

湾曲したシクロパラフェニレン骨格を有するトリチルラジカルに関する研究

(広島大理化¹, 広島大院先進理工²) ○柴田 あみり¹・安倍 学²

Study on trityl radicals with curved cycloparaphenylene skeleton (¹Department of Chemistry, School of Science, Hiroshima University, ²Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University) ○Amiri Shibata,¹ Manabu Abe²

The HOMO energy level of cycloparaphenylene derivatives becomes higher as the size of its ring becomes smaller. This is attributed to the increase of the characteristics of quinoid when the benzene rings become bent¹⁾. With this characteristic, the long wavelength absorption, and the SOMO-HOMO conversion phenomenon, in which the energy level of SOMO becomes lower than that of HOMO, is expected in the trityl radicals. Trityl radicals are rather stable due to the spin delocalization and kinetic stabilization. Furthermore, some of trityl radicals show luminescent characteristics depending on the substituents. In this study, a new chemistry of trityl radical within the cycloparaphenylene skeleton will be discussed. Additionally, the photophysical properties of cycloparaphenylene ketone that is precursor of CPP trityl radical will be presented.

Keywords : Cycloparaphenylene; Triphenylmethyl radical; Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO); SOMO-HOMO conversion (SHC)

シクロパラフェニレン骨格では、環サイズが小さくなるにつれて HOMO のエネルギー準位が高くなるという特徴をもつ。これは、ベンゼン環の湾曲に伴い、キノイド性が増すことに由来している¹⁾。このような高い HOMO エネルギーにより、長波長吸収や HOMO のエネルギー準位が SOMO のエネルギー準位よりも高くなる SOMO-HOMO 逆転現象が期待される。トリチルラジカルは安定性の高いラジカルとして知られており、置換基によっては発光を示すものもある。そこで、SOMO-HOMO 逆転現象、長波長吸収、さらには、発光が期待されるシクロパラフェニレン骨格に組み込まれたトリチルラジカルについて着目し、その新たな物性について精査した。加えて、特異的な特徴をもつシクロパラフェニレン骨格をもち、CPP トリチルラジカルの前駆体である CPP ケトンについての物性調査を行った。

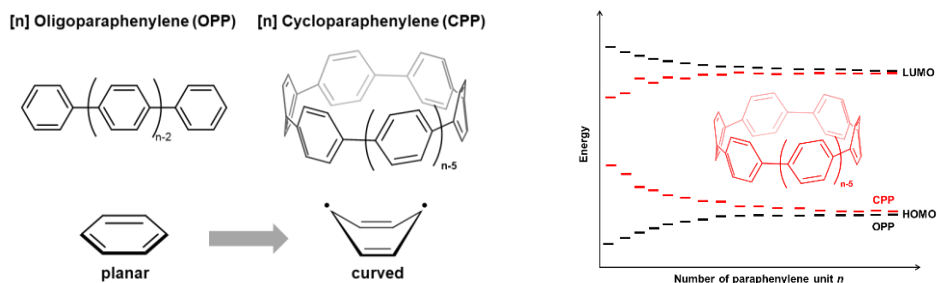


Figure. The HOMO and LUMO energy of CPP and OPP

1) Iwamoto, T.; Yamago, S. *et al.* J. Am. Chem. Soc. **2011**, 133, 8354–8361.