

## ジシクロヘプタ[*a,d*]ベンゼンを基盤とする基底三重項ケクレ炭化水素の創出

(阪大院基礎工) ○森腰哲也・清水章弘・新谷亮

Creation of Dicyclohepta[*a,d*]benzene-Based Kekulé Hydrocarbon with a Triplet Ground State  
(Graduate School of Engineering Science, Osaka University)

○Tetsuya Morikoshi, Akihiro Shimizu, Ryo Shintani

Molecules with a triplet ground state are expected to be the basic skeleton of magnetic materials. Because all triplet ground-state hydrocarbons with two-spin systems isolated to date are non-Kekulé molecules, the creation of Kekulé hydrocarbon with a triplet ground state is expected to open up a new class of molecules.

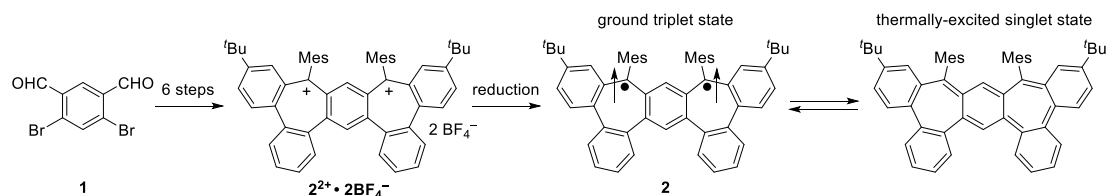
Because Kekulé hydrocarbons generally have a singlet ground state, an appropriate molecular design is required to have a triplet ground state: (1) the stabilization of the triplet state by incorporating a skeleton of a triplet ground state, and (2) the destabilization of the singlet state by decreasing the number of its aromatic sextet compared to that of the triplet state. In this study, a dicyclohepta[*a,d*]benzene-based Kekulé hydrocarbon **2** was designed and synthesized (Scheme 1). The precursor  $2^{2+} \cdot 2\text{BF}_4^-$  was synthesized in six steps from **1**. Triplet species generated by the reduction of  $2^{2+} \cdot 2\text{BF}_4^-$  were observed by the ESR measurement.

**Keywords** : Triplet Ground State; Kekulé Hydrocarbon; Dicyclohepta[*a,d*]benzene;

*m*-Quinodimethane; Seven-membered Ring

基底三重項分子は、磁性材料の基本骨格となることが期待されている。今までに単離されている全ての二スピン系の基底三重項炭化水素は非ケクレ分子であり、基底三重項ケクレ炭化水素の創出は、基底三重項の新しい分子群の開発につながると期待される。

ケクレ炭化水素は一般的に基底一重項であるため、基底三重項となるには、(1) 基底三重項である骨格を組み込むことにより、三重項状態を安定化し、(2) 一重項状態の aromatic sextet の数を、三重項状態よりも少なくすることにより、一重項状態を不安定化するような、適切な分子設計が必要である。本研究では、ジシクロヘプタ[*a,d*]ベンゼンを基盤とするケクレ炭化水素 **2** を設計・合成した (Scheme 1)。前駆体  $2^{2+} \cdot 2\text{BF}_4^-$  は **1** から 6 段階で合成した。 $2^{2+} \cdot 2\text{BF}_4^-$  を還元することにより発生させた三重項種を、ESR 測定により観測した。



**Scheme 1.** Synthesis of **2**.