

ヘキサベンゾコロネンで π 拡張したトリチルラジカルの合成と物性

(阪大院理) ○濱崎 誠士・西内 智彦・久保 孝史

Synthesis and Properties of π -Extended Trityl Radicals with Hexabenzocoronenes

(Graduate School of Science, Osaka University) ○Seiji Hamazaki, Tomohiko Nishiuchi, Takashi Kubo

Aromatic hydrocarbon radicals are highly reactive to afford its dimer, hydrogen abstracted and oxidated compounds. A variety of stable radicals including trityl radicals, such as a molecule with sterically bulky substituents for kinetic stabilization, or a π -extended molecule for thermodynamic stabilization have been synthesized.

In this work, we have designed a tris (2-hexabenzocorononyl(HBC)) methyl radical, which is a π -extended trityl radical by HBC, to achieve the thermodynamic stabilization and evaluate the effect of strong π - π interaction between HBCs on the intermolecular radical-radical interaction.

Keywords : Hexabenzocoronene; Trityl Radical; Radical dimer

芳香族炭化水素ラジカルは二量化、水素引き抜き、酸化反応により容易に分解する非常に高い反応性を有している。これまでに、速度論的安定化を狙って立体的にかさ高い置換基が組み込まれた分子や、熱力学的安定化を狙って π 拡張された分子など様々な安定ラジカルが合成されてきた。その中で代表的な芳香族炭化水素ラジカルの1つとしてトリチルラジカルがある。

本研究では、トリチルラジカルのフェニル基をヘキサベンゾコロネン(HBC)で π 拡張したラジカル **1** を設計した。 π 拡張によるトリチルラジカルの熱力学的安定化、および二量化挙動をはじめとした分子間相互作用に HBC の π - π スタッキングがどのような影響を及ぼすかを明らかにすることを目的としている。

化合物 **2** から縮環反応により化合物 **3** を高収率で得ることに成功し、その結晶構造を明らかにした。結晶中では HBC 同士の強い π - π スタッキングによる集積構造が確認された。化合物 **1** も同様に HBC 同士の相互作用が強く働くことが期待される。現在、この化合物 **1** の合成および結晶化を試みている。

