π 拡張型ビアントロンチオフェン類似体の合成と性質

(北里大院理)○大寄 裕・上田 将史・真崎 康博

Synthesis and properties of π -extended bianthrone-thiophene analog (*Graduate School of Science, Kitasato University*) \bigcirc Yu Oyori, Masafumi Ueda, Yasuhiro Mazaki

Bianthrone has demonstrated thermochromism due to the conformational change between folded- and twisted-form. We have synthesized bianthrone-thiophene analogs and investigated their chromic properties, focusing on the unusual characteristics. Herein, we report the synthesis and properties of novel π -extended bianthrone-thiophene analog.

The synthetic route of 1 is depicted in Scheme 1. A benzonaphtothiophene derivative 2 was obtained from benzothiophene as a starting material in a 5-steps (yield: 43%). Subsequently, compound 2 was reacted with MnO_2 in CH_2Cl_2 to afford dimer 3 in 86% yield. When compound 3 was treated with *t*-BuOK, followed by atmospheric oxidation, the diol derivative 4 was obtained in 80% yield instead of 1. The molecular structures of 3 and 4 were determined by X-ray crystal structure analysis because their single crystals were obtained as colorless platelet crystals of $(3)_2(CHCl_3)$ and $(4)(acetone)_2$, respectively. Further investigation is in progress. Keywords: Bianthrone, Chromism, Conformational Isomer, π -Conjugated System

ビアントロンは folded 型と twisted 型の配座変化によってサーモクロミズムを示す。この特異な性質に着目して、我々はビアントロンチオフェン類似体を合成しており、そのクロミック特性について明らかにしてきた。今回、新規 π 拡張型ビアントロンチオフェン類似体の合成と性質について報告する。

合成経路を Scheme 1 に示す。ベンゾチオフェンを出発物質として、五段階の反応を経てベンゾナフトチオフェン誘導体 2 を 43 %の収率で得た。次に、化合物 2 を CH_2Cl_2 中で MnO_2 と反応させることにより、二量体 3 を 86 %の収率で得た。続いて、化合物 3 を t-BuOK で処理した後に空気酸化を試みたが、化合物 1 は得られず、ジオール体 4 が 80 %の収率で得られた。化合物 3 と 4 は $CHCl_3$ と acetone から無色の $(3)_2(CHCl_3)$ と(4)(acetone) $_2$ の板状結晶としてそれぞれ得られ、X 線結晶構造解析によって分子構造を決定した。現在、4 を酸化によって 1 にする方法を検討している。

