

## らせん型円偏光発光性キラルホウ素錯体の合成

(日大院生産工<sup>1</sup>・近大院総理工<sup>2</sup>・日大生産工<sup>3</sup>) ○渡邊 伸安<sup>1</sup>・北原 真穂<sup>2</sup>・今井 喜胤<sup>2</sup>・池下 雅広<sup>3</sup>・津野 孝<sup>3</sup>

Synthesis of Helically Chiral-Boron Complexes with Circularly Polarized Luminescence (<sup>1</sup>Graduate School of Industrial Technology, Nihon University, <sup>2</sup>Graduate School of Science and Engineering, Kindai University, <sup>3</sup>College of Industrial Technology, Nihon University)

○Shinya Watanabe,<sup>1</sup> Maho Kitahara,<sup>2</sup> Yoshitane Imai,<sup>2</sup> Masahiro Ikeshita,<sup>3</sup> Takashi Tsuno<sup>3</sup>

Helically chiral-boron complexes (*S*)- and (*R*)-**1** were synthesized and investigated their photophysical properties. The molecular structures of the complexes were determined by X-ray diffraction (XRD) analysis, and unidirectional helical structures of (*S,M*) and (*R,P*) were observed. Circularly polarized luminescence (CPL) of **1** shows that the  $g_{lum}$  ( $2.6 \times 10^{-3}$ ) in the KBr-dispersed pellet state is a higher value comparison with that in the dilute  $CH_2Cl_2$  solution state ( $1.1 \times 10^{-3}$ ). Density functional theory (DFT) and time dependent (TD)-DFT calculations revealed that the key factor for increase in  $g_{lum}$  value is the fixation of the helical structure in the solid state.

**Keywords** : Boron Complex; Circularly Polarized Luminescence; Circular Dichroism; Helical Structure

円偏光発光 (CPL : Circularly Polarized Luminescence) は、キラルな色素が示し得る発光特性であり、三次元ディスプレイなどへの応用を期待して近年注目を集めている。我々の研究グループは、キラルシッフ塩基配位子を有するホウ素錯体を合成し、配位子の $\pi$ 共役系の拡張に基づくマルチカラーCPLの発現を達成した<sup>1)</sup>。本講演では動的制御によるCPLの向上を目指した[4]ヘリセン骨格を有するらせん型ホウ素錯体**1**の合成し (Fig. 1)、それら錯体の希薄溶液および固体状態におけるCPL結果について報告する。

VT-<sup>1</sup>H NMR は、(*S*)-**1** がジアステレオマーの関係にある(*S,M*)-および(*S,P*)-体の存在を示し、室温においてそれらジアステレオマー間で早いらせん反転を受けていることを明らかにした。一方、 $CH_2Cl_2/EtOH$  より得た**1**の単結晶X線構造解析は、(*S*)-**1** が(*S,M*)-体、(*R*)-**1** が(*R,P*)-体として晶析していることを示した。**1** は、 $CH_2Cl_2$  溶液中ならびに KBr 分散ペレット中にて CPL (Fig. 2) を発現し、異方性因子 ( $g_{lum}$ ) はそれぞれ  $1.1 \times 10^{-3}$ 、 $2.6 \times 10^{-3}$  であった。KBr 分散ペレット中の  $g_{lum}$  値が溶液状態と比べて 2 倍ほど向上した結果は、**1** の[4]ヘリセン骨格の動的制御が達成されていることを示唆する。

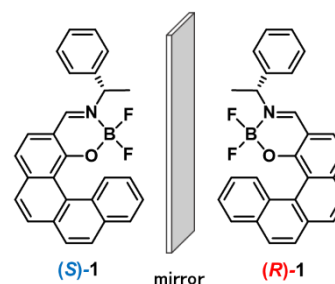


Fig. 1 Structures of (*S*)- and (*R*)-**1**.

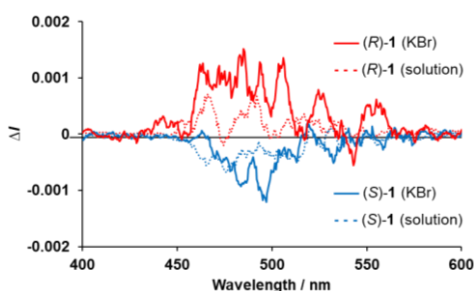


Fig. 2 CPL spectra of (*S*)- and (*R*)-**1** in the KBr-dispersed pellet state and in  $CH_2Cl_2$  solution state ( $2.0 \times 10^{-4}$  M).

1) M. Ikeshita, Y. Imai, T. Tsuno, *et al. Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 15502.