

## りん光解析によるホスト誘起の $\pi$ 分子の位置選択的な振動抑制効果の発見

(電通大院情報理工<sup>1</sup>) ○都留 羅那<sup>1</sup>・上田 朔也<sup>1</sup>・平田 修造<sup>1</sup>

Host-Induced Site-Selective Vibrational Suppression of a  $\pi$ -Molecule Revealed by Extensive Phosphorescence Analysis (<sup>1</sup>*Department of Engineering Science, The Univ. of Electro-Commun.*) ○Rana Tsuru,<sup>1</sup> Sakuya Ueda,<sup>1</sup> Shuzo Hirata<sup>1</sup>

The phosphorescence yield of  $\pi$  molecules is increased due to a suppression of the nonradiative transition rate ( $k_{nr}$ ) from the lowest triplet excited state depending on the deuterium position of the  $\pi$  molecule. As far, it has been reported that the suppression of  $k_{nr}$  depends on the deuteration position in  $\pi$  molecule in 77 K. However, there has been no consideration of the deuteration positions that effectively suppress the  $k_{nr}$  at room temperature in the  $\pi$ -conjugated backbone. Here we clarified the effective deuterium substitution position of a polycyclic aromatic hydrocarbon (PAH) that leads to the suppression of  $k_{nr}$  and revealed that the degree of suppression of  $k_{nr}$  changes depending on the host molecule surrounding the PAH.

*Keywords* : *Quantum Chemical Calculation; Phosphorescence; Nonradiative Transition; Deuteration; Host-Guest Material*

りん光を示す  $\pi$  分子では水素を重水素置換することにより、最低三重項励起状態からの非放射遷移速度( $k_{nr}$ )が抑制されりん光収率が増加する。これまで、77K の低温中で  $\pi$  分子の重水素位置によって  $k_{nr}$  の抑制度合が異なること、色素の置換基よりも発色団を重水素化した方が  $k_{nr}$  を抑制できることが知られている<sup>1,2)</sup>。しかし、室温で発色団の重水素置換位置によって  $k_{nr}$  の抑制度合が異なることは調査されていない。

本研究では dibenzo[*g,p*]chrysene (DBC) の  $k_{nr}$  の抑制につながる効果的な重水素置換位置を明瞭化し、 $\pi$  分子の周囲のホスト分子によって  $k_{nr}$  の抑制の度合が変化することを明らかにした。DBC では A 部位(図 1a)よりも B 部位(図 1b)を重水素置換した方が重水素の効果が大きく、 $k_{nr}$  の抑制度合が 1.38 倍異なることが確認された。また、DBC 周囲のホスト環境が変化すると、A(図 1a)の重水素化位置では  $k_{nr}$  の抑制度合は変化しないのに対して、B(図 1b)の重水素化位置では  $k_{nr}$  の抑制度合が大きく変化することが確認された(図 1b)。

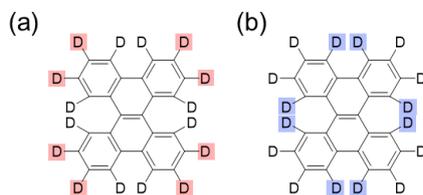


図 1 DBC の重水素置換位置 A(a)と B(b)の説明

1) J. C. Miller, K. U. Breakstone, J. S. Meek, S. J. Strickler, *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 1142–1145.

2) S. Hirata, K. Totani, T. Watanabe, H. Kaji, M. Vacha, *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *20*, 119–125.