

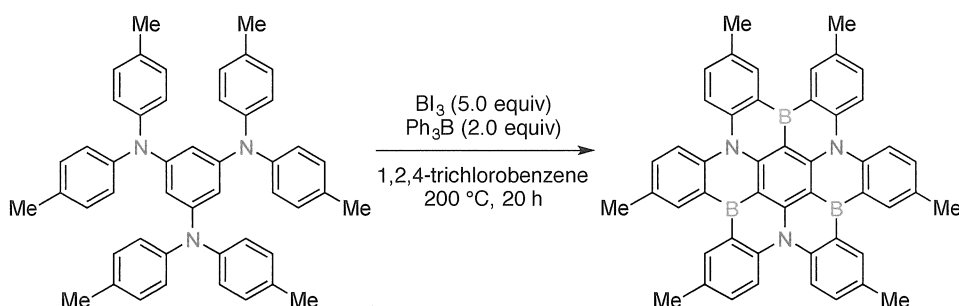
研究 成果 報 告 書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

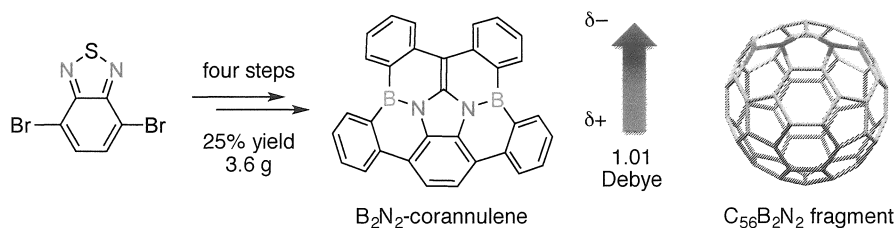
研究テーマ (和文) AB	ボラ Friedel-Crafts 反応による含ホウ素 π 共役ポリマーの合成と機能開拓				
研究テーマ (欧文) AZ	Synthesis of boron-containing π -conjugated polymers via bora-Friedel-Crafts reaction and their applications				
研究氏 代 表 名 者	カナ字 CC	姓)	名)	研究期間 B	2017 ~ 2018 年
	漢字 CB	畠山	琢次	報告年度 YR	2018 年
	ローマ字 CZ	Hatakeyama	Takuji	研究機関名	関西学院大学
研究代表者 CD 所属機関・職名	理工学部・教授				

概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)

タンデムボラ Friedel-Crafts 反応におけるホウ素化剤、添加剤、溶媒、反応条件を精査することで、位置選択的かつ効率的な多重 C-H ホウ素化反応の開発を行った。これにより、トリアリールアミン類に対して、最大 4 個のホウ素原子を高選択的に導入することが可能となった。得られたホウ素と窒素を有するナノグラフェンは、一重項励起エネルギーと三重項励起エネルギーの差が小さく、色純度の高い青色蛍光を示すことから、熱活性化遅延蛍光材料として有用であることが明らかとなった。



ホウ素と窒素を有するフラレン ($C_{56}B_2N_2$) の部分構造に相当する含 B_2N_2 コランニュレンのタンデムボラ Friedel-Crafts 反応によるグラムスケール合成を行った。含 B_2N_2 コランニュレンは、その炭素類縁体であるコランニュレンよりも浅いお椀構造をとっていた。その結果、コランニュレンがお椀の凹面から凸面への垂直方向に双極子モーメントを持つものに対して、含 B_2N_2 コランニュレンは、お椀に対して水平方向に双極子モーメントを持つ。結晶中では、それぞれの分子は、お椀の凸面同士と凹面同士での π - π 相互作用交互に繰り返しながら、水平方向に規則的にずれた一次元のスリップスタック構造を形成して積層していた。本化合物は、BN 結合に起因して比較的大きな遷移双極子モーメントを有しており、有機 EL 素子の青色蛍光材料として有用であることを明らかとした。



キーワード FA	Friedel-Crafts 反応	π 共役ポリマー	ナノグラフェン	コランニュレン
----------	-------------------	--------------	---------	---------

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA									
研究機関番号 AC					シート番号									

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）										
雑誌	論文標題 ^{GB}	One-shot Multiple Borylation toward BN-Doped Nanographenes								
	著者名 ^{GA}	T. Hatakeyama, et al.	雑誌名 ^{GC}	J. Am. Chem. Soc.						
	ページ ^{GF}	1195~1198	発行年 ^{GE}	2	0	1	8	巻号 ^{GD}	140	
雑誌	論文標題 ^{GB}	Four-Step Synthesis of B ₂ N ₂ -embedded Corannulene								
	著者名 ^{GA}	T. Hatakeyama, et al.	雑誌名 ^{GC}	J. Am. Chem. Soc.						
	ページ ^{GF}	13562~13565	発行年 ^{GE}	2	0	1	8	巻号 ^{GD}	140	
雑誌	論文標題 ^{GB}	Tetracoordinate Boron-Fused Double [5]Helicenes as Cathode Active Materials for Lithium Batteries								
	著者名 ^{GA}	T. Hatakeyama, et al.	雑誌名 ^{GC}	Org. Lett.						
	ページ ^{GF}	1770~1773	発行年 ^{GE}	2	0	1	9	巻号 ^{GD}	21	
図書	著者名 ^{HA}									
	書名 ^{HC}									
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}		
図書	著者名 ^{HA}									
	書名 ^{HC}									
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}		

欧文概要^{EZ}

By screening the borylation agents, additives, solvents, and reaction conditions in the tandem bora-Friedel-Crafts reaction, we have developed regioselective and efficient multiple C-H boration reactions. This makes it possible to introduce up to 4 boron atoms to triaryl amines in a highly selective manner. The obtained nanographene having boron and nitrogen has a small energy gap between singlet and triplet excited states and exhibits blue thermally activated delayed fluorescence with high color purity and enable us to fabricate highly an organic EL device.

Gram-scale synthesis was carried out B₂N₂-corannulene, one of the substructure molecules of fullerene (C₅₆B₂N₂) having boron and nitrogen. B₂N₂-corannulene has a bowl structure shallower than its carbon analogue corannulene. As a result, B₂N₂ corannulene has a dipole moment in the horizontal direction, while corannulene has a dipole moment in the vertical direction from the concave surface to the convex surface. In the crystal, each molecule was stacked by forming a one-dimensional slip stack structure regularly shifted in the horizontal direction while alternately repeating the π - π interaction between convex faces and concave faces of the bowl. This compound has a relatively large transition dipole moment due to BN bonding, and is useful as a blue fluorescent material of an organic EL device.