ゲスト認識能を有する σ -カルボラン含有マクロサイクルの合成と物性評価

(京大院工) ○徳富 芽衣・油原 和公・田中 一生

Synthesis and Physical Properties of o-Carborane Containing Macrocycle with Guest Recognition Ability (*Graduate School of Engineering, Kyoto University*) OMei Tokutomi, Kazuhiro Yuhara, Kazuo Tanaka

o-Carborane (CB) is an icosahedral carbon and boron cluster compound. It has been revealed that CB with π -conjugated systems show intramolecular charge transfer emission with elongation of carbon–carbon bond of CB in the excited state.^{1,2} It was also reported that emission wavelength became longer when there was enough space for structural relaxation.³ In this work, we synthesized the novel CB embedded macrocycle 1 containing π -conjugated systems and oligo(ethylene glycols) (Figure 1). Upon addition of 100 equivalent KPF₆ to 1 in solution state, blue-shift of emission maximum wavelength and increase of emission intensity were observed (Figure 2). In this presentation, details of the change of bond elongation process and physical properties upon guest recognition will be reported.

Keywords: Carborane; Optical property; Host-Guest; Crown Ether; Solid-State Emission

o-カルボラン(CB)は化学式 $C_2B_{10}H_{12}$ で表される二十面体型クラスター化合物である。CB 炭素上に π 共役系を導入することで分子内電荷移動(ICT)発光を示し、その際に励起状態で CB の炭素–炭素結合が伸長することが明らかとなっている 1,2 。また結合が伸長しやすい環境であるほど、発光波長が長波長化することが報告されている 3 。

本研究では、CB の炭素上に π 共役系とオリゴエチレングリコール鎖を連結して環状化した CB 誘導体 1 (Figure 1)を合成した。1 のゲスト存在下の溶液状態での発光特性を測定したところ、100 等量の KPF_6 の添加により発光波長の短波長化と、発光強度の増大が観測された (Figure 2)。本発表では、ゲスト認識に伴う CB 炭素–炭素結合伸長過程と物性の変化に関して詳細に

報告する。

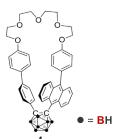


Figure 1. Chemical structure of 1.

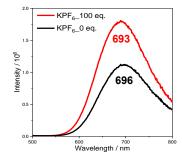


Figure 2. Photoluminescence spectra of **1** in 1.0×10^{-5} M acetone/CHCl₃ 3/2 (v/v) solution.

1) Fox, M. A. et al. Chem. Eur. J. **2012**, 18, 347–8357. 2) Chujo, Y. et al. Angew. Chem. Int. Ed. **2017**, 56, 254–259. 3) Tanaka, K. et al. Dalton Trans. **2021**, 50, 1025–1033.