

高い対称性をもつ有機二核ホウ素錯体の結晶構造と蛍光特性

(阪公大工¹・阪公大院工²・阪公大 RIMED³) ○福田 侑真¹・大垣 拓也^{2,3}・

松本 楓子²・松井 康哲^{2,3}・池田 浩^{2,3}

Crystal Structures and Fluorescence Properties of Organic Binuclear Boron Complexes with High Symmetry (¹*Sch. of Eng., Osaka Metro. Univ.*, ²*Grad. Sch. of Eng., Osaka Metro. Univ.*, ³*RIMED, Osaka Metro. Univ.*) ○Yuma Fukuda,¹ Takuya Ogaki,^{2,3} Fuko Matsumoto,² Yasunori Matsui,^{2,3} Hiroshi Ikeda^{2,3}

We previously reported that the crystals of organoboron complexes **1-R** (Fig. 1) exhibit “excited multimer luminescence”.^{1,2} In this work, we synthesized new organic binuclear boron complexes **2-R** (Fig. 1) with higher molecular symmetry and investigated their crystal structures and fluorescence properties. X-ray crystallographic analysis revealed that a **2-*m*-Me** molecule has a completely planar π -framework (Fig. 2a). In addition, **2-*m*-Me** molecules are arranged with π -stacking of crystallographically-equivalent adjacent four molecules and finally form an “isotropic brickwork structure” (Fig. 2b). Furthermore, **2-*m*-Me** in the crystalline state exhibited yellow fluorescence with a wavelength of 545 nm, which is longer than that (460 nm) of the blue fluorescence of the mononuclear complex **1-*m*-Me**. In the presentation, we will also give the details of the crystal structures and fluorescence properties of other derivatives.

Keywords: Organoboron Complex; Organic Crystal; Fluorescence; X-ray Crystallographic Analysis; Symmetry

我々は以前、有機ホウ素錯体 **1-R** (Fig. 1) の結晶において、三分子以上が関与した励起子に由来する“励起マルチマー発光”発現のためには、高い分子対称性が重要であることを明らかにした^{1,2}。本研究では、より高い分子対称性を有する新規有機二核ホウ素錯体 **2-R** (Fig. 1) を合成し、その結晶構造および蛍光特性を調べた。

X 線結晶構造解析の結果、**2-*m*-Me** の π 骨格は完全平面構造であることがわかった (Fig. 2a)。また、**2-*m*-Me** の分子は結晶学的に等価な隣接四分子と面間距離 3.39 Å で π 積層をした“等方的ブリックワーク構造”を形成していた (Fig. 2b)。さらに、**2-*m*-Me** は結晶状態で黄色蛍光を示し、その波長の 545 nm は単核錯体 **1-*m*-Me** の青色蛍光 460 nm より長波長であった。発表では、他の誘導体の結果についても議論する。

1) Sakai, A.; Tanaka, M.; Matsui, Y.; Ikeda, H. *et al. Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 18128–18137.

2) 松本, 池田ら, 日本化学会第104春季年会(2024)講演予稿集, P2-3am-25, 2024.

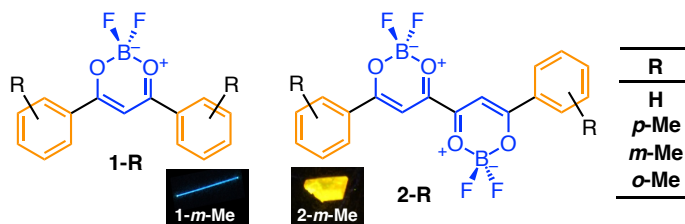


Fig. 1. Molecular structures of **1-R** and **2-R** with photographs of fluorescence of **1-*m*-Me** and **2-*m*-Me** crystals under 365-nm light.

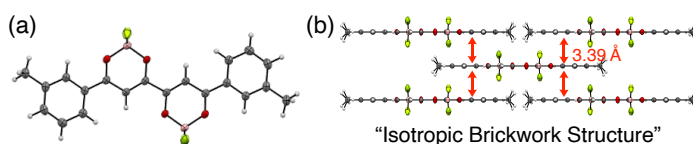


Fig. 2. (a) The molecular geometry and (b) the packing structure of **2-*m*-Me** determined by X-ray crystallographic analysis.