

イソベンゾヘテロールユニットを有するキノイド型 π 共役系分子の合成と物性

(京大化研¹) ○古田 水萌¹・山本 恵太郎¹・山内 光陽¹・山田 容子¹

Development and Properties of Quinoidal π -Conjugated Molecules Based on Isobenzoheterole Units (¹*Institute for Chemical Research, Kyoto University*) ○Minamo Furuta,¹ Keitaro Yamamoto,¹ Mitsuaki Yamauchi,¹ Hiroko Yamada¹

Quinoidal conjugated molecules have been extensively studied as electron-transporting organic semiconductors owing to their high electron affinity and strong intermolecular interactions. They also exhibit sharp long-wavelength absorption stemming from their narrow HOMO–LUMO gaps. In contrast, their emission properties have been rarely reported, presumably due to enhanced nonradiative decay associated with their diradical character. In this study, we designed quinoidal molecules based on an isobenzheterole framework to explore their luminescence properties. The effects of conjugation length and heteroatoms (sulfur and oxygen) were considered in the molecular design. Notably, isobenzofuran-type quinoids represent a previously unexplored molecular framework. Currently, compound **1** has been synthesized and shows clear long-wavelength fluorescence at room temperature.

Keywords : Organic electronic materials; Quinoidal molecule; Isobenzoheterole

キノイド共役系分子は、高い電子親和力および分子間相互作用を有することから、電子輸送性有機半導体として広く研究されている。また、狭い HOMO–LUMO 差に起因する鋭い光吸収を長波長領域に示すことが知られている。一方で、キノイド分子の発光特性に関する報告例は限られている。これは、各ヘテロ環の芳香族化に伴うジラジカル状態の影響により、無放射失活が促進されるためであると考えられる。キノイド分子に発光特性を付与することができれば、有機発光トランジスタなどの光電子デバイスへの展開が期待される。本研究では、キノイド構造の寄与が高まることが想定されるイソベンゾヘテロール骨格を基調とした分子設計を行い、キノイド分子の発光特性を明らかにすることを目的とした。キノイド共役系の鎖長やヘテロ原子の種類（硫黄および酸素）を変化させることで、分子構造が発光特性に与える影響を系統的に評価する設計とした (図 1)。特に、イソベンゾフラン型キノイドは、これまで報告例のない新規骨格である。現在までに化合物 **1** を合成し、基礎的な光物性評価を行った結果、室温において長波長領域に蛍光発光を示すことが確認された (図 2)。

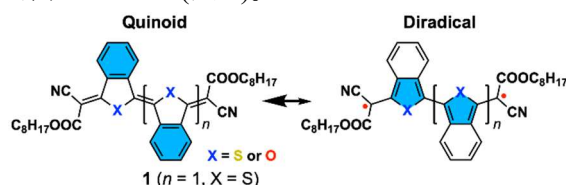


図 1. イソベンゾヘテロールを基調とするキノイド分子。

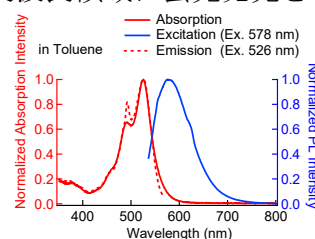


図 2. 化合物 **1** の吸収、励起、及び蛍光スペクトル。