

共役拡張したアミノキシラジカルホウ素錯体の合成と性質

(兵庫県立大院理¹、茨城大院理工²)○黒田 拓真¹、百武 梨紗²、中村 鞠香²、福元 博基²、井上 僚¹、久保 和也¹、吾郷 友宏¹

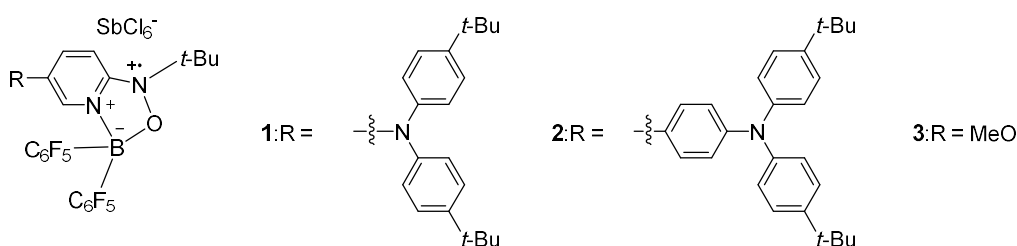
Synthesis and properties of conjugation-extended aminoxyl radical-boron complexes (¹Graduate School of Science, University of Hyogo, ²Graduate School of Science and Engineering, Ibaraki University) ○Takuma Kuroda,¹ Risa Hyakutake,² Marika Nakamura,² Hiroki Fukumoto,² Ryo Inoue,¹ Kazuya Kubo,¹ and Tomohiro Agou¹

Stable open-shell molecules have been paid increasing attention to because of their potential as near-infrared (NIR) dyes. We reported the intense NIR-absorption property of aminoxyl radical-boron complex **1** and **2**.^{1,2} Unpaired electrons of **1** and **2** were delocalized over the aminoxyl radical π -conjugated systems. In this study, we synthesized π -contracted complex **3** to clarify the relationship between the electron-donating groups and the optical properties of the aminoxyl radical complexes.

Keywords : aminoxyl radicals, boron complexation

近年、開殻性化合物を基本構造とした近赤外 (NIR) 色素が新しいタイプの NIR 吸収材料として注目されている¹⁾。我々は以前にアミノキシラジカルホウ素錯体 **1** において NIR-II 吸収を報告しており²⁾、さらにアミノキシラジカル共役系を拡張した錯体 **2** では NIR 吸収の長波長化を見出している³⁾。これらの錯体では、不対電子がアミノキシラジカル共役系に非局在化することを確認している。

本研究では、アミノキシラジカルホウ素錯体の電子状態や光学的性質に及ぼす電子供与基の効果を明らかにするために、弱い電子供与基としてメトキシ基を導入した錯体 **3** を合成した。ESR スペクトル、単結晶 X 線構造解析および量子化学計算に基づいて錯体 **3** における不対電子の非局在化や光学的性質を検討したので報告する。他の電子供与基を有するアミノキシラジカルホウ素錯体の合成と性質についても併せて発表する予定である。



- 1) M. Yano, Y. Inada, Y. Hayashi, M. Nakai, K. Mitsudo, Y. Kashiwagi, *Dyes Pigm.* **2022**, *197*, 109929.
- 2) M. Nakamura, R. Hyakutake, H. Fukumoto, T. Agou *et al.*, *Dalton Trans.* **2022**, *51*, 13675.
- 3) T. Kuroda, M. Nakamura, R. Hyakutake, H. Fukumoto, K. Kubo, R. Inoue, T. Agou *et al.*, *Dalton Trans.* in press.