

# Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät

## Institut für Chemie

**Fachgebiet:** *Chemie*

Betreuer: Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Peter Langer

Ihr Name Jan Radolko

(e-mail: jan.radolko@uni-rostock.de)

## Synthesis of Heterocyclazines by Buchwald-Hartwig reaction and C-H activation

### Deutsche Zusammenfassung

In dieser Dissertation entwickle ich effizienter Methoden für den Aufbau verschiedener neuer heteroaromatischer Polyzyklen, wie zum Beispiel Stickstoff und Sauerstoff dotierte Aceanthrylene und Stickstoff dotierte Azulenfluorene. Die primäre Synthesestrategie ist es, Buchwald-Hartwig-Reaktionen und/oder C-H-Aktivierungen durchzuführen um Zyklisierungsreaktionen an ausgewählten Startmaterialien wie zum Beispiel Imidazo[1,2-*a*]pyridin und 5*H*-Dibenz[*b,f*]azepin zu ermöglichen. In dieser Hinsicht werden effiziente und einzigartige C-C und C-N Bindungen für die Entwicklung unbekannter Heterocycl[3.3.2]azine und Heterocycl[4.2.2]azine aufgebaut. Darüber hinaus sind computergestützte Berechnungen zu der Aromatizität, den Energieniveaus sowie experimentelle Untersuchungen zu den elektronischen und optischen Eigenschaften an den neu entwickelten Molekülen durchgeführt worden.

### Englisch Zusammenfassung

Within this dissertation, I develop efficient methodologies for the design of several new heteroaromatic polycycles, such as nitrogen and oxygen doped aceanthrylenes and nitrogen doped azulenofluorenes. The primary synthetic strategy is to perform Buchwald-Hartwig reaction and/or C H activation to enable cyclization reactions on distinct starting materials such as imidazo[1,2 *a*]pyridine and 5*H*-dibenzo[*b,f*]azepine. In this regard, efficient and unique C C and C-N bonds are formed to develop previously unknown heterocycl[3.3.2]azines and heterocycl[4.2.2]azines. Moreover, computational studies on aromaticity and energy levels, as well as experimental studies on electronic and optical properties, are performed on the newly designed molecules.