

大環状芳香族炭化水素分子モジュール合成による単層型有機発光デバイス  
基盤材料開発

**Development of Single-Layer Organic Light-Emitting Device  
by Modular Synthesis of Aromatic Hydrocarbon Macrocycles**

芳井朝美<sup>a</sup>、池本晃喜<sup>b</sup>、泉倫生<sup>b,c</sup>、高秀雄<sup>b,c</sup>、北弘志<sup>c</sup>、薛婧<sup>a</sup>、小林良<sup>a</sup>、  
佐藤宗太<sup>a,b</sup>、磯部寛之<sup>a,b</sup> (東北大院理<sup>a</sup>, WPI-AIMR<sup>b</sup>, コニカミノルタ<sup>c</sup>)

大環状芳香族炭化水素分子は、剛直な構造と高い安定性を有する化合物として、デバイス材料としての応用が期待されている。我々はこれまで、1,3-ジブromoベンゼン類を原料とした one-pot 環化反応により大環状芳香族炭化水素分子の合成法を確立し、大環状芳香族炭化水素分子が OLED の材料として優れていることを見出した。すなわち、ベンゼン環を環状に連結した  $[n]$ cyclo-*meta*-phenylene ( $[n]$ CMP) は高い熱安定性及び、両極性電子輸送能を持ち、有機発光デバイス (OLED) の正孔輸送層・電子輸送層としての機能を示すことを明らかにした<sup>1</sup>。また、トルエンを環状に連結した  $n$ Me- $[n]$ CMP は、正孔輸送層・電子輸送層に加えて、発光層のホスト材料としての特性も兼ね備えており、 $n$ Me- $[n]$ CMP を用いることで高効率な単層型 OLED の開発に成功した<sup>2</sup>。しかしながら、one-pot 環化反応は、前駆体として 2 置換ハロゲンベンゼンを合成する必要があるため、多様な置換型  $[n]$ CMP の合成が容易ではなかった。そこで本研究ではモジュール合成によって簡便に置換型  $[n]$ CMP を合成する手法を開発した。トリル基、キシリル基を導入した 2'-tolyl $[n]$ CMP 及び 2'-*m*-xylyl $[n]$ CMP を新たに分子設計・合成を行い、新規置換型  $[n]$ CMP の単層 OLED の材料としての性能を評価した<sup>3</sup>。

まず出発原料として  $[n]$ CMP を用いて Ir 触媒を用いた直接ホウ素化をしたのち、鈴木・宮浦クロスカップリング反応で置換基を導入したところ、種々の置換基導入型  $[n]$ CMP を 78%–96% の高効率で大量合成することができた (Scheme 1)。合成した 2'-tolyl- $[n]$ CMP 及び、2'-*m*-xylyl- $[n]$ CMP を用いて Ir 錯体を発光材料とした単層 OLED を作製した。その結果、これらの化合物を用いることで、これまでの三領域の構造からより単純化した二領域構造からなる高効率な単層有機発光デバイスの開発に成功した (図 1)。特に 2'-tolyl-[5]CMP の性能は外部量子効率 (EQE) が 24.8% という、ほぼ理論上限の値を示した。

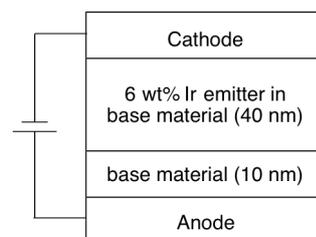
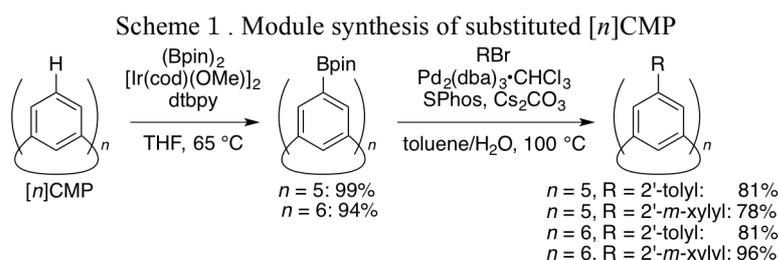


図 1. デバイス構造

<参考文献>

- 1) Xue, J. Y.; Ikemoto, K.; Takahashi, N.; Izumi, T.; Taka, H.; Kita, H.; Sato, S.; Isobe, H. *J. Org. Chem.* **2014**, *79*, 9735–9739. 2) Xue, J. Y.; Izumi, T.; Yoshii, A.; Ikemoto, K.; Koretsune, T.; Akashi, R.; Arita, R.; Taka, H.; Kita, H.; Sato, S.; Isobe, H. *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 896–904. 3) Ikemoto, K.; Yoshii, A.; Izumi, T.; Taka, H.; Kita, H.; Xue, J. Y.; Kobayashi, R.; Sato, S.; Isobe, H. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 662–666.

発表者紹介

氏名 芳井 朝美 (よしい あさみ)  
所属 東北大学原子分子材料科学高等研究機構(AIMR)  
学年 博士課程前期 2 年 (理学研究科化学専攻)  
研究室 磯部研究室

