

ペンタフェン誘導体の合成とその環化三量化

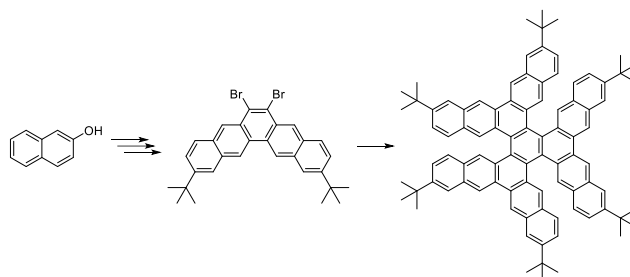
(東電大院工) ○鄭 賢柱・宮坂 誠

Synthesis of pentaphene derivatives and their cyclotrimerization (*Graduate School of Engineering, Tokyo Denki University*) ○Hyeonju Jeong, Makoto Miyasaka

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) with multiple fused benzene rings include non-planar PAHs such as helicenes, which have a torsionally conjugated backbone resulting from intramolecular steric repulsion. Chiral nonplanar PAHs have been of interest because they exhibit unique structure-derived chiroptical properties. However, due to destabilization of the π -conjugated system by distortion, the fluorescence quantum yield remains low. Therefore, it is expected to improve the luminescence properties by expanding the π -conjugated system and promoting delocalization of the π -electrons by condensing them. Recently, multi-helicenes having two or more helicene subunits in one molecule have been created, and their structural beauty and interesting properties have been reported. Among them, the [5]helicene trimer has slightly improved the low fluorescence quantum yield while possessing unique chiroptical properties. Our laboratory has also focused on the excellent optical properties of pentaphene, a V-shaped PAH derivative, and the present study is aimed at the synthesis of V-shaped PAH derivatives and the creation of self-condensing cyclized trimers containing pentaphene's in their backbone.

Keywords : *pentaphene, polycyclic aromatic hydrocarbon, cyclotrimerization*

複数のベンゼン環が縮環した多環芳香族炭化水素(PAHs)には、分子内の立体反発により生じるねじれ共役骨格を持つヘリセン類のような非平面 PAHs がある。キラル非平面型 PAHs は、ユニークな構造由来のキロプティカル特性を示すため、関心が注がれてきた。しかし、歪みによる π 共役系の不安定化により、蛍光量子収率は低く留まる¹⁾。そこで、これらを縮環させ π 共役系を拡張し、 π 電子の非局在化を促すことで、発光特性の改善が期待される²⁾。近年、1 分子中に 2 つ以上のヘリセンサブユニットをもつ、マルチヘリセンの創製がされ、その構造美と興味深い性質が報告されている。その中でも、[5]ヘリセン三量体は、特有のキロプティカル特性を持ちつつ、低い蛍光量子収率をわずかに改善した³⁾。また、当研究室では、V 字型 PAH 誘導体であるペンタフェンの優れた光学特性について注目しており、本研究では、V 字型 PAH 誘導体の合成とペンタフェン誘導体を骨格に含む自己縮合環化三量体の創製を目的としている。



1)M. Gingras, *Chem. Soc. Rev.*, **2013**, 42, 968.

2)R. Mokrai *et.al.*, *New J. Chem.*, **2021**, 45, 8118.

3)M. Gingras *et.al.*, *J. Am. Chem Soc.*, **2017**, 139, 51, 18508.