

## N-ヘテロ環状カルベン–BN- $\pi$ 電子系ハイブリッド分子の合成と電子状態の解明

(東大院工<sup>1</sup>・JST ACT-X<sup>2</sup>・理研<sup>3</sup>) ○澤 聡人<sup>1</sup>・小池 太智<sup>1,2</sup>・伊丹 健一郎<sup>3</sup>・正井 宏<sup>1</sup>

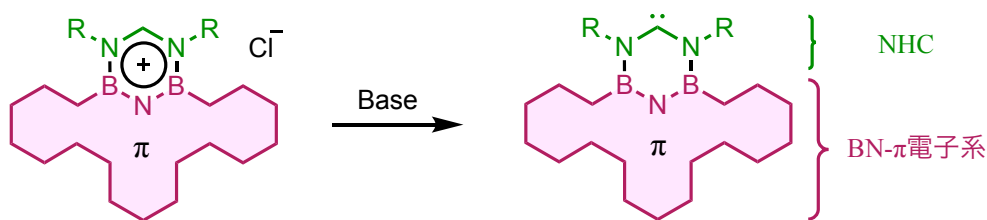
Synthesis and Electronic Properties of N-Heterocyclic Carbene–BN- $\pi$  Hybrid Molecules (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Tokyo University, <sup>2</sup>JST ACT-X, <sup>3</sup>RIKEN) ○Akito Sawa<sup>1</sup>, Taichi Koike<sup>1,2</sup>, Kenichiro Itami<sup>3</sup>, Hiroshi Masai<sup>1</sup>

Fusing functional  $\pi$ -electron systems directly to N-heterocyclic carbenes (NHCs) is a promising strategy for accessing unexplored molecular motifs with tunable properties. Motivated by the attractive fluorescence and redox characteristics of boron- and nitrogen-doped polycyclic aromatic compounds, we designed a hybrid scaffold combining these doped aromatic compounds with an NHC core. Herein, we report on the synthesis of a target carbene utilizing our electrophilic B–N–B-tetracene reagent and examine its electronic properties.

**Keywords :** Low-Valent Carbon Species; N-Heterocyclic Carbene; Boron Doped Aromatic Molecules; Luminescent Molecules; Redox Chemistry

N-ヘテロ環状カルベン (NHC) に機能性  $\pi$  電子系を直接縮環させた分子は、特異な物性と反応性を併せ持つため、材料の物性制御や未踏分子への誘導における新しい手段として注目されている<sup>1)</sup>。本研究では、ホウ素と窒素原子がドーピングされた多環式芳香族化合物 (BN- $\pi$ ) が示す特異な発光<sup>2)</sup>や酸化還元特性<sup>3)</sup>に着目し、これらを NHC とハイブリッド化させた分子の電子的特性の解明やさらなる未踏 BN- $\pi$  分子への誘導化をはじめとした機能開拓を目指している。

今回我々は、当研究室が着目している B–N–B テトラセン試薬を基軸とした目的カルベンの合成について検討するとともに、その電子状態についても調査したので、詳細を報告する。



- 1) Examples of functional NHC. Nguyen, D. T.; Freitag, M.; Gutheil, C.; Sothewes, K.; Tyler, B. J.; Böckmann, M.; Das, M.; Schlüter, F.; Doltsinis, N. L.; Arlinghaus, H. F.; Ravoo, B. J.; Glorius, F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 13651–13656.
- 2) Nakatsuka, S.; Yasuda, N.; Hatakeyama, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13562–13565.
- 3) Wei, H.; Liu, Y.; Gopalakrishna, T. Y.; Phan, H.; Huang, X.; Bao, L.; Guo, J.; Zhou, J.; Luo, S.; Wu, J.; Zeng, Z. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 15760–15767.