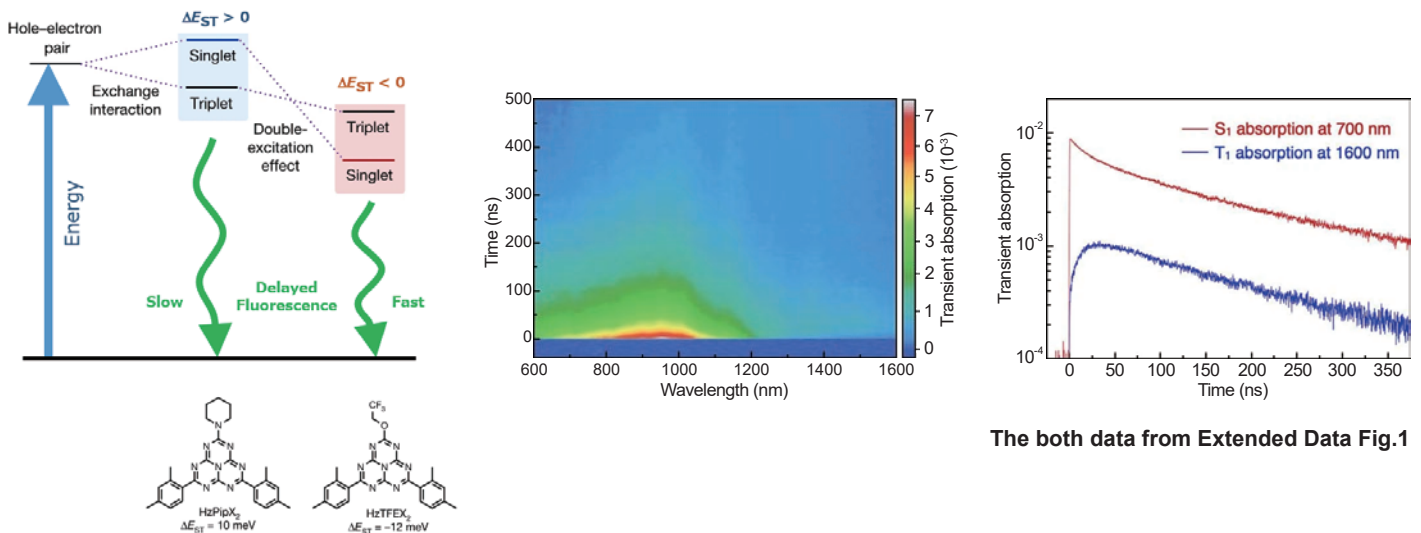


Delayed Fluorescence from Inverted Singlet and Triplet Excited States

N. Aizawa *et al.*, Nature 609, 502 (2022).

Recently, numerous photochemists and display manufacturers have focused their efforts on utilizing thermally activated delayed fluorescence (TADF) of organic compounds for OLEDs. This approach is particularly advantageous as it eliminates the need for rare metals. In TADF, luminescence efficiency is enhanced by converting the triplet excited state (T_1) to the singlet excited state (S_1). However, the conversion efficiency is typically limited due to the Hund's rule of maximum multiplicity, which dictates that the energy of T_1 is lower than that of S_1 and thus their energy difference (ΔE_{ST}) is positive. To address this limitation, N. Aizawa at Osaka University and his collaborators conducted computational simulations to screen various heptazine analogues where the ΔE_{ST} could be theoretically negative by violating the Hund's rule. Out of promising candidates, the researchers synthesized two heptazine analogues. They showed that one of these molecules exhibit delayed fluorescence with shorter lifetimes at lower temperatures, and the ΔE_{ST} was experimentally determined to be -11 meV. These findings represent the first instance of the successful creation of a Hund's rule-breaking OLED molecule.

近年では、有機化合物の熱活性遅延蛍光（TADF）を有機 EL ディスプレイなどに応用することが注目されています。この手法では、レアメタルが必要なくなるという特に有利な点があります。TADFでは、三重項励起状態（ T_1 ）を一重項励起状態（ S_1 ）に変換することで、発光効率が向上します。しかし、フントの規則により、 T_1 のエネルギーは S_1 よりも低く、そのエネルギー差（ ΔE_{ST} ）が正であるため、エネルギー変換効率に限界があります。大阪大学の相澤直矢氏と共同研究者らは、フントの規則を破る、つまり ΔE_{ST} が負になる可能性がある様々なヘプタジン誘導体を理論計算によってスクリーニングしました。そのスクリーニングによって選ばれた候補物質から2つのヘプタジン誘導体を合成し、そのうちの1つの分子は、低温で寿命が短い遅延蛍光を示し、 ΔE_{ST} が実験的に -11 meVであることが示されました。これらの研究成果は、Hundの規則に基づいた常識を打ち破った有機 EL 材料の開発に世界で初めて成功したことを示しています。



The both data from Extended Data Fig.1