

第2屆大專校院綠色化學創意競賽創意說明書

一、主題

使用簡易的合成路徑搭配元件製程的調控，設計出嶄新橘黃光銥金屬錯合物 **YIr** 並應用於高效率的發光電化學元件 (Light-Emitting Electrochemical Cells, LECs)。

二、動機

有機發光二極體 (Organic Light-Emitting Diodes, OLEDs) 具有光色飽和且元件可撓曲的性質，成為目前顯示器的霸主，但由於製程繁瑣及發光效率遲滯因素使成本非常昂貴，大部分民眾可望不可得。於是我們為了解決此現象，以銥金屬設計出非常簡易的錯合物，應用於發光電化學元件 (LECs) 中的主動層，達到高效率放光的效果。

三、目的

LECs 相較於 OLEDs 在元件設計上簡單得多，不論是製程時間或成本都能大幅降低。在本研究中，我們將全新的橘黃光銥金屬錯合物 (**YIr**) 搭配藍綠光銥金屬錯合物 (**BG**) 形成一個主-客體系統，並搭配一層散射基板，應用於 LECs 的主動層，試圖以簡單的 LECs 元件設計就可做出超越 OLEDs 的效率，期許民眾以低成本就可追求高程度的生活品質，同時也能縮減金錢上的流失。

四、設計大綱 (含流程圖及照片更佳)

首先，我們以 butylphenyl 化合物搭配 pyrazole，進行 Ullmann reaction 合成 C^N ligand (**bppz**)，再將它與 IrCl₃ 反應成為 dimer (**Ir₂(bppz)₄Cl₂**)，最後再與 N^N ligand (biphenylphenanthroline) 合成為最終產物 **YIr** (Figure 1)。

