

## ボロン酸と 1,2-ジオールとの可逆的ボロン酸エステル形成を利用した環状アントラセン二量体の合成

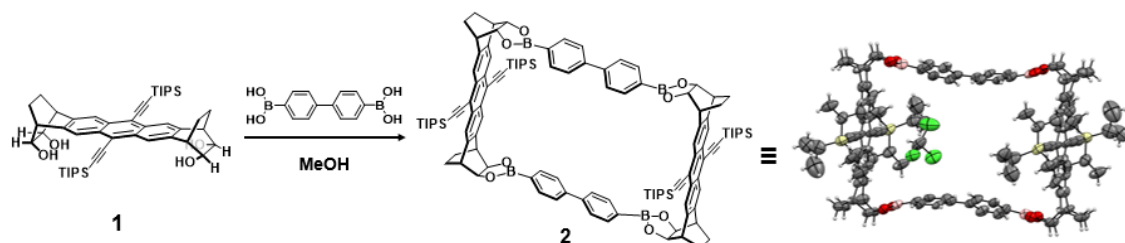
(奈良先端大先端科技<sup>1</sup>・JST さきがけ<sup>2</sup>) ○奥村 崇之<sup>1</sup>・林 宏暢<sup>1,2</sup>・荒谷 直樹<sup>1</sup>・山田 容子<sup>1</sup>

Synthesis of anthracene-containing macrocycles by using reversible boronic ester formation between 1,2-diol and boronic acid (<sup>1</sup>*Graduate School of Science and Technology, Nara Institute of Science and Technology*, <sup>2</sup>*PRESTO, Japan Science and Technology Agency*) ○Takayuki Okumura,<sup>1</sup> Hironobu Hayashi,<sup>1,2</sup> Naoki Aratani,<sup>1</sup> Hiroko Yamada<sup>1</sup>

Macrocyclic compounds have been regarded as important materials for molecular recognition due to the large inner space. However, the reaction yields of macrocyclization reactions are often low, because of the competing undesirable polymerization. In this study, we have successfully synthesized a set of anthracene-containing macrocycles with relatively high yields, by using reversible boronic ester formation between boronic acid and 1,2-diol. In addition, the structure of one of the macrocycles was confirmed by single-crystal X-ray structural analysis.

**Keywords :** *Macrocyclic compound; Dynamic covalent chemistry; Boronic acid; Single crystal structure; Anthracene*

環状分子は、内部に大きな空間を有するため、分子認識などの分野において注目されている。しかしながら、一般的に環状分子の合成収率は、ポリマー生成が競合するため高くない。本研究では、ボロン酸と 1,2-ジオールとの可逆的ボロン酸エステル形成を利用して、アントラセンを有する種々の環状分子の高効率合成に成功した。具体的には、1,3-シクロヘキサジエンを出発原料として 9 段階を経て鍵中間体であるアントラセンを有するテトラオール (**1**) を合成した。その後、種々のジボロン酸誘導体とのボロン酸エステル形成反応を検討した (スキーム 1)。例えば、ジボロン酸誘導体として 4,4'-ビフェニルジボロン酸を用いた場合、目的の環状アントラセン二量体 (**2**) を収率 77% で得ることに成功した。単結晶 X 線構造解析の結果、環の内部空間はトリイソプロピルシリル基と単結晶作製溶媒として用いたクロロホルムで充填されていることが明らかになった。発表では、テトラオール (**1**) と異なるジボロン酸誘導体とのボロン酸エステル形成反応の結果や諸物性に関しても報告する。



**Scheme 1.** Representative example of anthracene-containing macrocycle synthesis.