

# 有機EL討論会

## 15周年記念公開シンポジウム・第33回例会 プログラム詳細版

2021/10/14

日時：2021年11月18日（木）、19日（金）

会場：オンライン（ライブ形式）

### 11月18日（木） 公開シンポジウム 13:00~17:45

---

13:00~13:05 開会の辞：熊 均（出光興産株式会社 電子材料部）

#### L1：特別講演 I 13:05~15:05

座長：熊 均（出光興産株式会社 電子材料部）

##### L1-1 有機EL研究：フラスコから大型テレビまでの30年

山形大学大学院有機材料システム研究科有機材料システム専攻 卓越研究教授

○城戸 淳二

##### L1-2 Next Frontiers in OLED Technology

Universal Display Corporation (UDC) Executive Vice President and CTO

○Julie Brown

15:05~15:20 休憩（15分）

#### L2：特別講演 II 15:20~17:20

座長：中 茂樹（富山大学 学術研究部工学系）

##### L2-1 有機CT相互作用が切り拓く高性能OLEDと学理の深化

九州大学工学研究院・主幹教授／最先端有機光エレクトロニクス研究センター・センター長

○安達 千波矢

##### L2-2 出光興産の有機EL材料開発史 -青色実用化への挑戦と企業研究の課題-

出光興産株式会社 主任研究員

○河村 祐一郎

#### A1：企業展示 17:20~17:40（各社3分）

座長：中 茂樹（富山大学 学術研究部工学系）

##### A1-1 OLEDに関する分析技術紹介

株式会社住化分析センター

##### A1-2 OLED関連の開発企画・事業計画に役立つ情報提供

UBI Research Co., Ltd.

##### A1-3 有機EL材料研究用安定同位体

大陽日酸株式会社

##### A1-4 「ニーズファースト型」産学連携

山形大学 INOEL フレキシブル基盤技術研究グループ

##### A1-5 有機ELに関する最新分析技術動向のご紹介

株式会社東レリサーチセンター

##### A1-6 Materials Science Suiteによるシミュレーションと機械学習を用いた有機EL分子の設計と解析

シュレーディンガー株式会社

17:40~17:45 閉会の辞：田中 泰三（ソニー株式会社 R&D センター）

18:00~19:30 オンライン交流会

## 11月19日（金） 例会 10:00~16:40

---

### S1：発光材料 10:00~11:00

座長：中野谷 一（九州大学 大学院工学研究院）

#### S1-1 ドナー・アクセプター直交型 TADF 分子における高効率発光メカニズム解析

京都大学 化学研究所

○和田 啓幹, 脇坂 安晃, 志津 功将, 梶 弘典

【要旨】TADF 材料の設計として、ドナー・アクセプター(D-A)接合型分子は未だ主流であり、直交型の分子も少ない。我々が過去に報告した D-A 直交型 TADF 材料 MA-TA において、励起状態は一重項・三重項ともに電荷移動性であり、一見、逆項間交差および輻射失活はともに効率的でないと予測される。本研究では、分子の静的・動的変形を考慮することにより効率的な TADF 発光要因の一端が解明できたので、発表する。

#### S1-2 Thioxanthone-based efficient blue thermally activated delayed fluorescence emitter showing very fast reverse intersystem crossing

Institute for Chemical Research, Kyoto University

○Yongxia Ren, Yoshimasa Wada, Katsuaki Suzuki, Yu Kusakabe, Jan Geldsetzer, Hironori Kaji

【Abstract】Accelerating reverse intersystem crossing (RISC) in thermally activated delayed fluorescence (TADF) emitters has attracted great attention owing to its vital importance in utilizing all triplet excitons for luminance and improving TADF efficiency. Here, we report a thioxanthone (TXO)-based TADF emitter, named MCz-TXO, where TXO fragment is adopted to realize stronger spin-orbit coupling and thus larger rate constant of RISC ( $k_{RISC}$ ), due to the heavy atom effect introduced by sulfur in TXO. Experimentally, MCz-TXO exhibited a considerably large experimental  $k_{RISC}$  of  $\sim 2 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ , one of the largest  $k_{RISC}$  values among all reported pure organic TADF emitters. The MCz-TXO based OLED also exhibited good performance, with the maximum external quantum efficiency of 17.4% and blue emission with the emission peak wavelength at 469 nm.

