

架橋部位に窒素原子を導入した環状分子の合成と特性評価

Synthesis and Property Evaluation of Nitrogen-Embedded Macrocycles

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 大谷 俊介

研究成果概要

Pillar[6]arene (**P6**) は、6枚のベンゼン環がメチレン基により架橋された環状分子である。固体状態における**P6**は、環内部の空孔や環同士の空隙にゲスト分子を取り込むことができる。そのため、固体発光性の付与により、ゲスト分子の取り込みに応答した発光特性変化が期待できる。一方で、**P6**の固体発光は紫外域に位置しており、さらに濃度消光と呼ばれる現象により溶液状態に比べて著しく低下する。本研究では、架橋部位に窒素原子を導入したPillar[6]arene (**P6NMe**) が可視領域で固体発光性を示すことが分かった。これは窒素架橋部位が電子ドナーとして働くことで分子内電荷移動(CT)発光へと変化し、自己吸収が抑制されたことに起因すると考察した。そこで、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、密度汎関数理論による分子軌道計算を行った。その結果、窒素部位に最高被占軌道(HOMO)が局在化しており、分子内CTに由来する遷移であることがわかり、理論的に固体発光性の向上を確認することができた(Figure 1b)。

発表論文(謝辞あり)

Ohtani, S.; Nakaguchi, K.; Kato, K.; Ogoshi, T. *Chem. Asian J.* **2024**, *19*, e202400106.

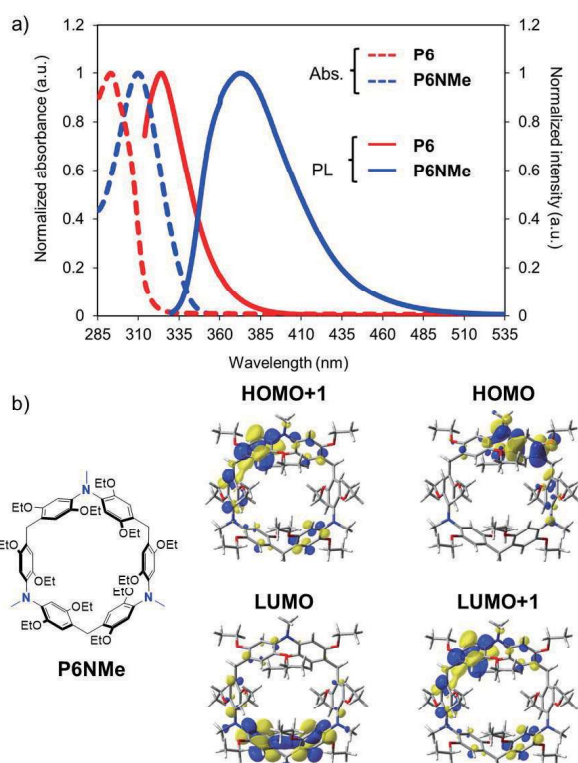


Figure 1. a) UV-vis absorption and photoluminescence spectra of **P6** and **P6NMe** in 1.0×10^{-5} M toluene solution. b) Molecular orbitals of **P6NMe** calculated at B3LYP 6-311G(d,p) level.