

## 軌道節面を介して結合した新規ビフェニル化合物の合成と光学特性

(山形大院有機<sup>1</sup>・山形大院理工<sup>2</sup>) ○大久保 快人<sup>1</sup>・上原 京子<sup>2</sup>・工藤 奨<sup>2</sup>・片桐 洋史<sup>1,2</sup>

Synthesis and Optical Properties of a Novel Biphenyl Compound Linked Through Molecular Orbital Nodal Planes (<sup>1</sup>*Graduate School of Organic Materials Science Yamagata University*, <sup>2</sup>*Graduate School of Science and Engineering Yamagata University*) ○Kaito Okubo,<sup>1</sup> Kyoko Uehara,<sup>2</sup> Kudo Shoh,<sup>2</sup> Hiroshi Katagiri<sup>1,2</sup>

Molecular design of organic fluorophores based on molecular orbital control has recently attracted attention as a crucial strategy. We have previously reported the development of fluorophores through nodal plane control using sulfonylaniline frameworks<sup>1)</sup>. In this study, we synthesized a novel biphenyl derivative (NPBP) conjugated through both HOMO and LUMO nodal planes and evaluated its photophysical properties. NPBP exhibited characteristic dual fluorescence at 412 nm and 518 nm in dichloromethane (DCM), and at 407 nm and 541 nm in tetrahydrofuran (THF). Excitation spectrum measurements at two fluorescence maxima in each solvent suggested the existence of different excited states. In addition, absorption and fluorescence spectroscopic measurements of individual aromatic units constituting NPBP (BMeSA, 2-MeS-*m*-A) revealed maximum absorption wavelengths coinciding with the first absorption band of NPBP and blue-shifted fluorescence spectra around 390 nm. Quantum chemical calculations and experimental results indicated that this dual fluorescence phenomenon originates from distinct electronic transitions derived from independent chromophore units and the biphenyl backbone.

**Keywords :** Nodal plane; Sulfonylaniline; Biphenyl; Fluorescence

近年、分子軌道の制御に基づく有機蛍光色素の分子設計が重要な戦略として注目されている。我々はこれまでに、スルホニルアニリン骨格を基盤とし、軌道節面制御による新規蛍光色素の開発を報告してきた<sup>1)</sup>。本研究では、HOMOとLUMO両方の軌道節面を介して共役したビフェニル誘導体(NPBP)を新規に合成し、その光物性を評価した。NPBPは、ジクロロメタン(DCM)中では412 nmおよび518 nm、テトラヒドロフラン(THF)中では407 nmおよび541 nmに特徴的な二重蛍光を示した(Figure 1)。各溶媒における二つの蛍光極大波長での励起スペクトル測定により、異なる励起状態の存在が示唆された。また、NPBPを構成する個別の芳香族ユニット(BMeSA, 2-MeS-*m*-A)の吸収および蛍光分光測定により、NPBPの第一吸収帯と一致する極大吸収波長と、約390 nm付近に短波長シフトした蛍光スペクトルを確認した。量子化学計算および実験結果から、この二重蛍光現象は、独立した発色団ユニットとビフェニル骨格に由来する個別の電子遷移に起因することが明らかとなった。

1) Kudo, S.; Hoshino, N.; Beppu, T.; Katagiri, H., *ChemPhysChem*. **2019**, *20*, 1581–1589.

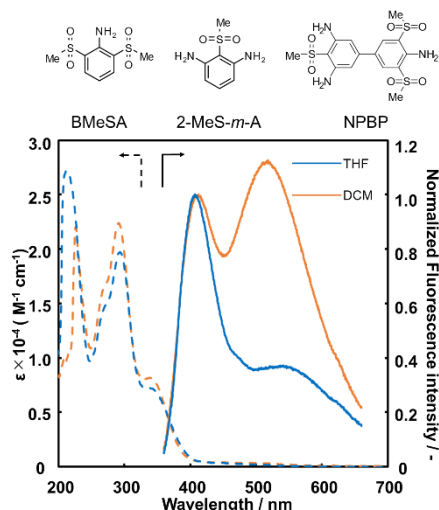


Figure 1 NPBPの吸収および蛍光スペクトル