TADF 材料の発光特性にあたえる溶媒・温度の影響

Temperature effect on the optical properties of TADF molecules in solution

東理大理工 [1], 産総研 [2], JST-ERATO[3], 九大 OPERA[4] ○山頭 周平 [1], 縄田 尚矩 [1], 野田 大貴 [4], 中山 泰生 [1], 中野谷 一 [3,4], 安達 千波矢 [3,4], 細貝 拓也 [2,3]

Tokyo Univ. Sci.[1], AIST [2], JST-ERATO[3], Kyushu Univ.[4], ○Syuhei Santou [1], Takanori Nawata[1], Hiroki Noda[4], Yasuo Nakayama [1], Hajime Nakanotani [3,4], Chihaya Adachi [3,4], Takuya Hosokai [2,3]

E-mail: 7218530@ed.tus.ac.jp

緒言: 次世代有機 EL 用発光材料である熱活性化遅延蛍光(TADF)材料の高性能化を目指した発光機構の研究が進められている [1]。TADF 材料は電子ドナー性置換基と電子アクセプター性置換基を組み合わせて合成され、光励起により分子内に電荷移動(CT)が生じる。TADF を実現するには励起一重項(S_1)状態と励起三重項(T_1)状態のエネルギー差を制御する必要があり、各状態エネルギーは室温下での蛍光測定および液体窒素温度下での燐光測定によりそれぞれ評価される。一方で，CT 状態のエネルギーは溶媒や温度によって変調することが知られているが、TADF 材料における溶媒や温度による影響の検討は乏しい [2]。そこで本研究は、有機溶媒と温度を変調させたときの青色 TADF 発光材料 5CzBN(Fig. 1)の発光特性を検討したので報告する。

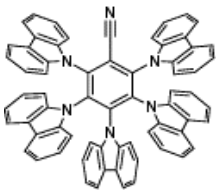
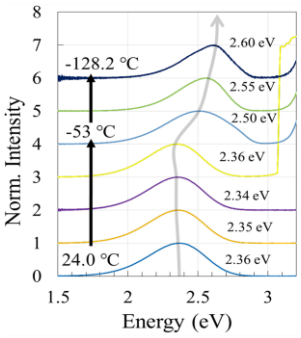


Fig. 1 Chemical structure of 5CzBN.

実験: 5CzBN の合成は既報[1]に従った。溶媒には分光分析用のアセトニトリル(比誘電率$\varepsilon_r = 37.5$) またはトルエン($\varepsilon_r = 2.3$)を用いた。溶液試料の濃度は 10^{-4}～10^{-5} mol/L とした。スペクトルの計測は蛍光分光器(LS50B)または自作のパルス化した LED 光源とマルチチャンネル分光器を用いて行った。後者の装置での蛍光と燐光の分離はパルス発生器と光学シャッターを用いて行った。試料の温度制御は液体窒素とセラミックスヒーターを使用した。

結果と考察: Fig. 2(a), 2(b)にある通り、室温ではアセトニトリル中の方が低エネルギー側にピークを示したが、それぞれの凝固点(アセトニトリル：-45 ℃、トルエン：-95 ℃)以下ではブルーシフトが生じてピークの溶媒依存性がほぼ消失した。室温においてアセトニトリル中の蛍光ピークがトルエン中より低エネルギー側に現れたのは、アセトニトリルの大きな ε_r に由来する強い溶媒和によって、5CzBN の S_1 状態がより安定化したためと考えられる。一方、凝固点以下で同程度のピークエネルギーとなったのは、溶媒の凍結によって配向分極緩和が阻害され、その結果、溶媒和の影響が低下したためと考えられる [2]。

(a) 5CzBN in acetonitrile



(b) 5CzBN in toluene

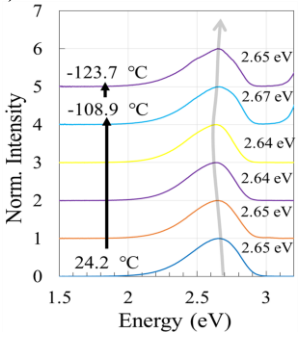


Fig. 2 Temperature dependence in the fluorescence spectra of 5CzBN in (a) acetonitrile and (b) toluene solution.

1) T. Hosokai, et al., *Sci. Adv.* **3**, e1603282 (2017). 2) T. Hosokai, et al., *J. Photon. Energy*, **8**, 032110 (2018).

© 2018年 応用物理学会