

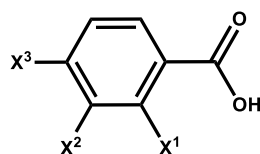
共結晶のりん光における内部エネルギー移動と発光色制御

(千葉大工¹・千葉大院工²)○榊田 結夢¹、佐々木 雄大¹、谷口 竜王²、唐津 孝²
 Internal energy transfer and emission color control in phosphorescence of co-crystal (¹*Faculty of Engineering, Chiba University*, ²*Graduate School of Engineering, chiba University*) ○
 Yume Masuda,¹ Yudai Sasaki,¹ Tatsuo Taniguchi,² Takashi Karatsu²

Metal free ultralong phosphorescent materials have several advantages, such as weak biotoxicity, easy preparation, and low cost. However, there are problems with luminescence lifetime, emission efficiency and intensity. At present, it is difficult to design molecules because the detailed mechanism of ultralong phosphorescence is still unclear. Fluorobenzoic acid, one of the ultralong phosphorescent molecules, is known to form a cocrystal with several molecules.^{1,2} Cocrystals generally have different chemical properties compared to their single molecule crystals. The purpose of this study is to elucidate the mechanism of ultralong phosphorescence by using the investigation of luminescence characteristics of cocrystals. We prepared cocrystals using fluorobenzoic acid derivatives and compared the luminescence of single-molecule crystals and cocrystals. Emission characteristics were investigated by measurement of emission spectrum, single XRD, and DFT calculation. There is a correlation between the luminescence lifetime and strength of hydrogen bond in crystal.

Keywords : Phosphorescence; Ultralong phosphorescence; Cocrystal;

レアメタルを用いない低分子有機物による長寿命りん光材料は、弱い生体毒性、作製の簡便さ、低コストといった利点がある。しかし発光の寿命や発光効率、発光強度には課題があり、詳しい長寿命りん光のメカニズムは未解明な部分が多いため、分子設計が困難であるのが現状である。長寿命りん光を示す分子の一つであるフルオロ安息香酸はいくつかの分子と共結晶を形成することが知られており、^{1,2} 共結晶は一般的に単一分子の結晶と比較して異なる化学的特性を示す。本研究では、長寿命りん光発光のメカニズム解明を目的とし、フルオロ安息香酸を用いた共結晶を作製、単一分子の結晶と共結晶の光化学的特性を比較調査した。定常発光スペクトル及び時間分解発光スペクトルの測定による発光特性調査、単結晶X線構造解析による結晶構造の分析、DFT 計算を用いた電子移動の可能性を調査し、結晶構造中の水素結合の強度と発光寿命に相関関係があることを確認した。



- 1 : X¹=F, X²=H, X³=H 2-Fruolobenzoic acid
 2 : X¹=H, X²=F, X³=H 3-Fruolobenzoic acid
 3 : X¹=H, X²=H, X³=F 4-Fruolobenzoic acid

- 1) R. Dubey and G. R. Desiraju. *Cryst. Growth Des.* **2015**, 15, 489.
- 2) V. R. Hathwar, T. S. Thakur, R. Dubey, M. A. Pavan, T. N. G. Row, and G. R. Desiraju, *J. Phys. Chem. A*, **2011**, 115, 12852.