トリ-tert-ブチルトリインデニルの合成とその性質

(阪大院理) ○宮川 奈那子・西内 智彦・久保 孝史

Synthesis and Properties of Tri-tert-Butyl Triindenyl

(Graduate School of Science, Osaka University) ○ Nanako Miyagawa, Tomohiko Nishiuchi, Takashi Kubo.

A one-dimensional (1D) chain of organic radical species is expected to show metallic behavior, and many studies have been carried out. However, the instability of radical species makes it difficult to construct a close 1D chain, and metallic conductivity has been obtained in only a few cases. In this study, we designed 2,5,8-tri-*tert*-butyl triindenyl radical 1 to construct electro-conductive 1D organic radical chains. The triindenyl 1 is expected to be thermodynamically stabilized, and the contribution of a triradical structure, predicted from the resonance structure, is expected to result in aggregation behavior with a remarkably close intermolecular distance. We succeeded in synthesizing 2,5,8-tri-*tert*-butyl triindene 6 from the starting material in five steps, and was further transformed it into trianion species by the reaction with a strong base. ESR signals of the radical dianion were obtained by exposing the trianion species to a small amount of oxygen. We are now attempting to synthesize 1 by oxidizing the obtained trianion species.

Keywords: Hydrocarbon Radical; Aromatic Hydrocarbon; Trianion Species

有機ラジカル種が一次元的に積層した集積体は、半充填バンドの出現により金属的な挙動を示すことが理論的に予測され、多くの研究がなされてきた。しかし、ラジカル種は本質的に不安定であるため密接な一次元集積体を作ることが困難であり、金属的導電性が得られた例はごく少数にとどまっている。

本研究では導電性を持つ有機ラジカル一次元鎖構築を目的とし、2,5,8-トリ-tert-ブチルトリインデニルラジカル 1 を設計した。トリインデニル骨格を用いることで大きな熱力学安定化が得られることや、共鳴構造から予測されるトリラジカルの寄与により分子間距離が著しく接近した会合挙動を示すことなどが期待される。今回出発物質から5段階で2,5,8-トリ-tert-ブチルトリインデン6の合成に成功し、さらにそれに強塩基を作用させることによりトリアニオン種に誘導した。また、トリアニオン種を少しの酸素にさらすことによりラジカルジアニオンのESRピークが得られた。現在トリアニオン種のさらなる酸化により1の発生を試みている。