

らせん型 π 共役系にピレンを導入した分子の合成と二重発光特性

(京大化研) ○平 翔太・廣瀬 崇至・村田 靖次郎

Synthesis of a Helical π -Conjugated Compound with Pyrenyl Groups and its Dual Emission Properties (*Institute for Chemical Research, Kyoto University*)

○Shota Hira, Takashi Hirose, Yasujiro Murata

Dual emission from molecules, where two different emissions are simultaneously detected from a single molecule due to multiple dynamics in the excited states, is applicable as functional light-emitting materials that show high responsiveness to the external environment.

In this study, we synthesized a [5]helicene derivative (**1**) with two 2-pyrenyl groups introduced at the 2- and 13-positions of [5]helicene and investigated its luminescence properties (Figure 1). Compound **1** showed dual emission in toluene, consisting of (i) a short-wavelength emission component with a vibrational structure and (ii) a broad long-wavelength component. Temperature-dependent emission spectra showed that the relative intensity of the long-wavelength component decreased significantly with decreasing temperature. From the emission decay curves at 255 K, totally three different time constants were observed, suggesting that at least three excited states are involved in the dual emission process of **1**. In this presentation, the luminescence properties of this molecule will be discussed in detail considering the solvent dependence of the emission spectra and DFT calculations.

Keywords: Dual emission, Excited-state dynamics, Helicenes, Pyrenes, Solvatochromism

光励起された有機分子の多くは最低エネルギー励起状態のみに由来する発光や光化学反応性を示し、高次励起状態における迅速な失活挙動は Kasha 則として知られている。励起状態の特異なダイナミクスに起因して単一分子から 2 つの異なる発光を同時に発する二重発光分子は、外部環境に応答する機能性発光材料としての応用が期待される。

本研究では、2 つの 2-ピレニル基を導入した[5]ヘリセン誘導体 (**1**) を合成し、その発光特性を調査した (Figure 1)。トルエン溶液中において、化合物 **1** は振動構造を持つ短波長の発光成分とブロードな長波長の発光成分からなる二重発光を示した。温度可変発光スペクトル測定により、温度の低下に伴い、長波長側の発光成分の相対強度が顕著に減少することが確認された。255 K における蛍光寿命測定では、430 nm における発光の失活曲線から 2.5 ns と 18.5 ns の 2 種類の異なる時定数が、540 nm における失活曲線から 26.7 ns の単一の時定数がそれぞれ確認されたことから、計 3 種類の寿命成分の存在が観測され、3 つ以上の励起状態が **1** の二重発光過程に関与していることが示唆された。

本発表では、発光スペクトルの溶媒依存性や DFT 計算の結果を踏まえて、本分子の発光特性に関して詳細に議論する。

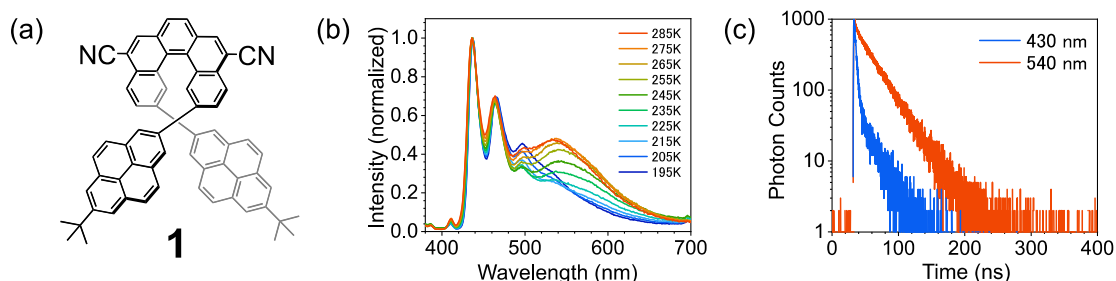


Figure 1. (a) Chemical structure of **1**, (b) temperature-dependent emission spectra of **1** in toluene cooling from 285 to 195 K, normalized to the maximum intensity, and (c) emission decay curves of **1** in toluene monitored at 430 (blue) and 540 nm (red) at 255 K.