

9-エチニルアントラセンを有するピリミジンおよびピリジン誘導体の合成と分光学的性質

(芝浦工大工) ○川村樹生・一杉礼央・Gary J. Richards・堀顕子

Synthesis and spectroscopic properties of pyrimidine and pyridine derivatives with 9-ethynylantracene. (Undergraduate School of Engineering, Shibaura Institute of Technology)

○Tatsuki Kawamura, Reo Ichisugi, Gary J. Richards, Akiko Hori

Aromatic compounds linked by ethynyl groups are well known to show dynamic luminescence behavior because of the conversion of molecular planarity. In this study, we planned to prepare the compound that combines ethynylantracene, which emits blue light, with pyrimidine or pyridine, which can coordinate to metal ions. The target blue-emitting compounds were synthesized by general Sonogashira coupling and identified by NMR studies. The molecular structures, spectroscopic properties, and further reactions with metal ions of the compounds will be reported.

Keywords : Pyrimidine; Luminescence; Sonogashira-coupling; Anthracene

発光材料の設計において、発光波長の制御には共役系の拡張が効果的であるため、多環式芳香環や金属イオンの導入が行われている。また、ピリミジンは二座配位子として知られており、その金属錯体の生物活性やキレート能について広く研究されている¹⁾。当研究室では多環式芳香環を導入したピリジン誘導体の合成を行っており²⁾、本研究では9-エチニルアントラセンおよび5-ブロモピリミジンを原料とする菌頭カップリングからピリミジン誘導体 **1** の合成を行った。¹H NMR から、ピリミジン由来およびアントラセン由来のピークが観測され、目的物が得られたことが分かった (図 1)。

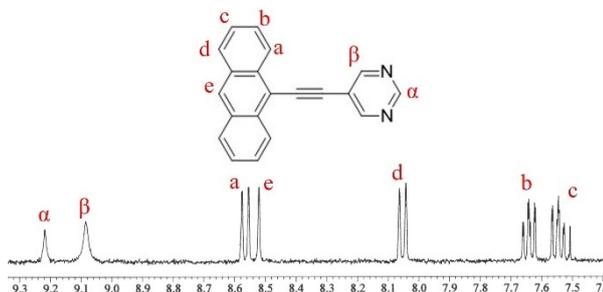


図 1. 化合物 **1** の ¹H NMR

単一溶媒からの結晶化は困難であったが、オクタフルオロナフタレンとの共結晶化 (溶媒は CH₂Cl₂:MeOH=1:1) から 1·C₁₀F₈ が得られたので X 線単結晶構造解析より構造を明らかにした。**1** の CHCl₃ 溶液は青色に発光したことから、溶液の分光学的性質を調べ、吸収極大波長は 400 nm、発光極大は 436 nm であり (図 2) エチニルアントラセンに特有の分光学的性質を示した。

1) S. Roy *et al.*, *Polyhedron* **26** (2007) 2603; 2) A. Hori *et al.*, *CrystEngComm*, **2009**, 11, 567.

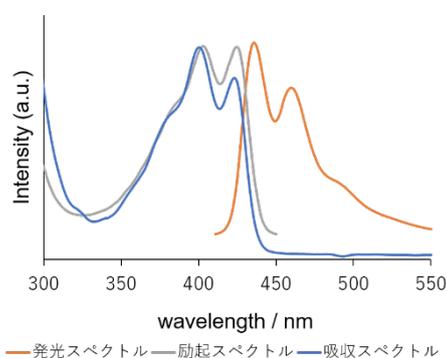


図 2. **1** の CHCl₃ 中での各種スペクトル