







#### 研究タイトル:

# ピロールを基盤とした固体発光性材料の創生

氏名: 大川原 徹 / Toru Okawara E-mail: okawara@kct.ac.ip

博士(工学) 職名: 准教授 学位:

日本化学会、錯体化学会、有機合成化学協会 所属学会•協会:

キーワード: 有機化学、錯体化学、複素環化合物、金属錯体、光化学、蛍光、発光、理論計算

•有機合成

•核磁気共鳴分光 技術相談

蛍光・発光スペクトル測定 提供可能技術:

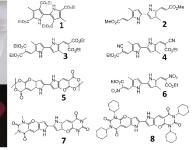
·密度汎関数理論計算



## |-2,2' -ビピロール系発光色素の発光波長制御|

ビピロールは窒素を含む五員環芳香族化合 物の一つであるピロールを単結合で直結した構 造を有し、天然の生理活性を持つ色素のビルデ ィングブロックとして知られている。近年ではビピ ロールを母体とする蛍光色素が注目を集めてい る。我々はジホルミルビピロールを中間原料とし、 種々の活性メチレン化合物とのアルドール縮合 反応によって共役を拡張することで、400 ~ 600



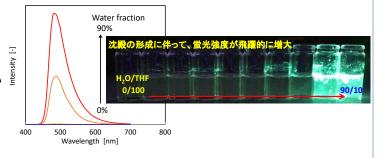


nm の範囲で発光波長を制御できる一連の化合物群の創生に成功している。

参考文献(責任著者\*):(1)T. Okawara,\* A. Doi, T. Ono, M. Abe, K. Takehara, Y. Hisaeda, S. Matsushima, *Tetrahedron Lett*., 2015, 56, 1407-1410; (2)R. Kawano, T. Kato, R. Fukuda, T. Okawara,\* K. Takehara, T. Nagamura, Chemistry Select, 2016, 1, 4144-4151 (Cover Picture); (3) T. Okawara,\* R. Kawano, H. Morita, A. Finkelstein, R. Toyofuku, K. Matsumoto, K. Takehara, T. Nagamura, S. Iwasa, S. Kumar, Molecules, 2017, 22, 1816.

#### - 凝集誘起発光性を示す 2-ビニルピロール(Pyrrol-2-ylmethylene)誘導体の合成と応用

ホルミルピロールを原料とし、メルドラム酸やバルビツ ール酸とアルドール縮合させることで、凝集誘起発光性 を示すビニルピロールの合成に成功している。これらの 化合物は通常の蛍光色素とは異なり、溶液中では発光 を示さないが色素が沈殿や凝集体を形成したときに強い 📱 発光性を示す。生体内の特定の組織や pH 条件など外 部環境に応じた発光の ON/OFF が可能であることから、 イメージング色素などへの応用が期待されている。



参考文献(責任著者\*):(1)T. Okawara,\* Y. Matsufuji, K. Mizuno, K. Takehara, T. Nagamura, S. Iwasa, *RSC Adv.,* **2019**, *9*, 22817-22822.

## 提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	
絶対発光量子収率測定装置 C11347 Quantaurus-QY	(浜松ホトニクス)
核磁気共鳴分光装置 JNM-ECS400	(日本電子)
赤外分光装置 FT/IR-410	(日本分光)
電子構造計算プログラム Gaussian 09	
グラフィカルインターフェース GaussView 5	