## 有機 EL 素子材料の CK端 XAFS による配向性評価

## Investigation of orientation about organic electro-luminescence materials by C K-edge XAFS

## <u>辻 淳一 a</u>, 国須 正洋 a, 藤田 学 a, 八尋 惇平 a, 山中 恵介 b, 太田 俊明 b Junichi Tsuji<sup>a</sup>, Masahiro Kunisu<sup>a</sup>, Manabu Fujita<sup>a</sup>, Jumpei Yahiro<sup>a</sup>, Keisuke Yamanaka<sup>b</sup>, Toshiaki Ohta<sup>b</sup>

<sup>a</sup>(株)東レリサーチセンター,<sup>b</sup>立命館大学 SR センター <sup>a</sup>Toray Research Center, Inc., <sup>b</sup>The SR Center, Ritsumeikan University

ガラス基板上に成膜した有機 EL 素子材料である $\alpha$ -NPD および Bphen について、角度分解 C K 端 XAFS により配向性を評価した。その結果、 $\alpha$ -NPD では顕著な配向性は認められなかった。一方、 Bphen では、ガラス基板に対して僅かに垂直配向していると推察された。

Orientations of  $\alpha$ -NPD and Bphen which are the organic electro-luminescence materials formed on the glass substrate were investigated by the angle-resolved C *K*-edge XAFS. As the results, prominant orientation in the  $\alpha$ -NPD was not observed. It was inferred that the  $\pi$  conjugated planes in the Bphen were oriented perpendicularly to the glass substrate.

Keywords: orientations, organic electro-luminescence materials, angle-resolved C K-edge XAFS

背景と研究目的: 有機 EL (Electroluminescence)素子は、「自己発光型で あるため、ディスプレイ用途とした時の視認 角が広い」、「低電圧駆動が可能」、「応答速度 が速い」、「素子構造が単純であるため、薄型 化および軽量化が可能」といった特徴を有し、 特に次世代ディスプレイや LED (Light emitting diode)として、活発に研究・開発が行 われている。従来、有機 EL 素子材料として は低分子の非晶質材料が用いられてきており、 無配向であるという認識が一般的であった。 しかしながら、高分子材料や液晶などの分野 では配向性の制御は、材料特性を決める上で 重要な因子の一つであり、有機 EL 分野にお いても配向性の重要度が認識されつつある。

XAFS (X-ray absorption fine structure)分析は 元素毎の測定手法であり、化学状態に関する 情報を得ることができる。また、XAFS は放 射光による測定が一般的であるが、通常、放 射光は水平面内に直線偏光しているため、入 射 X 線の試料に対する入射角を変化させ、測 定を行うことにより、配向性に関する情報を 得ることが出来る。

本研究では、ガラス基板/ITO (Indium tin oxide)膜上に製膜した2種類の有機EL素子材料について、成膜速度違いの試料を準備した。

それらについて、入射X線の角度を変化させ、 CK端XAFS測定を行うことにより、配向性の評価を行うことを目的とした。

**実験**: 測定試料は、ガラス基板/ITO膜 (150nm)上に約200nmの厚さで成膜された有 機EL素子材料2試料である。一つはα-NPD(ジ フェニルナフチルジアミン)であり、もう一つ はBphen (バソフェナントロリン)である。そ れらの構造をFig. 1, 2に示す。それら2種類の 材料について、それぞれ0.3Å/sおよび30.0Å/s の2種類の成膜速度で測定用試料を作製した。

角度分解C K端XAFS測定は立命館大学SR センターBL2にて、試料電流計測による全電 子収量法にて行った。全電子収量法での分析 深さは約100 nm以下である。入射角として、 10, 50, 90度の3角度にて測定した。エネルギ ー校正は、HOPG (Highly Oriented Pyrolytic Graphite)の $\pi$ \*ピークを285.5eVに合わせた。



**Fig. 1.** Schematic drawing of  $\alpha$ -NPD.



Fig. 2. Schematic drawing of Bphen.

<u>結果および考察</u>: α-NPD の角度分解 C K 端 XANES (X-ray absorption near-edge structure) スペクトルについて、Fig. 3 に成膜速度 0.3Å /s、Fig. 4 に成膜速度 30.0Å/s の結果を、それ ぞれ示す。Fig. 3 および Fig. 4 より、いずれも 約 285.5eV  $c\pi^*(C-C)$ 由来のピークが認めら れる。ただし、いずれの結果共に、角度の変 化と強度の変化に顕著な相関は認められない。 これより、α-NPD では、π共役面の平均情報 として、顕著な配向性は無いと考えられる。

Bphen の角度分解 C K 端 XANES スペクト ルについて、Fig. 5 に成膜速度 0.3 Å/s、Fig. 6 に成膜速度 30.0 Å/s の結果を、それぞれ示す。



**Fig. 3.** Angle-resolved C K-edge XANES spectra of  $\alpha$ -NPD (0.3 Å/s).



**Fig. 4.** Angle-resolved C *K*-edge XANES spectra of  $\alpha$ -NPD (30.0 Å/s).



**Fig. 5.** Angle-resolved C K-edge XANES spectra of Bphen (0.3 Å/s).



spectra of Bphen (30.0 Å/s).

Fig. 5 および Fig. 6 より、いずれも $\alpha$ -NPD と 同様に約 285.5eV に $\pi$ \*(C-C)由来のピークが 認められる。いずれの結果共に、ピーク強度 の変化について、「低角度 < 高角度」の関係 が認められる。これより、Bphen では $\pi$ 共役面 の平均情報として、基板に対して垂直に配向 していると考えられる。また、成膜速度の違 いにより、ピーク強度の変化に顕著な違いは 認められない。そのため、Bphen では成膜速 度の違いは、 $\pi$ 共役面全体の配向性に対して 顕著な影響を与えない可能性が考えられる。

XAFS では、元素ごとの情報は得られるが、 官能基ごとの情報を得るためには、詳細なピ ークアサイメントや他元素の XAFS 測定結果 との総合的な考察が必要である。α-NPD およ び Bphen についての本測定結果においても、 更なる詳細な解析、窒素元素の角度分解 XAFS 測定、および XAFS 以外の分析結果な どより、更に詳細な配向性評価を進める予定 である。