

質量分析と理論解析を組み合わせた OLED劣化解析の新規技術

p-i-n型OLEDに対して、質量分析による劣化解析を実施し、更に量子化学計算に基づく理論解析を適用する事で、劣化物の分子構造とその生成過程を明らかにした。本解析技術を用いる事で、劣化初期過程の詳細な解析が可能となり、高耐久なOLEDの研究・開発に役立つ情報を提供できる。

1. 質量分析と理論解析を組み合わせたOLEDの新規劣化解析のコンセプト

■ 質量分析

TOF-SIMS: 飛行時間型二次イオン質量分析法

質量スペクトル
デプスプロファイル

1次イオン 2次イオン

OLED内劣化層と劣化物の推定

■ 理論解析 NEW!!

量子化学計算に基づく振電相互作用解析

$$V_s = \left\langle \Psi_{CT} \left| \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial Q_s} \right)_{R_0} \right| \Psi_{CT} \right\rangle$$

振電相互作用密度

吸収・蛍光スペクトルの計算から、輝度低下原因の予測も可能

劣化に起因する反応部位の特定

従来の**質量分析**に新たに**理論解析**を適用する事で、より詳細なOLEDの劣化解析が可能に!!

2. 適用事例: p-i-n型OLEDの劣化解析

■ p-i-n型OLEDサンプル 駆動劣化試験を実施

OLED層構成

陰極: Al (100 nm)
EIL: Liq (2 nm)
ETL: TPBi, 50%Liq (50 nm)
EML: mCBP, 6%Ir(ppy) ₃ (30 nm)
HTL: HTL1 (10 nm)
HIL: HTL1, 3%PD (30 nm)
陽極: ITO (100 nm)

発光層(EML)の構成分子

mCBP Ir(ppy)₃

■ 理論解析【劣化物生成過程に関する仮説の検証】

劣化物の生成過程(仮説)

- mCBPからのCzフラグメントの解離
- 解離したCzフラグメントのmCBPへの付加

Czフラグメント

1. mCBPからのCzフラグメントの解離

mCBPのCzフラグメントの結合解離における断熱ポテンシャル曲線

垂直イオン化エネルギーと電子親和力から見積もられたmCBPの励起子形成エネルギー: 6.3 eV

mCBPが励起子形成後に1.4 eVの活性化障壁を越えて、Czフラグメントが解離。

2. 解離したCzフラグメントのmCBPへの付加

mCBPにおける正孔と有効モードとの間の振電相互作用密度

白: 電子密度が増えている領域
青: 電子密度が減っている領域

解離したCzフラグメントから攻撃を受けやすいサイト

質量分析によって推定された劣化物の生成を示唆

■ 質量分析【劣化層と劣化物の推定】

GCIB-TOF-SIMS デプスプロファイル

青: 劣化前 赤: 劣化後

[mCBP+H]⁺ [Ir(ppy)₃]⁺ [C₄₈H₃₁N₃+H]⁺

EMLでC₄₈H₃₁N₃が増加

mCBPにCzが付加した劣化物の生成を示唆

【MS/MSによるCz付加位置の特定】

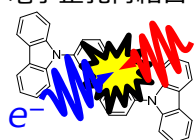
MS/MS プロダクトイオンスペクトル

劣化物の推定分子構造

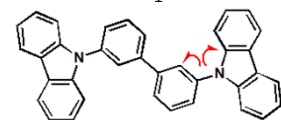
mCBP中Cz基へのCz付加

■ 推定される劣化物の生成機構

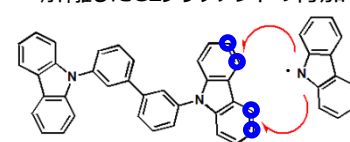
1. EMLでのmCBP中の電子正孔再結合



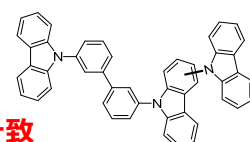
2. mCBPのT₁での結合解離



3. mCBP中Cz基3, 4, 5, 6位への解離したCzフラグメントの付加



質量分析から推定された劣化物の分子構造



分析結果と一致

劣化初期過程及び劣化物の生成機構を総合的に解析し、OLEDの研究・開発に役立つ情報を提供します