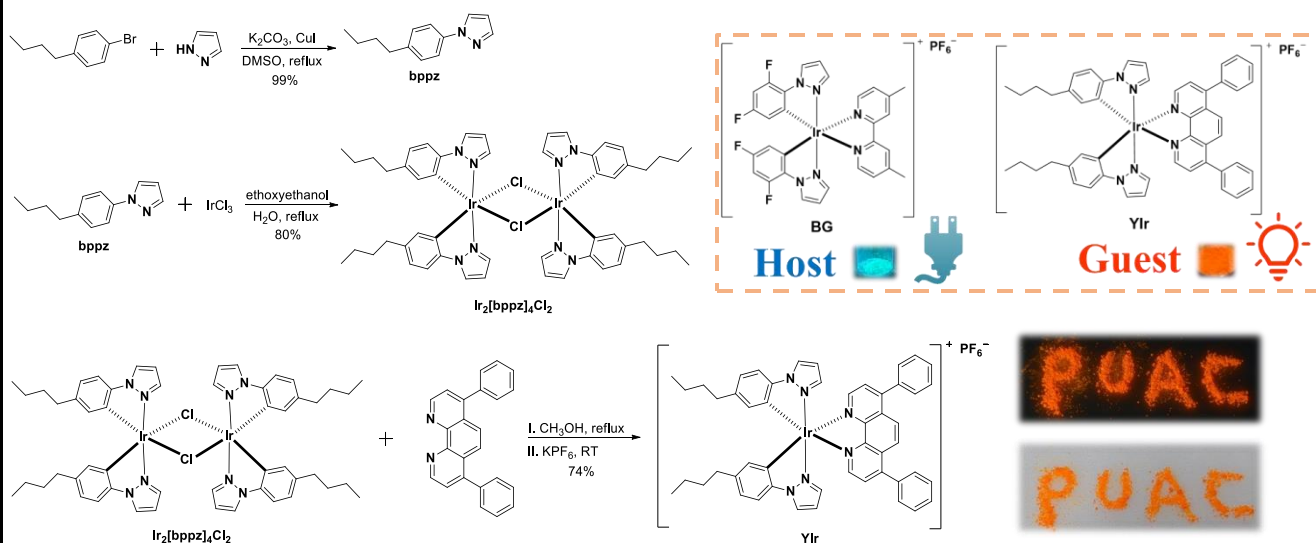


Figure 1. **YIr** 分子合成路徑、樣品外觀及主動層中主-客體材料設計

為了進一步探討此分子性質，我們以光物理、電化學以及熱穩定性等等的方式進行測試，如 (Table 1) 所示。其中發現此分子有非常高的耐熱性，熱裂解溫度為 356°C，推測原因為 **YIr** 分子具有高度剛性所造成，而這項因素使它具有商業化的優勢及可能性，期許進一步製成 LECs 元件 (Figure 2) 的效果能如預期達到高效率。

Table 1. Physical properties of **YIr**.

Complex	Absorption [nm] ^{a)}	Emission [nm] ^{a)}	Φ_{PL} [%] ^{b)}	τ_{obs} [ns] ^{c)}	$E_{1/2}^{\text{ox}}$ [V] ^{d)}	Electrochemical [eV]			TD-DFT [eV]			Optical [eV] ^{e)}		T_d [°C] ^{f)}
						HOMO	LUMO ^{e)}	Energy Gap	HOMO	LUMO	Energy Gap	Energy Gap		
YIr	264, 281	602	61	824	1.38	-5.70	-3.27	2.43	-6.00	-3.52	2.48	2.48	356	

^{a)}Measured in 1×10^{-5} M MeCN at room temperature. ^{b)}Solid-state absolute quantum yield was measured by employing an integrating sphere. ^{c)}Lifetime measurement was carried out in degassed MeCN (1×10^{-5} M, $\lambda_{\text{ex}} = 365$ nm). ^{d)}TBAPF₆ (0.1 M) was used as electrolyte in MeCN. Potential vs. ferrocene/ferrocenium redox couple. ^{e)}Derived from the onset of emission wavelength. ^{f)}Temperature at 5% weight loss to initial weight.

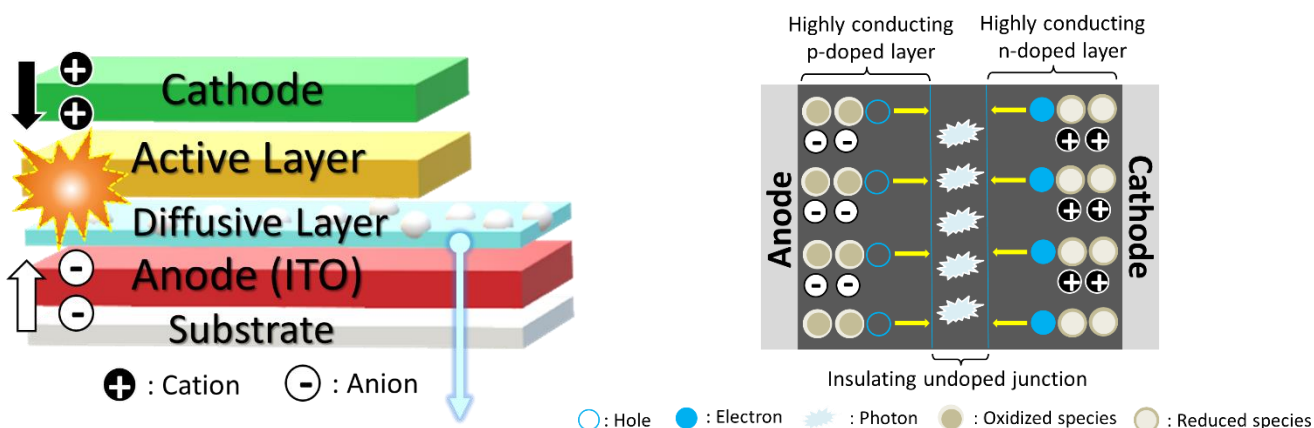


Figure 2. Light-emitting electrochemical cells device. White granules in diffusive layer are TiO₂ nanoparticles.