

(3,5-ジフルオロピリジル)ビス(2,4,6-トリクロロフェニル)メチルラジカルの変位置換が蛍光に与える影響

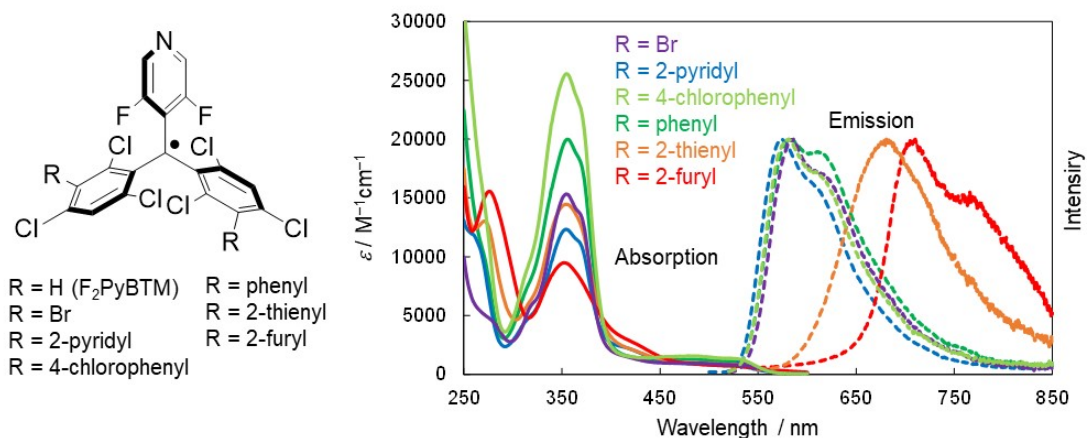
(龍谷大学¹・分子科学研究所²) ○服部 陽平¹・椿 隼典¹・松岡 亮太²・草本 哲郎²・内田 欣吾¹

Effect of meta-substitution of (3,5-difluoropyridyl)bis(2,4,6-trichlorophenyl)methyl radical on fluorescence (¹Ryukoku University, ²Institute for Molecular Science) ○ Yohei Hattori,¹ Shunsuke Tsubaki,¹ Ryota Matsuoka,² Tetsuro Kusamoto,² Kingo Uchida¹

Luminescent radicals are expected to be used in highly efficient OLED, since they exhibit fluorescence from the lowest doublet excited state.¹⁾ Among them, polychlorotriarylmethyl radicals with pyridyl groups are known to have high photostability.²⁾ Recently, we have synthesized meta-substituted (3,5-difluoropyridyl)bis(2,4,6-trichlorophenyl)methyl radical (F₂PyBTM)³⁾ derivatives using Migita-Kosugi-Stille coupling. These new radicals showed fluorescence in cyclohexane. Here we report substitution effect on luminescent properties and photostability, and explain the effect using DFT calculations.

Keywords : Radical; Doublet Excited State; Fluorescence; DFT Calculations; Substitution Effect

発光性ラジカルは最低二重項励起状態からの蛍光を示すため高効率 OLED への応用が期待されており、中でもピリジル基を持つポリクロロトリアルメチルラジカルは光安定性が高いことが知られている²⁾。本研究では、右田・小杉・スティルカップリングを用いて(3,5-ジフルオロピリジル)ビス(2,4,6-トリクロロフェニル)メチルラジカル(F₂PyBTM)³⁾のメタ位を様々な芳香環に置換した誘導体を合成し、これらの新規ラジカルがシクロヘキサン中で蛍光を示すことを確認した。置換基が発光特性や光安定性に及ぼす効果について報告し、DFT 計算の結果を用いて考察する。



1) X. Ai, E. W. Evans, S. Dong, A. J. Gillett, H. Guo, Y. Chen, T. J. H. Hele, R. H. Friend, F. Li, *Nature* **2018**, 563, 536.

2) Y. Hattori, T. Kusamoto, H. Nishihara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 11845.

3) Y. Hattori, T. Kusamoto, H. Nishihara, *RSC Adv.* **2015**, 5, 64802.