

青色燐光有機発光デバイスに向けた大環状分子材料の周縁部設計 Periphery Design of Macrocyclic Materials for Organic Light-Emitting Devices with a Blue Phosphorescent Emitter

芳井朝美¹, 池本晃喜², 泉倫生^{2,3}, 高秀雄^{2,3}, 北弘志³, 佐藤宗太², 磯部寛之^{2*}

¹ 東北大学, 大学院理学研究科, 化学専攻, 〒980-8578 宮城県仙台市青葉区

² 東京大学, 大学院理学系研究科, 化学専攻,

JST, ERATO 磯部縮退 π 集積プロジェクト, 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1

³ コニカミノルタ, 〒192-8505, 東京都八王子市石川町

Asami YOSHII¹, Koki IKEMOTO², Tomoo IZUMI^{2,3}, Hideo TAKA^{2,3}, Hiroshi KITA³, Sota SATO²
and Hiroyuki ISOBE^{2*}

¹Department of Chemistry, Tohoku University
Aoba-ku, Sendai 980-8578, Japan

²Department of Chemistry, The University of Tokyo and JST, ERATO, Isobe Degenerate π -
Integration Project, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

³Konica Minolta, Ishikawa-cho, Hachioji, 192-8505, Japan

1 はじめに

我々はこれまで、大環状芳香族分子[n]シクロメタフェニレン ([n]CMP) が有機発光デバイス (OLED) 中で優れたデバイス物性を示すことを見出してきた。今回、CMP の大環状骨格の周縁部にトリフルオロメチル基を導入した化合物、 $n\text{CF}_3$ -[n]CMP を設計し、その固体物性やデバイス特性を明らかにした[1]。

2 実験

山本カップリング反応により $n\text{CF}_3$ -[n]CMP ($n=5, 6$) をそれぞれ収率 24, 12% で得た。合成した $n\text{CF}_3$ -[n]CMP について、KEK の高輝度 X 線を用いることでその結晶固体中での構造を決定した。また、これらの分子を青色燐光 OLED のホスト材料として応用し、そのデバイス特性を明らかにした。

3 結果および考察

単結晶 X 線構造解析の結果から、 5CF_3 -[5]CMP はヘリンボーン状充填構造をとり、 6CF_3 -[6]CMP は π スタッキング充填構造をとることが分かった (図 1a,b)。Hirshfeld 表面解析を用いた分子間相互作用の解析によって、 5CF_3 -[5]CMP では CH- π /CF- π 相互作用が主要となっているのに対し、 6CF_3 -[6]CMP では π スタッキング相互作用が主要となっている違いが観測された。この結果を踏まえ、これらの分子を、F 原子を分子内に有する青色燐光発光材料 FIrpic とともに共蒸着し、青色 OLED を作製した。そのデバイス特性を評価したところ、20%程度が理論限界とされる外部発光量子効率の値において、 5CF_3 -[5]CMP では 9.9%、 6CF_3 -[6]CMP では 6.3% と良好な値を示すことが分かった。燐光発光材料との CH- π /CF- π 相互作用によって、 5CF_3 -[5]CMP の方が優れたデバイス特性を与えたと考えられる。

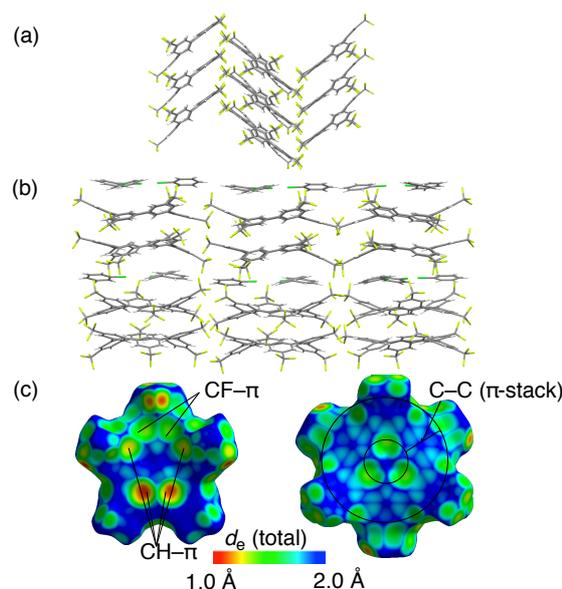


図 1. (a) 5CF_3 -[5]CMP 及び (b) 6CF_3 -[6]CMP の充填構造. (c) d_e マッピングによる Hirshfeld 表面解析.

4 まとめ

周縁部に CF_3 基を導入した大環状分子 $n\text{CF}_3$ -[n]CMP を設計することで、青色燐光有機発光デバイスの優れたホスト材料を開発することができた。

謝辞

本研究の一部は JST, ERATO (JPMJER1301) および 科研費 (16K04864, 17H01033, 17K05772, 18J10131) の支援を受けました。

参考文献

[1] A. Yoshii, K. Ikemoto, T. Izumi, H. Taka, H. Kita, S. Sato and H. Isobe, *Org. Lett.* **21**, 2759 (2019).

* isobe@chem.s.u-tokyo.ac.jp