

基板上合成を用いた含窒素ウンデカセンとその誘導体の合成

(奈良先端大先端科技¹・JST さきがけ²) ○林 宏暢^{1,2}・山田 容子¹

On-surface synthesis of nitrogen-substituted undecacene and its derivatives (¹Graduate School of Science and Technology, Nara Institute of Science and Technology, ²PRESTO, Japan Science and Technology Agency) ○Hironobu Hayashi,^{1,2} Hiroko Yamada¹

Polyacenes, composed of multiple linearly fused benzene rings, have drawn considerable attention because of their diradical character in the ground state. However, polyacenes are poorly soluble due to their uncomplicated structure. Furthermore, the zigzag-edged structure of polyacenes results in ultra-narrow bandgap with increasing acene length, which causes a decrease in stability. In this study, we have successfully synthesized precursor of nitrogen-substituted undecacene. Then, on-surface reaction of the precursor on Au(111) under ultrahigh vacuum conditions afforded not only nitrogen-substituted undecacene but also its derivatives, depending on the reaction conditions.

Keywords : On-surface synthesis; Polyacene; Precursor molecule; Diradical character; Nanocarbon materials

ベンゼン環を直線上に縮環した高次アセンは、基底状態でのビラジカル性など興味深い物性を示す。しかしながら、プレーンな構造に由来する難溶性と HOMO の上昇による不安定性から通常的手法では合成が困難である。一方我々はこれまで、難溶かつ不安定な有機材料を溶媒に可溶な前駆体から光照射や加熱により合成する前駆体法と、酸素のほとんど存在しない超高真空中での変換反応を組み合わせることで、ノナセンの合成とノナセンが基底状態でビラジカル性を有することを実験的に明らかにしてきた。本研究では、ベンゼン環が 11 個連結された含窒素ウンデカセン前駆体を合成した。超高真空中において、Au(111) 表面に前駆体分子を昇華後に種々の条件で変換反応を行うことで、含窒素ウンデカセンとその誘導体が得られたので報告する (Figure 1)。¹

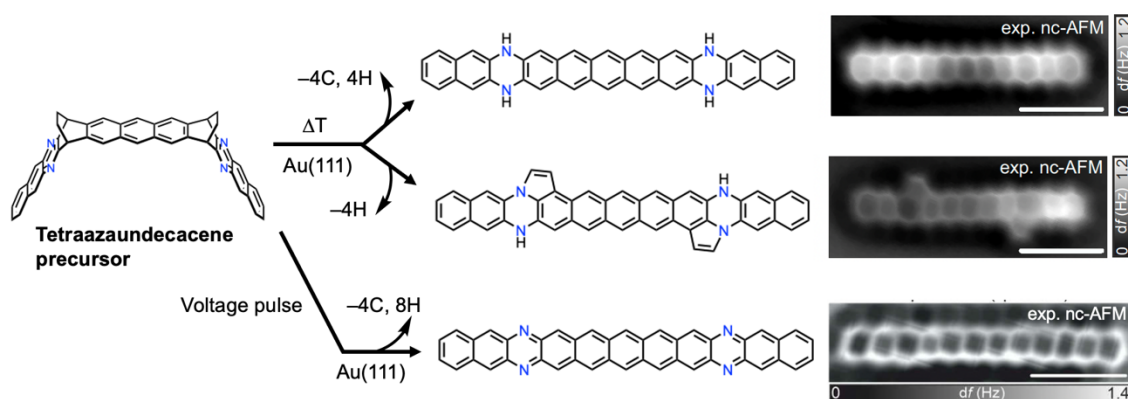


Figure 1. On-surface synthesis of nitrogen-substituted undecacene and its derivatives.

1) Eimre, K.; Urgel, J. I.; Hayashi, H.; Giovannantonio, M. D.; Ruffieux, P.; Sato, S.; Otomo, S.; Chan, Y. S.; Aratani, N.; Passerone, D.; Gröning, O.; Yamada, H.; Fasel, R.; Pignedoli, C. A. *Nat. Commun.* **2021**, in press. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-27961-1>.