

十員環を有する巨大 π 共役分子の合成と物性

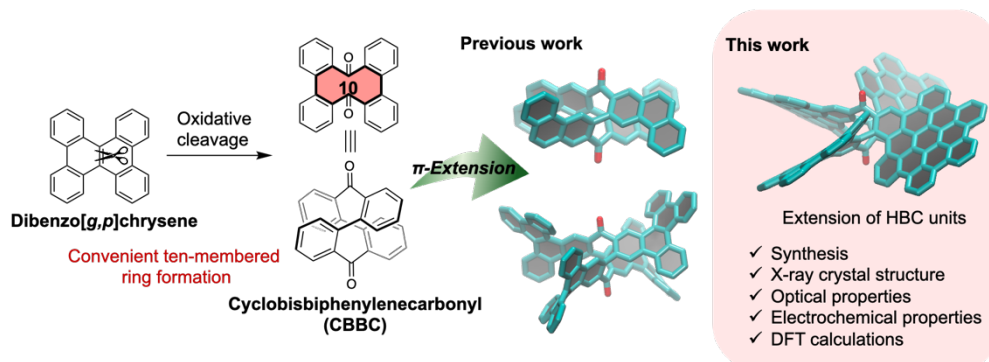
(名大院工¹・JST さきがけ²) ○平野 純一朗¹、忍久保 洋¹、福井 識人^{1,2}

Synthesis and properties of a gigantic π -conjugated molecule containing a ten-membered ring (¹Graduate School of Engineering, Nagoya University, ²JST PRESTO)○Junichiro Hirano¹, Hiroshi Shinokubo¹, Norihito Fukui^{1,2}

Construction of medium-sized rings in conjugated π -systems has been challenging, which often requires multistep transformations with low chemical yields. In particular, π -conjugated molecules containing relatively large medium-sized rings such as nine- and ten-membered rings have been almost elusive. Recently, we reported the convenient synthesis of a ten-membered macrocycle, i.e., cyclobisbiphenylenecarbonyl (CBBC), by cleaving the inner double bond of dibenzochrysene. We also synthesized π -extended CBBC derivatives, in which the original benzene units are extended to phenanthrene and dibenzochrysene. Here, we report the extension of the benzene units to hexabenzocoronene, affording a gigantic non-planar π -conjugated molecule consisting of 170 sp^2 carbon atoms.

これまでナノグラフェンへの中員環の導入は、多段階反応による低収率での合成にとどまっていた。特に八員環を超える員環数が導入された π 共役分子の報告例はほとんどなく、探求が求められる分野である。一方、最近我々は、ジベンゾクリセンの骨格内部の二重結合を酸化的に開裂することで、 sp^2 炭素のみからなる十員環を分子内にもつシクロビスビフェニレンカルボニル(CBBC)が合成できることを報告している¹⁾。また、CBBC のベンゼン環をフェナントレンやジベンゾクリセンに π 拡張した類縁体も合成可能であることを明らかにしている²⁾。

今回我々は、CBBC のベンゼン環をヘキサベンゾコロネンへと π 拡張し、構成炭素数 170 の新規非平面 π 共役分子を創出することに成功した。本発表では標的分子の合成法、単結晶 X 線構造、光学特性、電気化学特性について報告する。



1) N. Fukui, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 29383–29390.

2) 日本化学会第 104 回春季年会、千葉(日本大学)、2024 年 3 月、E1113-4am-03