

電子供与基をもつアントラセン大環状化合物の合成とフラーレン C₆₀ との土星形錯体の形成

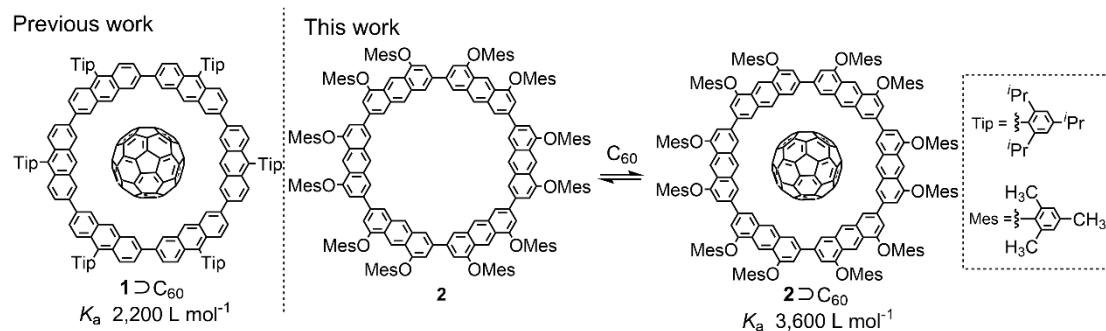
(東工大理) ○嶋原 勇希・鶴巻 英治・豊田 真司

Synthesis of Macrocyclic Compounds of Anthracenes with Electron-donating Substituents and Formation of Saturn-shaped Complex with C₆₀ (*School of Science, Tokyo Institute of Technology*) ○Yuki Shigihara, Eiji Tsurumaki, Shinji Toyota

We reported the synthesis of 2,7-anthrylene cyclic hexamer **1** and its formation of Saturn-shaped complex with fullerene C₆₀ stabilized by multipoint C-H... π interactions^[1]. We here synthesized cyclic hexamer **2** with two electron-donating mesityloxy groups in each anthracene unit to investigate the substituent effect. Cyclic hexamer **2** was synthesized by Yamamoto coupling of the corresponding 2,7-dibromoanthracene in 16% yield. Formation of a Saturn-shaped complex with C₆₀ was confirmed by ¹H NMR and fluorescence quenching titration experiments. The association constant K_a was determined to be 3,600 L mol⁻¹ in toluene at 296 K, which was larger than that of **1**. This result suggests that the electron-donating substituents enhance the association with the guest molecules. The association constants were also determined for C₇₀ and other guests.

Keywords: Macrocyclic compounds; Yamamoto coupling; Saturn-shaped complex; Anthracenes; Fullerene

我々は、10 位に 2,4,6-トリイソプロピルフェニル基 (Tip 基) を持つアントラセンユニットを 2,7 位で直接連結した大環状六量体 **1** が、多点 C-H... π 相互作用によりフラーレン C₆₀ を包接した土星形錯体を形成することを報告した^[1]。本研究では、ホスト分子の電子状態が錯形成に及ぼす影響を調べる目的で、電子供与性のメシチルオキシ基 (OMes 基) を 4,5 位に導入したアントラセンユニットを用いて大環状化合物を合成し、C₆₀ 錯体の形成を調べた。目的の環状六量体 **2** は、対応する 2,7-ジブロモアントラセン誘導体の Yamamoto カップリングにより、収率 16% で合成した。¹H NMR および蛍光消光滴定により、**2** と C₆₀ の錯体形成を確認し、トルエン中 296 K での会合定数を K_a 3,600 L mol⁻¹ と決定した。この値は、**1** の場合比べて大きく、電子供与性の置換基が錯形成を促進することが示唆された。また、C₇₀ など他のゲストとの錯体についても会合定数を決定し、結果を比較した。



[1] Y. Yamamoto, E. Tsurumaki, K. Wakamatsu, S. Toyota, *Angew. Chem., Int. Ed.* **2020**, *57*, 8199.