

## ジシラン架橋(DAD)分子の合成と発光特性

(東大院理) ○山野井慶徳・西尾正樹・宮部浩人・氏田瑞葉・松下峻也・中江豊崇・山田鉄兵

Synthesis and emission properties of disilane cross-linked (DAD) molecules (The University of Tokyo) ○Yoshinori Yamanoi, Masaki Nishio, Hiroto Miyabe, Mizuha Ujita, Shunya Matsushita, Toyotaka, Nakae, Teppei, Yamada

Molecules that connect an electron donor (D) and an electron acceptor (A) with a disilane bond (Si-Si) show intense photoluminescence in the solid state. In this work, we synthesized a novel D-Si-Si-A-Si-Si-D type molecule in which phenothiazine was introduced as an electron donor site. This compound exhibited mechanochromic and vapochromic emissions with response to external stimuli. The relationship between properties and structures was investigated using single crystal and powder X-ray diffraction measurements.

*Keywords* : donor-acceptor, disilane

電子ドナー(D)と電子アクセプター(A)をジシラン結合(Si-Si)でつないだ分子は結晶状態で特異な発光を示す。今回、メカノクロミック発光を示すことが知られているフェノチアジンを電子ドナー部位として導入した新規 D-Si-Si-A-Si-Si-D 型分子を合成し、その結晶構造と機械的刺激、溶媒蒸気への応答性を単結晶および粉末 X 線回折測定を利用して調査した。

合成したジシラン分子の単結晶について、Rigaku VariMax Dual を用いて単結晶 X 線回折測定を 93 K で行った。得られた測定データは Olex2 を用いて解析した。SHELXT プログラムを用いて位相決定を行い、SHELXL プログラムにて構造精密化を行った。また、結晶をすりつぶした試料、すりつぶした後に溶媒蒸気に暴露した試料、ジクロロメタン溶液から得られた試料に関して、キャピラリーに封入し、Rigaku SmartLab (K $\alpha$ 1)を用いて粉末 X 線回折測定を行った。

単結晶 X 線回折測定から、得られた新規ジシラン化合物は結晶状態において擬エクタトリアル型のフェノチアジンを有することが明らかになった。また粉末 X 線回折測定から、結晶性試料はすりつぶしによって非晶質に、溶媒蒸気への暴露によって再び結晶性になり、ジクロロメタン溶液からは非晶質試料が得られることが明らかになった。これらの X 線回折測定の結果と発光測定から、結晶状態からは青緑色、非晶質状態からは黄色に発光するメカノクロミック発光を示すことが明らかになった。得られた結晶構造を用いた量子化学計算の結果、これまでに知られているフェノチアジンのメカノクロミック発光の発現機構とは異なる新しい機構によるメカノクロミック発光であることが示唆された。