修飾トリフェニレン誘導体青色 TADF 材料群の電子構造制御

Regulation of electronic structures of chemically modified triphenylene-based blue TADF emitters

°熊田 健吾 [1]、笹部 久宏 [1,2,3]、中尾 晃平 [1]、松家 実咲 [1]、野田 泰登 [1]、荒井 博貴 [1]、城戸 淳二 [1,2,3]
(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)
°Kengo Kumada[1], Hisahiro Sasabe[1,2,3], Kohei Nakao[1], Misaki Matsuya[1], Taito Noda[1], Hiroki Arai[1] and Junji Kido[1,2,3]
(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

【緒言】電子−光変換効率を理論上 100% とする技術として、熱活性化遅延蛍光 (TADF) 発光材料が注目されており [1]、特に青色 TADF 材料の開発が重要課題である [2]。高効率青色 TADF 材料の開発には高い三重項エネルギーを有する剛直なユニットが有用である [3]。本研究では多環芳香族炭化水素であるトリフェニレンに着目し、電子求引性基を導入した修飾トリフェニレンをアクセプターに用いた新規青色 TADF 材料群の開発を行った [4]。

【実験】電子求引性基としてシアノ基とピリミジンをそれぞれ導入した修飾トリフェニレンをアクセプターとして用いた新規 TADF 材料群を設計した。合成の前に電子物性を量子化学計算にて見積もった。目的物は対応する修飾トリフェニレンの塩化物とジメチルアクリジンとの Buchwald-Hartwig アミノ化反応にてそれぞれ合成し ^{1}H-NMR, ^{13}C-NMR, MS および元素分析により同定した。熱物性は TGA, DSC にて評価し、光学物性は UV-vis 吸収、PL スペクトルおよび PYS にて評価した。次いで、ホスフィンオキシド誘導体ホスト材料 DPEPO に発光材料を 10wt% ドープした薄膜を作製し、積分球にて発光量子収率 (PLQY)、ストリークカメラにより過渡減衰 PL スペクトルおよび低温リン光スペクトルを測定した。最後に蒸着型有機 EL 素子に応用した。素子構造は [ITO /polymer-HIL(20) /TAPC(20) /mCP(10) /EML(20) /DPEPO(10) /B3PyPB(30) /LiF(0.5)/ Al(100)] とした。

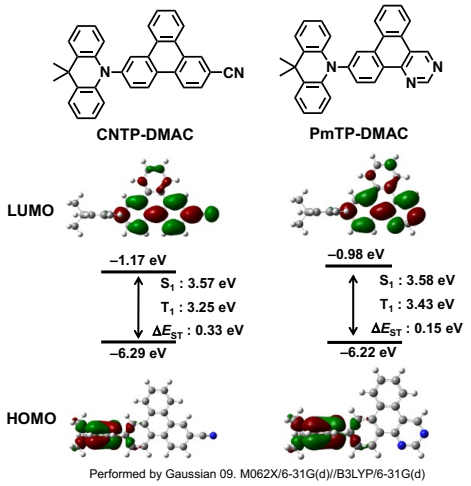

Fig. 1 分子構造と分子軌道

【結果と考察】 量子化学計算より、光学バンドギャップが >3.0 eV, ΔE_{ST} = 0.15~0.33 eV と見積もられ、青色発光と TADF 特性が期待された(**Fig 1.**)。熱物性評価の結果、5% 熱分解温度が 350 °C 超を示し、良好な熱安定性を示した。ドープ膜の光学物性評価を行ったところ、PLQY は 88% を示した。過渡減衰 PL スペクトルから、低温 6K と比べて室温 300K において遅延蛍光の強度の増加が見られたことから TADF 挙動が確認された。また、低温リン光スペクトルと PL スペクトルの立ち上がりの差から、ΔE_{ST} = 0.14~0.34 eV と算出した。素子評価の結果、駆動電圧は 3.0 V 付近、最大外部量子効率は 20% 超を示した (**Fig. 2**)。輝度 100 cd/m^2 の CIE 色度座標は (0.18, 0.33) の青色発光を示した。

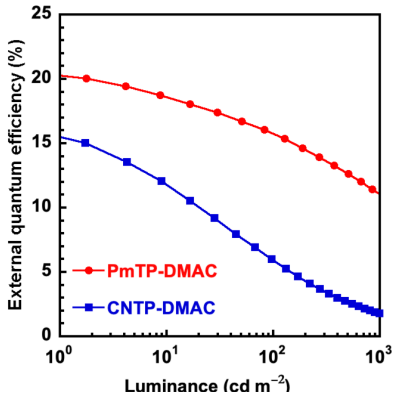

Fig. 2 外部量子効率-輝度特性

【参考文献】1) H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, *Nature* **2012**, *492*, 234. 2) Q. Zhang, B. Li, S. Huang, H. Nomura, H. Tanaka, C. Adachi, *Nat. Photon.* **2014**, *8*, 326. 3) T. Hatakeyama, K. Shiren, K. Nakajima, S. Nomura, S. Nakatsuka, K. Kinoshita, J. Ni, Y. Ono, T. Ikuta, *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 2777. 4) K. Kumada, H. Sasabe, K. Nakao, M. Matsuya, T. Noda, H. Arai, J. Kido, *Chem. Eng. J.* **2022**, under revision.