π共役系を連結した分子内相互作用部位を持つ *o*-カルボラン誘導体の合成と物性評価

（京大院工）○油原 和公・越智 純毅・田中 一生

Synthesis and Physical Properties of *o*-Carborane Derivatives with π-Conjugated Systems Possessing Intramolecular Interaction Sites

(*Graduate School of Engineering, Kyoto University*) ○Kazuhiro Yuhara, Junki Ochi, Kazuo Tanaka

o-Carborane (CB) is an icosahedral carbon and boron cluster compound. CB has three-dimensionally delocalized skeletal electrons derived from boron's three-center two-electron bonds. To obtain unique functions, we have investigated optical and electronic properties of CBs with π-conjugated systems. In this work, we focused on CB's electron deficient carbon atoms and the influence of introducing an intramolecular CH···O interaction site on physical properties was investigated.

Keywords : Carborane; Optical property; Intramolecular interaction

o-カルボラン（CB, Figure 1）は炭素 2 原子とホウ素 10 原子からなる正二十面体型クラスター化合物であり、ホウ素の三中心二電子結合により骨格電子が三次元的に非局在化した特殊な電子状態を有する。我々はπ共役系を連結した CB の特異な発光特性について研究を行ってきた[1,2]。本研究では CB の炭素原子が電子不足であることに着目し、分子の適切な位置に酸素原子を導入することで分子内に CH···O 相互作用部位を持つ CB 誘導体の合成を目指した。

まず **H-OMe**（Figure 2）を合成し、単結晶 X 線構造解析による分析を行った。その結果、単結晶中で分子内 CH···O 相互作用の形成が示唆される構造であるという結果を得た。また発光スペクトルを測定したところ、通常のπ共役系を連結した CB で見られる電荷移動性の発光とは異なり、π共役系の局所励起に由来する発光を示すことが明らかとなった。本発表では分子内相互作用部位の導入とその物性への影響について詳細に報告する。

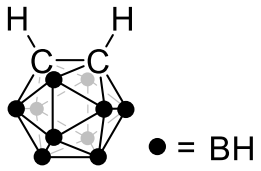

Figure 1. Chemical structure of CB.

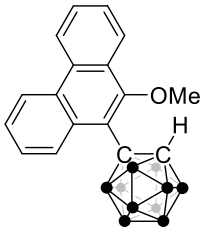

Figure 2. Chemical structure of **H-OMe**.

1) Naito, H.; Nishino, K.; Morisaki, Y.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 254–259. 2) Ochi, J.; Tanaka, K.; Chujo, Y. *Eur. J. Org. Chem.* **2019**, *19*, 2984–2988.

© The Chemical Society of Japan