

関西学院大学 研究成果報告

2019年11月14日

関西学院大学 学長殿

所属： 理工学部
職名： 准教授
氏名： 畠山 琢次

以下のとおり、報告いたします。

研究制度	<input type="checkbox"/> 特別研究期間 <input type="checkbox"/> 自由研究期間 <input type="checkbox"/> 大学共同研究 <input checked="" type="checkbox"/> 個人特別研究費 <input type="checkbox"/> 博士研究員 ※国際共同研究交通費補助については別様式にて作成してください。
研究課題	高色純度熱活性化遅延蛍光材料の開発
研究実施場所	三田キャンパス 4号館 畠山研究室
研究期間	2017年 4月 1日 ～ 2018年 3月31日 (12ヶ月)

◆ 研究成果概要 (2,500字程度)

上記研究課題に即して実施したことを具体的に記述してください。

<研究目的>

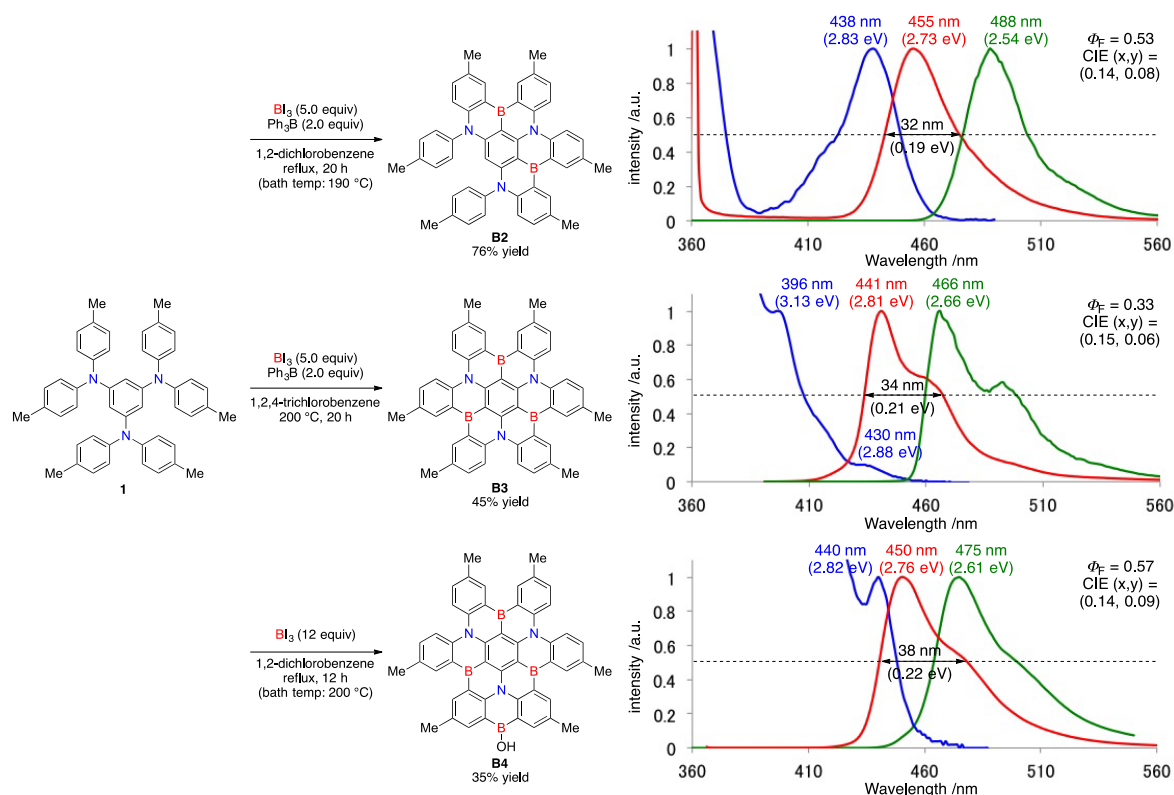
有機ELは、視野角、応答速度、コントラスト比などに優れ、次世代のディスプレイ技術として期待されている。しかし、エネルギー変換効率は未だ十分ではなく、現在、内部量子効率が25%に留まる蛍光材料に代わって、100%近い内部量子効率が可能な燐光材料や熱活性化型遅延蛍光(TADF)材料の開発が盛んに行われている。しかし、両者は発光スペクトルの半値幅が60~100nmと広いために、実用に際して余分なスペクトル領域をカットして色純度を向上させる必要がある。結果として、いずれの発光材料を用いた場合でも、ディスプレイとしてのエネルギー変換効率は理論限界値の50%以下に留まり、消費電力の増加と素子寿命の低下の主原因となっている。

