

## 湾曲したパラフェニレンで繋がれたマルチラジカルの 構造と電子的性質

(広大院先進理工<sup>1</sup>) ○宮澤 友樹<sup>1</sup>・松本 岬<sup>1</sup>・王 哲<sup>1</sup>・岡本 一茂<sup>1</sup>・波多野 さや佳<sup>1</sup>・安倍 学<sup>1</sup>

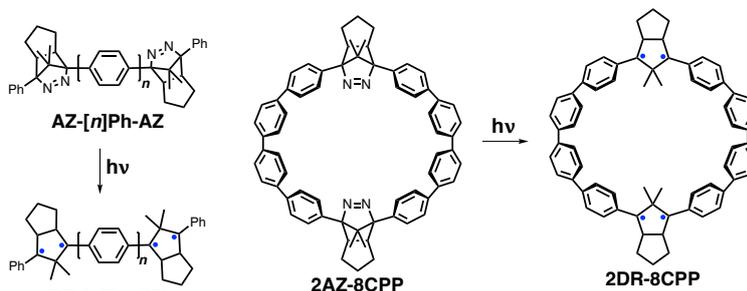
Structure and Electronic Character of Multi-radicals Embedded in Curved Paraphenylene Unit (<sup>1</sup>Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University) ○Yuki Miyazawa,<sup>1</sup> Misaki Matsumoto,<sup>1</sup> Zhe Wang,<sup>1</sup> Kazushige Okamoto,<sup>1</sup> Sayaka Hatano,<sup>1</sup> Manabu Abe,<sup>1</sup>

Open-shell molecules have attracted much attention because of their scientifically interesting properties derived from the unique electronic character. We have been working on the electronic characteristic and reactivity of multi-radicals embedded in macrocyclic systems such as cycloparaphenylenes to study the through space and/or through bond interaction of the magnetic dipoles. In this study, we investigated the tetra-radicals embedded in linear or curved paraphenylene units. The quintet state was observed for the first time in the tetradical in the curved paraphenylene units.

*Keywords* : Multi-radicals; Curve effect; Spin multiplicity; Cycloparaphenylene

開殻性分子はその特異な電子状態や物性から注目を集め、盛んに研究が行われている。マルチラジカル間のスピン-スピン相互作用は、その開殻性分子の特性に大きく関与している。これまでにシクロパラフェニレンのような環状骨格内でのマルチラジカルは、ベンゼン環が湾曲することにより誘起される結合性相互作用によって、遠隔位でのスピン-スピン相互作用による環状キノイド構造の構築や面内芳香族の発現を明らかにしてきた<sup>(1,2)</sup>。本研究では、湾曲したパラフェニレンで繋がれたテトララジカル **2DR-8CPP** におけるスピン-スピン相互作用を調査すべく、その前駆体となる環状アゾ分子 **2AZ-8CPP** を合成した。比較のため、直鎖状テトララジカル **DR-4Ph-DR** ( $n = 4$  : ベンゼン環の枚数)を発生させ、スピン-スピン相互作用に及ぼす湾曲効果を調査した。その結果、**2AZ-**

**8CPP** の光脱窒素反応によって生じた環状テトララジカル **2DR-8CPP** は、ジラジカルユニット間のスピン相互作用によって生じる 5 重項種が観測されることを実験的に初めて明らかにした。



1) Matsumoto, M.; Antol, I.; Abe, M. *Molecules*. **2019**, *24*, 209.

2) Miyazawa, Y.; Antol, I.; Yamago, S.; Abe, M. *et al. J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*(19), 7426-7439.