

空間的分子軌道相互作用を有する 1,4-シクロヘキサジエン誘導体合成と光学特性

(東京理大院化学) ○古山翔太・山野本健・遠藤恆平

Synthesis and optical research of 1,4-Cyclohexadiene derivative with Intramolecular through-space interaction (*Department of Chemistry, Graduate School of Science, Tokyo University of Science*) ○Shota Furuyama, Ken Yamanomoto, Kohei Endo

Fluorescent molecules are applicable across various fields for live-cell imaging and organic light-emitting diodes (OLEDs), and they often have long π -conjugation system. Recently, the luminescent molecules with through-space conjugation (TSC) by controlled three-dimensional structures have been studied. We focused on 1,4-cyclohexadienes that have planar six-membered ring and non-conjugated diene moiety. In this study, we report the synthesis of 1,4-cyclohexadiene derivatives for unique optical property in both solution and solid states (Fig. 1).¹ The derivatives exhibited strong visible light emissions with a large Stokes shift (ca. 100 nm) in 1.0×10^{-5} M chloroform solutions and solid states (Fig. 2).

Keywords : *Fluorescent; Homo-conjugation; Aggregation-Induced Emission*

蛍光分子は現在生体イメージングや有機 EL 等様々な分野に応用可能な機能性分子の一つであり、その多くは広い π 共役を有している。一方で近年、分子内での空間的な分子軌道相互作用により可視領域に蛍光を発する分子が新たな材料として注目を集めている。私たちはホモ共役を用いた新規蛍光分子の合成を目的とし、非共役なジエン部位を有する 1,4-シクロヘキサジエンに着目した。本研究では、3,6 位に芳香環置換基を有した種々の 1,4-シクロヘキサジエン誘導体を合成し (Fig. 1)¹, 光学特性の調査を行った。合成した誘導体はそれぞれ 1.0×10^{-4} M クロロホルム溶液中で 350–400 nm に特徴的な吸収を示し、溶液・固体の両状態で可視領域に蛍光発光を示した (Fig. 2)。

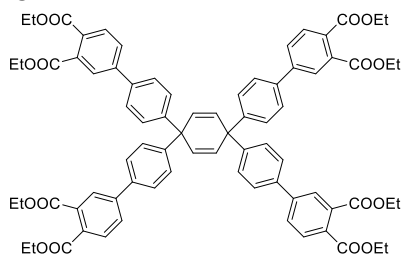


Figure 1. 合成した CHD 誘導体 1 の一例

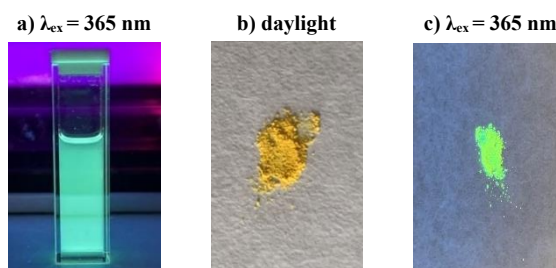


Figure 2. CHD 誘導体 1 の蛍光

a) 1.0×10^{-5} M CHCl_3 溶液, b) 固体 (daylight), c) 固体 (365 nm 光照射)

1) Kohei Endo. et al. J. Org. Chem. 2022, 87, 14833–14839.