

ブタジインを導入したクリセン誘導体の合成と結晶構造および高圧下での蛍光挙動の追跡

(阪大院基礎工¹) ○神山凌弥¹・新堀魁星¹・中本有紀¹・加賀山朋子¹・桶谷龍成¹・久木一朗¹

Synthesis, crystal structure and fluorescence behavior under high pressure of butadiyne-modified chrysene derivative (¹*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○ Ryoya Kamiyama¹, Kaisei Niibori¹, Yuki Nakamoto¹, Tomoko Kagayama¹, Ryusei Oketani¹, Ichiro Hisaki¹

The physical properties of π -conjugated molecules can be tuned by applying pressure that causes shrinkage of intermolecular distances. For example, the conductivity of phenanthrene increases due to the increase interorbital interactions [1]. However, it is a challenge to maintain these physical properties under ambient pressure because these changes are reversible. To keep the physical properties, the structure needs to be maintained after pressure release. In this study, we designed, synthesized, and crystalized a chrysene derivative **1** with butadiynyl side chains for the purpose of immobilizing the crystal structure through topochemical polymerization under high pressure. Fluorescence spectra for single crystals of **1** under high pressure was measured using diamond anvil cell. As a result, the red-shift of fluorescence band was observed. In this presentation, we will discuss the synthesis, crystal structure, and solid-state fluorescence behavior under high pressure in detail.

Keywords : diamond anvil cell, π -conjugated compound, high pressure, crystal structure, optical property

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。例えばフェナントレンに圧力を印加すると導電性が増加する[1]。しかし、この変化は圧力に対して可逆的であるため、高圧下での物性を常圧で保持することは困難である。これらの物性を常圧で実現するためには、圧力解放後も構造を保持する必要がある。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** を設計し、合成及び結晶化を行った (Figure 1a)。ダイヤモンドアンビルセルを用いて **1** の結晶に圧力を印加しながら、蛍光スペクトルを測定したところ、圧力が増加するにしたがって発光帯の長波長シフトが観察された。(Figure 1b)。本発表では **1** の合成と結晶化および高圧下での蛍光挙動について詳細に報告する。

[1] Shim, J. H. *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 13888.

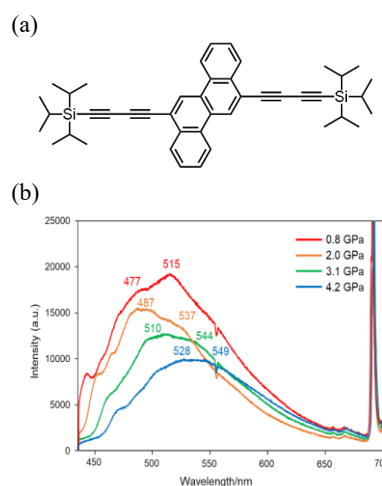


Figure 1. (a) Target compound **1** in this study. (b) fluorescence spectra of **1** in the solid state under ambient and high pressure ($\lambda_{\text{ex}} = 365 \text{ nm}$).