

平面構造を有する新規 TADF 分子の設計と光電子物性

New TADF Design with Coplanar Structures and Their Optoelectronic Properties

九州大¹, JST ERATO², Georgia Tech³, WPI-I2CNER⁴ °土屋 陽一^{1,2}, (M1)石川 悠真¹, Xiankai Chen³,
Jane-Luc Bredas³, 安達 千波矢^{1,2,4}

Kyushu Univ.¹, JST ERATO², Georgia Tech³, WPI-I2CNER², °Youichi Tsuchiya^{1,2}, Yuma Ishikawa¹,
Xiankai Chen³, Jean-Luc Bredas³, Chihaya Adachi^{1,2,4}

E-mail: tsuchiya@opera.kyushu-u.ac.jp

E型遅延蛍光として知られる熱活性遅延蛍光 (TADF) を示す発光材料は、小さな一重項-三重項エネルギーギャップ (ΔE_{ST}) を有し、室温程度の小さな熱エネルギーで、逆項間交差を起こす。そのため、電流励起下で生成する励起子の全てを蛍光として取り出すことができる。従来の TADF 性分子は小さな ΔE_{ST} を達成するために魚山らの示した分子設計に基づいて開発されてきた。[1] 具体的には電子ドナー部と電子アクセプター部を連結した分子において両者の二面角を大きくすることで共役を制限し、最高被占軌道 (HOMO) と最低空軌道 (LUMO) の軌道の重なりを小さくすると、 ΔE_{ST} の小さな発光分子が得られる。この場合、振動子強度が小さく、すなわち発光量子収率 (PLQY) が低くなりやすい。

今回、我々は量子化学計算の結果に基づいて、小さな ΔE_{ST} と大きな振動子強度を有する電子ドナー部と電子アクセプター部が平面に位置する TADF 分子の設計を行った。ドナー部位として平面性の高いアザトリアンギュレンをアクセプター部位としてジフェニルトリアジンを用いた HMAT-TRZ は、一重項と三重項励起状態でドナー・アクセプター間の構造変化が小さく、また、励起状態の軌道の変化も極めて小さい (図 1)。[2] 本講演では平面 TADF 分子の設計及び HMAT-TRZ の光電子物性について述べる。

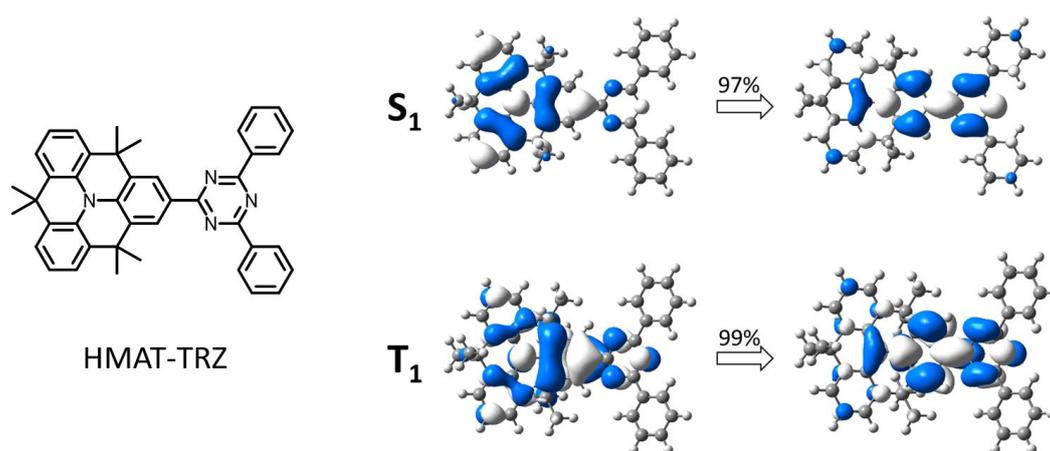


図 1. HMAT-TRZ の構造及び量子化学計算 (LC- ω PBE/6-31G(d)) による一重項 (S_1) / 三重項 (T_1) 状態の自然遷移軌道 (NTO)。

[1] H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura and C. Adachi, *Nature* **2012**, 492, 234–238.

[2] X. Chen, Y. Tsuchiya, Y. Ishikawa, C. Zhong, C. Adachi, and J.-L. Brédas, (*submitted*).