これに対し申請者は、ホウ素と窒素の多重共鳴効果を鍵として、内部量子効率が最大で100%に達しながら、半値幅が25~30nmと極めて色純度に優れた青色発光を示すTADF材料の開発に成功している。しかし、現在のところ、高輝度領域で内部量子効率が低下するという問題がある。そこで本課題研究では、分子構造の最適化による逆項間交差の促進と素子構造の最適化によるキャリアバランスの改善により、高輝度領域における内部量子効率の向上を図る。また、これと並行して、 π 共役系の拡張によりバンドギャップを縮小し、緑色および赤色TADF材料の開発を行う。一連の研究を通じて、最高レベルの内部量子効率と色純度を有するフルカラーの有機EL素子の実

現を目指す。

<研究成果>

逆項間交差の促進を目指して、複数のホウ素と窒素を有する多環芳香族化合物の合成を行った。電子豊富なトリアリールアミン**1**に対し、ホウ素化剤として三ヨウ化ホウ素、ブレンステッド塩基として非配位性のトリフェニルボランを用いることで、3つのホウ素原子を一挙に導入することで、新たな含BN多環芳香族化合物**B3**を合成することに成功した(下図中央)。さらに、適切な反応条件を選択することで、2つあるいは4つのホウ素原子を選択的に導入し、**B2**および**B4**を合成することに成功した。得られた3つの化合物の分光測定を行なったところ、ホウ素と窒素の多重共鳴効果により、各々、32-38 nmの半値幅の高色純度の青色蛍光を示すことが明らかとなった(下図右)。また、最低励起一重項状態(S_1)と最低励起三重項状態(T_1)を蛍光スペクトルと燐光スペクトルのピークトップから算出した結果、そのエネルギー差は、0.15-0.19 eVであり、TADFに適した値であることが明らかとなった。そこで、**B2**を用いて、有機EL素子を作成したところ、通常青色蛍光材料の外部量子効率(EQE)の理論限界値である5%を大きく上回る18.3%という高い値を示した。また、CIE(x,y)値は(0.13, 0.11)であり、ディスプレイ用青色発光素子に適していることも明らかとなった(*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 1195)。しかし、逆項間交差速度が十分ではなく、高輝度領域でのEQEの低下(ロールオフ)が確認された。そこで、本手法を応用して、様々な含BN多環芳香族化合物を合成した結果、高い逆項間交差速度を示す誘導体の合成に成功した。この誘導体を用いて素子構成を最適化したところ、ロールオフの大幅な抑制を達成した。



さらに、本研究を通じて確立した方法論により、含BNコラニュレンのグラムスケール合成を達成した(*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13562)。本化合物は有機EL用青色蛍光材料としてのみならず、含BNフラーレンや含BNカーボンナノチューブのボトムアップ合成の出発物質としても期待できる。

報告用紙②

提出期限：研究期間終了後2ヶ月以内

※個人特別研究費：研究費支給年度終了後2ヶ月以内 博士研究員：期間終了まで

提出先：研究推進社会連携機構（NUC）

※特別研究期間、自由研究期間の報告は所属長、博士研究員は研究科委員長を経て提出してください。

◆研究成果概要は、大学ホームページにて公開します。研究遂行上大学ホームページでの公開に支障がある場合は研究推進社会連携機構までご連絡ください。