

π 共役系を拡張したピリジン配位子によるヨウ化銅(I)錯体の発光制御

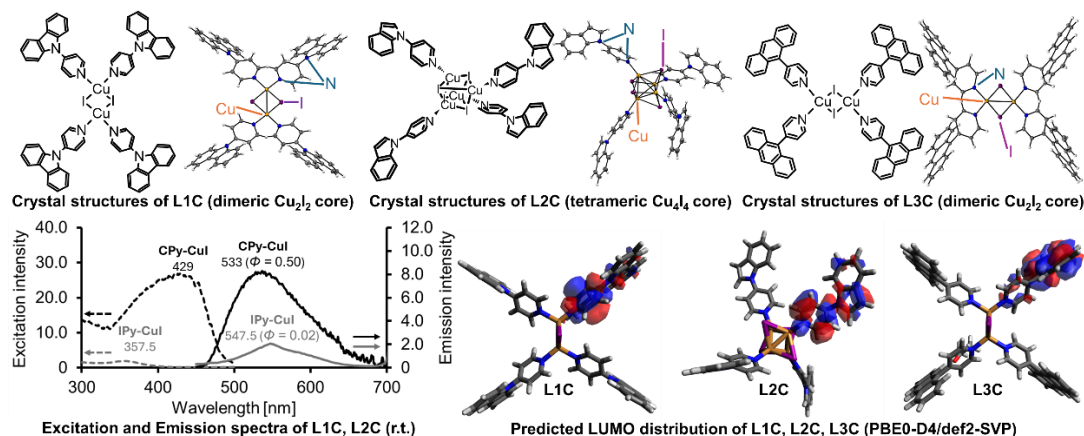
(東京高専物質工¹⁾) ○内藤 翔¹・井手 智仁¹

Controlling the Emission Properties of Luminescent Copper(I) Iodide Complexes by π -extended Pyridine Ligands (¹Department of Chemical Science Engineering, National Institute of Technology, Tokyo College) ○Sho Naito,¹ Tomohito Ide¹

CuI complexes are promising materials for emissive devices such as OLEDs due to their strong light emission properties in the solid state¹⁾. In this study, we synthesized 4-position π -extended pyridine ligands **L1**, **L2**, and **L3**, which incorporate carbazole, indole, and anthracene, respectively, and their complexes **L1C**, **L2C**, and **L3C**. **L1C** and **L2C** exhibited maximum emissions at 533 nm ($\Phi = 0.50$) and 577 nm ($\Phi = 0.02$), respectively, while **L3C** showed no light emission. X-ray crystallography revealed that **L1C** and **L3C** adopt a rhombic Cu₂I₂ core structure, while **L2C** adopts a cubane-like Cu₄I₄ core structure. DFT calculations suggested that the LUMO of **L3C** does not distribute over the pyridine moieties, unlike the luminescent complexes **L1C** and **L2C**. The charge transfer between the CuI core and the ligands in **L3C** may be hindered by this LUMO distribution.

Keywords : Luminescent Copper(I) complexes; Copper(I) halide; Excited state; DFT Calculation

CuI 錯体は固体状態で強発光性を示すものが多く、OLED などの発光デバイスへの応用を期待されている¹⁾。本研究では、ピリジンの4位にカルバゾール、インドール、アントラセンを導入した配位子 **L1**, **L2**, **L3** およびこれらの CuI 錯体 **L1C**, **L2C**, **L3C** を合成した。**L1C**, **L2C** は 533 nm ($\Phi = 0.50$), 577 nm ($\Phi = 0.02$) に最大発光波長を示したが **L3C** は発光しなかった。このうち特に **L1C** は量子収率が高く、発光デバイスへの応用が期待できる。単結晶 X 線構造解析より **L1C**, **L3C** はひし形 Cu₂I₂ 構造を、**L2C** はキューバン型 Cu₄I₄ 構造をとっていた。DFT 計算によって、発光を示した **L1C**, **L2C** と異なり、**L3C** の LUMO が殆どピリジン環上に分布しないために CuI コアと配位子間の電荷移動が阻害され、発光を示さなかった可能性が示唆された。



1) Q. C. Chang, et al. *Coord. Chem. Rev.* **2019**, 378, 121.