

トリアジンコアカルバゾール dendrimer の輻射・無輻射遷移における振電相互作用

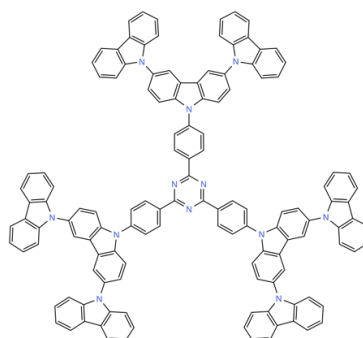
(京大福井セ¹・京大工²・京大院工³・九大院総理工⁴・九大先導研⁵) ○若林 未己^{1,2}・大田 航^{1,3}・安楽 滉允⁴・アルブレヒト 建⁵・佐藤 徹^{1,3}

Vibronic Coupling in Radiative and Nonradiative Transitions of Triazine-Cored Carbazole Dendrimers (¹*Fukui Institute for Fundamental Chemistry, Kyoto Univ.*, ²*Faculty of Engineering, Kyoto Univ.*, ³*Graduate School of Engineering, Kyoto Univ.*, ⁴*Interdisciplinary Graduate School of Engineering Sciences, Kyushu Univ.*, ⁵*Institute for Materials Chemistry and Engineering, Kyushu Univ.*) ○Mio Wakabayashi,^{1,2} Wataru Ota,^{1,3} Kosuke Anraku,⁴ Ken Albrecht,⁵ Tohru Sato^{1,3}

Triazine-cored carbazole dendrimers, which show thermally activated delayed fluorescence, are used as luminescent materials for light-emitting electrochemical cell. A theoretical understanding of photophysical processes for luminescent materials is important in molecular design because quantum efficiency depends on the radiative and nonradiative transition rate constants. In this study, we used triazine-cored carbazole dendrimers to theoretically investigate vibronic structures that contribute to the photophysical processes. The density functional theory calculations were performed at the M06-2X/3-21G level of theory, using Gaussian 16 Revision C.01. The calculated fluorescence spectrum well reproduced the lineshape of the experimental spectrum.

Keywords : *Light-Emitting Electrochemical Cell; Vibronic Coupling; Nonradiative Transition; Intersystem Crossing; Dendrimer*

トリアジンコアカルバゾール dendrimer は熱活性型遅延蛍光を示し、電気化学発光セルの発光材料として検討されている¹⁾²⁾。量子収率は輻射・無輻射遷移速度定数に依存するため、光物理過程の理論的理解は分子設計において重要である。本研究では、トリアジンコアカルバゾール dendrimer を用いて、光物理過程に寄与する振電構造を理論的に特定した。計算は密度汎関数理論に基づき、計算方法は M06-2X/3-21G、プログラムは Gaussian 16 Revision C.01 を用いた。計算による蛍光スペクトルは実験スペクトルの線形を再現した。



- 1) L. M. Cavinato *et al.*, *Adv. Funct. Mater.* **2023**, 33, 2302483.
- 2) K. Albrecht *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 5677.