#### S1-3 高速かつ定量的な電子遷移速度定数計算手法の開発とベンゾフェノンの光励起状態への応用

京都大学 化学研究所

○志津 功将, 梶 弘典

【要旨】有機材料の各種物性は、輻射遷移ならびに無輻射遷移の競合により決まる。本研究では、蛍光、りん光、内部転換および項間交差の速度定数を高速かつ定量的に計算できる理論手法を開発し、光励起されたベンゾフェノンの失活過程に適用した。速度定数の計算値は実験値と定量的に一致し、ベンゾフェノンの光励起状態は高励起三重項状態 (T2) を経由して最低三重項状態 (T1) に失活することが明らかになった。

11:00~11:10

休憩 (10分)

### S2：分子配向 11:10~11:50

座長：福島 大介（住友化学株式会社 先端材料開発研究所）

#### S2-1 高秩序な自発配向を誘起する極性分子の設計指針

九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター\*, 東京農工大学 工学部\*\*

○田中 正樹\*\*, Morgan Auffray\*, 中野谷 一\*, 安達 千波矢\*

【要旨】Alq<sub>3</sub> や TPBi などの極性分子は、真空蒸着過程で分子の永久双極子モーメントが完全には打ち消されず、膜厚方向に対して自発配向を示すことが知られている。自発配向により生じる膜分極は、有機 EL 素子の特性に影響することが知られているが、配向メカニズムや配向制御のための分子設計指針は確立されていない。本研究では、膜形成過程の表面自由エネルギーの観点から、自発配向を誘起する分子設計を提案する。

## S2-2 重水素化材料を用いた非晶質有機半導体膜中の官能基配向評価

山形大院有機材料システム\*, 保土谷化学工業株式会社\*\*, 山形大有機エレクトロニクス研究センター\*\*\*  
○鮎川慶仁\*, 北原秀良\*\*, 望月俊二\*\*, 横山大輔\*,\*\*\*

【要旨】非晶質有機半導体薄膜中の分子配向は、有機 EL デバイスの光学・電気特性を深く理解し改善していく上で重要な因子である。特に電気特性と関連付けて議論するためには、遷移双極子モーメントの配向分析のみならず官能基レベルで配向分析を行い、その詳細を把握する必要がある。今回、官能基を部分的に重水素化した有機 EL 正孔輸送材料を用いて、その赤外吸収から官能基配向評価を行い、官能基ごとの配向性の違いを明らかにした。

11:50~13:10

昼食 (80分)

## S3: デバイス

13:10~13:50

座長: 横山 大輔 (山形大学 大学院有機材料システム研究科)

### S3-1 超低仕事関数電極の実現による OLED の電子注入・輸送機構の解明

東京理科大学理学研究科\*, NHK 放送技術研究所\*\*, 日本触媒\*\*\*, 大阪大学日本触媒協働研究所+  
○稲牆 魁斗\*, 佐々木 翼\*\*, 長谷川 宗弘\*\*\*, 大野 拓\*\*, 森井 克行\*\*\*,+, 清水 貴央\*\*, 深川 弘彦\*\*,\*\*

【要旨】有機 EL 素子(OLED)では、電子注入材料にリチウムなどのアルカリ金属、電子輸送材料にはピリジン等の含窒素複素環を有する化合物を用いることが常識であった。しかし、詳細な電子注入・輸送機構は明らかになっていない。本研究では、陰極の仕事関数を大幅に低減できる新規電子注入材料を開発すると共に、陰極周辺のエネルギーレベルと OLED の特性との相関を調べることで OLED における電子注入・輸送機構を明らかにした。さらにその結果を基に、駆動電圧が低く・駆動安定性が高い単純構造の青色 OLED の作製に成功したので報告する。

