

大環状 Pd 錯体の形成と配位子を利用した反応性制御によるポリフルオロシクロパラフェニレンへの変換

(筑波大院数理物質 TREMS¹) ○五十嵐 大也¹・神原 貴樹¹・桑原 純平¹

Formation of Macrocyclic Pd Complexes and Their Conversion to Polyfluorocycloparaphenylene by Controlling Reactivity Using Ligands

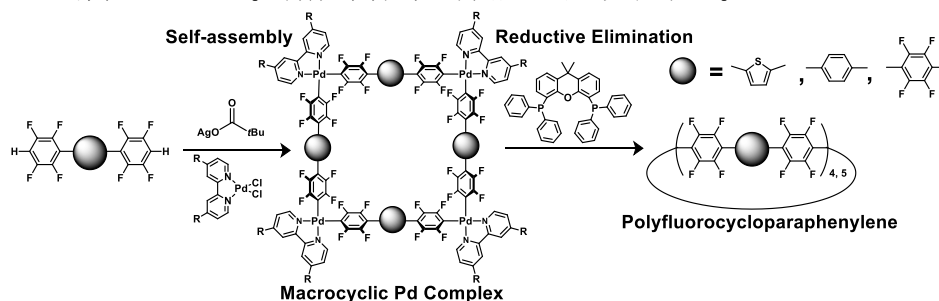
(¹Univ. of Tsukuba TREMS) ○Hiroya Igarashi¹, Takaki Kanbara¹, Junpei Kuwabara¹

Recently, cycloparaphenylene (CPP) has attracted much attention due to its beautiful structure and unique properties, and the synthesis of CPP derivatives with various aromatic units has been reported. In this study, we have succeeded in synthesizing highly fluorinated cycloparaphenylene by self-assembling macrocyclic Pd complexes via a reversible transmetalation reaction in the Pd/Ag system developed in our laboratory, followed by reductive elimination via ligand exchange. The synthesis of polyfluorocycloparaphenylene was achieved by two-step reactions using three different substrates with thienylene, phenylene, and tetrafluorophenylene introduced between two tetrafluorophenylenes. The formation of tetrameric and pentameric polyfluorocycloparaphenylene derivatives with three different units was confirmed by NMR and mass spectra.

Keywords : Cycloparaphenylene; Supramolecular Metal Complex; Reductive Elimination; Organo-fluorine Compound

近年、シクロパラフェニレン (CPP) はその美しい構造やユニークな性質から多くの注目を集め、様々な芳香族ユニットをもつ CPP 誘導体の合成も報告されている。本研究では、当研究室で開発した Pd/Ag 系¹⁾の可逆的なトランスメタリゼーション反応を利用して自己組織的に大環状 Pd 錯体を形成し、その後の配位子交換を経た還元的脱離反応により、高度にフッ素化されたシクロパラフェニレン誘導体の合成に成功した。

2つの Tetrafluorophenylene の間に Thienylene, Phenylene, Tetrafluorophenylene をそれぞれ導入した3種類の基質を使用して、2段階の反応によりポリフルオロシクロパラフェニレンの合成を行った。現在までに、それぞれの基質の4量体および5量体のポリフルオロシクロパラフェニレン誘導体の生成を NMR スペクトルおよび Mass スペクトルから確認している。合成条件等の詳細は当日発表する。



1) Y. Shimoyama, J. Kuwabara, T. Kanbara; *ACS Catal.* **2020**, *10*, 3390.

2) H. Shudo, Y. Segawa, K. Itami, *et al.*; *Nat. Commun.* **2022**, *13*, 3713.