

## 電解酸化による窒素ドーピング多環芳香族炭化水素の合成と物性評価

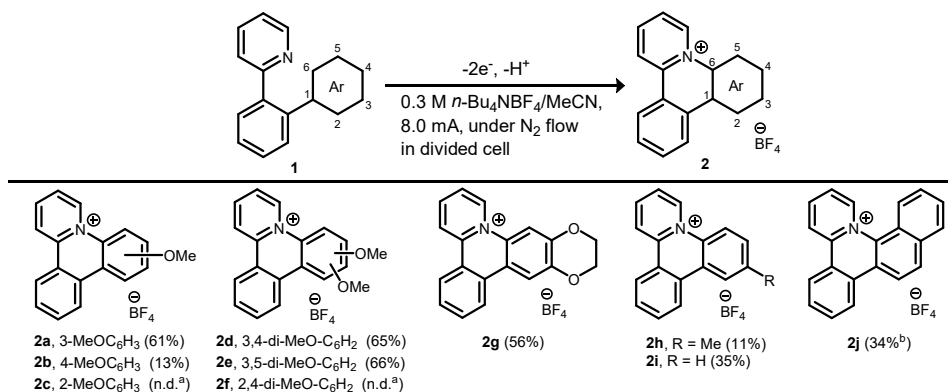
(東工大物質理工<sup>1</sup>) ○大野 雄史<sup>1</sup>・古性 大亮<sup>1</sup>・一二三 遼祐<sup>1</sup>・富田 育義<sup>1</sup>・稲木 信介<sup>1</sup>

Synthesis of  $N^+$ -doped Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by Electrolytic Oxidation and Their Optoelectronic Properties (<sup>1</sup>*School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology*) ○Yushi Ohno<sup>1</sup>, Daisuke Furusho<sup>1</sup>, Ryoyu Hifumi<sup>1</sup>, Ikuyoshi Tomita<sup>1</sup>, Shinsuke Inagi<sup>1</sup>

Cationic nitrogen-doping in the framework of polyaromatic hydrocarbons (PAHs) is an effective method to modulate optoelectronic properties. However, the approaches to synthesize  $N^+$ -doped PAHs are still limited. In this work, we demonstrate the facile synthesis of  $N^+$ -doped triphenylene derivatives using intramolecular pyridination reaction by electrolytic oxidation. The phenylpyridine derivatives successfully afforded the corresponding  $N^+$ -doped triphenylenes in 66–11% yield. In addition, we also elucidated the reaction mechanism by DFT calculation. Moreover, we found that the obtained  $N^+$ -doped triphenylenes have high electron accepting nature and good emission properties derived from the incorporation of the pyridinium moiety.

**Keywords** :Polycyclic aromatic hydrocarbons; Triphenylene; Cyclization; Electrolytic oxidation

多環芳香族炭化水素(PAHs)への窒素カチオンドーピングにより得られる  $N^+$ -doped PAHs は、PAHs と比較して特異な電子物性を発現する。しかしながら、 $N^+$ -doped PAHs の合成法に関する知見は限られており<sup>1)</sup>、簡便な合成法の開発が望まれている。本研究では、 $N^+$ -doped PAHs の簡便な合成法の確立を目的とし、分子内電解ピリジン化反応を利用した  $N^+$ -doped トリフェニレン類の合成を検討した。その結果、種々の  $N^+$ -doped トリフェニレン類を収率 66–11%で得ることに成功し、DFT 計算を用いて反応メカニズムを明らかにした。また、得られた  $N^+$ -doped トリフェニレンは、無置換トリフェニレンと比較して、高い電子受容性及び発光特性を有することを見出した。



<sup>a</sup> Not detected, <sup>b</sup> Et<sub>4</sub>NBF<sub>4</sub> was used as a supporting electrolyte.

1) Y. Asanuma, H. Eguchi, H. Nishiyama, I. Tomita, S. Inagi, *Org. Lett.* **2017**, *19*, 1824.