

中心に 10 員環を有する新規 5 回対称性含窒素多環芳香族分子の合成と物性

(京大院理¹) ○松尾 悠佑¹・田中 隆行¹・大須賀 篤弘¹

Synthesis and Properties of a Novel Five-Fold Symmetric Nitrogen-Embedded PAH Containing a 10-Membered Ring at the Center (¹*Graduate School of Science, Kyoto University*)

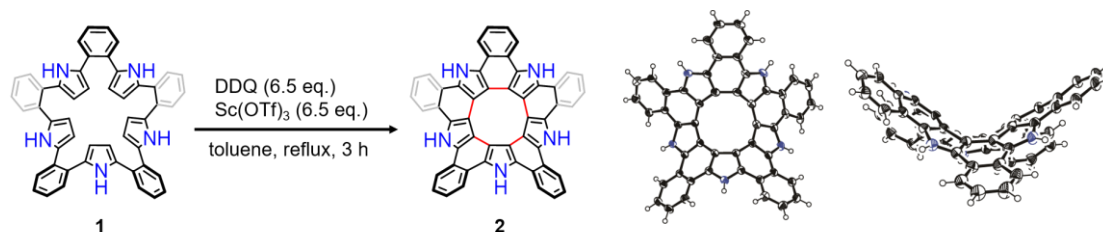
○Yusuke Matsuo,¹ Takayuki Tanaka,¹ Atsuhiko Osuka¹

Heteroatom-incorporated [8]circulene, namely hetero[8]circulene, is one of the most attractive heteronanographenes in terms of their planar structure, high symmetry, and presumed 8π antiaromaticity at the central eight-membered ring. Recently, Pittelkow and coworkers reported the synthesis of fully aromatic diazatrioxa[9]circulene, which took a planar structure. However, they failed to synthesize fully aromatic hetero[10]circulene due to its highly strained structure. Recently, we have explored the synthesis and functionality of tetraaza[8]circulene as a novel four-fold symmetric planar molecule. By employing our fold-in-type strategy, here we report a new five-fold symmetric heterocirculene, namely pentabenzopentaaza[10]circulene. X-Ray diffraction analysis showed its saddle-distorted structure. We will report the details of its synthesis, structure, and optical properties as well as the decent contribution of 10π aromaticity of cyclodecapentaene.

Keywords : heteroatom-incorporated PAH • heterocirculene • saddle structure • 10-membered ring • five-fold symmetry

ヘテロ[8]サーキュレンは中心に八員環を有するヘテロナノグラフェンの一種であり、テトラアザ[8]サーキュレンは四回対称性の剛直な平面分子である¹⁾。また、最近 Pittelkow らによって中心に九員環を有したジアザトリオキサ[9]サーキュレンが報告され、高い平面性を示すことが明らかになった。しかしながら、完全に共役したヘテロ[10]サーキュレンの合成は未だ達成されておらず、その構造と物性、そして中央部の十員環における芳香族性の有無には興味もたれる²⁾。

今回我々は、環状ピロール五量体 **1** に対する酸化的縮環反応によって中心に十員環を有する五回対称性のペンタベンゾペンタアザ[10]サーキュレン **2** の合成に成功した。X 線構造解析よりこの分子は鞍型構造を示し、溶液状態においては分子の柔軟性に起因するブロードな吸収・蛍光スペクトルを与えた。本発表において、合成や光学特性の詳細に加え、中央のシクロデカペンタエンの芳香族性の寄与について報告する。



1) F. Chen, Y. S. Hong, S. Shimizu, D. Kim, T. Tanaka, A. Osuka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 10639.

2) S. K. Pedersen, K. Eriksen, H. Årgen, B. F. Minaev, N. N. Karaush-Karmazin, O. Hammerich, G. V. Baryshnicov, M. Pittelkow, *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 14058.