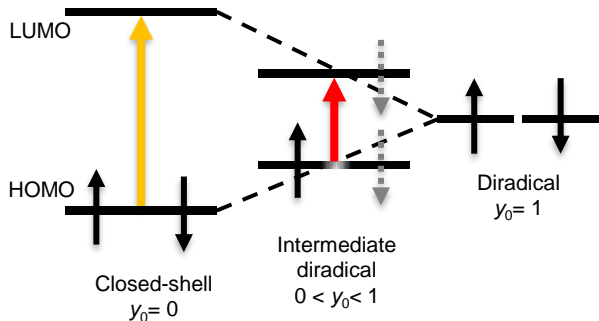


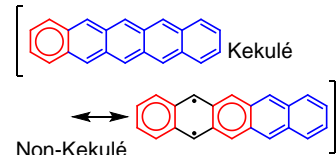
## 研究背景と目的

### 遷移エネルギーと電子構造の関係

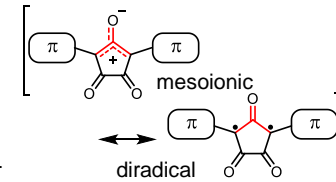


Fabian, J. et al., *Angew Chem Int. Ed.*, **1998**, 28, 6772.

### アセン類

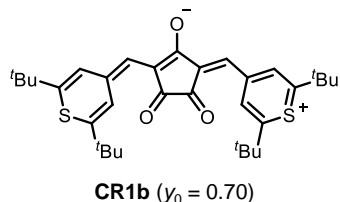


### クロコナイン色素

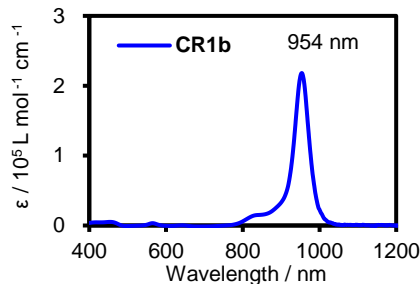


- 遷移エネルギーが小さい(近赤外光吸収を示す)分子は共鳴構造にジラジカル構造を持つと予測される  
⇒ この予測を実験的に明らかにし、さらにジラジカル構造に伴う特性も評価する

## 対象分子と電子吸収スペクトル

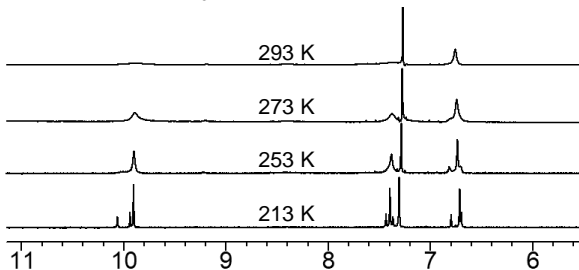


- 954 nmに極大吸収を示すクロコナイン色素CR1bを調査する

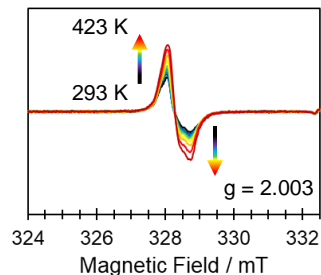


## ジラジカル構造の実験的評価

### $^1\text{H NMR}$ (in $\text{CDCl}_3$ )



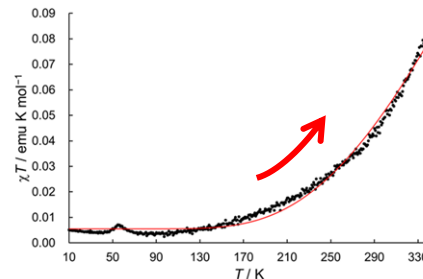
### 電子スピン共鳴 (ESR) 測定 (固体)



- ジラジカル構造に起因する熱励起三重項種が確認された

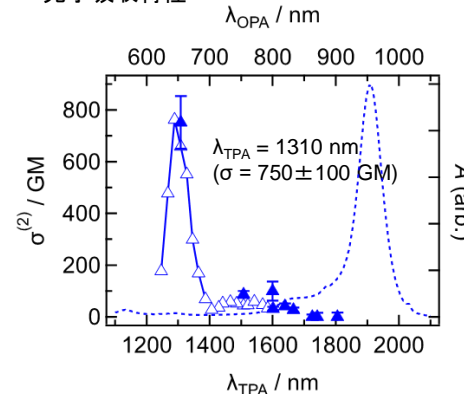
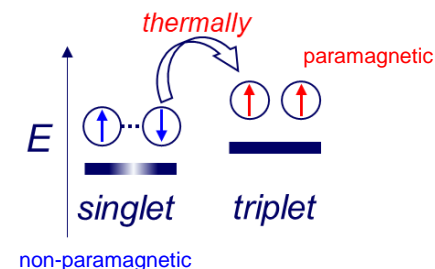
## ジラジカル構造に起因する特性調査

### SQUID磁気測定

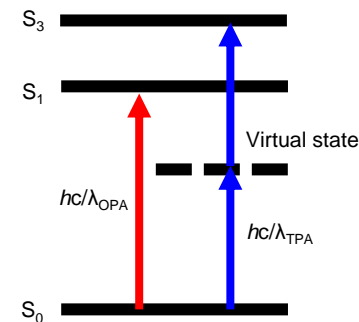


- 常磁性を持つ三重項種が温度上昇により増えるため、周囲温度により磁性が変化した
- 二光子吸収特性

### エネルギーダイアグラム



- ジラジカル構造による共役の歪みに起因して、二光子吸収特性が確認された



## まとめ

- 近赤外光吸収クロコナイン色素のジラジカル特性を実験的に初めて明らかにした
- 温度上昇により三重項種が増えることで、温度に依存した磁性の変化が確認された
- 共役系の歪みに起因した二光子吸収特性が確認された
- 本内容はT. Maeda, T. Oka, S. Yagi et al., *Chem. Sci.*, **2023**, 14, 1978.にて報告
- 受賞
  - ✓ Most popular 2023 organic chemistry articles
  - ✓ 2023 Chemical Science HOT Article Collection
- 展開
  - ✓ Chem-Station 第500回スポットアップリサーチ