

トリアルキルシリル基を有するドナー・アクセプター型分子の結晶内配列構造と固体光物性

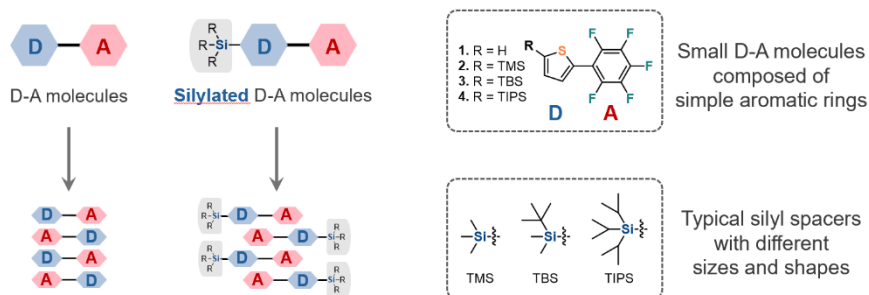
(北大院総化¹・北大 WPI-ICReDD²・北大院工³) ○米澤 毅治¹・陳 旻究²・伊藤 肇^{2,3}

Crystal Structures and Solid State Photophysical Properties of Donor-Acceptor Type Molecules Possessing Trialkylsilyl Groups (¹*Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University*, ²*WPI-ICReDD, Hokkaido University*, ³*Graduate School of Engineering, Hokkaido University*) ○Takeharu Yonezawa,¹ Mingoo Jin,² Hajime Ito^{2,3}

In organic crystals, trialkylsilyl groups are utilized as spacers to modify their molecular arrangement. Moreover, it is suggested that the photophysical properties in the solid state can be modulated by fine-tuning of the arrangement of donor-acceptor (D-A) type molecules. In this study, we introduced various trialkylsilyl groups at the edge of these molecules to obtain the different crystal structures as well as the photophysical properties. We adopted thiophene and pentafluorobenzene as the donor and the acceptor and synthesized four molecules (R=H; **1**, R=TMS; **2**, R=TBS; **3**, R=TIPS; **4**) (see the figure below). We found that the four molecules showed different arrangements in crystals. In addition, we observed that the excitation and emission spectra of the four crystals differed as well as the photoluminescence quantum yields. *Keywords* : Organic Crystals; D-A molecules; Steric Effect; π - π interactions; Organosilane

有機結晶において、トリアルキルシリル基は分子配列を調整するスペーサーとして利用されている¹⁾。一方、ドナー・アクセプター型分子(D-A 型分子)は結晶内の分子配列を微調整することで、固体発光物性を制御できると考えられている²⁾。本研究では、D-A 型分子の末端にトリアルキルシリル基を導入した結果、結晶構造と固体発光物性に差異が生じることを見出した。

ドナーであるチオフェンの2位に、アクセプターであるペンタフルオロベンゼンを結合した構造を基本骨格とし、チオフェンの5位に水素(R=H; **1**)またはシリル基(R=TMS; **2**, R=TBS; **3**, R=TIPS; **4**)を有する分子を合成した(下図)。4つの分子の結晶構造はシリル基の立体障害に応じてそれぞれ異なり、励起・発光波長と発光量子収率にも違いがあった。本発表では、結晶構造と発光物性の詳細について説明する。



1) Anthony, J. E.; Brooks, J. S.; Eaton, D. L.; Parkin, S. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 9482–9483.

2) Yamada, S.; Mitsuda, A.; Miyano, K.; Tanaka, T.; Morita, M.; Agou, T.; Kubota, T.; Konno, T. *ACS Omega* **2018**, 3, 9105–9113.