

4,4'-ジメチルチャルコンの結晶化とその後の臭素化反応の条件が生成物の組成とキラリティーに与える影響

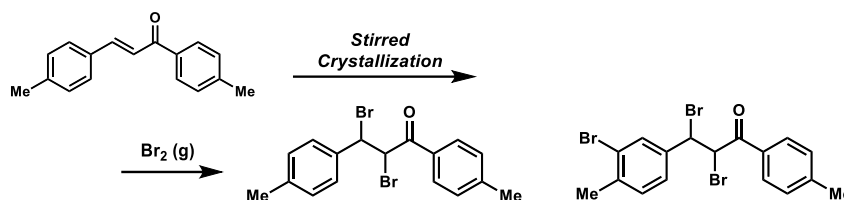
(慶大理工¹) ○池田 将希¹・伴野 太祐¹・朝倉 浩一¹

Effect of conditions for the crystallization of 4,4'-dimethylchalcone followed by bromination on the composition and chirality of the products (¹*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Masaki Ikeda,¹ Taisuke banno,¹ Kouichi Asakura¹

Crystal of achiral compound, 4,4'-dimethylchalcone, possesses chirality based on the configuration. The inclination in chirality was found to generate in its dibromide derivative when its crystal obtained by stirred crystallization was reacted with gaseous bromine. The reaction also produces a derivative in which the aromatic ring is substituted by bromine as a by-product. In this study, we investigated the effect of conditions for the crystallization of 4,4'-dimethylchalcone followed by its bromination on the composition and chirality of the products by changing the stirring rate, presence or absence of seeding crystals during the crystallization, and reaction conditions for the bromination. Stirring during the crystallization was found to increase the conversion and reduce the yield of the by-product. In addition, it enhanced the degree of spontaneous inclination in chirality, although no obvious influence of stirring rare was observed. The appropriate timing for adding seed crystal was found for controlling the chirality of the product.

Keywords : *Chiral Crystal; Chiral Symmetry Breaking; Stirring Crystallization; Bromination; Secondary Nucleation*

4,4'-ジメチルチャルコンはアキラルな分子であるが、その結晶には分子の配列によりキラリティーが生じる¹⁾。また、この化合物を攪拌結晶化させ気体臭素で臭素化させると、生成されるジブロモ体のキラリティーが偏る²⁾。さらに、芳香族環も臭素置換された誘導体が副生成する³⁾。本研究では、4,4'-ジメチルチャルコンの結晶化とその後の臭素化反応において、結晶化の際の攪拌条件や種結晶の添加の有無、臭素化反応の条件が生成物の組成やキラリティーの偏りに与える影響を調査した。結晶化の際に攪拌した場合は、反応率が増加した一方で副生成物の収率は低下した。また、キラリティーの自発的な偏りが大きくなったが、攪拌速度による顕著な違いは確認されなかった。そして、種結晶の添加については、生成物のキラリティーの制御のために適切なタイミングがあることが確認された。



1) B. S. Green, L. Heller, *Science*, **1974**, 185, 525-527.

2) D. J. Durand, D. K. Kondepudi, P. F. Moreira, F. H. Quina, *Chirality*, **2002**, 14, 284-287.

3) K. Penzien, G. M. J. Schmidt, *Angew. Chem. Int. Ed.* **1969**, 8, 608-609.