

高配向 4CzIPN 分子膜の分子配列, 電子状態, および PL 角度依存性 Molecular arrangement, electronic state, and photoluminescence angular distribution of highly ordered 4CzIPN film

筑波大数理¹, 産総研², 九大 OPERA³

長谷川友里¹, 南颯斗¹, 金田哲¹, 山田洋一¹, 細貝拓也², 佐々木正洋¹, 中野谷一³, 安達千波矢³

Univ. of Tsukuba¹, AIST², Kyushu Univ. OPERA³,

°Y. Haegawa¹, Y. Yamada¹, H. Minami¹, S. Kanada¹, T. Hosokai², M. Sasaki¹, H. Nakanotani³, C. Adachi³

E-mail: yurihase.2121@gmail.com

緒言 次世代有機 EL 材料である熱活性型遅延蛍光(TADF)分子では, 内部量子効率 100%に近い蛍光発光が達成されている. しかし一般に有機 EL 素子は光取り出し効率が 20-30%にとどまり外部量子効率を制限する要因となっている. TADF を用いた有機 EL 素子の外部量子効率のさらなる向上のためには, 光取り出し効率の向上が求められる. 光取り出し効率の向上には発光層における分子配向を制御し, 遷移双極子モーメント(TDM)の配向を実現することが重要となるが, TADF 分子の分子配向制御はこれまで十分に検討されていない. そこで本研究では, 分子配向の均一な TADF 分子の単相膜を作製し, その構造と電子状態を計測し, 発光特性の計測から薄膜の TDM の配向度を調べた.

実験 本研究では, 高い内部量子効率を示す 4CzIPN 分子(図 1(a))を用いた. 低速真空蒸着により Ag(111)および SiO₂ 基板表面に 4CzIPN の単分子膜(monolayer; ML)と約 4 分子層の多層膜をそれぞれ作製した. 成膜速度は水晶振動子膜厚計を用いて制御し 0.001 ML/s とした. 4CzIPN(1ML)/Ag(111)の分子配列と電子状態は走査トンネル顕微鏡 (STM) と紫外光光電子分光法 (UPS) を用いてそれぞれ計測した. UPS 計測には PF の BL13B と UVSOR の BL2B を利用した. 4CzIPN(4ML)/SiO₂ では, 過渡 PL と PL の角度分布をそれぞれ大気中で計測した.

結果と考察 図 1(b)に Ag(111)上の 4CzIPN ML の STM 像を示す. 4CzIPN はカゴメ格子の均一な周期構造を, 基板全面に形成することがわかった. 均一な分子配向は TDM の均一な配向を示唆する. 同様の分子配列は異なる基板においても観察され, 4CzIPN は均一な配向膜を形成しやすいことが示唆された. 4CzIPN ML の UPS スペクトルは DFT 計算から得られた孤立分子の DOS とほぼ同様であることから, 高配向単分子膜においても TADF 特性が維持されていることが期待される.

図 2(a)に, 4CzIPN(4ML)/SiO₂ の AFM 像を示す. 表面荒さの RMS 値は 0.2nm 程度であった. 4CzIPN(4ML)/SiO₂ の PL スペクトルは 540 nm 付近にピークを示した. 540 nm における PL の時間分解スペクトル (図 2(b)) からは, 瞬時蛍光に続き, 2.5 μ s の時定数を有する遅延蛍光がみられたことから, TADF 特性が確認された. 一方, PL の角度分解計測の結果から(図 2(c)), 4CzIPN(4ML)/SiO₂ の TDM の水平配向成分はおよそ 0.97 と見積もられた. これは TDM のほぼ完全な水平配向を示唆しており, これまで報告された 4CzIPN 分散膜中の値(0.73)に比べて十分大きい[J. W. Sun *et. al.*, Adv. Funct. Mater. 2013, **23**, 3896]. 以上の結果から, 4CzIPN 単相膜は良好な分子配向を示すことから, 高い光取り出し効率を有する発光層材料として役立つ可能性が示された.

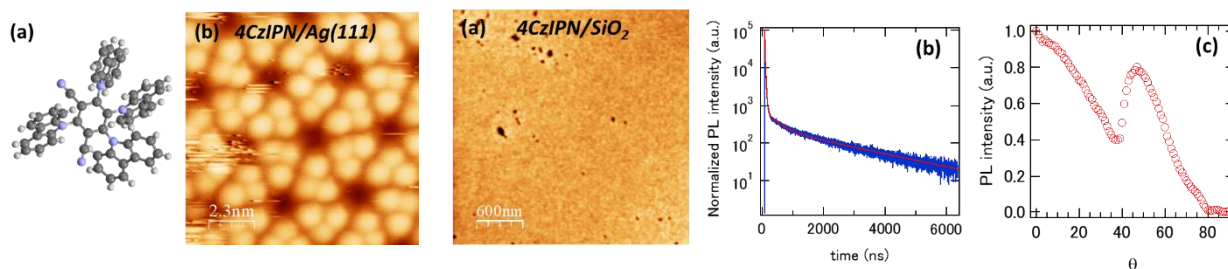


Figure 1 (a)Molecular structure of 4CzIPN. (b)STM image of 4CzIPN ML/Ag(111)

Figure 2 (a) AFM image of 4CzIPN(4ML)/SiO₂. (b)Transient PL spectra and fitting curve and (c) PL angular distribution taken from 4CzIPN(4ML)/SiO₂.