

凹部に極性官能基を導入したアントラセン二量体の合成

(東工大 化生研) ○菊地悠太・青山慎治・Lorenzo Catti・吉沢道人

Concave Modification of Bent Anthracene Dimers with Polar Functional Groups (*Lab. for Chem. & Life Sci., Tokyo Tech*) ○Yuta Kikuchi, Shinji Aoyama, Lorenzo Catti, Michito Yoshizawa

A bent anthracene dimer is a versatile building block for the preparation of polyaromatic capsules and tubes. We here report the concave modification of the bent anthracene dimer with various polar functional groups. The new building blocks are synthesized starting from 3,5-dimethoxyphenol via Negishi coupling and ester/etherification as the key steps to introduce polar groups (e.g., benzoyl, *N*-acetyl-glycyl, and *N*-Boc-2-aminoethoxy) flanked by two polyaromatic panels. In addition, successful introduction of a cyano group at the concave is achieved.

Keywords: Bent anthracene dimer, Concave functionalization, Polar functional groups, ester, Nitrile

メタフェニレンで架橋したV型アントラセン二量体は、芳香環カプセルやチューブなどの有用なビルディングブロックになる (*Acc. Chem. Res.* **2019**, *52*, 2392–2404)。この二量体は凹部に芳香環パネルに挟まれた非極性ポケットを持つ。今回、この二量体の機能拡張を目指して、凹部に様々な極性官能基を導入する手法を開発したので報告する (下図上)。

3,5-ジメトキシフェノールを出発原料として、根岸カップリングを含む計4段階の反応で、凹部に1つの水酸基を持つ二量体 **1** を得た。そのエステル化またはエーテル化により種々の極性基 (ベンゾイル、*N*-アセチルグリシル、*N*-Boc-2-アミノエトキシ) を有する新規 V 型アントラセン二量体 **2a-c** の合成を達成した (下図下)。**2c** の ^1H NMR スペクトルにおいて、導入された官能基は芳香環の遮蔽を受けて大きく高磁場シフトして観測された。また、3,5-ジメトキシシアノベンゼンから、凹部にシアノ基を導入した二量体 **2d** を合成した。

