

ピロリンニトロキシド骨格を縮環させたドナー分子の合成と物理化学的性質

(慶應大理工) ○大場 重幸・佐藤 帆・三浦 洋平・吉岡 直樹

Synthesis and Physicochemical Properties of Donor Molecules Fused by Pyrroline Nitroxide Skeleton (*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Shigeyuki Oba, Han Sato, Youhei Miura, Naoki Yoshioka

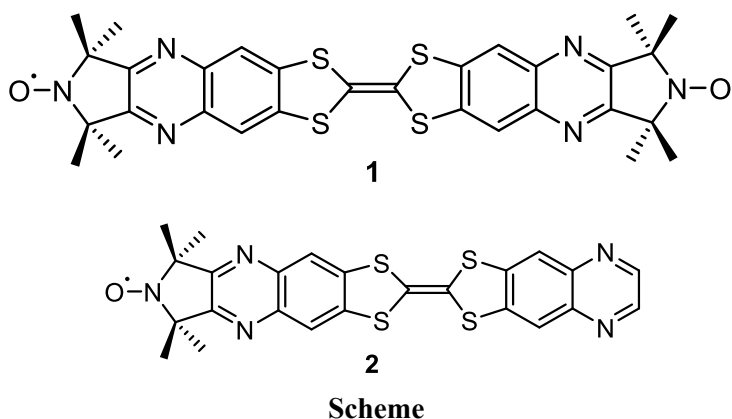
A moderate size of intramolecular magnetic interactions in diradical molecules back-to-back connected delocalized benzotriazinyl and localized pyrroline nitroxide through nonconjugated framework. The observed interaction is different from the conventional magnetic interaction in π -conjugated systems. To explore multi-spin molecules through the non-conjugated framework, TTF-based donor molecules carrying pyrroline nitroxide were designed. Their TTF moiety are expected to form stable cationic radical species through one electron oxidation.

Their physicochemical properties have been characterized by various spectroscopies and magnetic measurement in connection with computational results.

Keywords : Donor; Organic Radical; Molecular Magnetism; Organic Crystal; Electronic State

分子磁性体を構築するには、分子内および分子間の磁氣的相互作用を制御することが重要である。当研究室では、非共役骨格を介して非局在型のベンゾトリアジニルと局在型のピロリンニトロキシドを縮環させたジラジカル分子において、中程度の分子内反強磁性的な相互作用を見出している¹⁾。これは非共役骨格を介して分子内磁氣的相互作用がはたらいっている点で、従来型の π 共役系分子におけるスピン整列則と異なっており興味深い。

本研究では、非共役骨格を介した縮環型マルチスピン分子の構築を目指して、酸化により安定なカチオンラジカルを生成する TTF 骨格に着目した²⁾。具体的には、ピロリンニトロキシド骨格を縮環させた TTF 型ドナー分子 **1**, **2**(Scheme)を分子設計し、化学的酸化に伴う電子状態の変化を各種分光法で検討した。



1) Y. Takahashi, N. Yoshioka, *et al.*, *Chem. Eur. J.*, **2018**, 24, 7939-7948.

2) 佐藤、三浦、吉岡、第 29 回有機結晶シンポジウム, P-28 (2021 年 9 月、オンライン)