

有機半導体材料の自発的配向分極現象と分子間相互作用の相関

Correlation between Spontaneous Orientation Polarization and Intermolecular Interaction of Organic Semiconductor Materials

○長田 航平¹, 合志 憲一², 梶 弘典³, 安達 千波矢², 石井 久夫⁴, 野口裕¹(明治大学大学院理工学研究科¹, 九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター²,京都大学化学研究所分子材料科学研究領域³, 千葉大学先進科学センター⁴)○Kohei Osada¹, Kenichi Goshi², Hironori Kaji³, Chihaya Adachi², Hisao Ishi⁴, Yutaka Noguchi¹(Meiji Univ.¹, OPERA Kyusyu Univ.², Institute for Chemical Research, Kyoto Univ.³, CFS Chiba Univ⁴)

E-mail: cel71018@meiji.ac.jp

有機半導体材料の蒸着膜において膜厚に比例した表面電位が現れる現象を巨大表面電位 (GSP) と呼ぶ[1]。GSP の起源は分子の永久双極子モーメント (PDM) が自発的に配向することで生じる自発的配向分極 (SOP) 現象として説明できる。GSP はこれまで有機半導体素子の設計には考慮されてこなかった要素だが、最近になって有機 EL 素子特性への影響が明らかになってきた[2]。これまで GSP を示す有機半導体材料は、遷移双極子モーメント (TDM) ではランダム配向性を示すものがほとんどであったが、我々は、比較的分子間相互作用が強いと考えられる平行配向性分子でも GSP を示すことを報告した[3]。また、SOP により膜中に形成される電界強度 (GSP slope) と PDM の関係に注目し、分子間相互作用の影響を指摘した。しかしながら、SOP 形成機構に関する包括的な理解はまだ得られておらず、どのような分子がどのくらいの GSP を示すのか、といった傾向も不明である。そこで今回、さらに多くの材料に対して蒸着膜の表面電位特性を測定し、これまでに報告された GSP 材料と合わせて SOP の形成機構を検討した。

今回、2CzPN、4CzPN、4CzIPN 及び DACT-II などといった TADF 材料の蒸着膜の表面電位特性を測定し、これら全てにおいて GSP が現れることを見出した。Fig. 1 にこれまでに観測された各種蒸着膜における GSP slope の絶対値と PDM の大きさの関係をまとめた[1-6]。各シンボルは TDM の配向性を表し、逆極性の GSP を示した分子については白抜きで示した。TDM の配向性や分子形状に関わらず多くの材料が GSP を示しており、極性有機半導体の蒸着膜において SOP が非常に一般的な現象であることがわかる。また、Fig. 1 を見ると多くの分子が同じ直線上にあることがわかる (Fig. 1 破線)。同じ直線上の分子は同じ「分極のしやすさ (分極度)」を持つと考えられる。一方、この直線より下に位置している分子は分極度が小さいことを表しており、分極を減少させるなんらかの力が働いていることが示唆される。そこで二分子間の PDM を反平行に配置した時の、分子間相互作用エネルギーの分子間距離依存性を密度汎関数法で計算した (Fig. 2)。計算結果を見ると Znq₂、Ir(ppy)₃、DCJTb 及び B3PyMPM などの分極度の小さい分子は分子間相互作用が強いことがわかった。分子間に働く強い静電相互作用が SOP を打ち消す力になると考えられる。

分子配向のデータ提供及びそれについて議論してくださった横山大輔先生 (山形大) に感謝申し上げます。また、本研究の一部は日本学術振興会 (JSPS) の支援を受けて行った。量子化学計算は自然科学研究機構計算科学研究センターの利用により行った。

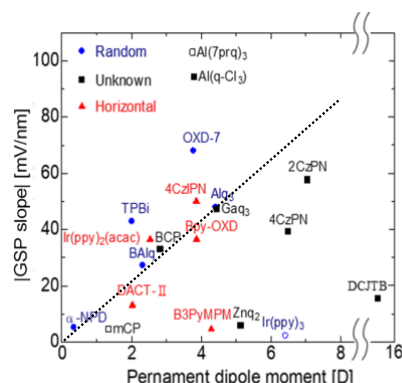


Fig.1 The relationship between the absolute value of GSP slope and permanent dipole moment in various organic materials.

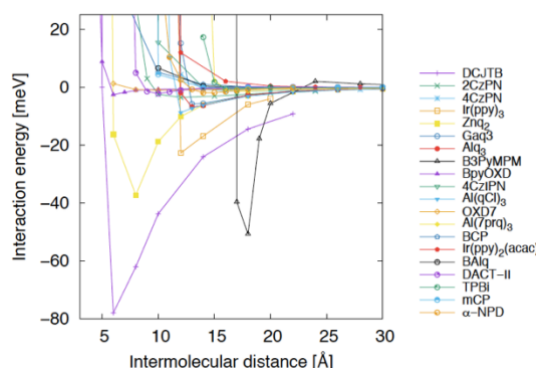


Fig.2 The calculated intermolecular interaction energies of dimers.

- [1] E. Ito et al., *J. Appl. Phys.* **92**, 7306 (2002).
 [3] 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会, 13p-B-12 (2016).
 [5] N. Hayashi et al., *IPAP Conf*, 69 (2004).

- [2] Y. Noguchi et al., *J. Vac. Soc. Jpn.* **58**, 109 (2015).
 [4] T. Isoshima et al., *Org. Electron.* **14**, 1988 (2013).
 [6] D. Yokoyama, *J. Mater. Chem.*, **21**, 19187 (2011).