

高平面・縮環構造の熱活性化遅延蛍光材料を導出可能な新規分子設計

A novel molecular design strategy for thermally activated delayed fluorescence materials with planar fused-ring system

○ 儘田 正史^{1, 2}, 稲田 工^{1, 2}, 小簗 剛^{1, 2}, 中野谷 一^{1, 2}, 安達 千波矢^{1, 2, 3} (1. 九大 OPERA, 2. JST, ERATO, 3. WPI-I2CNER)

○ Masashi Mamada^{1, 2}, Ko Inada^{1, 2}, Takeshi Komino^{1, 2}, Hajime Nakanotani^{1, 2}, Chihaya Adachi^{1, 2, 3}
(1. OPERA, Kyushu Univ., 2. JST, ERATO, 3. WPI-I2CNER)

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

熱活性化遅延蛍光(TADF)材料は、レアメタルフリーで 100%の内部 EL 量子効率を達成可能なことから、近年大きな注目を集めている[1]。TADF を示す材料は、古くから芳香族ケトン類やフラーレン誘導体などが知られているが、これらは PL 量子収率が低いことから有機 EL の発光材料としては実用的ではなかった。一方、ドナーアクセプター(D-A)ユニットを用いた電荷移動(CT)型の分子設計により、高い PL 量子収率を維持しながら励起一重項と三重項状態間のエネルギーギャップ(ΔE_{ST})を小さくでき、多くの TADF 材料とそれらを用いた高効率有機 EL デバイスが報告されてきた。一般的に、TADF 材料では、効率的な HOMO-LUMO の分離と電荷移動励起状態の安定化のために、D-A 間が大きくねじれた構造や非共役結合で D-A 部位をブリッジした構造が用いられる。しかしながら、このような構造における励起状態の大きな構造緩和は、分子の不安定性をもたらすと考えられ、高い安定性を有する TADF 材料の実現には、D-A 系ではない新たな分子設計に基づく材料開発が必要不可欠である。本研究では、D-A 系を用いなくても、励起状態分子内プロトン移動(ESIPT)反応により効率的な HOMO-LUMO の分離が可能であり、その結果、完全に縮環した平面構造でありながら TADF を示す材料を見出したので、有機 EL 素子評価とともに報告する。

非常に高い熱化学的安定性を有する Triquinolonobenzene (TQB)は、分子内水素結合をもち、Fig. 1 のように大きなストークスシフトを示す。これは、ESIPT のためであり、DFT 計算とよく一致する。この構造変化に伴い、分子の電子密度分布も大きく変化し、結果的に ΔE_{ST} が小さくなることが明らかとなった。実際に、TQB の溶液、結晶、ドーパ薄膜では、マイクロ秒オーダーの遅延蛍光が観測され、TADF に典型的な温度依存性も見られた(Fig. 2)。また、TQB を用いた有機 EL 素子において、高い外部量子効率 14%を達成した。この結果から、TADF 材料の新たな分子設計として ESIPT が有望であると考えられる。
[謝辞]本研究の一部は、エネルギー研究教育機構、若手研究者・博士課程学生支援プログラムの支援を受けて行われた。

[1] H. Uoyama, C. Adachi, et al., *Nature*, **492**, 234 (2012).

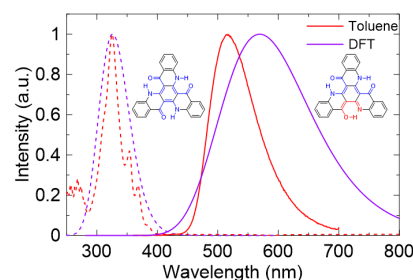


Fig. 1 UV-Vis and PL spectra of TQB. Inset: Chemical structure of TQB.

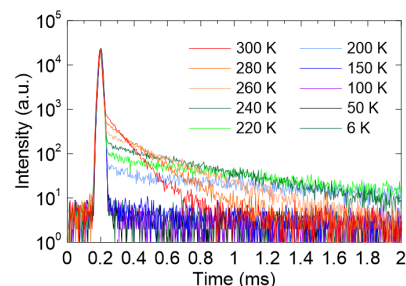


Fig. 2 Temperature dependence of transient PL decay for a TQB-doped DPEPO film.