

無置換ジオキサジアザ[8]サーキュレンの合成

(京大院理¹, 京大院工²) ○中川 蒼¹、松尾 悠佑¹、田中 隆行^{1,2}

Synthesis of a substituent-free dioxadiaza[8]circulene (¹*Graduate School of Science, Kyoto University*, ²*Graduate School of Engineering, Kyoto University*) ○Aoi Nakagawa¹, Yusuke Matsuo¹, Takayuki Tanaka¹

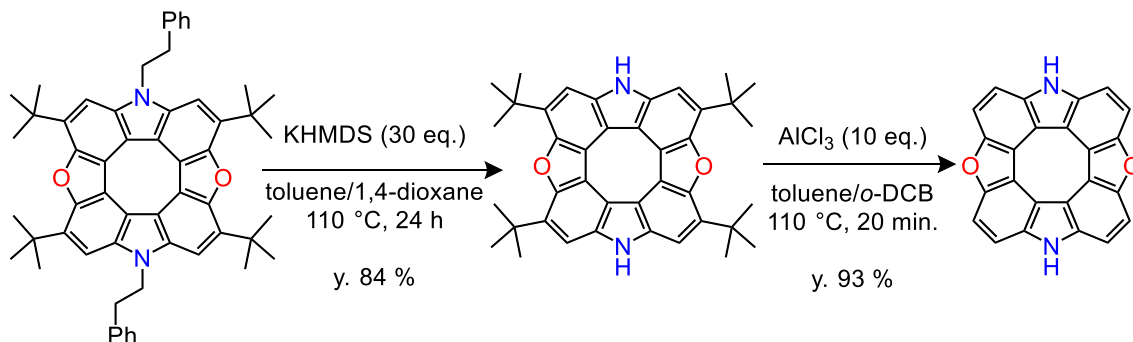
[n]Circulene is a kind of nanographene having an n-membered ring at the center that is surrounded by n-sided aromatic rings, and those containing heteroaromatic rings are called hetero[n]circulene. Hetero[8]circulenes mostly have a planar structure and a formal cyclooctatetraene structure at the center. Known hetero[8]circulenes are substituted with alkyl groups or formed with benzo-fused structures, except for an example of unsubstituted tetraoxa[8]circulene¹⁾, which, however, is insoluble in organic solvents and its physical properties have not been examined.

This time, we successfully synthesized a substituent-free dioxadiaza[8]circulene by removing the substituents after forming the circulene skeleton. This molecule is soluble in THF due to hydrogen bonding at the NH sites, that helped to measure its physical properties. Single crystal XRD showed a bimolecular herringbone structure in the solid state. We also report UV/Vis absorption and fluorescence spectra, IR spectra, and electrochemical properties.

Keywords : *Circulene; Nanographene; Fluorescence; X-ray Diffraction;*

[n]サーキュレンは中央の n 員環周辺を芳香環が環状に縮環したナノグラフェンの一種で、一部をヘテロ芳香環に置き換えたものをヘテロ[n]サーキュレンという。このうちヘテロ[8]サーキュレンは平面構造で、中央に形式的な COT 構造を持つ。これまでヘテロ[8]サーキュレンは周辺部にアルキル基やベンゾ縮環構造をもつものがほとんどであり、無置換のものはテトラオキサ[8]サーキュレン¹⁾の 1 例のみであった。しかしこの分子は低い溶解性から詳細な物性は調べられていない。

今回我々はサーキュレン合成後に置換基を外すことで無置換ジオキサジアザ[8]サーキュレンの合成に成功した。この分子は NH サイトの水素結合により THF などの溶媒に可溶で各種物理特性の測定が可能である。単結晶 X 線構造解析から二分子一組のヘリングボーン構造を持つことが分かった。本発表においてこの分子の紫外・可視吸収および蛍光、赤外吸収、電気化学特性などを報告する。



1) T. Brock-Nannestad, C. B. Nielsen, M. Schau-Magnussen, P. Hammershøj, T. K. Reenberg, A. B. Petersen, D. Trpceviski, M. Pittelkow *et al.*, *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 6320.