

時間分解 EPR 法による熱活性化遅延蛍光分子の励起状態の解析

(神戸大院理¹・京大化研²・神戸大分子フォト³) ○勝平 譲治¹・日下部 悠²・和田 啓幹²・菅野 奈都子²・Yongxia Ren²・梶 弘典²・小堀 康博^{1,3}

Time resolved EPR study on the excited states of a thermally activated delayed fluorescence molecule (¹Grad. Sch. Sci., Kobe Univ., ²Inst. Chem. Res., Kyoto Univ., ³Mol. Photosci. Res. Center, Kobe Univ.) ○Joji Katsuhira,¹ Yu Kusakabe,² Yoshimasa Wada,² Natsuko Kanno,² Yongxia Ren,² Hironori Kaji,² Yasuhiro Kobori^{1,3}

In organic light emitting diodes, thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials, which convert non-emissive triplets to emissive singlets through the reverse intersystem crossing, is drawing much attraction. Here, we observed the excited triplet states generated by light irradiation using time resolved EPR method to analyze processes of spin conversion on MA-TA[1,2] (Fig. 1), which verifies the electronic structure of the excited states related to the reverse intersystem crossing and its spin sublevel dynamics. Analysis of light polarization effect on the EPR spectrum elucidated that the main principal axis (Z') of the zero-field splitting (ZFS) interaction of the excited triplet states was perpendicular to a molecular long axis, and that the dipolar coupling constant was positive. This suggests an importance of the spin-orbit coupling on the ZFS parameters.

Keywords : Organic Light Emitting Diodes; Time Resolved EPR; Thermally Activated Delayed Fluorescence

有機発光ダイオード (OLED) において、逆項間交差を利用して非発光性の三重項を発光性の一重項に変換する熱活性化遅延蛍光 (TADF) 材料が注目されている。本研究では、逆項間交差にかかわる励起状態の電子構造とそれに基づくスピン副準位ダイナミクスの解明を目的とし、TADF を示すアクリジン-トリアジン連結系分子の一つである MA-TA [1,2] (Fig. 1) を対象とし、時間分解 EPR (TREPR) 法を用いて光照射直後に生成する励起状態の観測とスピン変換過程の解析を行った。

偏光依存性を考慮した TREPR スペクトルの解析から、励起三重項のゼロ磁場分裂相互作用テンソルの最大主値を示す主軸は分子長軸方向と直交しており、アクリダンやトリアジンの電子軌道によるスピン軌道相互作用による重要性が示唆された。

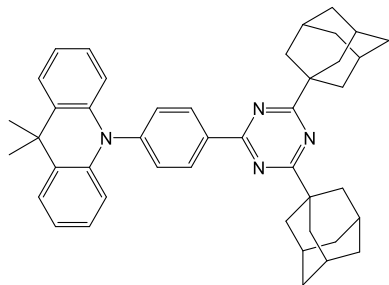


Figure 1. Structural formula of MA-TA.

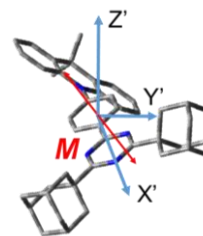


Figure 2. Principle axis of ZFS tensor and transition dipole moment (M).

1) Y. Wada et al, Adv. Mater. 2018, 30, 1705641. 2) Y. Wada et al, ChemPhysChem 2021, 22, 625–632.