

密接した環状ペンタセン二量体の合成検討と特異な電子物性

(阪大理¹・阪大院理²) ○榎原 優太¹、西内 智彦²、久保 孝史²

Toward a highly congested cyclic pentacene dimer and its unique electronic properties

(¹ Graduate School of Science, Osaka University, ² Graduate School of Science, Osaka University) ○Yuta MAKIHARA¹, Tomohiko NISHIUCHI², Takashi KUBO²

In cyclophane-type compound composed of anthracene units, an open-shell character is suggested in the transition state during the photoisomerization and reversion event, where the two aromatic rings are closer together (Figure 1).¹⁻²⁾ It is noteworthy that, in quantum chemical calculations, the cyclophane-type compound composed of pentacene units exhibits an open-shell character at longer distance (~ 3.00 Å) than that of anthracene units. Herein, we designed a cyclophane-type compound **1** with pentacene units (Figure 2) and the synthetic study and quantum chemical calculations will be discussed.

Keywords: π -cluster; pentacene; biradical

高次アセンの1つであるアントラセンを用いたシクロファン型化合物において、光異性化前後の芳香環同士がより密着した遷移状態($2.25\sim 2.50$ Å)において、開殻性の発現が示唆されている。(図1)¹⁻²⁾ そしてより高次なペンタセンを用いたシクロファン型化合物においては、アントラセン骨格を用いた場合と比較してより長い距離(~ 3.00 Å)で開殻性を発現するという興味深い結果を量子化学計算によって見出した。そこで本研究ではペンタセン骨格を用いたシクロファン型化合物 **1** を設計した。(図2) 発表では合成検討および量子化学計算について報告する。

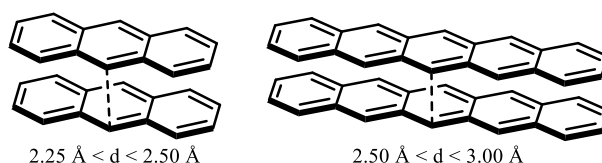


図1 開殻性発現の距離依存性

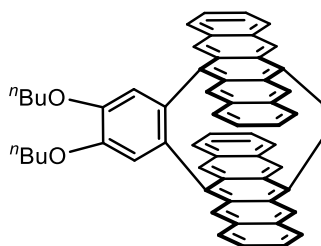


図2 ペンタセンを用いたシクロファン型化合物 **1**

(1) B. Slepetz, M. Kertesz, *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 13720-13727.

(2) T. Nishiuchi, K. Kisaka, T. Kubo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 5400-5406.