

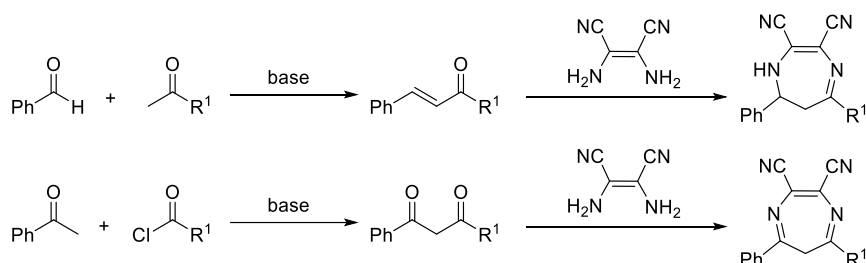
1,4-Diazepine 類が示す凝集誘起発光特性の分子構造依存性の解明

(東京都市大院総合理工¹・都市大応化²) ○田邊 理乃¹・村田 大輔¹・水越 大幹¹・塩月 雅士²

Aggregation-Induced Emission Properties of 1,4-Diazepine Derivatives Depending on Their Molecular Skeletons (¹ Graduate School of Tokyo City University, ² Tokyo City University)
○Rino Tanabe¹, Daisuke Murata¹, Hiroki Mizukoshi¹, Masashi Shiotsuki²

The properties of 1,4-diazepine-based aggregation-induced emission (AIE) materials, achieving wavelength control through functional group modifications were investigated. Diimine-type derivatives exhibited long-wavelength emission shifts upon amorphization, attributed to disrupted crystalline alignment. In contrast, monoimine-type derivatives showed reduced fluorescence intensity due to shorter conjugation and suppressed aggregation caused by a chiral center. By grinding, monoimine derivatives remained disordered after amorphization due to pre-existing molecular disorder. These findings highlight the potential of 1,4-diazepine derivatives in chiral fluorescence analysis. *Keywords* : Aggregation-Induced Emission, 1,4-diazepine, AIE, Emission, molecular structure

凝集誘起発光 (AIE) 材料は、凝集や固体状態で強い蛍光を示す特性である。本研究では、1,4-diazepine 類を基盤とした AIE 材料の特性を調査し、官能基導入による分子内電荷移動の制御を通じて、様々な波長領域での発光を実現した。ジイミン型 1,4-diazepine と部分的に飽和したモノイミン型 1,4-diazepine を合成し、蛍光特性を評価した。フェニル基および *p*-トリル基を持つ誘導体では AIE 特性が見られず、末端置換基の電子供与性により吸収・蛍光波長に変化が確認された。ジイミン型に比べ、モノイミン型では 7 員環の C=N 二重結合が一つであることから、分子全体の共役長が短く、キラル中心の存在が分子凝集時の重なりを抑制し蛍光強度が低下すると考えられる。粉末のすりつぶしによる光学特性変化について、モノイミン型では上記の理由により結晶状態とすりつぶし後のアモルファス状態では各分子の状態に変化は少なく、結果として光学特性に変化は見られなかった。一方のジイミン型は、結晶中で整列した状態の分子形態とすりつぶし後のアモルファス状態では分子形態の差が大きいことから、これに起因する長波長化が観察された。これらの結果から、モノイミン型 1,4-diazepine はキラル蛍光分析への応用可能性を示唆する。



1) Tang, B. Z.; Mei, J.; Leung, N. L. C.; Kwok, R. T. K.; La, J. W. Y. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 11718-11940.