

異なるアルキル基を有するフルオレンを含むシクロパラフェニレンの合成

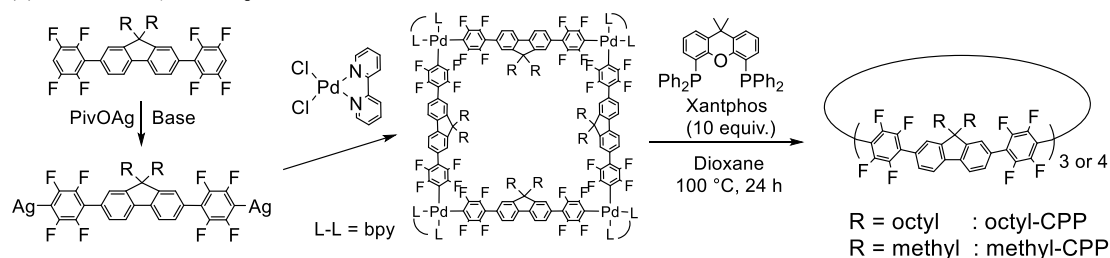
(筑波大院数理物質¹⁾)○盛 哲¹、五十嵐 大也¹、神原 貴樹¹、桑原 純平¹

Synthesis of cycloparaphenylenes containing fluorenes with different alkyl groups (¹University of Tsukuba) ○Sheng Zhe¹, Hiroya Igarashi¹, Takaki Kanbra¹, Junpei Kuwabara¹

Cycloparaphenylene (CPP) is a π -conjugated molecule composed of multiple benzene rings connected at the para-position, known for its unique properties stemming from its curved π -conjugated system. In previous studies, we synthesized cyclic Pd complexes through self-assembly, employing reversible transmetalation between Pd and Ag, and developed a method to transform them into CPPs¹⁾. In this study, we synthesized fluorinated cycloparaphenylenes bearing fluorenes with different alkyl groups and explored ring size selectivity and their luminescence properties (Scheme 1). The cyclic Pd complexes were obtained via introduction of Ag to the fluorobenzene moiety and transmetalation to a Pd complex (Scheme 1). Subsequent conversion to CPPs via reductive elimination reactions yielded cyclic trimers and tetramers. The tetramer was predominantly formed with octyl groups, while the trimer was mainly formed with methyl groups. We characterized these compounds using NMR, mass spectrometry, and single-crystal X-ray structural analysis.

Keywords : π -conjugated molecules, cycloparaphenylene, self-assemble, transmetalation

シクロパラフェニレン (CPP) は複数のベンゼン環がパラ位で環状に連結した π 共役分子であり、湾曲した π 共役系に由来する興味深い性質が発現する。当研究室の先行研究で、Pd と Ag の可逆なトランスメタル化を利用した自己組織化によって環状 Pd 錯体を合成し、この環状錯体から CPP に変換する方法を開発してきた。¹⁾本研究では異なるアルキル基を有するフルオレンを含む含フッ素シクロパラフェニレンを合成し、環サイズ選択性、発光特性などの性質を解明することを目指している (Scheme 1)。まず基質を銀化し、Pd へのトランスメタル化によって、環状 Pd 錯体を得た。その後、還元的脱離反応を経て CPP に変換しところ、環化三量体と四量体を得られた。この結果から、当初想定した四核錯体に加えて、三核錯体も生成していたと想定される。アルキル基がオクチル基の場合は環化四量体が優先的生成し、メチル基の場合は環化三量体が優先的に生成した。化合物の同定は NMR、マスペクトルに加えて、単結晶 X 線構造解析によって行った。



1. 五十嵐 大也 神原貴樹 桑原純平 日本化学会第 103 春季年会 2023-P3-2vn-60.