

ラジカル置換ペンタレン誘導体の合成と外部スピンの反芳香族電子構造に与える影響の調査

(京大院工) ○山口 華穂・清水 大貴・松田 建児

Synthesis of radical-substituted pentalene derivatives for investigation of the effect of external spins on the antiaromatic systems (*Graduate School of Engineering, Kyoto University*) Kaho Yamaguchi, Daiki Shimizu, Kenji Matsuda

[4n]π-Antiaromatic molecules intrinsically have an open-shell electronic structure with degenerated frontier orbitals. The degeneracy is, however, generally dissolved by Jahn–Teller distortion. If the intrinsic diradical character of antiaromatic molecules can be recovered, attractive functions such as magnetism, nonlinear optical properties, and antiaromaticity based on the open-shell [4n]π-electronic structure are expected to emerge.

In this study, we hypothesized that the diradical character of an antiaromatic molecule could be induced by introducing radical substituents into the molecule which provide an electronic perturbation of external spins. Based on this idea, we designed verdazyl-substituted dibenzopentalene **1**. At first, compound **2** was synthesized as a precursor and treated with 2,4-diphenylcarbonohydrazide to give **3**. In the oxidation reaction of **3**, the APCI-TOFMS and ESR analysis suggested the formation of target product **1**. In this presentation, we will report the latest results on the synthesis and properties of **1**.

Keywords : antiaromaticity, diradical character, radical, pentalene, magneticity

反芳香族分子は本質的にフロンティア軌道が縮退した開殻電子構造を有するが、一般に Jahn-Teller 歪みにより縮退が解けた電子構造をとることが知られている。反芳香族分子の本質的なジラジカル性を回復することができれば、開殻性に基づく磁性や非線形光学特性、反芳香族性など魅力的な機能の発現が期待できる。

本研究では反芳香族分子にラジカル置換基を導入して外部スピンによる電子的な摂動を与えることにより、そのジラジカル性を誘起することができるのではないかと考え、ベルダジルラジカル置換ジベンゾペンタレン **1** を設計した。**1** の合成経路を下に示す。まず前駆体として化合物 **2** を合成し、2,4-ジフェニルカルボノヒドrazidと反応させることにより、**3** が得られた。前駆体 **3** から **1** への酸化反応では APCI-TOFMS や ESR スペクトルによって目的の **1** が生成したことが示唆された。本発表では **1** の合成および物性についての最新の研究成果を報告する。

