

## 高性能有機 EL 実現のための分子デザインと精密解析

(京大化研) ○梶 弘典

Material Design and Precise Analysis for Realization of Excellent Organic Light-Emitting Diodes (*Institute for Chemical Research, Kyoto University*) ○Hironori Kaji

Conversion of originally dark triplet excitons into light is very important to realize highly efficient organic light-emitting diodes (OLEDs) and thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials enable the conversion via reverse intersystem crossing (RISC). However, the RISC in TADF materials has been slow and the rate-limiting process. Here, we show a new material design concept realizing very fast RISC with a rate constant ( $k_{\text{RISC}}$ ) exceeding  $10^7 \text{ s}^{-1}$ . We also show different two design concepts for excellent OLEDs; one realizes accelerations of both RISC and radiative decay by dynamic (and/or static) fluctuation effects and the other is acceleration of RISC by the introduction of sulfur resulting in  $k_{\text{RISC}}$  over  $10^8 \text{ s}^{-1}$ . I will also talk about a multiscale simulation method for predicting carrier transport and a high-throughput material screening method for predicting rate constants of all relevant electronic transitions.

**Keywords :** OLEDs; TADF; RISC; High-throughput screening; Fermi golden rule

軽元素のみからなる有機化合物において三重項励起子を光に変換することは、高効率の有機 EL 素子を実現するうえで極めて重要である。熱活性化遅延蛍光(TADF)は、逆項間交差(RISC)によりその変換を可能とするもので、九州大学安達研究室で開発されて以来<sup>1)</sup>我々も含め<sup>2)</sup>、世界中で極めて活発な研究・開発が行われてきた<sup>3)</sup>。しかし、RISC は TADF の中で律速過程にあり、高輝度域での効率向上や素子寿命向上の観点から、その高速化が求められている。我々は最近、RISC を高速化するための“*tilted face-to-face alignment with optimal distance*” (tFFO)と名付けた新たな分子設計指針を提案し、実際に  $10^7 \text{ s}^{-1}$  を超える RISC 速度定数( $k_{\text{RISC}}$ )を実現した<sup>4)</sup>。また、それとは異なる 2 つの設計指針も提案した。1 つは、動的(あるいは静的)ゆらぎにより RISC と輻射緩和の両方を高速化できることを示した<sup>5,6)</sup>。もう 1 つは、硫黄を導入することにより  $10^8 \text{ s}^{-1}$  を超える  $k_{\text{RISC}}$  を実現した<sup>7)</sup>。当日は、これらに加え、優れた特性を有する分子設計のための新たな high-throughput material screening 法<sup>8)</sup>、電荷移動度予測のための multiscale simulation 法<sup>9)</sup>についても紹介する。

本研究全体に関し、関係各位に深く感謝する。また、本研究は、JSPS 科研費 JP20H05840 (学術変革領域研究「動的エキシトン」)、JP17H01231(基盤研究(A))、京大化研 国際共同利用・共同研究プログラム等により助成された。計算には京大化研および京大 ACCMS のスパコンシステムを利用した。

1) H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, *Nature* **2012**, 492, 234. 2) H. Kaji, H. Suzuki, T. Fukushima, K. Shizu, K. Suzuki, S. Kubo, T. Komino, H. Oiwa, F. Suzuki, A. Wakamiya, Y. Murata, C. Adachi, *Nat. Commun.* **2015**, 6, 8476. 3) M. Y. Wong, E. Zysman-Colman, *Adv. Mater.* **2017**, 29, 1605444. 4) Y. Wada, H. Nakagawa, S. Matsumoto, Y. Wakisaka, H. Kaji, *Nat. Photon.* **2020**, 14, 643. 5) Y. Wada, Y. Wakisaka, H. Kaji, *ChemPhysChem* **2021**, 22, 625. 6) Y. Wada, K. Shizu, H. Kaji, *J. Phys. Chem. A* **2021**, 125, 4534. 7) Y. Ren, Y. Wada, K. Suzuki, Y. Kusakabe, J. Geldsetzer, H. Kaji, *Appl. Phys. Express* **2021**, 14, 071003. 8) K. Shizu, H. Kaji, *J. Phys. Chem. A* **2021**, 125, 9000. 9) S. Kubo, H. Kaji, *Sci. Rep.* **2018**, 8, 13462.