

## ペンタセン骨格を有する $\pi$ 拡張型トリチルラジカルの構造と物性

(阪大院理) ○石井 大介・西内 智彦・久保 孝史

Structure and Properties of  $\pi$ -extended trityl radical having a pentacene unit.

(Graduate School of Science, Osaka University) ○Daisuke Ishii, Tomohiko Nishiuchi, Takashi Kubo

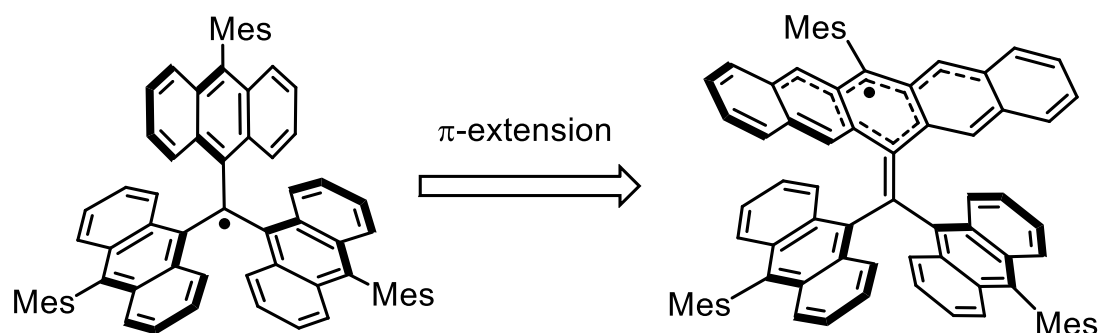
Tri(9-anthryl)methyl(**TAntM**) radical having mesityl substitutions at 10-position of anthryl groups possesses high kinetic stability and high spin density at the central  $sp^2$  carbon. **TAntM** radical shows reversible redox waves in electrochemical measurement and near-infrared absorption<sup>1)</sup>. Previously, a  $\pi$ -extension of one anthracene unit of **TAntM** radical to tetracene was conducted. Spin delocalization from central  $sp^2$  carbon to tetracene unit for red shift of absorption and broad ESR signal compared to that of **TAntM** radical was confirmed.

In this work, we conducted a  $\pi$ -extension of one anthracene unit of **TAntM** radical to pentacene unit. With the introduction of the higher acene, the spin migrates from the central  $sp^2$  carbon to pentacene unit. Because of that, properties of the radical are different from that of **TAntM** radical. In the presentation, we will discuss the structure and properties of the radical.

**Keywords** : Pentacene; Radical;  $\pi$ -Congested systems

トリフェニルメチルラジカルをアントラセンで $\pi$ 拡張したトリアントリルメチル(**TAntM**)ラジカルは、3つのアントラセンによってスピン密度の最も高い中心の $sp^2$ 炭素の保護、さらにアントラセン骨格の10位の炭素をメシチル基で保護することで速度論的に非常に安定化されたラジカルとして得られ、近赤外領域の吸収や可逆で良好な酸化還元電位を示す。そしてこの**TAntM**ラジカルの一つのアントラセンを $\pi$ 拡張してテトラセンを導入したラジカルは、吸収の長波長シフトやESRシグナルの線幅の広がりなど $\pi$ 拡張によるテトラセン骨格へのスピンの非局在化が確認された。

本研究では**TAntM**ラジカルの一つのアントラセンをさらに高次のペンタセンへと $\pi$ 拡張したラジカルを合成した。この $\pi$ 拡張により**TAntM**ラジカルの場合には中心の $sp^2$ 炭素に局在化していたスピン密度がペンタセン骨格へと局在化することによる物性の変化が確認された。本発表ではペンタセン骨格を導入したラジカルの構造と物性について報告する。



1) T. Nishiuchi, S. Aibara, T. Kubo, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, 57, 16516-16519.