

## 一次元鎖を目指した一重項ジラジカル種の合成検討

(阪大理<sup>1</sup>・阪大院理<sup>2</sup>) 坂井春樹<sup>1</sup>・久保孝史<sup>2</sup>

### Synthetic study of singlet diradical species for one-dimensional chain

○Haruki Sakai<sup>1</sup>, Takashi Kubo<sup>2</sup> (<sup>1</sup>School of Science, Osaka University, <sup>2</sup>Graduate School of Science, Osaka University)

When radical species are aligned in one dimension and equally stacked, they form half-filled bands and can behave like metals. In this study, we tried to synthesize singlet diradical species **1** with two phenalenyl moieties in the molecule and to evaluate their physical properties. We think that compound **1** will form straight one-dimensional chain due to the interaction of two phenalenyl moieties and that of fluorine-hydrogen. The expected properties include electrical conductivity due to the formation of one-dimensional chains and superconductivity due to hole-doping into a stacked spin ladder structure. We report the crystal structure of **2** and the synthetic study of compound **1**.

**Keywords** : one dimensional chain, singlet diradical, phenalenyl

ラジカル種が一次元かつ、等間隔に並ぶと半充填バンドが形成され、金属と同様にふるまうことができる。本研究では分子内に 2 つのフェナレニルとペンタフルオロフェニル基を持つ一重項ジラジカル種 **1** の合成、並びに物性の評価を目的としている。化合物 **1** はフェナレニルラジカル同士での相互作用、ならびにペンタフルオロフェニル基の F 原子とフェナレニルの H 原子での相互作用により、ズレのない一次元鎖を形成すると予想している。また、期待している物性として、一次元鎖の形成による電気伝導性、また積層してできたスピンのラダー構造へのホールドーピングによる超伝導があげられる。今回、市販のアセナフテンに 4 段階の反応をかけて得られた化合物 **2** の結晶構造、並びに化合物 **1** の合成検討について報告する。

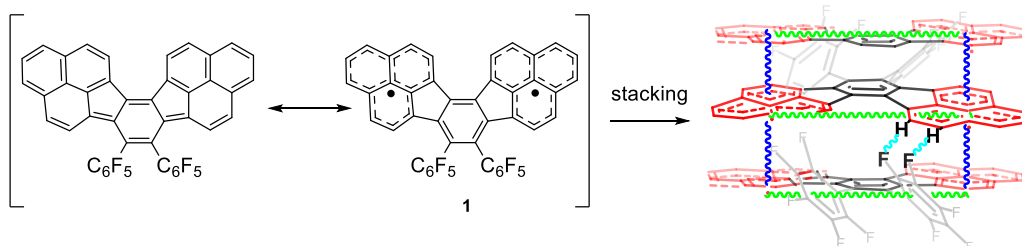


図 1. 化合物 **1** の積層状態と相互作用 (波線)

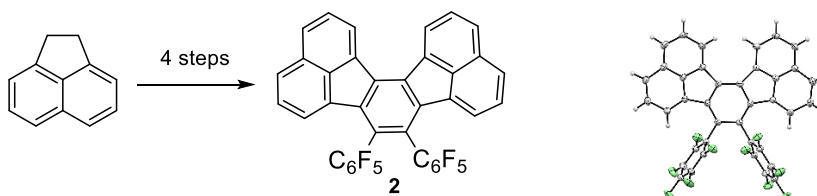


図 2. 化合物 **2** の構造式と ORTEP 図