

ブタジンを側鎖にもつクリセン誘導体の合成と結晶構造および蛍光挙動

(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²) ○神山凌弥¹・桶谷龍成²・久木一朗²

Synthesis, crystal structure and luminescence behavior of chrysene derivatives with butadiyne
(¹Faculty of Engineering Science, Osaka University, ²Graduate School of Engineering Science, Osaka University) ○Ryoya Kamiyama,¹ Ryusei Oketani,² Ichiro Hisaki²

By applying high pressure to the crystals composed of π -conjugated molecules, expansion or shrinkage of intermolecular distances occurs and their physical properties could be tuned or enhanced. For example, electron conductivity increases due to an increase in interorbital interactions. However, it is challenging to maintain these physical properties under ambient pressure because these changes are reversible with respect to pressure. In this study, we designed chrysene derivative **1** which possesses reactive butadiyne side chains for topochemical polymerization under high pressure. Single crystal X-ray structure analysis of **1** revealed that the chrysene skeleton and TIPS groups are arranged adjacent to each other. The CH_2Cl_2 solution of **1** showed fluorescence at 406 nm and its quantum yield was 65%. In this presentation, we will discuss the synthesis, crystal structure, and luminescence behavior in detail.

Keywords : π -conjugated molecules, topochemical polymerization

π 共役系化合物の結晶に圧力を印加すると、分子間空隙の収縮に伴い物性が変化することが知られている。例えば軌道間相互作用の増加による導電性の増加が挙げられる^[1]。しかし、この変化は圧力に対して可逆的であるため、高圧下での密な構造を常圧に戻した際に保持することは困難である。そこで本研究は高圧下でのトポケミカル反応による集積構造の固定化を志向し、クリセンを基盤にジイン骨格を導入した誘導体 **1** (Figure 1a)を設計、合成した。**1** の単結晶を X 線構造解析すると、この結晶の空間群は $P-1$ であり、クリセン骨格同士および TIPS 基同士が隣接するように配列していることがわかった (Figure 1b)。また、**1** のジクロロメタン溶液は、406 nm に発光極大をもつ比較的強い蛍光発光 ($\Phi_F = 0.65$) を示すことがわかった (Figure 1c)。本発表では **1** の合成、結晶構造および蛍光特性について詳細に報告する。

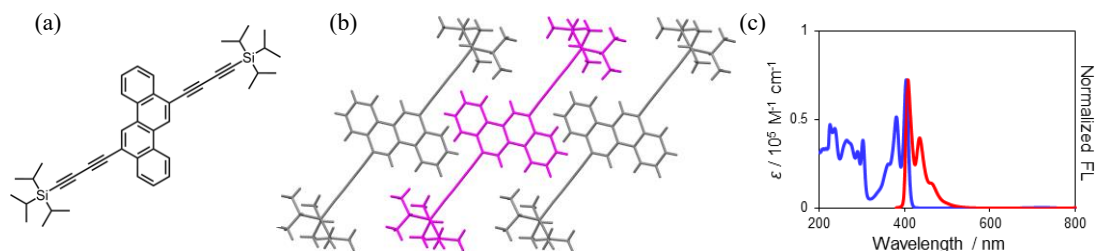


Figure 1. (a) Chemical structure of **1**. (b) Crystal structure of **1**. (c) Absorption (blue line) and fluorescence (red line) spectra of **1** in CH_2Cl_2 .

1) Rang, Z. *et al. Appl. Phys. Lett.* **2011**, 79, 2731.