

## C<sub>3</sub>キラルなトルキセン類の蛍光およびリン光における優れた円偏光発光特性の理論解析とデバイス応用

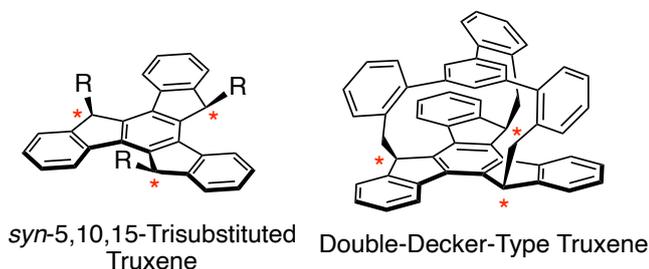
(阪大院工<sup>1</sup>・京大化研<sup>2</sup>) ○石割 文崇<sup>1</sup>、大峰 拓也<sup>1</sup>、廣瀬 崇至<sup>2</sup>、森 直<sup>1</sup>、相澤 直矢<sup>1</sup>、佐伯 昭紀<sup>1</sup>

Theoretical Analysis and Device Application of C<sub>3</sub>-Chiral Truxenes Showing an Excellent Circularly Polarized Luminescence Property on Fluorescence and Phosphorescence (<sup>1</sup>Graduate School of Engineering, Osaka University, <sup>2</sup>Institute for Chemical Research, Kyoto University) ○Fumitaka Ishiwari<sup>1</sup>, Takuya Omine<sup>1</sup>, Takashi Hirose<sup>2</sup>, Tadashi Mori<sup>1</sup>, Naoya Aizawa<sup>1</sup>, Akinori Saeki<sup>1</sup>

We show that C<sub>3</sub>-chiral truxenes exhibit excellent CPL with dissymmetric factor (*g* value) of the order of 10<sup>-2</sup>. Vibrational calculations and variable-temperature CPL measurements suggested that molecular vibrations dramatically lower the *g* value of CPL. Furthermore, at low temperature, C<sub>3</sub>-chiral trimethyltruxene exhibits long-lifetime and strong phosphorescent CPL. A conformationally rigid double-decker-type truxene with thermally robust CPL properties at high temperature was applied as an emitter of electroluminescence devices exhibiting circularly polarized electroluminescence with a high *g* value. In the presentation, we will show the theoretical analysis on the CPL properties of C<sub>3</sub>-chiral truxenes and device application.

**Keywords** : Circularly Polarized Luminescence, Truxenes, Molecular Vibration, Phosphorescence, OLED

5,10,15 位に *syn* の立体配置で置換基を有するトルキセン類は、 $\pi$  電子系に直結した三つの不斉炭素原子を有する C<sub>3</sub>キラル分子である (図)。この種のトルキセン類は簡便な合成方法が確立されており多くの合成の報告例があるものの<sup>1,2</sup>、意外にもこれまでにその不斉に関しては一切注目されておらず、光学分割の例もなかった。最近我々は、その光学活性体を初めて単離し、C<sub>3</sub>キラルトルキセン類が高い異方性因子 (*g* 値 =  $1.6 \times 10^{-2}$ ) を示す優れた円偏光発光 (CPL) 特性を示すことを発見した。理論計算と極低温領域の温度可変 CPL 測定から、分子振動が *g* 値を大幅に低下させる可能性が示唆され、5,10,15 位の置換基を連結したより剛直なダブルデッカー型トルキセン<sup>2</sup>は、室温下でさらに高い *g* 値 ( $2.2 \times 10^{-2}$ ) を示すことを見出した。加えて、トルキセン類は 77 K 程度の低温状態において長波長側にリン光を示すが、ある誘導体はこのリン光に由来する CPL を示した。発表では、前述の実験と理論計算の詳細に加え、このリン光 CPL に対する理論的解釈、およびデバイス応用について述べる予定である。



- 1) M. Echavarren *et al.*, *Acc. Chem. Res.*, **2019**, 52, 1812.
- 2) M. Echavarren *et al.*, *Chem. Eur. J.*, **2002**, 8, 2879.