ベンゾチアジアゾール骨格を有する酸素架橋ヘテロアセン類の合成と物性評価

（東工大物質理工 [1]）○門谷成隆 [1]・瀧川菜月 [1]・一二三遼祐 [1]・冨田育義 [1]・稲木信介 [1]

Synthesis and properties of benzothiadiazole-containing *O*-bridged heteroacenes

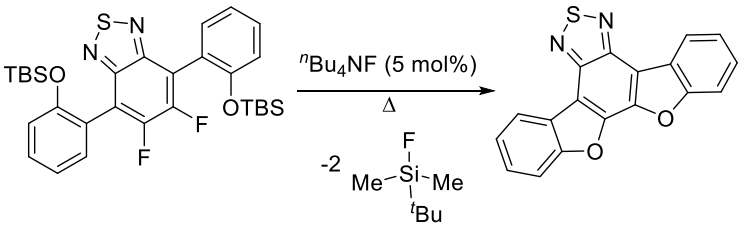
([1] *Department of Chemical Science and Engineering, School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology*) ○Shigetaka Monya[1], Natsuki Takigawa[1], Ryoyu Hifumi[1], Ikuyoshi Tomita[1], Shinsuke Inagi[1]

Oxygen-bridged heteroacenes (*O*-heteroacenes) are known to have superior carrier mobility and oxidation tolerance compared to ordinary acenes and heteroacenes, and are expected to be applied to organic electronics. However, the conventional synthetic method requires severe reaction conditions and the use of transition metal catalysts.

In our previous study, we have reported a facile method for the synthesis of *O*-heteroacenes based on nucleophilic aromatic substitution reactions (S_NAr) using fluoride ions as catalysts. In this method, a variety of *O*-heteroacenes were obtained in high yields under relatively mild conditions without transition metal catalysts. In this study, we synthesized a benzothiadiazole (BTD)-containing *O*-heteroacenes, which possess donor-acceptor structure, with the same protocol. In addition, their optical and electrochemical properties were investigated.

Keywords : heteroacene; fluorine chemistry; cyclization; benzothiadiazole

酸素架橋したヘテロアセンは、通常のヘテロアセン類に比べキャリア移動度や耐酸化性に優れることが知られており、有機エレクトロニクスなどへの応用が期待されている。しかしながら、従来の合成法では厳しい反応条件や遷移金属触媒を使用することなどが課題となっている [1)]。当研究室では、酸素架橋ヘテロアセンの簡便な合成法として、フッ化物イオンを触媒的に利用した芳香族求核置換反応に基づく方法を報告している [2)]。本手法では、遷移金属触媒フリーかつ比較的温和な条件において、酸素架橋ヘテロアセン類が高収率で得ている。そこで本研究では、この合成法の基質適用範囲の拡大を目的として、強力な電子求引性基として知られるベンゾチアヂアゾール(BTD)に着目し、BTD 骨格を有する酸素架橋ヘテロアセンの合成およびその光学的・電気化学的特性評価を行った。条件検討の結果、目的生成物を高収率で得ることに成功した。また、BTD の電子求引性に由来する分子内電荷移動吸収も観測した。



1) P. J. Borpatra, B. Deka, M. L. Deb, P. K. Baruah, *Org. Chem. Front.*, **2019**, *6*, 3445.
2) K. Sekino, N. Shida, R. Shiki, N. Takigawa, H. Nishiyama, I. Tomita, S. Inagi, *Org. Lett.*, **2020**, *22*, 2892.

© The Chemical Society of Japan