

種々のヨードフェニル基を有する有機ボロン錯体の室温りん光特性と結晶構造

(阪府大工¹・阪府大院工²・阪府大 RIMED³・リガク⁴) ○舩見笙¹・大垣拓也^{2,3}・酒井敦史²・阿利拓夢²・松井康哲^{2,3}・佐藤寛泰⁴・太田英輔^{2,3}・池田浩^{2,3}

Room-temperature Phosphorescence Properties and Crystal Structures of Organoboron Complexes with Various Iodophenyl Groups (¹Col. Eng., Osaka Pref. Univ., ²Grad. Sch. Eng., Osaka Pref. Univ., ³RIMED, Osaka Pref. Univ., ⁴Rigaku) ○Sho Masumi,¹ Takuya Ogaki,^{2,3} Atsushi Sakai,² Takumu Ari,² Yasunori Matsui,^{2,3} Hiroyasu Sato,⁴ Eisuke Ohta,^{2,3} Hiroshi Ikeda^{2,3}

We have previously reported that an organoboron complex with *p*-iodophenyl groups (*p*-**1**, Fig. 1) exhibits room-temperature phosphorescence (RTP) in crystals.¹ In this work, we newly synthesized the *m*- and *o*-iodo-derivatives (*m*-**1** and *o*-**1**) and investigated the effects of iodo-substituted positions on RTP properties in crystals. As a result of evaluation of the photoluminescence properties in the crystal at room temperature and 77 K, revealed that *p*-**1** shows the most efficient RTP. In the crystal, *p*-**1** has a *B-on-D* structure in which a benzene ring (*B* ring) and a dioxaborinine ring (*D* ring) were continuously overlapped (Fig. 2a), forming a rigid crystal structure. On the other hand, *m*-**1** and *o*-**1** form a *B-on-B* structure in which *B* rings overlap each other, instead of the *B-on-D* structure (Figs. 2b and 2c). It was suggested that the difference in crystal structure is one of factors in determining the efficiency of RTP.

Keywords : Iodine; Room-temperature Phosphorescence; Heavy-atom Effects; Crystal Structure; Intermolecular Interaction

我々は以前、*p*-ヨードフェニル基を有する有機ボロン錯体 (*p*-**1**, Fig. 1) が、結晶中で室温りん光を示すことを報告した¹。本研究では、*m*-および *o*-ヨード体 (*m*-**1** および *o*-**1**) を新たに合成し、これらの結晶中での室温りん光特性に対するヨード置換位置の効果を検討した。室温および 77 K における結晶中での発光特性を評価した結果、*p*-**1** が最も効率よく室温りん光を示した。結晶中において *p*-**1** は、ベンゼン環 (*B* 環) とジオキサボリニン環 (*D* 環) が連続的に重なった *B-on-D* 構造を取り (Fig. 2a), 強固な結晶構造を形成していた。一方、*m*-**1** および *o*-**1** では *B-on-D* 構造の代わりに *B* 環同士が重なった *B-on-B* 構造を形成していた (Fig. 2b,c) これらの結晶構造の違いが室温りん光の効率を決定する要因になることが示唆された。

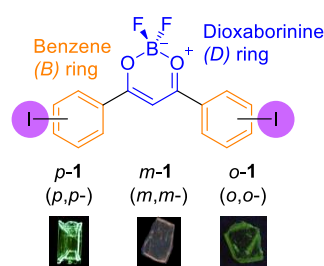


Fig. 1. Structures of organoboron complexes with iodophenyl groups.

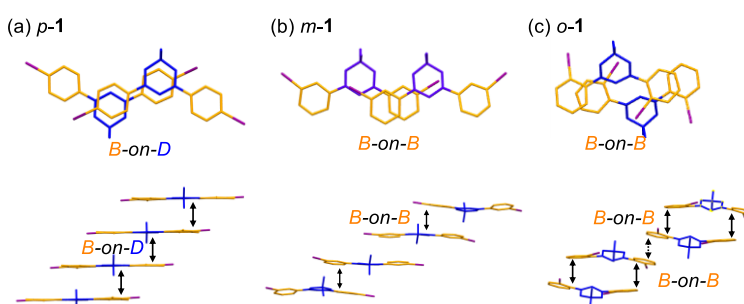


Fig. 2. Packing structures of (a) *p*-**1**, (b) *m*-**1**, and (c) *o*-**1**.

(1) Sakai A.; Ikeda H. *et al. ChemPhysChem* **2016**, 17, 4033–4036.