

新規元素置換ペンタレン誘導体の合成および性質

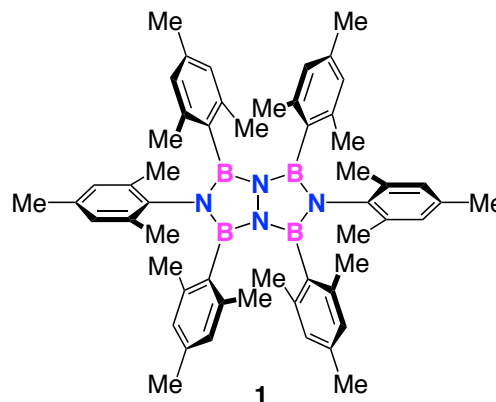
(東工大化生研¹・早稲田大理工学術院²・コニカミノルタ³・慶大理工⁴) ○菓子田 惇輝¹・庄子良晃¹・五十幡 康弘²・高 秀雄³・酒井 隼人⁴・羽曾部 卓⁴・中井 浩巳²・福島 孝典¹

Synthesis and Properties of a New Element-Substituted Pentalene Derivative (¹Laboratory for Chemistry and Life Science, Tokyo Institute of Technology; ²Research Institute for Science and Engineering, Waseda University; ³Konica Minolta; ⁴Department of Chemistry, Faculty of Science and Technology, Keio University) ○Junki Kashida,¹ Yoshiaki Shoji,¹ Yasuhiro Ikabata,² Hideo Taka,³ Hayato Sakai,⁴ Taku Hasobe,⁴ Hiromi Nakai,² Takanori Fukushima¹

Element-substitution, *e.g.*, the replacement of C–C bonds with isoelectronic but polar B–N bonds, can endow π -conjugated molecules with new electronic and opto-electronic properties.^[1] We recently demonstrated that an element-substituted cyclobutadiene (CBD) derivative, in which its C–C bonds are replaced by B–N bonds, displays unique excited-state properties.^[2] Here we report the synthesis of a new element-substituted BN-pentalene derivative (**1**) and its detailed molecular structure revealed by single-crystal X-ray crystallography. Similar to the case of the element-substituted CBD, **1** can emit high-energy phosphorescence from a T₁ state. We also show the fabrication and properties of OLED devices using **1** as a host material.

Keywords : BN-Containing π -Conjugated Molecule; Element Substitution; Pentalene; Phosphorescence; Host Material

π 電子系化合物の炭素–炭素 (C–C) 結合を、等電子的かつ分極したホウ素–窒素 (B–N) 結合に置き換える元素置換は、新たな電子・光電子物性を実現させるための有効なアプローチである^[1]。我々は最近、C–C 結合を B–N 結合に置換したシクロブタジエン誘導体の特異な励起状態特性を示すことを報告している^[2]。今回、同様の元素置換により、新規 BN ペンタレン誘導体 (**1**) を合成し、単結晶 X 線構造解析により分子構造の詳細を明らかにした。また **1** が、無機 CBD と同様に、エネルギーの高い T₁ 状態からの燐光発光を示すことを見出した。本発表では、**1** の分子・電子構造の詳細とともに、**1** をホスト材料として用いた OLED 素子の特性についても報告する。



[1] a) P. G. Campbell, A. J. V. Marwitz, S.-Y. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 6074. b) Z. X. Giustra, S.-Y. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 1184.

[2] (a) 庄子良晃, Ryzhii Ivan, 五十幡康弘, 王祺, 中井浩巳, 生駒忠昭, 福島孝典 日本化学会第 99 春季年会, 3H1-49. (b) Ryzhii Ivan, 庄子良晃, 三浦智明, 福島孝典, 生駒忠昭 日本化学会第 99 春季年会, 3H1-51.