

ヨードエチニル基で置換したテトラチアフルバレン誘導体の合成と構造

(理研・科学技術振興機構) ○ 芦沢実・深谷敦子・

加藤礼三

Synthesis and structures of iodoethynyl-modified tetrathiafulvalene derivatives (RIKEN, JST-CREST) ASHIZAWA, Minoru; FUKAYA, Atsuko; KATO, Reizo

【序】ハロゲン原子を介した分子間相互作用を利用した新規な結晶構造や電子構造の構築を意図して、ヨードエチニル基で置換した TTF 誘導体を合成し、その結晶構造を明らかとした。

【結果と考察】合成を Scheme 1 に示す。原料である TCF をリチオ化した後、ヨウ素化した。このヨウ素化した TCF をトリメチルシリルアセチレンと菌頭カップリングして **4** と **5** を得た。最後にトリメチルシリル基の脱保護とヨウ素化を連続して行いヨードエチニル基を導入した。ここで TSF へ 2 つのヨードエチニル基を導入することを試みた **2** は、トリメチルシリル基を脱保護した前駆体が不安定と考えられ痕跡量程度で単離はできなかった。合成した **1** の単結晶を作成し X 線構造解析を行った(図 1)。TTF 骨格は平面であり *a* 軸方向にスタックする。分子間にはヨードエチニル基のヨウ素と隣の分子の硫黄との間にファンデアワールス半径の和より 10% 程度短い接触(点線)が存在する。結果として結晶構造中にはこの接触を介したネットワークが構築される。当日は **3** も含めて電荷移動錯体の作成についても報告する予定である。

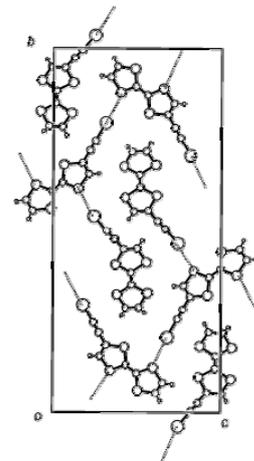
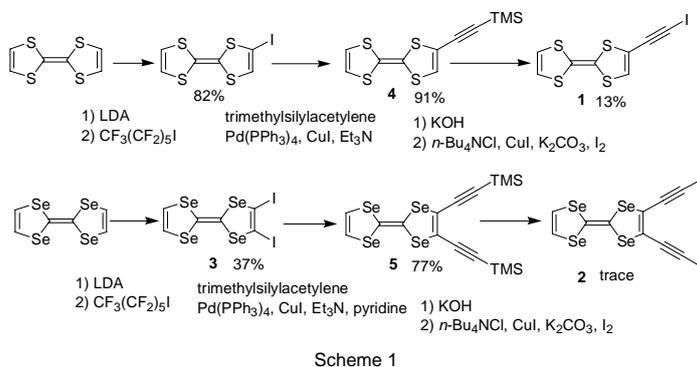


図1 1の結晶構造