

イリジウム触媒を用いたビチオフェン架橋ジインとニトリルの [2+2+2]付加環化反応と蛍光特性の評価

(青学大理工¹・東邦大薬²) 澤野 卓大¹・〇浦沢 和希¹・杉浦 涼介¹・吉川 武司²・坂田 健²・大曲 仁美¹・長谷川 美貴¹・武内 亮¹

Iridium-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition of Bithiophene-Linked Diynes with Nitriles and the Evaluation of Fluorescent Properties (¹*Faculty of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University*, ²*Faculty of Pharmaceutical Sciences, Toho University*) Takahiro Sawano,¹ 〇 Kazuki Urasawa,¹ Ryosuke Sugiura,¹ Takeshi Yoshikawa,² Ken Sakata,² Hitomi Ohmagari,¹ Miki Hasegawa,¹ Ryo Takeuchi¹

Polycyclic heteroaromatic compounds have been expected as important fundamental structures of organic semiconductor and fluorescence material due to the electrochemical and photochemical properties, and the efficient synthetic methods for the formation of the target structures are desired.

We have recently developed iridium-catalyzed [2+2+2] cycloaddition of nitriles and newly synthesized three types of bithiophene-linked diynes to give novel polycyclic heteroaromatic compounds in high yields. These kinds of diynes showed the different reactivity for the cyclization, and the difference was explained by DFT calculation. Furthermore, we evaluated the fluorescent properties of the cyclized compounds.

Keywords : Iridium Catalyst; [2+2+2] Cycloaddition; Bithiophenes; Fluorescence; DFT Calculation

多環式複素環化合物は様々な電気化学的特性や光化学的特性を有することから有機半導体や蛍光材料などの機能性物質の重要な基本骨格として期待が寄せられており、望みの骨格を自在に作り出す原子効率的合成法の開発が求められている。

最近我々は、二つのチオフェン環で架橋した3種類の新規ジインを合成し、イリジウム触媒を用いたニトリルとの[2+2+2]付加環化反応を行うことで、新規多環式複素環化合物を高収率で得ることに成功した。3種類のジインは付加環化反応においてそれぞれ異なる反応性を示し、我々はこの反応性の違いをDFT計算により明らかにした。さらに、合成した環化体の蛍光特性も調べた。

