イミド骨格を有する新規機能性液体材料の開発(相模中研¹、北里大院²)

○磯田 恭佑 1、大村 拓実 1,2、森迫 祥吾 1

Development of liquid materials based on imide moieties (\(^1SCRI\), \(^2Graduate School of Science, \) *Kitasato University*) \(\Omega Kyosuke ISODA\), Takumi Omura\(^{1,2}\), Shogo Morisako\(^1\)

Solvent-free liquid materials have much attention as low environmental-loaded soft materials that can be used by anyone, anytime, anywhere, without using volatile organic solvents., which have the potential to achieve some of the Sustainable Development Goals (SDGs) as an alternative to solid materials. Herein, we report on development novel imide-based liquid materials. This imide-based liquid material is capable of dissolving various π -conjugated molecules as solute. Since the imide-based liquid can behave as electron acceptor, the degree of charge-transfer can be tuned by selecting π -conjugated molecules, which were found to be dependent upon HOMO levels of them.

Keywords: imide materials; Supramolecular chemistry; Charge-transfer complex; Sensing material, Stimuli-responsive liquid materials

有機溶媒フリーの液体材料は、揮発性有機溶剤を使用せず、いつでも、どこでも、誰でも使用できる環境負荷の低いソフトマテリアルとして注目されており、固形材料に代わる持続可能な開発目標 (SDGs) の一部を達成する可能性を秘めた機能性材料である。これまで我々は、imide 骨格を有する pyromellitic diimide を用いた新規液体材料を開発しており、当該液体を溶媒として様々な π 共役化合物を溶解することで、電荷移動錯体/exciplex を形成することが可能となり、様々な発光色を有する液体材料および刺激応答材料への応用を行ってきた。「そこで本研究ではさらなる液体材料の開発のために、pyromellitic diimide よりもさらに π 共役部位を拡張した液体材料の開発に成功したので報告する。2

今回開発した液体材料は、naphthalene diimide 骨格からなり、室温にて過冷却液体状態をとり、水色発光特性を示した。また、当該液体は naphthalene を溶解することで黄緑色発光溶液へと変化することが明らかとなった。さらに、溶解するnaphthalene 誘導体へ様々な置換基を導入したところ、発光色を制御可能であることが分かった。一方、N,N-dimentylamino naphthalene (Me_2N -NA) を溶解した溶液は、発光を示さずに電荷移動錯体形成由来の濃青色を示した。

その他に naphthalene 骨格よりも π 共役部位を拡張した誘導体を溶解したところ、 Me_2N -NA 溶液同様に発光色を示さずに、電荷移動錯体の形成が示唆される結果となった。上記の発光色の変化や電荷移動錯体形成を解明するために DFT 計算を行ったところ、naphthalene diimide 骨格の LUMO と溶解した誘導体の HOMO 準位と関連がある示唆される結果が得られた。

- 1) Takumi Omura, Shogo Morisako, Kyosuke Isoda*, *Chem. Commun.* **2024**, *60*, 9352. (selected as cover picture); Yuya Tanabe, Hiroki Tsutsui, Shinya Matsuda, So Shikita, Takuma Yasuda, Kyosuke Isoda*, **2023**, *ChemPhotoChem*, e202200287. (selected as cover picture); 特開 2024-109062; 特願 2024-194222; 特願 2024-231482
- 2) 特願 2024-038536