

## ジベンゾフラン含有ホール輸送材料の末端置換位置の効果 Effect of substitution position of end-capping groups on dibenzofuran-terminated hole-transporters

○阿部翔希<sup>1</sup>、笹部久宏<sup>1,2,3</sup>、荒木卓<sup>1</sup>、中村剛瑠<sup>1</sup>、伊藤望<sup>1</sup>、城戸淳二<sup>1,2,3</sup>

(1. 山形大院有機、2. 山形大有機エレ研セ、3. 山形大有機材料セ)

○Shoki Abe<sup>1</sup>, Hisahiro Sasabe<sup>1,2,3</sup>, Suguru Araki<sup>1</sup>, Takeru Nakamura<sup>1</sup>, Nozomi Ito<sup>1</sup>, Junji Kido<sup>1,2,3</sup>

(1. Dept. of Organic Materials Science, Yamagata Univ., 2. Research Center for Organic Electronics, 3. Frontier Center for Organic Materials)

E-mail: h-sasabe@yz.yamagata-u.ac.jp, kid@yz.yamagata-u.ac.jp

【緒論】貴金属を用いずに高効率化を実現できる TADF 材料<sup>1)</sup>が注目されている。30% 超の外部量子効率を実現しているが、駆動寿命が短い問題がある。高効率、長寿命なデバイスを実現するための解決策の 1 つとして、高い三重項エネルギーと高い安定性を両立するホール輸送材料の利用がある。我々の研究室は、高い三重項エネルギーを有するジベンゾフランを 4 つ導入したテトラジベンゾフラン誘導体ホール輸送材料が TADF 型有機 EL の長寿命化に有効であると報告した<sup>2)</sup>。本研究では発展研究として、当研究室で開発したホール輸送材料 **T4DBFBP** に着目し、置換位置の異なる一連の位置異性体 (**Fig. 1**) を開発することで、光学特性や熱物性への影響、デバイスの効率や寿命に与える影響を検証した。

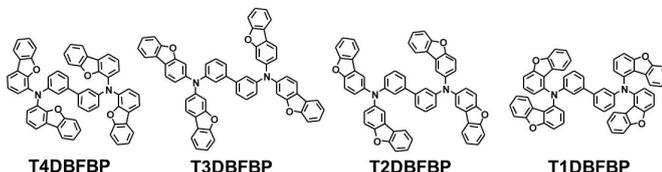


Fig. 1. 新規ホール輸送材料の分子構造

【実験方法】最終目的物是对应する中間体とジプロモビフェニルとの Buchwald-Hartwig アミノ化反応を用いて合成した。一連の異性体の熱物性を TGA、DSC にて評価し、光学特性は UV-vis 吸収スペクトル、PL スペクトル、PYS により評価し、励起三重項準位、アニオン状態の C-N 結合解離エネルギー (BDE) は量子化学計算により算出した。次にこれらの新規分子をホール輸送材料として用いた緑色 TADF 素子を作製、評価した。素子構造は [ITO (100 nm)/polymer buffer layer (20 nm)/NPD (10 nm)/HTL (10 nm)/mCBP: 20 wt% 4CzIPN (30 nm)/DBF-TRZ (10 nm)/nBPhen (40 nm)/Liq (2 nm)/Al (100 nm)] とした。

【結果・考察】化学的安定性を表す指針である結合解離エネルギーは、置換位置によって変化が見られた。特に **T2DBFBP** では 1.75 eV と高い値を示した。全ての分子においてガラス転移温度 ( $T_g$ ) が 135 °C 以上の高い熱安定性を示した。また光学特性を評価したところ、置換位置より大きく変化しイオン化ポテンシャル ( $I_p$ ) は -5.5 ~ -5.9 eV を示した。また量子化学計算により算出された励起三重項準位 ( $E_T$ ) は全ての分子において 2.6 eV 以上の値を示し、緑色 TADF 素子に適応可能であることが示唆された。素子特性評価の詳細は当日報告する。

Table 1. ホール輸送材料の熱物性、光学特性

Compound	Mw	C-N BDE <sup>a)</sup> (eV)	$T_g^{b)}/T_m^{b)}/T_{ds}^{c)}$ (°C)	$I_p^{d)}/E_g^{e)}/E_a^{f)}/E_T^{g)}$ (eV)
T4DBFBP	848.9	1.61	138 / 286 / 493	-5.7 / 3.4 / -2.3 / 2.8
T3DBFBP	848.9	1.63	145 / 330 / 532	-5.5 / 3.1 / -2.4 / 2.6
T2DBFBP	848.9	1.75	144 / 303 / 511	-5.6 / 3.0 / -2.6 / 2.7
T1DBFBP	848.9	1.43	149 / 290 / 465	-5.9 / 3.2 / -2.7 / 2.9

a) Calculated by Gaussian 09 at the URB3LYP/6-31G(d) level of theory to evaluate the BDEs for the anion states. b) Measured by a DSC. c) Measured by a TGA. d) Obtained from a photoelectron yield spectroscopy (PYS). e) Taken as the point of intersection of the normalized absorption spectra. f) Calculated using  $I_p$  and  $E_g$ . g) Calculated by Gaussian 09 at B3LYP/6-311G+(d,p)//B3LYP/6-31G(d).

### 【参考文献】

- 1) H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, *Nature* **2012**, *492*, 234-238.
- 2) T. Kamata, H. Sasabe, N. Ito, Y. Sukegawa, A. Arai, T. Chiba, D. Yokoyama, J. Kido, *J. Mater. Chem. C* **2020**, *8*, 7200-7210.