

光学活性 bis-(*para*)-pseudo-*ortho* 四置換[2.2]パラシクロファンを用いた π 電子系積層 X 字型分子の合成とキロプティカル特性

(関西学院大院理工) ○小川 夏奈・井上 僚・森崎 泰弘

Synthesis and Chiroptical Properties of Optically Active X-Shaped Molecules from Bis-(*para*)-pseudo-*ortho*-tetrasubstituted [2.2]Paracyclophane

(Graduate School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University)

○Kana Ogawa, Ryo Inoue, Yasuhiro Morisaki

[2.2]Paracyclophane has a stacked structure in which two benzene rings are fixed with ethylene chains at the *para*-positions. We have synthesized various optically active π -electron-system-stacked molecules using planar chiral [2.2]paracyclophanes. In this study, we achieved the synthesis of X-shaped molecules using optically active bis-(*para*)-pseudo-*ortho*-tetrasubstituted [2.2]paracyclophanes as building blocks. The optical properties were compared with those of V-shaped molecules previously synthesized.

Keywords : [2.2]Paracyclophane; Planar Chirality; Circularly Polarized Luminescence

[2.2]パラシクロファンは2枚のベンゼン環がパラ位においてエチレン鎖で固定された積層構造を有する化合物である。当研究室では[2.2]パラシクロファンに位置選択的に置換基を導入することで様々な光学活性 π 電子系積層化合物を系統的に合成してきた。本研究では、光学活性 bis-(*para*)-pseudo-*ortho* 四置換[2.2]パラシクロファンをビルディングブロックとして用いて、 π 電子系が X 字に積層した分子を合成し (Figure 1)、 π 電子系が V 字に積層した分子との物性の比較を行った。X 字型の分子では蛍光量子収率 $\Phi_{\text{lum}} = 72\%$ 、V 字型の分子では蛍光量子収率 $\Phi_{\text{lum}} = 73\%$ という高い発光効率を示した。また、両方の分子において、ミラーイメージの円二色性(CD)、円偏光発光(CPL)スペクトルが観測された。円偏光発光の異方性因子 ($|g_{\text{lum}}|$) は、X 字型の分子で 1.1×10^{-3} 、V 字型の分子で 1.0×10^{-3} であった。シミュレーションの結果、V 字型分子は一方の π 電子系に軌道が局在化されて発光するのに対し、X 字型分子は分子全体に軌道が非局在化して発光することが示された。

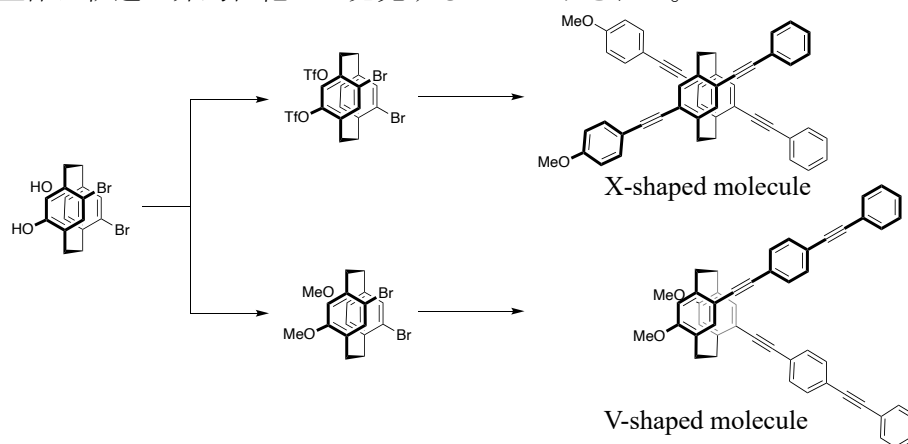


Figure 1. π 電子系が積層した X 字型分子と V 字型分子