

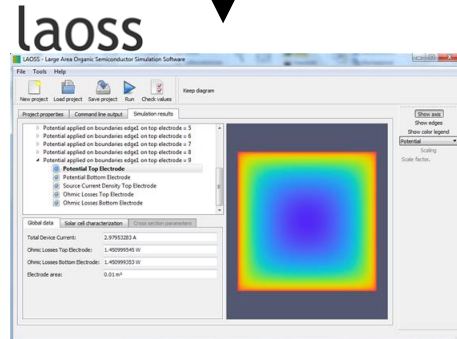
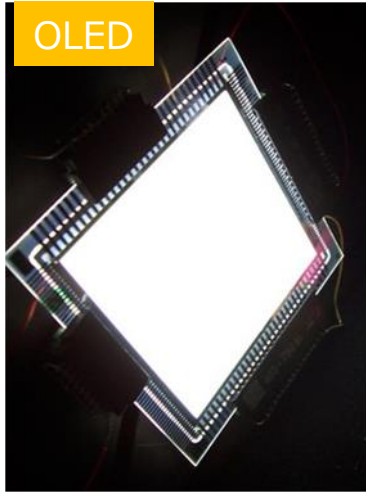
CYBERNET

Fluxim製品によるOLED解析例のご紹介

サイバネットシステム株式会社



Fluxim製品のラインナップ



シミュレーション
・測定連携

シミュレーション
・測定連携

測定連携

連携
シミュレーション

Setfos: OLED・太陽電池などの薄膜構造の半導体デバイスに対する、光学・電気シミュレーションソフトです。

Laoss: 大面積のOLED・太陽電池（パネル）に対する、電気・熱・光学シミュレーションソフトです。

Paios: OLED・太陽電池などのデバイスに対し、様々な電気・光学特性をワンクリックで測定できる装置です。

Phelos: OLEDの発光や有機薄膜のPLに対し、分光放射輝度の角度依存性を測定する装置です。半円筒形レンズによる基板導波光の取り出しや偏光測定も可能です。

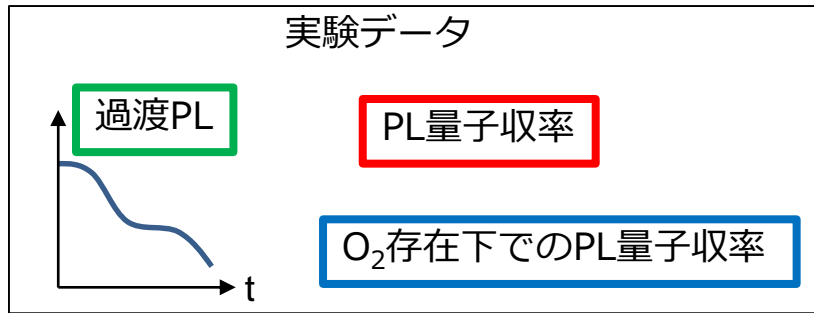
Litos: 有機EL・太陽電池などの素子寿命を測定する装置です。

Fluxim社より発表された論文紹介 (概要)

Determining non-radiative decay rates in **TADF compounds** using coupled transient and steady state optical data (過渡状態と定常状態の光学データを組み合わせた**TADF化合物**における無放射速度定数の決定)

S. Sem, S. Jenatsch, K. Stavrou, A. Danos, A. P. Monkman and B. Ruhstaller

J. Mater. Chem. C, 2022, DOI: 10.1039/d1tc05594a



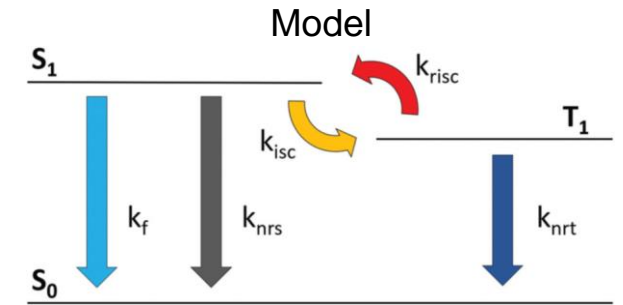
数学モデル

$$\begin{cases} \frac{dS(t)}{dt} = -(k_f + k_{isc} + k_{nrs}) \cdot S(t) + k_{risc} \cdot T(t) \\ \frac{dT(t)}{dt} = -(k_{risc} + k_{nrt}) \cdot T(t) + k_{isc} \cdot S(t) \end{cases}$$

$$PLQY = \frac{k_f A}{(k_f + k_{nrs})A + k_{nrt}}, A = \frac{k_{risc} + k_{nrt}}{k_{isc}}$$

$$PLQY_{O_2} = \frac{k_f}{k_f + k_{isc} + k_{nrs}}$$

実験(過渡PL, PLQY, PLQY_{O₂})結果と、それらに対応する数式から、無放射速度定数(k_{nrs} and k_{nrt})をフィッティングにより抽出しました。



