

PyBTM ラジカル誘導体のパラ置換基が高効率溶液蛍光特性に与える効果

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

Effect of *para*-substituents of PyBTM radical derivatives on high-efficiency solution fluorescence properties (¹Ryukoku University, ²Institute for Molecular Science) ○Yohei Hattori,¹ Ryota Kitajima,¹ Ryota Matsuoka,² Tetsuro Kusamoto,² Kingo Uchida¹

Fluorescence of stable triarylmethyl radicals has attracted much attention for applications such as highly efficient OLED materials.¹⁾

We have found that diphenylpyridylmethyl radical derivatives, PyBTM²⁾ and F₂PyBTM³⁾ had high photostability. Substituting chlorine atoms at the *para*-position of the methyl group using micellar Suzuki-Miyaura coupling reaction,⁴⁾ we prepared Mes₂F₂PyBTM with high fluorescence quantum yields in solutions.⁵⁾

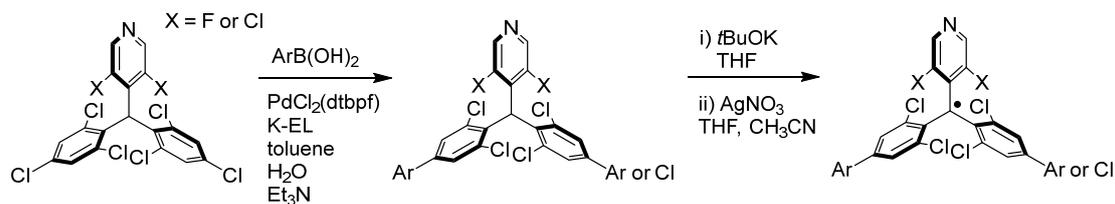
We have recently synthesized new radicals with other *para*-substituents. We will report on their fluorescent properties and discuss the role of the *para*-substituents.

Keywords : Radical, Fluorescence, Luminescence, Donor-Acceptor System, DFT Calculation

安定発光ラジカルは、高効率の有機 EL 材料となることから注目を集めている¹⁾。

我々は、安定なジフェニルピリジルメチルラジカル誘導体である PyBTM²⁾や F₂PyBTM³⁾が高い光安定性を示すことを見出した。メチル基に対するパラ位の塩素をミセル中の鈴木・宮浦カップリングで選択的にアール基に置換する方法⁴⁾を用いることで、パラ位をメシチル基に付加した F₂PyBTM を合成したところ、クロロホルム中で 69%の高い蛍光量子収率を示した。ここでメシチル基のオルト位のメチル基はトリアールメチル部位とメシチル基の共役を抑える役割を担っている⁵⁾。

新たにオルト位のメチル基を減らしたラジカルや、メチル基より嵩高いイソプロピル基に変更したラジカル等の新規ラジカル数点を合成したので、その蛍光特性について報告し、オルト位の置換基の役割について考察する。



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.

4) S. Mattiello, F. Corsini, S. Mecca, M. Sassi, R. Ruffo, G. Mattioli, Y. Hattori, T. Kusamoto, G. Griffini, L. Beverina, *Mater. Adv.* **2021**, 2, 7369–7378.

5) Y. Hattori, R. Kitajima, W. Ota, R. Matsuoka, T. Kusamoto, T. Sato, K. Uchida, *Chem. Sci.* **2022**, 13, 13418–13425.