

## ルビセン構造を高度に集積した新 $\pi$ 共役化合物の合成と物性

(東工大理<sup>1</sup>・産業技術高専<sup>2</sup>) ○伴 沙弥果<sup>1</sup>・鶴巻 英治<sup>1</sup>・池田 宏<sup>1,2</sup>・豊田 真司<sup>1</sup>  
 Synthesis and Properties of Novel  $\pi$ -Conjugated Compounds with Highly Accumulated Rubicene Structure

(<sup>1</sup>School of Science, Tokyo Institute of Technology, <sup>2</sup>Tokyo Metropolitan College of Industrial Technology)

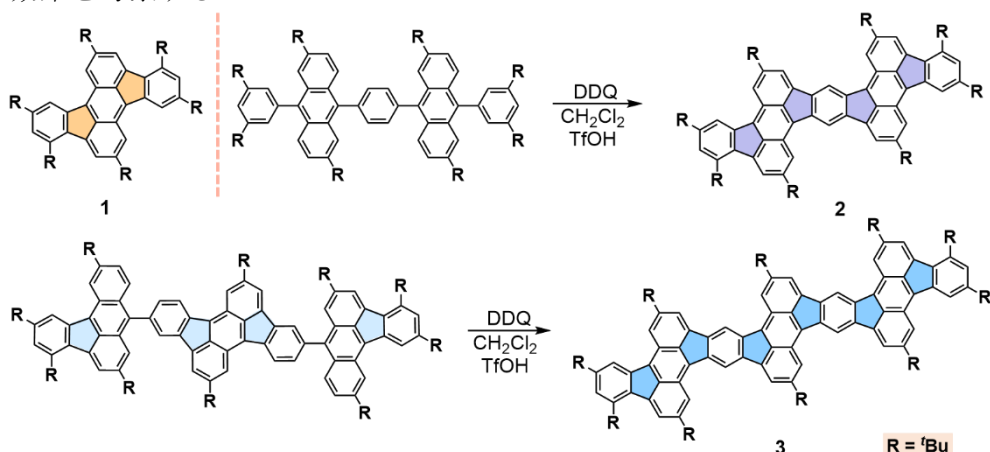
○Sayaka Ban<sup>1</sup>, Eiji Tsurumaki<sup>1</sup>, Hiroshi Ikeda<sup>1,2</sup>, Shinji Toyota<sup>1</sup>

We reported that rubicene was efficiently synthesized by the Scholl reaction of 9,10-diphenylanthracene with DDQ. We adopted this reaction for the synthesis of novel  $\pi$ -conjugated compounds with multiple rubicene structures. We synthesized *t*-butyl substituted compounds **1–3** by the Scholl reaction of the corresponding precursors. Compound **3**, isolated as a blue solid, showed an absorption band at 670 nm in the UV-vis spectrum and an emission band at 699 nm in the fluorescence spectrum. The effects of extended  $\pi$ -conjugation will be discussed from the data of structures, electrochemical measurements, and DFT calculations.

**Keywords** : Polycyclic aromatic hydrocarbon, Rubicene, Scholl reaction, Extended  $\pi$ -conjugation, Long wavelength shift

当研究室では、DDQを用いた9,10-ジフェニルアントラセンのScholl反応により多環芳香族炭化水素であるルビセンが効率的に合成できることを報告した<sup>1)</sup>。この反応を用いて、複数のルビセン構造を集積した新しい $\pi$ 共役化合物を合成した。

*t*-ブチル基を導入した目的化合物**1–3**は、相当する前駆体のScholl反応により合成した (Scheme 1)。三つのルビセン構造をもつ化合物**3**は青色の固体として単離された。紫外・可視および蛍光スペクトルでは構造の伸長にともない顕著な長波長シフトが観測され、化合物**3**は670 nmに吸収を、699 nmに発光を示した。これらの化合物の構造、電気化学測定およびDFT計算の結果から、 $\pi$ 共役の拡張が物性に及ぼす効果を考察する。



**Scheme 1.** Structures and synthesis of rubicene **1** and extended derivatives **2** and **3**.

1) Kawamura, M.; Tsurumaki, E.; Toyota, S. *Synthesis* **2018**, 50, 134.