

ジアリールエテン縮環体の π 共役特性に与える置換基効果

(京大院工) ○坂崎 亜実・墨谷 祐希・東口 顕士・松田 建児

Substituent effect on the conjugation character of diarylethene annulated isomer (*Kyoto University*) ○Ami Sakazaki, Youki Sumiya, Kenji Higashiguchi, Kenji Matsuda

Diarylethene (DAE) has three types of isomers; the colorless open-ring isomer, the colored closed-ring isomer, and the colored annulated isomer. Although the conjugation system of the annulated isomer is similar to the closed-ring isomer, the annulated isomer is a photoirreversible product. The conjugation properties of the annulated isomer had been investigated from the viewpoints of electron transition and radical exchange interaction in our previous study. In this study, we synthesized the annulated isomer having the other types of substituents.

Keywords : *Diarylethene; Annulated isomer; Meso form*

ジアリールエテン (DAE) には可逆な光異性化を示す開環体と閉環体の他に、光不可逆な異性体である縮環体が存在する¹⁾。縮環体は閉環体とよく似た共役構造を有し、吸収スペクトルやビラジカルの交換相互作用も類似していた²⁾。これまでは、分子平面表裏に2つのメチル基が突き出した化合物のみ合成されているため、本研究ではメチル基以外の置換基を導入した DAE 縮環体の性質について評価する。

共役平面表裏の片方にメチル基、もう片方にシクロヘキシル基を導入した **DAE1** を設計した。可視域の吸収極大波長は量子化学計算により閉環体 **DAE1c** について 482 nm、縮環体 **DAE1h-u**, **DAE1h-d** についてそれぞれ 476, 479 nm となった(B3LYP/6-31G(d))。ピナコールカップリングにより合成した **DAE1o** に紫外光を照射したところ、可視域に吸収バンドが立ち上がった。続いて可視光を照射したところ、450-650 nm のバンドが下がったことから、450-650 nm は閉環体や様々な副生成物に相当し、450 nm 付近が縮環体 **DAE1h** と見做された。**DAE1h-u** と **DAE1h-d** の区別については、今後行う予定である。

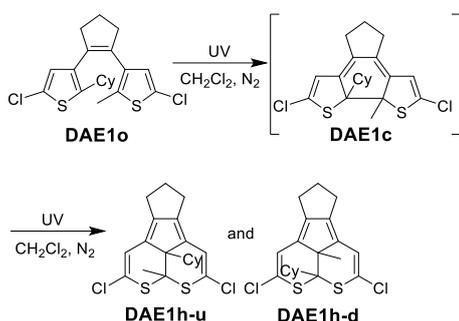


Figure 1. Photoisomerization of DAE1.

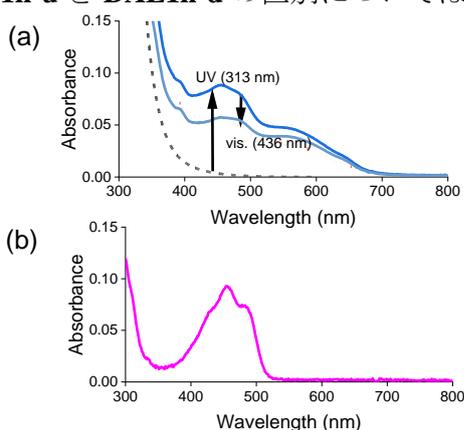


Figure 2. (a) Photochromism of DAE1o. (b) Absorption spectrum of DAE1h.

1) M. Irie *et al.*, *Chem. Commun.* **1999**, 747. 2) Y. Sumiya *et al.*, *Chem. Commun.* **2020**, 56, 2447.