

ピロール環を有するヘテロトリプチセンの合成と集合特性

(関西学院大院理工) ○古本 恭介・井上 僚・森崎 泰弘

Synthesis and Crystal Structure of Heterotriptycene Consisting of Two Pyrrole Skeletons
(Graduate School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University)

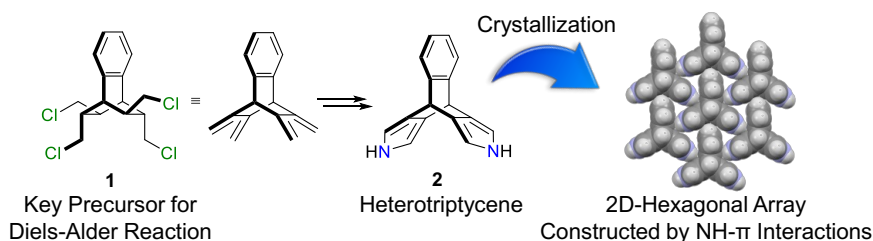
○Kiyosuke Furumoto, Ryo Inoue, Yasuhiro Morisaki

Triptycenes have attracted much attention as key frameworks for functional materials. The paddle-wheel rigid structure has been used as building blocks for macrocycles and polymers. Most of them are synthesized by the Diels-Alder reaction of acene and benzyne derivatives. Heterotriptycenes with heteroarene are important in the development of functional materials; however, such compounds are still rare. Syntheses of heterotriptycenes consisting of two heteroarenes and one polycyclic aromatic hydrocarbon are challenging, because the corresponding acene derivatives are inactive to the Diels-Alder reaction. In this work, we report the synthesis of a heterotriptycene consisting of two unsubstituted pyrrole rings via Imamura's pyrrole synthesis using benzobicyclo[2.2.2]octane derivative as a novel precursor for bis-diene. The obtained molecule formed a 2D-nested hexagonal array with intermolecular NH- π interactions in the crystalline state.

Keywords : Triptycene; Pyrrole; 2D-hexagonal array

トリプチセンは機能性材料の鍵骨格として注目されている。パドルホイール型の剛直な構造は、大環状分子や高分子のビルディングブロックに利用される。ほとんどのトリプチセン誘導体はアセンとベンザインの Diels-Alder 反応 (DAR) により合成される。一方、ヘテロ芳香環を有するヘテロトリプチセンは、新規機能性材料を開発する上で重要であるが、このような化合物は未だに稀である。特に2つのヘテロ芳香環と1つの芳香族炭化水素で構成されるヘテロトリプチセンは、前駆体となるアセン誘導体の合成が困難である、または DAR に不活性であるため、その合成は挑戦的である。

本研究では、DAR 活性なビスジエン前駆体として新規ベンゾビスシクロ[2.2.2]オクタン誘導体 **1** を開発し、ヘテロ DAR を経由したピロール合成¹⁾を用いることで、無置換ピロール環を2つ有するヘテロトリプチセン **2** の合成に成功した。合成した **2** は、結晶中で NH- π 分子間相互作用により2次元六角配列することが分かった。



1) K. Ichimura, S. Ichikawa, K. Imamura, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1976**, *49*, 1157.