

テトラフェニルエテン誘導体を基盤とした巨大空孔をもつ蛍光性水素結合性有機フレームワークの構築

(阪大院基礎工) ○山口 真生・鈴木 悠斗・桶谷 龍成・久木 一朗

Fluorescent Hydrogen-Bonded Organic Framework with Large Pore Composed of Tetraphenylethene Derivative (*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○ Mao Yamaguchi, Yuto Suzuki, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki

Hydrogen-bonded organic framework (HOF) can be obtained as single crystals due to their reversible bond formation. However, strength of hydrogen bonds is weak, and even for carefully designed molecules, the obtained structures are often against our expectations. In this work, I became interested in tetraphenylethene and designed its carboxylic acid derivative (Ter-CPE) with longer phenylene groups. We successfully obtained a HOF of Ter-CPE which has an eclipsed-stacking structure composed of two-dimensional network with a rhombic void (Fig.1). We will discuss the structure and properties of the HOF, compared with the previously reported HOFs of phenyl derivatives^[1] and biphenyl derivatives.^[2]

Keywords : Tetraphenylethene, hydrogen-bonded organic framework, Porous materials, aggregation-induced emission (AIE), isomorphous structure

水素結合性有機フレームワーク (Hydrogen-bonded Organic Framework: HOF) はその可逆的な結合形成により単結晶として得られるため、単結晶構造解析による構造-物性相関の詳細な議論が可能である。一方で水素結合の結合の強さは弱く、入念に設計した分子であっても得られる構造は予想に反する構造を与えることがある。本研究では、凝集誘起発光を示す分子として知られているテトラフェニルエテンに着目し、フェニル基をターフェニル基へと伸長したカルボン酸誘導体(Ter-CPE)を合成した。Ter-CPEを用いて結晶化を行い、結晶構造を単結晶 X 線回折により明らかにした。カルボキシ基同士の自己相補的な水素結合によりひし形開口部を持つ二次元ネットワークを形成していた。三次元構造は二次元シートが真上に積層していた(Fig.1)。この構造を既報のフェニル誘導体^[1]およびビフェニル誘導体^[2]のHOFの構造と比較を行った。また、Ter-CPEの蛍光発光特性、HOFの多孔性についても評価した。

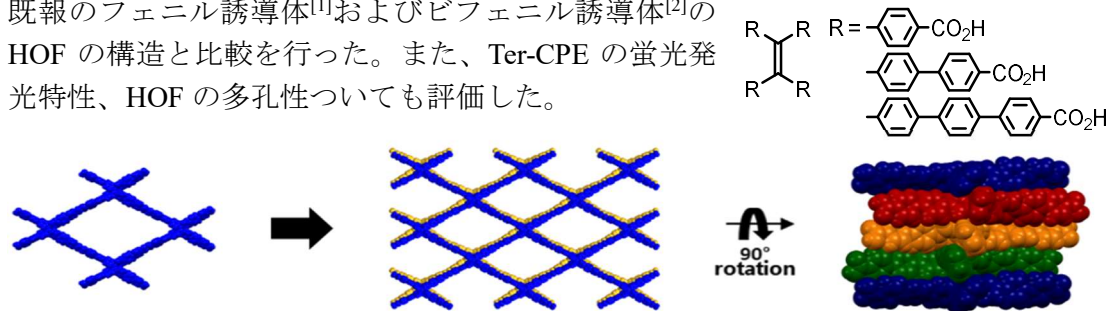


Fig 1. Crystal structure of HOF Ter-CPE

- 1) N. B. Shustova, B. D. McCarthy, M. Dincă, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 20126
- 2) Y. Suzuki, N. Tohnai, and I. Hisaki, *Chem. Eur. J.* **2020**, 26, 17056.