

### 3-トリフルオロメチルベンザインを用いたトリプチセンの合成

(九大先導研<sup>1</sup>・九大院総理工<sup>2</sup>・フロリダ州立大化<sup>3</sup>) ○岩田 隆幸<sup>1</sup>・藤原 匠<sup>2</sup>・兵頭 瑞樹<sup>2</sup>・川野 隆生<sup>2</sup>・Leah Kuhn<sup>3</sup>・Igor Alabugin<sup>3</sup>・新藤 充<sup>1</sup>

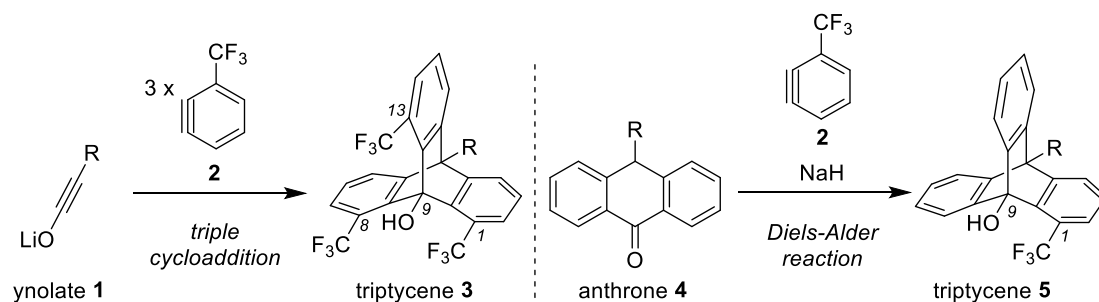
Synthesis of Triptycenes Using 3-Trifluoromethylbenzynes (<sup>1</sup>*Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu University*, <sup>2</sup>*Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu University*, <sup>3</sup>*Department of Chemistry and Biochemistry, Florida State University*) ○Takayuki Iwata,<sup>1</sup> Takumi Fujiwara,<sup>2</sup> Mizuki Hyodo,<sup>2</sup> Ryusei Kawano,<sup>2</sup> Leah Kuhn,<sup>3</sup> Igor Alabugin,<sup>3</sup> Mitsuru Shindo<sup>1</sup>

Triptycenes are propeller-shaped aromatic compounds where three benzene rings are fixed with barrelene scaffold. We have recently developed efficient syntheses of triptycenes using the reaction of benzyne with ynolates or anthracenes derived from anthrones. In this presentation, we will report synthesis of substituted triptycenes applying 3-trifluoromethylbenzynes to our methods, and discuss its regioselectivity based on theoretical calculation.

**Keywords :** Triptycenes; Benzyne; Trifluoromethyl group; Iodine; Diels-Alder reaction

トリプチセンは3つのベンゼン環が縮環したプロペラ型分子であり、超分子や機能性有機材料へと利用されている。発表者らは最近、イノラートとベンザインの3連続環化付加反応<sup>1,2</sup> およびアントロン由来の活性化アントラセンとベンザインの Diels-Alder 反応<sup>3</sup> を用いたトリプチセンの効率合成法を見出した。本発表では、これら手法に 3-トリフルオロメチルベンザインを用いて置換トリプチセンの合成を検討した。

イノラート **1** と 3-トリフルオロメチルベンザイン **2** を反応させたところ、3つのトリフルオロメチル基がヒドロキシ基と同じ方向に揃った 1,8,9,13-置換トリプチセン **3** が位置選択的に得られた。また、アントロン **4** 由来の活性化アントラセンと 3-トリフルオロメチルベンザイン **2** との反応でも、位置選択的に 1,9-置換トリプチセン **5** が得られた。本発表ではこれら反応の詳細について報告するとともに、位置選択性について理論計算から議論する。



(1) S. Umezu, G. P. Gomes, T. Yoshinaga, M. Sakae, K. Matsumoto, T. Iwata, I. Alabugin, M. Shindo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 1298. 2) T. Yoshinaga, T. Fujiwara, T. Iwata, M. Shindo, *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 13855. 3) T. Iwata, M. Hyodo, T. Fukami, Y. Shiota, K. Yoshizawa, M. Shindo, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 8506.