

大環状金錯体を経由したジアザペンタセンを含む三角形状ナノフープの合成と酸化特性

(東理大理¹・阪公大理²) ○小澤 由佳¹、土戸 良高¹、酒巻 大輔²、河合 英敏¹

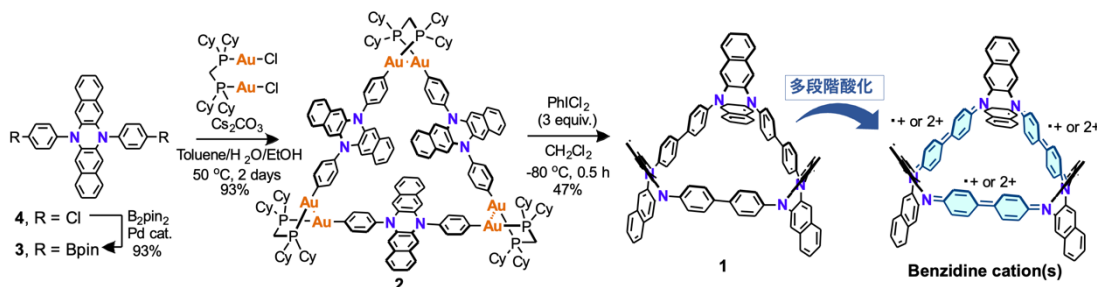
Synthesis and Oxidation Properties of a Triangular Nanohoop Containing Diazapentacenes via a Macrocyclic Gold(I) Complex (¹Tokyo University of Science, ²Osaka Metropolitan University) ○Yuka Ozawa¹, Yoshitaka Tsuchido¹, Daisuke Sakamaki², Hidetoshi Kawai¹

We synthesized a new conjugated molecule (**1**) consisting of three units of 6,13-dihydro-6,13-diazapentacene (DHDAP) linked with 4,4'-biphenyl spacers at the 6,13-positions by applying the cycloparaphenylene synthetic method *via* a macrocyclic gold complex. By single crystal X-ray diffraction analysis, compound **1** adopts a characteristic triangular molecular structure with a "V"-shaped bending of the DHDAP units. Monitoring of absorption changes upon chemical oxidation and electrochemical measurements suggested that compound **1** undergoes multi-step electron oxidations, leading to the formation of the benzidine cation(s) through stepwise electron oxidation(s) of each benzidine unit.

Keywords : Azacene; Cycloparaphenylene, Gold(I) complex; Electronic oxidation

ペンタセンの 6,13 位を窒素置換した平面状の π 共役化合物である 6,13-ジヒドロ-6,13-ジアザペンタセン (DHDAP) は、高い蛍光量子収率と良好な電子ドナー性を持ち、化学修飾が容易であることから官能基の導入や π 共役構造の拡張による様々な DHDAP 誘導体が報告されている¹⁾。本研究では、DHDAP 骨格をシクロパラフェニレン (CPP) の環状共役構造に組み込むことで、新たな電子的特性や光物性などの機能発現を目指し、DHDAP の 6,13 位がビフェニル部位によって 3 ユニット連結された新規環状共役分子(**1**)を設計した。目的化合物は、大環状金錯体を経由する CPP 合成法²⁾を用いて合成した。単結晶 X 線構造解析によって、化合物 **1** は DHDAP ユニットが V 字型に屈曲した特徴的な三角形状の分子構造であることが明らかになった。

溶液中における電気化学測定、化学酸化による吸収の変化をモニターした結果、化合物 **1** は多段階の電子酸化を受けることが明らかとなった。量子化学計算の結果より、化合物 **1** の分子内の「辺」に相当するベンジジン部位がそれぞれ 1~2 電子酸化された多価カチオン種が生成したと結論づけた。



1) D. Sakamaki, S. Seki et al. *Chem. Sci.* **2019**, *10*, 8939; 2) Y. Tsuchido, K. Osakada et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 22928.