### S3-2 有機 EL デバイス寿命に影響を与える不純物評価

株式会社アルバック

○鈴木 健太, 渡部 純, 中村 寿充, 稲吉 さかえ, 堀田 和正, 佐藤 誠一, 清田 淳也

【要旨】有機 EL ディスプレイは長寿命化が求められているが、真空装置内の不純物による寿命低下が問題となっている。そのため、装置メーカーにおいては装置の清浄性を確保する必要がある。本研究では、有機 EL デバイス作製途中に未処理または洗浄処理済のフッ素系樹脂被覆ケーブルに曝露したデバイスを作製し、寿命評価および不純物分析を行った。その結果、洗浄処理により寿命が改善し、寿命低下の要因が F であることが示唆された。

13:50~14:00

休憩 (10分)

## S4: 評価・解析

14:00~15:00

座長: 小林 隆史 (大阪府立大学 大学院工学研究科)

### S4-1 微小正弦波重畳型変位電流評価法による電気化学発光セルの評価: 電圧掃引方向によるインピーダンスの違い

千葉大学先進科学センター\*, 千葉大学大学院融合理工学府\*\*, 千葉大学分子キラリティ研究センター\*\*\*  
○田中 有弥\*\*, 平賀 太一\*\*, 神林 辰洋\*\*, 山本 星斗\*\*, 大原 正裕\*\*, 石井 久夫\*\*,\*\*\*

【要旨】電気化学発光セル (LEC) においては、電極から注入した電子・ホールは素子内のカチオン・アニオンに補償されてバルク中へと伝搬するため、印加電圧に伴う可動イオンの挙動を詳細に調べることは、LEC 動作機構を理解するうえで重要である。そこで本研究では微小正弦波重畳型変位電流評価法を開発して電圧掃引時のインピーダンス (Z) 測定を可能にし、LEC に適用して電気化学的なドーブ層の形成・消滅過程の Z を調べた。

### S4-2 周期的な屈折率変調格子構造による光取り出し向上の簡易な見積もり II

~二次元格子の取り扱い、プラズモニク格子への応用~

国立研究開発法人産業技術総合研究所ナノ材料研究部門

○石堂能成

【要旨】前回、光回路用屈折率グレーティングカップラの入出力効率計算に用いられる WKB 解を使い、主に発光波長付近の格子幅を持つ周期構造による光取り出し向上の評価式を示した。引き続きいくつかの実験報告に基づき二次元格子の取り扱い及び最近しばしば用いられる金属プラズモニク格子に対する適用例を論ずる。

S4-3 有機半導体結晶中の移動度シミュレーション

シュレーディンガー株式会社\*, Schrödinger Inc.\*\*

○大塚 勇起\*, 森里 嗣生\*, Jacob GAVARTIN\*\*, David GIESEN\*\*, Shaun KWAK\*\*, Alexander GOLDBERG\*\*, Hadi ABROSHAN\*\*, Chris BROWN\*\*, Yixiang CAO\*\*, Tom HUGHES\*\*, Art BOICHEVAROV\*\*, Mathew HALLS\*\*

【要旨】 マーカス理論に基づく移動度計算では、電子やホールが移動する経路にある全ての分子ペア間の電子カップリングや再配向エネルギーの計算が必要であるが、結晶中ではユニークな分子は空間対称性によって限られた少数のものになるため、計算量を劇的に削減することができる。最近、結晶構造を与えるとユニークな分子を自動的に検出し、最小限の計算しか行わない移動度計算プログラムを開発したので、有機半導体結晶に応用した。

15:00~15:10 閉会の辞：野田 和宏 副実行委員長  
(株式会社 JOLED 技術開発本部)

ポスター討論 15:10~16:40 (S1, S2, S3, S4)

【講演形式について】本討論会における各講演発表は、一般口頭発表（20分：質疑あり）とポスター討論（90分）の両方で行います。

【ポスター討論について】講演者と参加者の討論を促すため、一般講演における口頭発表者が講演会終了後に参加者と討論する場（ポスター討論）を設けます。是非参加ください。

【講演奨励賞対象者について】一般口頭発表における35歳以下の発表者が講演奨励賞の対象になります。