

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on the HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

本年度は主に光機能性分子の設計、構造、および基礎物性の解析のため Gaussian を用いた量子化学計算を行った。具体的には、らせん状 π 共役系を有する [5]ヘリセンのらせんキラリティに由来する円偏光発光 (CPL) に着目した。当研究室での先行研究により、[5]ヘリセンの発光はフロンティア軌道の縮退に由来した配置間相互作用により禁制となっていることが示されていた。そこで、[5]ヘリセンに対する置換基効果を分子軌道計算により種々検討したところ、5,10-位への電子求引基の導入及び 2,13-位への電子供与基の導入がフロンティア軌道の縮退を効果的に解くために有効であることが分かった。これらの知見をもとに、実際に Figure 1 に示す分子 **1** を合成し、発光特性を調査したところ、[5]ヘリセンとしては良好な発光量子収率 (62%) および有機化合物としては比較的高い非対称性因子 ($g = 4.2 \times 10^{-3}$) が観測された。さらに、ドナー・アクセプター型である **1** は励起状態での高い極性に由来した溶バトクロミズムを示す一方、溶媒の極性が非対称性因子に与える影響は小さいことも明らかになった。

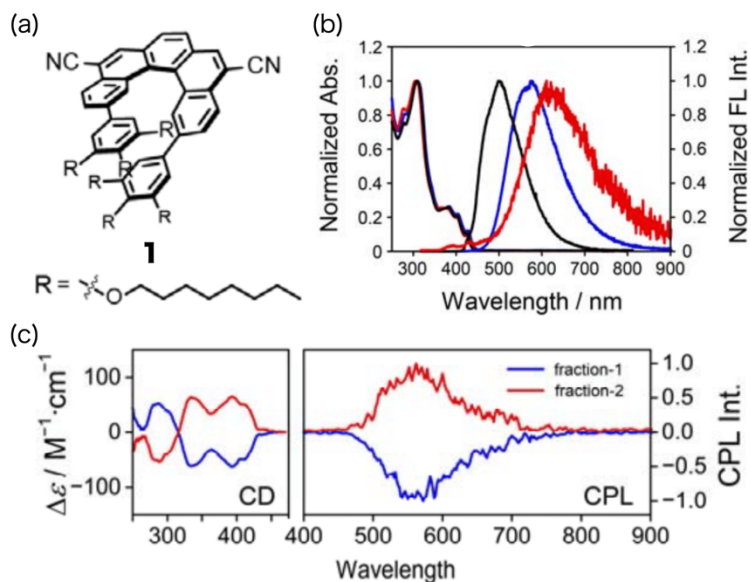


Figure 1. (a) Structure of **1**. (b) Absorption spectrum of **1** in *n*-hexane (black), CHCl_3 (blue), and MeOH (red). (c) Circular dichroism and circularly polarized luminescence spectra of **1** in CHCl_3 . Blue and red lines denote fraction-1 and fraction-2 on chiral HPLC, respectively.

発表論文(謝辞あり)

1. H. Kubo, T. Hirose, D. Shimizu, K. Matsuda, *Chem. Lett.* **2021**, on the web. [DOI: 10.1246/cl.200913]