

カルバゾールを電子ドナー、ジベンゾフェナジンを電子アクセプター、キサントレンを π -リンカーとする D- π -A- π -D 分子の合成と物性

(阪大工¹・阪大院工²) ○青田 奈恵¹・武田 洋平²・南方 聖司²

Synthesis and Physicochemical Properties of D- π -A- π -D Compound Having Carbazole as the Electron Donor, Dibenzophenazine as the Acceptor, and Xanthene as the π -Linker (¹*School of Engineering and* ²*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Nae Aota,¹ Youhei Takeda,² Satoshi Minakata²

Highly twisted electron donor-acceptor (D-A) compounds that are composed of a D and an A and directly linked through a σ bond exhibit through-bond charge transfer (TBCT). Since spatial separation of the HOMO and LUMO of a highly twisted D-A compound allows for a small singlet-triplet energy splitting, thermally activated delayed fluorescence (TADF) can be radiated via the reverse intersystem crossing, and therefore, twisted D-A compounds have been widely studied as OLED emitters. However, the rotation and the vibration around σ bond causes non-radiative decay from the excited state. In contrast, D- π -A type compounds that are composed of a D and an A which are linked through a π -linker show through-space charge transfer (TSCT). In addition to the spatial separation of the HOMO and LUMO, a rigid D/A stacked conformation would suppress non-radiative decay, and therefore, the emission efficiencies would be enhanced. With the aim of developing efficient TADF molecules, herein we report the design, synthesis, and properties of a novel TSCT type D- π -A- π -D compound that comprises of carbazole as the Ds, dibenzophenazine as the A, and xanthene as the π -linker.

Keywords : *Through Space; Charge Transfer; Intersystem Crossing; Donor-Acceptor; Luminescence*

電子ドナー (D) と電子アクセプター (A) が大きなねじれ角で直接連結した D-A 分子は σ 結合を介して電荷移動 (through-bond charge transfer : TBCT) できる。D-A 分子では、HOMO と LUMO が空間的に分離されることで励起一重項状態と励起三重項状態のエネルギー差は小さく、逆項間交差を経た熱活性化遅延蛍光 (thermally activated delayed fluorescence : TADF) を示すことから、OLED 材料として広く研究されてきた。しかし、TBCT 型の D-A 分子では、 σ 結合を軸とした回転や振動により、励起状態の熱失活が起こりやすい。これに対して、D と A が π -リンカーを介して連結した D- π -A 型分子は、分子内の π 空間を介して電荷移動 (through-space charge transfer : TSCT) できるため、HOMO と LUMO の空間的分離に加えて、D \cdots A 間の相互作用によって重なり配座で固定されることで、熱失活の抑制による発光量子収率の向上が期待できる。以上の背景から、本研究では高効率な TADF 分子の創製を目指し、カルバゾール誘導体を D、独自に開発したジベンゾフェナジンを A とし、これらをキサントレンで連結した TSCT 型の新規 D- π -A- π -D 分子を設計・合成し、物性を調査した。