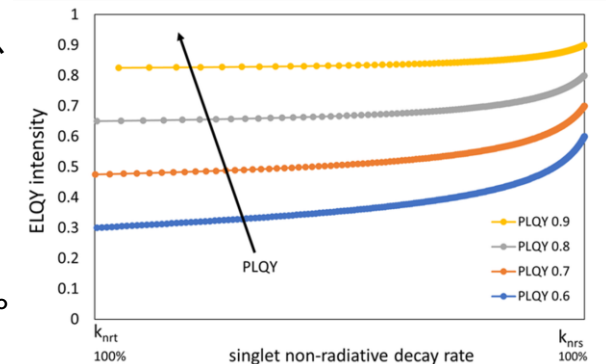
Global Fitting Algorithm

$k_f, k_{isc}, k_{risc}, k_{nrs}, k_{nrt}$

実験データのフィッティングにより、これらの速度定数を抽出しました。

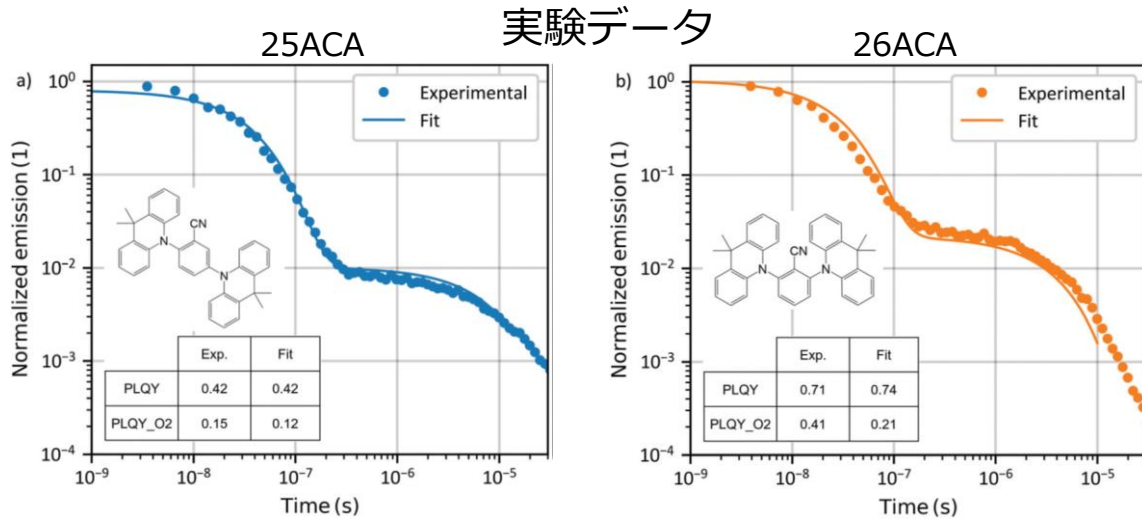
特に、 $k_{nrt} \gg k_{nrs}$ の時、ELQYはPLQYに比べて小さくなります。

↓
無放射速度定数は、**TADF**の解析に重要です。



Fluxim社より発表された論文紹介 (結果)

Zeonexホスト中に1wt%の25ACAもしくは26ACAをドーピングした薄膜に対し、過渡PL, PLQY and PLQY_{O2} を測定し、フィッティングを実施しました。



抽出されたパラメーター

Extracted parameters	25ACA	26ACA
$k_f [s^{-1}]$	$(3.2 \pm 0.3) 10^6$	$(7.2 \pm 0.1) 10^6$
$k_{isc} [s^{-1}]$	$(23 \pm 0.1) 10^6$	$(26.8 \pm 0.5) 10^6$
$k_{rise} [s^{-1}]$	$(3.5 \pm 0.1) 10^5$	$(8.5 \pm 0.2) 10^5$
$k_{nrs} [s^{-1}]$ Singlet	$(9.1 \pm 36) 10^4$	$(1.1 \pm 5.8) 10^3$
$k_{nrt} [s^{-1}]$ Triplet	$(8.0 \pm 0.1) 10^4$	$(8.9 \pm 0.5) 10^4$



無放射
速度定数

これらのパラメーターは常微分方程式と量子収率の式を組み合わせで抽出しました。

桁で異なる

これらのパラメーターはSetfosで利用でき、これらのパラメーターを用いて、放射速度定数の空間分布(Purcell factor)や電荷/励起子分布など重要な現象を考慮したより正確なOLEDの光学特性のシミュレーションが可能となります。

3D Master-Equation モデルを用いたシミュレーションも可能で、非局在励起子のエネルギー移動(Förster, Dexter)や、層の界面を超えるエネルギー移動、相関・非相関エネルギーディスオーダーなど考慮できます。

詳細は、<https://www.fluxim.com/determining-non-radiative-decay-rates-in-tadf-compounds>をご覧ください。

本資料内でご紹介した製品に関するお問い合わせは
こちらまでご連絡ください。

サイバネットシステム株式会社 CAE事業本部 CAE第2事業部

E-mail: optsales@cybernet.co.jp

WEB : <https://www.cybernet.co.jp/optical/>