

新奇アゾメチン骨格を用いた二核超原子価スズ化合物の合成と光学特性

(京大工¹・京大院工²) ○田中 健登¹・谷村 和哉²・権 正行²・田中 一生²

Synthesis and Optical Properties of Dinuclear Hypervalent Tin Compounds Based on Novel Azomethine Scaffolds (¹Kyoto University, ²Graduate School of Engineering, Kyoto University)

○Kento Tanaka¹, Kazuya Tanimura², Masayuki Gon², Kazuo Tanaka²

We have reported narrow HOMO-LUMO energy gaps and unique optical properties of the π -conjugated scaffold using hypervalent states of heavy elements [1]. In addition, dinucleation which incorporates two heteroatoms into a ligand has a potential to provide different optical properties from mononuclear compounds [2].

In this research, we synthesized dinuclear hypervalent tin compounds **TPhCN** and **TPhNC** (Figure 1) with two azomethine ligands with different azomethine bond directions. As a result, the optical properties of the two compounds showed differences in absorption and emission wavelengths and quantum yields and so on (Figure 2). Density function theory calculations suggested that the electronic distributions of the molecules contribute to the differences in optical properties. We also carried out polymerization of each dinuclear compound and evaluated the optical properties.

Keyword: Conjugated polymer; Near-infrared emission; Hypervalent Tin; Azomethine; Dinuclear Compounds

当研究室では、高周期元素の超原子価状態が π 共役系骨格に与える電子的効果を用いた HOMO と LUMO の狭エネルギーギャップ化および特異な光学特性を報告している[1]。また、2つのヘテロ原子を配位子に組み込む二核化により、単核構造では見られなかった光学特性の発現を確認している[2]。

本研究において、合成が容易かつ二つのアゾメチン結合の向きが異なる二種類の骨格に対して、スズを導入した二核超原子価化合物 **TPhCN**, **TPhNC** を合成した (Figure 1)。二つの化合物の光学特性には吸収・発光波長や量子収率などに違いが見られ (Figure 2)、量子化学計算から、分子の電荷分布の違いがエネルギー準位の差に寄与していることを考察した。また、それぞれの二核化合物において共役系高分子化を行い、光学特性を評価したので、当日詳述する。

[1] Gon, M.; Ito, S.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2021**, 94, 2290–2301.

[2] Ohtani, S.; Nakamura, M.; Gon, M.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Chem. Commun.* **2020**, 56, 6576–6578.

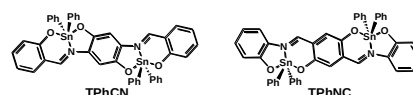


Figure 1. Chemical structures of dinuclear compounds.

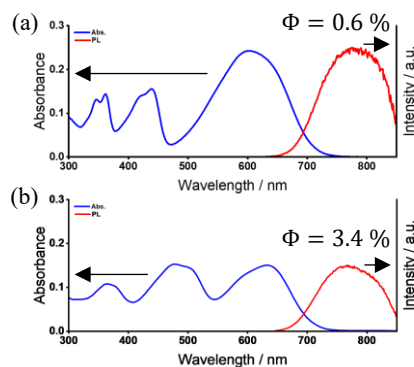


Figure 2. UV-vis absorption and photoluminescence (PL) spectra of (a)**TPhCN**, (b)**TPhNC** (1.0×10^{-5} M in toluene).