

熱活性化遅延蛍光 (TADF) 分子 4CzIPN 単分子層と酸素との反応

Structural Change of 4CzIPN Monolayer Upon Oxidation

筑波大数理¹, 産総研² ○山田洋一¹, 岩澤 証人¹, 星野 亜門¹, 佐々木正洋, 細貝拓也²

Tsukuba Univ.¹, AIST², Yoichi Yamada¹, Masato Iwasawa², Amon Hoshino¹, Takuya Hosokai²

E-mail: yamada@bk.tsukuba.ac.jp

[緒言]

熱活性化遅延蛍光 (TADF) は第三世代の発光材料として大きく注目されている。TADF では熱エネルギーにより、 $T_1 \rightarrow S_1$ の比較的遅い逆項間交差を利用するため、酸素とのエネルギー交換による T_1 の失活が問題となるとされる。我々はこれまで、TADF 分子である 4CzIPN の単相分子膜を利用した基礎的研究をおこなってきた[1,2]。今回、4CzIPN の単分子膜と酸素の反応に着目し、STM を用いた分子レベルでの評価を行ったので報告する。

[実験]

4CzIPN の単分子層は、Cu(111), Au(111), Ag(111)などのいくつかの金属単結晶表面を基板として真空蒸着により作製した。単分子層の分子配列構造は室温超高真空中で STM により行った。電子状態は Photon Factory BL-13B において光電子分光をおこなった。

[結果と考察]

Fig. 1 に、Cu(111)上の 4CzIPN 単分子層を Torr の酸素雰囲気暴露した場合の構造変化を in-situ で STM 計測した結果を示す。4CzIPN 単分子層は特徴的なカゴメ格子を形成するが、酸素への暴露に伴い、カゴメ構造が崩壊し、新たな秩序構造を形成した。この極めて特徴的な変化は、Cu(111), Ag(111)上の単分子層で同様に観察されたが、Au(111)では観察されなかった。これらの基板上的分子配列は僅かに異なっており、これが酸素との反応性の違いを生じている可能性がある。

Cu(111), および Ag(111)上の単分子層の酸化反応過程の光電子分光では、主に 4CzIPN 分子の窒素の内殻軌道の僅かな変化と同時に、仕事関数の増加とフロンティア軌道のエネルギー状態の変化が見られたことから、分子が酸素と反応している可能性が示唆された。本反応の詳細は、未だわかっていないことが多いが、講演ではなるべくその詳細を議論したい。

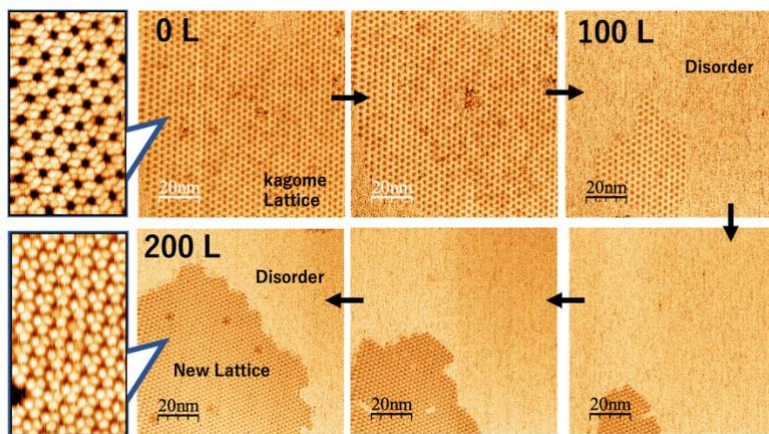


Fig.1
Cu(111)上の 4CzIPN 単分子層を 1×10^{-7} Torr の酸素雰囲気暴露した場合の構造変化の in-situ STM 計測 (室温)。

[1] Y.Hasegawa, et.al., *J. Phys. Chem. Lett.* (2018), 9, 853

[2] Y. Fukami, et.al., *Adv. Optical Mater.* (2021), 2100619.