

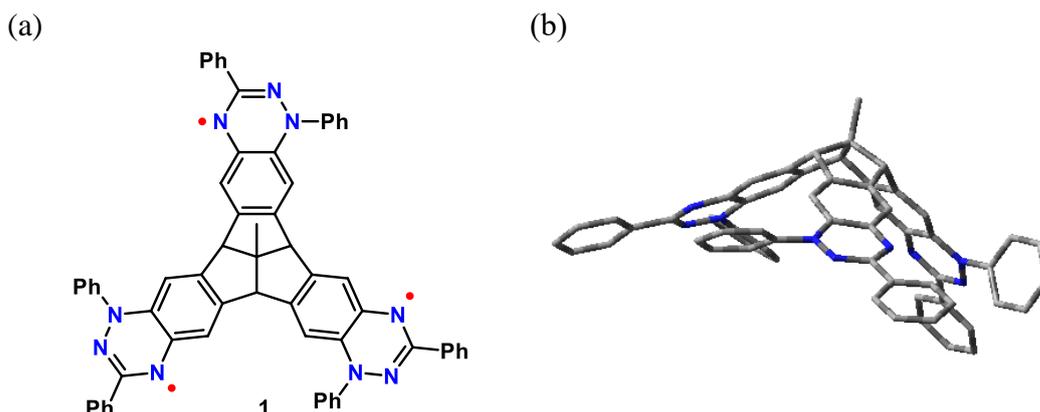
## 超分子積層を志向したお椀型構造を有する $C_3$ 対称トリラジカル分子の合成検討

(<sup>1</sup>京大院工,<sup>2</sup>京大福井セ) ○高井 隼人<sup>1</sup>・清水 大貴<sup>1</sup>・松田 建児<sup>1,2</sup>

Synthetic studies of a Blatter-based triradical with  $C_3$  symmetric bowl-shaped structure (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Kyoto University, <sup>2</sup>FIFC, Kyoto University)  
Hayato Takai,<sup>1</sup> Daiki Shimizu,<sup>1</sup> Kenji Matsuda<sup>1,2</sup>

Recently, we discovered that through-space conjugating di- and tri-radicals exhibit spin-state-dependent photophysical properties.<sup>[1,2]</sup> In this study, we focus on triquinacene as a through-space linker unit, and designed triradical **1** shown in Figure 1a. Compound **1** is predicted to adopt a  $C_3$ -symmetric chiral bowl-shaped structure (Figure 1b). In addition to the spin-dependent optical properties, we aim to explore the chiroptical properties, supramolecular assembly, and host-guest chemistry of **1**. In this presentation, we will report the synthesis of **1**.  
**Keywords:** *Triquinacene Triradical, stable radical, Supramolecular assembly, Photophysical properties*

最近我々はトリプチセンによる架橋によって空間的に相互作用したジラジカルおよびトリラジカルがスピン状態に大きく依存した吸収スペクトルを示すことを見出した。<sup>[1,2]</sup> 本研究では空間的な相互作用ユニットとしておわん型構造を有するトリキナセンに着目し、Figure 1a に示す化合物 **1** を設計した。トリラジカル **1** は  $C_3$  対称のキラルな構造をとることが予測されており (Figure 1 b)、先行研究と同様にスピン状態依存的なスペクトル特性に加えて、キラル光学特性やトリキナセン誘導体に特徴的なカラム状の積層構造の形成、ゲスト分子の包接挙動などについても興味もたれる。本発表では、この化合物 **1** の合成について報告する。



**Figure 1.** (a) Canonical structure and (b) energy-minimized geometry (UB3LYP/6-311G\*) of **1**.

[1] D. Shimizu, H. Sotome, H. Miyasaka, K. Matsuda, *ACS Cent. Sci.* **2024**, *10*, 890.

[2] T. Aoki, D. Shimizu, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *64*, e202418655.