ジベンゾイルメタンフッ化ホウ素錯体の蛍光性メカノクロミズムに及ぼす置換位置の効果

（信州大教育[1]・信州大院総合理工[2]・阪公大院工[3]）○伊藤 冬樹[1,2]・梶原 佑太[1]・藤本 悠史[2]・伊藤 大智[1]・北川 大地[3]・小畠 誠也[3]
Effects of Substitution Position on Mechanofluorochromism of Dibenzoylmethanato Boron Difluoride Complexes ([1]*Institute of Education, Shinshu University*, [2]*Graduate School of Science and Technology, Shinshu University,* [3]*Graduate School of Engineering, Osaka Metropolitan University*) ○Fuyuki Ito,[1] Yuta Kajihara,[1] Yushi Fujimoto,[2] Daichi Ito,[1] Daichi Kitagawa,[3] Seiya Kobatake[3]

Dibenzoylmethanato boron difluoride complexes (BF_2DBM) have been studied as mechanofluorochromic molecules. The fluorescence color is different between the crystal and amorphous states. The fluorescence and mechanofluorochromic properties of BF_2DBM have been focused on only para-substituted derivatives. The mechanofluorochromic properties strongly relate to the fluorescence properties at each phase, it is expected to the substitution position affects the intermolecular interaction. In this study, we synthesize BF_2DBM derivatives substituted with methoxy groups at ortho- or meta-position and investigate the mechanofluorochromic properties and fluorescence color changes during solvent evaporative crystallization.
Keywords : Dibenzoylmethanato boron difluoride complexes; fluorescence; mechanofluorochromism; Substituent Effects

ジベンゾイルメタンフッ化ホウ素錯体（BF_2DBM）は，摩砕などによる機械的刺激により蛍光色変化する蛍光性メカノクロミズムを示す分子として研究されてきている．これまでに，両端のフェニル基のパラ位置換した誘導体に着目されてきており，オルト位やメタ位に置換基をもつ BF_2DBM に関する知見は限られている．本研究では，オルト位やメタ位をメトキシ基置換した BF_2DBM をそれぞれ合成し，蛍光特性に及ぼす置換位置の効果を検討した．

図1は，対象としたBF_2DBM誘導体（*o*-，*m*-，および*p*-a2bBF_2）の構造である．*o*-および *m*-a2bBF_2 の粉末は，緑色蛍光を示し，メカノクロミック特性は示さなかった．一方，*p*-a2bBF_2粉末は，シアン色蛍光を示し，摩砕により橙色蛍光へと変化した．そこで，単結晶X線構造解析に基づき，分子積層様式について検討した．特に *p*-a2bBF_2 は，単位格子中での分子間距離は *o*-および *m*-a2bBF_2 と比較して大きく，単量体的な状態として積層している．さらに，単位格子中の分子同士では，head-to-tail 型の二量体を形成しやすい構造であると考えられる．つまり，*p*-a2bBF_2は摩砕によりJ会合体を形成し，蛍光性メカノクロミズムを示したと考えられる．さらに，溶媒蒸発結晶化過程における蛍光変化との関係について議論する．

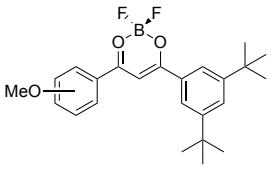

図1 *o*-，*m*-，および*p*-a2bBF_2の分子構造．

1) J.-X. Wang, Y.-S. Yu, L.-Y. Niu, B. Zou, K. Wang, Q.-Z. Yang, *Chem. Commun.*, **2020**, *56*, 6269.

© The Chemical Society of Japan