed as curved molecules fit into their concavities with each other.

Keywords : non-planar structure; seven-membered ring; eight-membered ring; saddle conformation; tab conformation

非平面 π 共役化合物は表裏の非対称性や立体構造に由来した自己組織化など様々な観点から注目を集めている。その設計指針の一つとして非六員環構造の導入があり、最近我々は連続した7員環構造の埋め込みにより大きく湾曲した構造を有する化合物**2–4**を報告してきた。^[1]本研究ではこの構造に八員環を導入した化合物**1**を合成した。単結晶X線構造解析の結果、**1**の分子構造は2つの対面した七員環部位が鞍型構造を、八員環部位は桶型構造をとりながら大きく湾曲していた。水素を除いた化合物**1**のMPDは1.53 Åであり、**2–4**(MPD: 0.37–1.16 Å)より大きな値であった。結晶中では湾曲した分子同士がかみ合うようなパッキングが見られた。本発表では**1**の大きく湾曲した構造と物性について報告する。

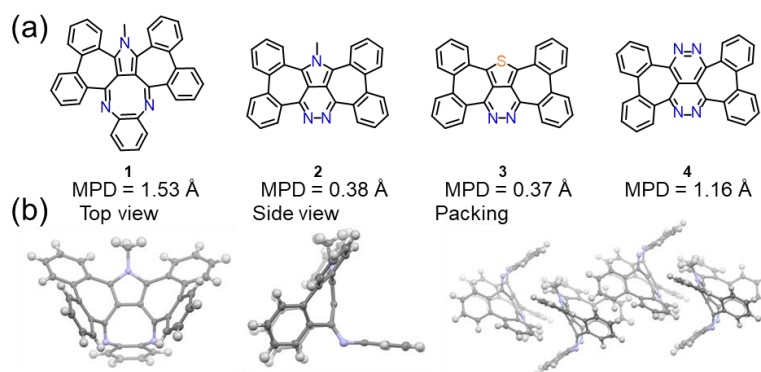


Fig. 1. (a) Structure of **1–4**. (b) Top, side, and packing views of the crystal structure of **1**.

1. M. Hisada, D. Shimizu, K. Matsuda, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 9034; *Org. Lett.* **2022**, *24*, 3707.