

内部官能基化されたジベンゾ[g,p]クリセン誘導体の合成と物性

(名大院工¹・JST さきがけ²) ○平野 純一朗¹、竹尾 佳紘¹、忍久保 洋¹、福井 識人^{1,2}

Synthesis and properties of internally functionalized dibenzo[g,p]chrysene derivatives. (¹Graduate School of Engineering, Nagoya University, ²JST PRESTO)○Junichiro Hirano¹, Yoshihiro Takeo¹, Hiroshi Shinokubo¹, Norihito Fukui^{1,2}

Generally, functionalization of π -conjugated molecules is achieved by introducing substituents on their peripheries. On the other hand, π -conjugated molecules having functional groups in the inner positions are rare. The investigation of the structure–property relationship of such internally functionalized π -conjugated molecules is of interest.

In this study, internally functionalized dibenzo[g,p]chrysenes analogues were synthesized. The single crystal X-ray structure analysis revealed that they adopt a twisted structure, being chiral. The optical resolution afforded their enantiomers. The inversion barrier between the enantiomers depended on the internal substituents. We also synthesized peripherally halogenated derivatives to examine π -extension.

Keywords: polycyclic aromatic hydrocarbon; dibenzo[g,p]chrysene; internal functionalization; π -conjugated molecule

一般的に π 共役分子の機能化は周辺への置換基導入によって達成される。一方、 π 共役分子の骨格内部に官能基が導入された例は少なく、構造物性相関の解明が望まれる。

本研究ではジベンゾ[g,p]クリセンの内部の二重結合に水素や酸素が付加した類縁体を合成した。単結晶 X 線構造解析を行ったところ、これらの内部官能基化体はねじれた構造を有し、キラルであることがわかった。そこで、得られた分子の光学分割を行い、反転障壁を求めたところ、その値は置換基によって変化することがわかった。さらに内部官能基化されたジベンゾ[g,p]クリセンにハロゲン基を導入した誘導体を合成し、 π 拡張類縁体の合成を検討した。

