

2023 年度年次報告書

原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能

2022 年度採択研究代表者

畠山 琢次

京都大学 大学院理学研究科

教授

含 BN ナノカーボン分子の自在合成と配向制御

主たる共同研究者:

安達 千波矢 (九州大学 大学院工学研究院 教授)

研究成果の概要

本研究では、炭素・ホウ素・窒素が精密に配列された巨大 π 共役系を有する「含 BN ナノカーボン分子」を合成し、素子中の配向を制御することで、次世代の有機光エレクトロニクスを実現する。さらに、精密有機合成と化学気相成長法を組み合わせることで、原子配列が精密に制御された「含 BN ナノカーボン」の創製を目指す。

本年度は、最大 8 個のホウ素を一挙に導入する多重ホウ素化反応を開発し、ノナセン、トリデセン、ヘプタデセン構造を有する含 BN ナノカーボン分子の合成に成功した¹⁾。また、本材料は半値幅 12–14 nm の高色純度な緑色熱活性化遅延蛍光 (TADF) を示した。また、含 BN 高色純度青色 TADF 材料にカルボニル基を導入することで、緑色化と逆項間交差速度の向上に成功した²⁾。各々を発光材料として用い有機 EL 素子を作製したところ、ノナセン構造を有する材料は、ピークトップ 490 nm、半値幅 21 nm、カルボニル基を有する材料はピークトップ 528 nm、半値幅 39 nm の高色純度緑色 EL を示し、実用輝度における外部量子効率も、各々、25.8%、34.6%と優れた値を示した。

これまでに含 BN 高色純度青色 TADF 材料を用いた分布帰還型 (DFB) レーザーデバイスを作製し、低しきい値での自然放射増幅光 (ASE) を確認していたが、ASE 発振条件下での材料の劣化が速いという問題があった。そこで、縮環構造を導入した誘導体を合成し、ホスト材料の分散膜において青色 TADF 材料と ASE 発振条件下での劣化速度を比較したところ、大幅な劣化の抑制を確認した³⁾。縮環構造による励起状態での構造変化の抑制、振動子強度、ASE に対する励起状態吸収が小さくなっていることなどが原因と考えられる。さらに DFB レーザーデバイスを作製したところ、しきい値が大きく低下した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “One-Shot Construction of BN-Embedded Heptadecacene Framework Exhibiting Ultra-narrowband Green Thermally Activated Delayed Fluorescence”, Sano, Y.; Shintani, T.; Hayakawa, M.; Oda, S.; Kondo, M.; Matsushita, T.; Hatakeyama, T.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 11504-11511.
- 2) “Efficient, narrow-band, and stable electroluminescence from organoboron-nitrogen-carbonyl emitter”, Cheng, Y.-C.; Tang, X.; Wang, K.*; Xiong, X.; Fan, X.-C.; Luo, S.; Walia, R.; Xie, Y.; Zhang, T.; Zhang, D.; Yu, J.; Chen, X.-K.*; Adachi, C.*; Zhang, X.-H.*, *Nat. Commun.* **2024**, *15*, 731.
- 3) “A Rigid Multiple Resonance Thermally Activated Delayed Fluorescence Core Toward Stable Electroluminescence and Lasing”, Tang, X.*; Xie, M.; Lin, Z.; Mitrofanov, K.; Tsagaantsooj, T.; Lee, Y.-T.*; Kabe, R.; Sandanayaka, A. S. D.; Matsushima, T.; Hatakeyama, T.; Adachi, C.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *63*, e202315120.