

# 高配向 TADF 分子膜の分子レベル構造計測

Molecular resolved structural measurement of highly ordered TADF thin film

筑波大数理<sup>1</sup>, 産総研<sup>2</sup>, 九州大 OPERA<sup>3</sup>

○長谷川友里<sup>1</sup>, 山田洋一<sup>1</sup>, 細貝拓也<sup>2</sup>, 佐々木正洋<sup>1</sup>, 中野谷一<sup>3</sup>, 安達千波矢<sup>3</sup>

Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, AIST<sup>2</sup>, Kyushu Univ. OPERA<sup>3</sup>

Y. Hasegawa<sup>1</sup>, Y. Yamada<sup>1</sup>, T. Hosokai<sup>2</sup>, M. Sasaki<sup>1</sup>, H. Nakanotani<sup>3</sup>, C. Adachi<sup>3</sup>

E-mail: yurihase.2121@gmail.com

**背景** 近年、精密な分子設計により、100%の内部量子効率での蛍光発光が可能となる熱活性型遅延蛍光(TADF)分子が開発され、次世代有機 EL 材料として注目されている。これらの分子を用いた高効率デバイスを実現する上で、その光取り出し効率の向上が鍵となる。有機 EL 分子は一般に複雑な分子骨格を持つために非晶質化することが多く、遷移双極子の方向を制御することが困難であり、これまで十分な光取り出し効率を得られていない。本研究では、高い内部量子効率を示す TADF 分子である 4 CzIPN を用いて高配向、高秩序な薄膜を作製することで、次世代高効率有機 EL 材料の実現を目指している。今回は、金属表面上に作製した完全配向単分子層の構造と電子状態を評価した結果について報告する。

**実験** 高配向な秩序膜を作製するため、基板には原子レベルで平坦であり不活性な Ag(111)表面を用いた。分子膜は真空蒸着により作製した。分子膜の構造は走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて計測した。電子状態は、光電子分光法 (UPS) および X 線吸収分光 (NEAFS) を用いて計測し、計測には PF BL13B を利用した。実験は全て超高真空中、基板の温度は室温で行った。

**結果と考察** 図 1 に 4CzIPN 単分子膜の STM 像を示す。4CzIPN は、Ag(111)基板上に均一な配列の分子膜を形成した。この構造において、すべての分子は平面吸着しており、遷移双極子の方向は一樣であると考えられる。同様の秩序構造は幾つかの別の表面においても観察されたことから、構造形成における基板の影響は小さいことが示唆される。

次に UPS により、単分子膜と厚膜の電子状態を計測したところ、両者の価電子帯に大きな違いはないことが分かった (図 2(a))。UPS スペクトルは、DFT 計算による孤立分子の電子状態と比較しても大きな違いがないことから、これらの膜において 4CzIPN の分子軌道は大きく変調されてはいないことが示唆された。一方 NEXAFS においても DFT 計算の結果と近いスペクトルが得られたことから、非占有軌道も孤立分子に近い状態であることが示唆された (図 2(b))。秩序形成や基板の効果による電子状態の変調がないことは、これらの膜中で分子は設計どおりの TADF 特性を維持していることを示唆する。

さらに、同様の高配向膜は類似の分子骨格を有する 2 CzIPN および 5 CzBN などの TADF 材料においても観察され、これらの

TADF 分子群は高配向秩序膜を形成しやすい可能性が示唆された。これらの高配向膜は、高効率発光材料としてだけでなく、高効率なエネルギーおよび電荷輸送性を有するホスト膜としても期待できる。

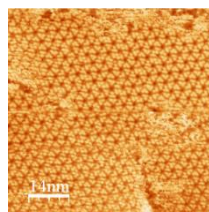


図 1 4 CzIPN の STM 像

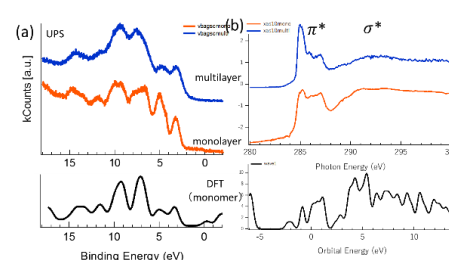


図 2 4 CzIPN/Ag(111)の (a) 占有軌道および (b) 非占有軌道の電子状態