新規テトラセン誘導体の合成と性質

(滋賀県大院工¹)○山﨑 惇平¹・加藤 真一郎¹・北村 千寿¹ Synthesis and Properties of Novel Tetracene Derivatives (¹*Graduate School of Engineering, The University of Shiga Prefecture*) ○ Jumpei Yamasaki,¹ Shin-ichiro Kato,¹ Chitoshi Kitamura¹

Development of tetracene derivatives have been limited. We aimed at preparing those compounds by different synthetic method using cyclohexane-condensed anthracene. From compound 1, anthrol ester 2 was obtained easily. Bromination of 2 with NBS gave 3 as a key intermediate. Tetracene derivative 5 was prepared by two different sequences, Suzuki-Miyamura cross coupling/DDQ oxidation and vice versa. Both methods were successful. Properties of 5, and attempts to synthesize other derivatives from 3 as well as 6 are going to be presented.

Keywords: Tetracene; Anthrol; Bromination; Cross-coupling

テトラセンは有機半導体など機能性材料として重要な骨格であるが、その誘導体化の手法は限定されており、テトラセンを基盤とした新しい分子への創出のネックとなっている。そこで、アントラセンにシクロヘキサン環が縮環した化合物がテトラセン誘導体の前駆体として有望と考えて、新奇な合成法の開拓を行うことにした。

シクロへキサン環が縮環したアントロン体 1 は無水フタル酸とテトラリンとの Friedel-Crafts 反応、分子内脱水反応、続いて、塩化スズとの還元で合成された。アントロールのエステル体 2 への変換は、 $Na_2S_2O_4$ 共存下の塩基性溶液中での無水安息香酸との反応で、高収率で達成された。NBS を用いた臭素化は、位置選択的に円滑に進行し、定量的に 3 を与えた。5 への合成は 2 つの経路で検討を行った。Path A では鈴木—宮浦クロスカップリング、DDQ 酸化の順で行い、Path B は酸化、カップリングの順で行った。どちらの経路でも 5 は合成できた。Path B の方が Path A より高収率かつ精製が容易であった。5 の物性に加えて、3 や6 から新しい誘導体の合成についても発表予定である。

OCOPh
$$(PhCO)_2O, NaOH \\ Na_2S_2O_4, Bu_4NBr \\ THF, H_2O \\ 1 \\ NBS \\ Path A \\ OCOPh \\ Suzuki-Miyamura \\ cross-coupling \\ DDQ \\ DDQ \\ OCOPh \\ Ar 4 \\ Ar 5 \\ OCOPh \\ Suzuki-Miyamura \\ cross-coupling \\ Suzuki-Miyamura \\ cross-coupling \\ Suzuki-Miyamura \\ cross-coupling \\ Suzuki-Miyamur$$