

ホウ素ドーブナノグラフェンの有機化学合成

Organic Synthesis of Boron-Doped Nanographenes

名大院理¹, JST さきがけ², JST CREST³, 名大 WPI⁴

○齊藤 尚平^{1,2}, Chuandong Dou¹, 大角 真一郎¹, 山口 茂弘^{1,3,4}

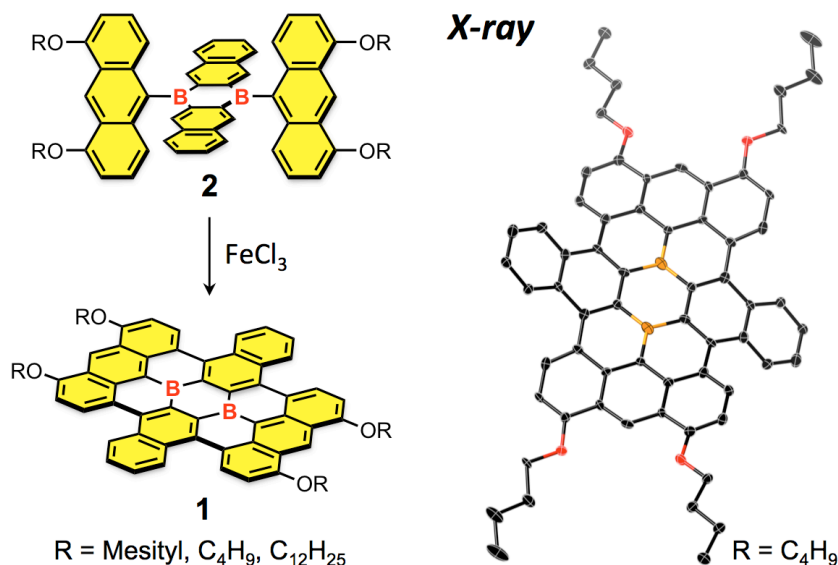
Nagoya Univ.¹, JST PREST², JST CREST³, WPI-ITbM⁴

○Shohei Saito^{1,2}, Chuandong Dou¹, Shin-ichiro Osumi¹, Shigehiro Yamaguchi^{1,3,4}

E-mail: yamaguchi@chem.nagoya-u.ac.jp

「ホウ素ドーブナノグラフェン」は、高性能電子デバイスや、リチウムイオン電池の負極材料として、近年ナノ科学分野で注目されている^[1]。しかし、従来の化学気相成長 (CVD) 法や電熱反応では、分子量、エッジ形状、ドーピング様式が揃っていない混合物が得られることから、精確な電子状態の解明には至っていない。今回我々は、単一化合物として、ホウ素ドーブされたナノグラフェンの有機合成に成功し、その分子構造と電子状態を明らかにした^[2]。

我々は既に、チオフェン環を含む縮合多環式 π 共役系の中央に 3 配位ホウ素を 1 つ導入した分子骨格の合成に成功している^[3]。次の標的化合物として、ナノグラフェンの炭素をホウ素で置き換えた化合物 **1** を考えた。化合物 **1** は、直交した π 共役骨格をもつ前駆体 **2** に対して、酸化的縮環反応を施すことにより合成した。一般に有機ホウ素化合物は酸素や水に不安定であり、安定に取り扱うためにはかさ高い置換基や窒素原子などを導入する必要があるが、化合物 **1** は空气中室温で十分に安定であり、シリカゲルカラムにより分離が可能であった。X 線結晶構造解析から、48 個の sp^2 炭素と 2 個の平面 3 配位ホウ素から構成される 15 環式のハニカム構造を確認することができた。分子軌道、電気化学特性、パッキング構造に及ぼす置換基の効果について報告する。



[1] a) C.-S. Lee, *et al. ACS Nano* **2012**, 6, 1970. b) W. Ren, H.-M. Cheng, *et al. ACS Nano* **2011**, 5, 5463.

[2] C. Dou, S. Saito, K. Matsuo, I. Hisaki, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 12206.

[3] S. Saito, K. Matsuo, S. Yamaguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 9130 (Highlighted in *Spotlights*).