

## カルバゾール-トリアジン誘導体 DACT-IIを発光層に用いた 有機EL素子の発光機構

<sup>1</sup>京大院工, <sup>2</sup>京大ESICB, <sup>3</sup>京大化研

○河内峻太郎<sup>1</sup>, 佐藤徹<sup>1,2</sup>, 梶弘典<sup>3</sup>

### Electroluminescence of Carbazole-Triazine Derivative, DACT-II

○Shuntaro Kochi<sup>1</sup>, Tohru Sato<sup>1,2</sup>, Hironori Kaji<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Molecular Engineering, Kyoto University, Japan

<sup>2</sup> Unit of Elements Strategy Initiative for Catalysts & Batteries, Kyoto University

<sup>3</sup> Institute for Chemical Research, Kyoto University, Japan

**【Abstract】** To realize highly efficient fluorescent OLEDs, thermally activated delayed fluorescence (TADF) which utilizes fluorescent via reverse intersystem crossing (RISC) from  $T_1$ , and fluorescent via higher triplet (FvHT)[1] which utilizes fluorescent via RISC from higher triplet states[3,4] have been proposed. It has been reported that the OLED which consists of carbazole-triazine derivative, DACT-II as a emitting layer exhibits a high internal quantum efficiency[4]. We theoretically discuss the mechanism of the OLED of DACT-II. It is necessary that non-radiative decay among the triplets should be suppressed in the FvHT mechanism. Because the rate constant of non-radiative decay depends on vibronic coupling constant (VCC)[5], we evaluate the non-radiative decay process with the VCC. As a result, the highly efficient emission in the OLED using DACT-II can be elucidated on the basis of the FvHT mechanism.

**【序】** 有機 EL 素子において、電流励起により 25%の一重項励起子と 75%の三重項励起子が生成する。高効率な EL 発光を実現するため、両者の励起子を発光に利用する機構が研究されており、 $T_1$  から  $S_1$  への逆系間交差 (RISC) を経由した熱活性型遅延蛍光 (TADF)[1] や、高次三重項励起状態  $T_n$  から一重項励起状態  $S_m$  への RISC を経由した蛍光 (高次三重項経由蛍光, FvHT)[2,3] などが提案されている。FvHT 機構では、ある  $T_n$  状態と  $S_m$  状態のエネルギー準位が接近しており、さらに  $T_n$  状態から低次三重項励起状態( $T_1$ )への遷移が抑制されている必要がある。(Fig. 1)

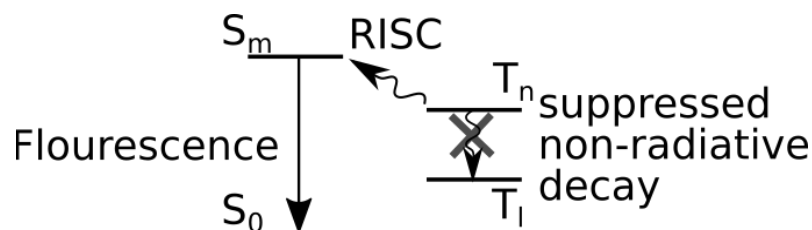


Fig. 1: FvHT mechanism.

梶らは、カルバゾール-トリアジン誘導体 DACT-II (Fig. 2) を用いた有機 EL 素子において、内部量子効率 100% の EL 発光を観測した [4]。この高い効率は通常の蛍光やリン光では説明できない。DACT-II では RISC に関わる一重項三重項間のエネルギー差  $\Delta E_{ST}$  は、実験により 9.0 meV と測定されている。本研究の目的は、DACT-II の高い内部量子効率の EL 発光起源を明らかにすることである。

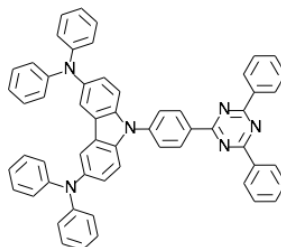


Fig. 2: Carbazole-triazine derivative, DACT-II.

**【方法 (実験・理論)】** FvHT 機構を仮定した場合に問題となる電子状態間の無輻射過程や  $\Delta E_{ST}$  を理論的に検討した。量子化学計算には Gaussian 09 及び当研究室開発プログラムを用いた。基底状態及び励起状態の計算は密度汎関数法と時間依存密度汎関数法を、計算レベル/基底には M06-2X/6-31G(d,p) を用いた。2つの電子状態 (n-1) 間の無輻射遷移速度定数は、振電相互作用定数 (VCC)  $V_{nl}$  に依存し、重なり密度と関係づけられる [5]。当研究室開発プログラムによって VCC を計算し、FvHT 機構における高次三重項励起状態から低次三重項励起状態への無輻射遷移を評価した。

**【結果・考察】** 室温で  $T_1$ - $S_1$  間の RISC が起こるためには  $\Delta E_{ST}$  が小さい必要があるが、 $\Delta E_{ST}$  を計算すると 571.5 meV となった。この値は RISC が起こるには大きいと考えられ、本発光メカニズムが TADF 機構によるものではないことが示された。一方で高次の三重項を調べると  $T_{10}$  が小さな  $\Delta E_{ST}$  (18.3 meV) を持つことがわかった。 $T_{10}$  最適化構造において  $T_{10}$  より低次の三重項励起状態は 2 つあり、 $T_{10}$  との VCC を計算するとどちらも小さいことがわかった (Fig. 3)。このことから  $T_{10}$  から低次三重項励起状態への内部転換による無輻射遷移は抑制されていると考えられる。VCC が小さくなったのは状態間の重なり密度が小さいことによるものとわかった。

本研究の結果、DACT-II の高効率発光は高次三重項を介した FvHT 機構によるものであることが示唆された。

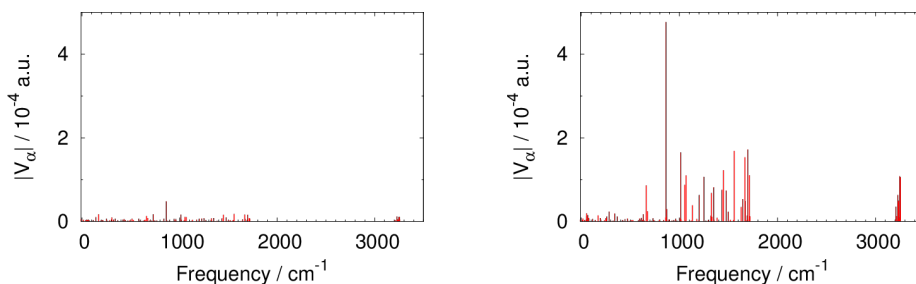


Fig. 3: VCCs between  $T_{10}$  and  $T_2$  (left),  $T_{10}$  and  $T_1$  (right) at  $T_{10}$  optimized structure.

### 【参考文献】

- [1] C. Adachi *Jpn. J. Appl. Phys.* **53**, 060101 (2014).
- [2] T. Sato *J. Comput. Chem., Jpn.* **14**, 189-192 (2015).
- [3] T. Sato *et al. Sci. Rep.* **7**, 4820 (2017).
- [4] H. Kaji *et al. Nat. Commun.* **6**, 8476 (2015).
- [5] M. Uejima *et al. Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 14244 (2014).