

分子間ハロゲン結合を有するジスチリルベンゼン誘導体： 高発光性極性結晶への挑戦

(阪公大工¹・阪公大院工²・阪公大 RIMED³)

○中野翔太¹・大垣拓也^{2,3}・松井康哲^{2,3}・池田 浩^{2,3}

Distyrylbenzene Derivatives with the Intermolecular Halogen Bonding: A Challenge to Highly Luminescent Polar Crystals

(¹Sch. of Eng, Osaka Metro. Univ., ²Grad. Sch. of Eng, Osaka Metro. Univ., ³RIMED, Osaka Metro. Univ.) ○Shota Nakano,¹ Takuya Ogaki,^{2,3} Yasunori Matsui,^{2,3} Hiroshi Ikeda^{2,3}

It is a challenging research topic to design highly luminescent polar crystals. To rationally develop such crystals, in this work, we synthesized new distyrylbenzene derivatives **1-X** (Fig. 1a) with CF₃ or halogen and OCH₃ groups at both ends of the molecule. As expected, **1-CF₃** showed the high fluorescence quantum yield in CH₂Cl₂, and that value was maintained in the crystals (Fig. 1b). On the other hand, contrary to our expectations, X-ray crystallographic analysis revealed that **1-CF₃** forms nonpolar crystals due to the disordered position of the CF₃ and OCH₃ groups (Fig. 1c), though **1-CF₃** forms a herringbone structure similar to **1-I**.

Keywords: Organic Polar Crystal; Fluorescence; Crystal Structure; Halogen Bonding; Triboluminescence

有機極性結晶はトリボルミネッセンスなどを示す興味深い材料であるが、高発光性極性結晶の合理的設計は容易ではなく、挑戦的研究課題である。この課題に対し、我々は両端にヨード (I) 基と OCH₃ 基をもつジスチリルベンゼン誘導体 **1-I** (Fig. 1a) が、極性結晶を形成することを以前に見出したが¹、I 基の重原子効果による低い蛍光量子収率 (Φ_{FL}) が問題であった。そこで本研究では、より軽い CF₃ 基またはハロゲン基を有する新規誘導体 **1-CF₃**, **-Cl**, および **-Br** を合成し、高発光性極性結晶の創出に挑戦した。

誘導体 **1-X** は、期待通りに結晶中で高い Φ_{FL} を示した (Fig. 1b)。一方、**1-CF₃** は **1-I** と互いに類似のヘリンボーン構造を形成するが、期待とは異なってディスオーダー由来の非極性結晶となることが、X線結晶構造解析よりわかった (Fig. 1c)。

発表では、その他の **1-X** の発光特性と結晶構造の詳細についても議論する。

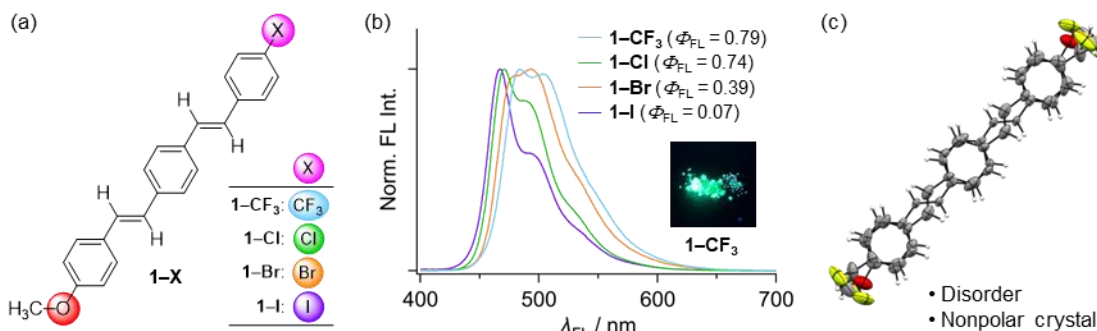


Fig. 1. (a) Molecular structures of distyrylbenzene derivatives **1-X**, (b) fluorescence spectra of **1-X** in crystals, and (c) the ORTEP drawing of molecular geometry of **1-CF₃** observed in the crystal.

1) 大垣, 山浦, 松井, 池田, 第50回有機典型元素化学討論会 講演要旨集, P-73, 2023.