ペリレン置換ビナフトール誘導体の結晶構造と発光特性

(横浜国大院理工¹・JST さきがけ²) ○矢野 理子¹・伊藤 傑^{1,2}

Crystal Structure and Luminescence Properties of Perylene-Substituted Binaphthol Derivatives
(¹Graduate School of Engineering Science, YOKOHAMA National University, ²PRESTO, JST)
○Riko Yano,¹ Suguru Ito^{1,2}

Controlling the formation of polymorph is important because the luminescence color of organic molecular crystals varies significantly depending on the molecular conformation and intermolecular interactions. Herein, we synthesized a binaphthol derivative (*S*)-**1** substituted with perylene ring at the 3-position. After examining the crystallization of (*S*)-**1** using various solvents, two polymorphic crystals were obtained. Solvate crystals **1-YG** containing MeCN showed yellow-green emission, whereas solvate-free crystals **1-Y** showed yellow emission. In both cases, mechanical stimuli induced a transition to a yellow-green-emissive state.

Keywords : Solid-State Luminescence; Organic Crystals; Polymorphism

有機分子結晶の発光色は、分子の立体配座や分子間相互作用に応じて大きく変化するため、結晶多形の生成を制御することは重要である¹⁾。今回、ペリレン環を3位に置換したビナフトール誘導体(*S*)-**1**を合成し、種々の溶媒を用いて結晶化することで、発光色の異なる2種類の結晶を得た。アセトニトリルを等モル量含む結晶**1-YG**(空間群 $P2_12_12_1$ (No. 19))は、ペリレン環とナフトレン環との間のキラル軸が*S*の立体配置となるジアステレオマーのみから構成されており、黄緑色($\lambda_{em} = 539$ nm)に発光した。一方、溶媒分子を含まない結晶**1-Y**(空間群 $P1$)では、キラル軸が*S*と*R*のジアステレオマーがペリレン環同士で積層しており、黄色($\lambda_{em} = 577$ nm)に発光した。結晶**1-YG**に機械的刺激を加えると、発光波長は短波長化した後に長波長化した。すなわち、**1-YG**を粉砕すると発光色は緑色($\lambda_{em} = 507$ nm)になり、強く擦ると発光色は黄緑色($\lambda_{em} = 547$ nm)に変化した。結晶**1-Y**も同様に、強く擦ると発光色は黄緑色になった。

1) Ito, S. *CrystEngComm* **2022**, *24*, 1112 (review).