

分子間 Scholl 反応によるコラニューレン誘導体の合成と性質

(阪工大工) ○岡田 鈴音・山岡 珠理・百々 佳輝・村田 理尚

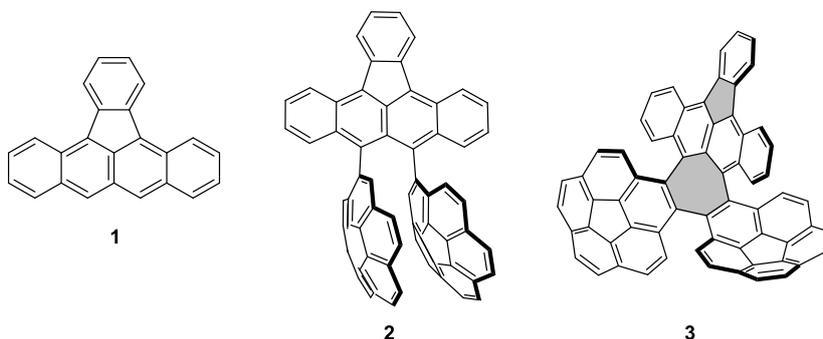
Synthesis and Properties of Corannulene Derivatives by Intermolecular Scholl Reaction
(Faculty of Engineering, Osaka Institute of Technology) ○Reo Okada, Shuri Yamaoka,
Yoshiki Dodo, Michihisa Murata

We have recently reported a domino-type multiple C–H functionalization of tetracene with molecular benzene. Under the typical conditions of the Scholl reaction, a domino reaction occurs between tetracene and six molecules of benzene in one pot to furnish an aromatic molecule with a curved π -system. In this work, we examined the domino-type reaction between a tetracene derivative and corannulene. The reaction proceeded at room temperature to furnish molecules having two corannulene units. The X-ray diffraction analysis of the obtained product unambiguously demonstrated a 3D molecular structure with a curved π -system, which contains two corannulene moieties.

Keywords : Polycyclic Aromatic Hydrocarbon; Scholl Reaction; Corannulene; Direct Functionalization; Curved π -System

コラニューレンは湾曲した多環芳香族炭化水素 (PAH) やホスト分子などの有機材料を合成するビルディングブロックとして有用であり、コラニューレンの π 共役拡張に関する研究が行われてきた¹⁾。本研究では、コラニューレンの直接的な構造変換として、分子間の連続した Scholl 反応^{2,3)}を検討したところ、2つのコラニューレンが組み込まれた特異な湾曲型 PAH がワンポットで得られることを見出した。

電子豊富な基質としてインデノテトラセン **1**²⁾に着目し、DDQ/TfOH を酸化剤に利用した分子間 Scholl 反応を検討した。**1** とコラニューレンとの反応は室温で進行し、やや複雑な混合物を与えたものの、単離精製により2つのコラニューレンが近傍に連結された **2** が生成することがわかった。さらに条件を検討した結果、2つのコラニューレン部位が環化して7員環が形成された **3** が生成した。得られた **3** の単結晶 X 線構造解析により、大きく捻じれて湾曲した π 共役構造が明らかとなった。



1) Y. Zhang, S. H. Pun, Q. Miao, *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 14554–14593.

2) M. Murata, M. Togo, D. Mishima, A. Harada, M. Muraoka, *Org. Lett.* **2020**, *22*, 4160–4163.

3) D. Mishima, H. Nakanishi, Y. Tsuboi, Y. Kishimoto, Y. Yamanaka, A. Harada, M. Togo, Y. Yamada, M. Muraoka, M. Murata, *Org. Lett.* **2021**, *23*, 7921–7926.