

ベンゾチエニルベンゾチアジアゾール誘導体のメカノクロミック発光特性

(横浜国大理工¹・JST さきがけ²) ○古川 陽斗¹・伊藤 傑^{1,2}

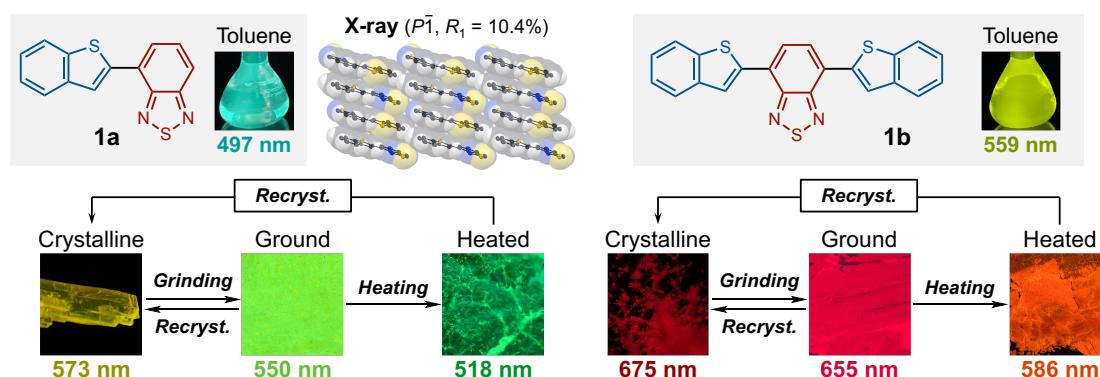
Mechanochromic Luminescence Properties of Benzothienylbenzothiadiazole Derivatives

(¹College of Engineering Science, YOKOHAMA National University, ²PRESTO, JST) ○ Haruto Furukawa,¹ Suguru Ito^{1,2}

We have reported versatile mechanochromic luminescence based on a molecular design where an electron-donating heteroaromatic ring is directly substituted for an electron-accepting benzothiadiazole ring. In this study, benzothiophene-substituted benzothiadiazole derivatives have exhibited hypsochromic luminescence shifts in response to mechanical stimuli and heating. The emission color of yellow-emissive crystals of monosubstituted **1a** changed to yellowish green upon grinding, and then to green upon heating. Disubstituted **1b** also changed its luminescence color from deep red to red upon grinding, and to orange upon heating.

Keywords: Organic Crystal; Solid-State Luminescence; Fluorescent Molecule; Mechanochromic Luminescence; Intramolecular Charge Transfer

我々は、種々のドナー性複素環をアクセプター性ベンゾチアジアゾール環に直接置換する分子設計に基づき、機械的刺激に応答して多彩に発光色が変化するメカノクロミック発光(MCL)を実現している¹⁾。今回、ベンゾチオフェン環をドナーとするベンゾチアジアゾール誘導体 **1** の発光色が、機械的刺激と加熱に応答して段階的に短波長化することを見出した。一置換体 **1a** は、トルエン溶液中で水色($\lambda_{\text{em}} = 497 \text{ nm}$)に発光したが、結晶状態では平面配座の分子が head-to-tail 型でスタッキングしており、黄色($\lambda_{\text{em}} = 573 \text{ nm}$)に発光した。結晶状態の **1a** をすり潰すと、発光色は黄緑色($\lambda_{\text{em}} = 550 \text{ nm}$)に変化し、さらに加熱すると緑色($\lambda_{\text{em}} = 518 \text{ nm}$)に変化した。二置換体 **1b** も同様に、溶液中($\lambda_{\text{em}} = 559 \text{ nm}$)よりも長波長の深赤色発光($\lambda_{\text{em}} = 675 \text{ nm}$)を示す結晶をすり潰して加熱すると、発光色は赤色($\lambda_{\text{em}} = 655 \text{ nm}$)、橙色($\lambda_{\text{em}} = 586 \text{ nm}$)へと順次変化した。



1) S. Ito, *Chem. Lett.* **2021**, 50, 649 (review).