

## 剛直な有機ケイ素配位子を用いた発光性亜鉛複核錯体の設計および合成

(東大院工<sup>1</sup>・東大生研<sup>2</sup>・JST さきがけ<sup>3</sup>) ○岩本 秀光<sup>1</sup>・和田 啓幹<sup>1,2</sup>・砂田 祐輔<sup>1,2,3</sup>  
Molecular design and synthesis of a luminescent dinuclear zinc complex using organosilyl ligands with rigidity(<sup>1</sup>*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*, <sup>2</sup>*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo*, <sup>3</sup>*JST PRESTO*) ○Hidemitsu Iwamoto,<sup>1</sup> Yoshimasa Wada,<sup>1,2</sup> Yusuke Sunada<sup>1,2,3</sup>

We have developed various polynuclear complexes and clusters showing intermetallic interaction, by which unique chemical reactions<sup>1,2)</sup> and photophysical functions<sup>3)</sup> have been demonstrated. For example, although divalent zinc complexes have been known as colorless or white compounds, we have realized a visible-light responsive dinuclear Zn(II) complex by controlling two zinc distance<sup>3)</sup>. Theoretical calculations revealed that visible light absorption was owing to electronic transition using the molecular orbital localized over the two zinc atoms. In this study, we design and synthesize Zn(II) complexes suitable for "visible light emission" to further exploit photophysical functions of zinc. One indicator characterizing emission performance is photoluminescence quantum yield (PLQY), and introduction of a rigid skeleton is known to be promising for suppressing the non-radiative decay and consequently improving PLQY. Therefore, in our molecular design, rigid aromatic fragments are introduced into the molecular skeleton in addition to the control of the zinc-zinc distance. I will present the photophysical properties of a new dinuclear Zn(II) complex based on the theoretical calculations, and compare the results with those of previously reported dinuclear Zn(II) complexes<sup>3)</sup>.

**Keywords:** Zinc; Visible light emission; Intermetallic interaction

当研究室ではこれまでに金属間に相互作用を有する様々な金属複核錯体・クラスターの開発により、特異的な化学反応<sup>1,2)</sup>や光機能の発現<sup>3)</sup>を可能にしてきた。その一例として、従来、二価の亜鉛錯体は無色もしくは白色化合物であると知られているが、亜鉛間距離を適切に制御することにより、可視光吸収を示す亜鉛二核錯体の開発に成功した<sup>3)</sup>。量子化学計算の結果から、この可視光吸収は、亜鉛2原子に局在化する分子軌道を利用した電子遷移に起因すると分かっている。そのような背景のもと、本研究では、亜鉛の可視光機能のさらなる開拓を目標に、“可視光発光”に適した新規亜鉛錯体の分子設計・合成を行った。発光性能の指標の一つとして、発光量子収率が挙げられるが、その向上の方策の一つに、剛直な骨格の導入が知られている。これは、励起状態において発光過程と競合する無輻射失活過程を効果的に抑制するためである。そこで、本研究の分子設計においては、亜鉛間距離の制御に加えて剛直な芳香族基導入に着目し、量子化学計算を用いた分子設計、ならびに合成を行った。当日は、過去に報告した亜鉛二核錯体<sup>3)</sup>との比較をふまえ、量子化学計算の結果に基づいて新規亜鉛複核錯体の光物性に関して発表する。

1) C. Yanagisawa *et. al.*, *ChemCatChem*, **2021**, *13*, 169-173.

2) K. Shimamoto and Y. Sunada, *Chem. Sci.*, **2022**, *13*, 4115-4121.

3) Y. Wada, T. Maruchi, R. Ishii, and Y. Sunada, *Available at SSRN*, DOI : 10.2139/ssrn.4197384.