

ゲスト・ホスト発光層における状態密度分布と ゲスト材料への電荷移動過程に関する研究

An investigation on the mechanism of the hole injection from a host material into a guest material in organic light emitting diodes.

中嶋 悠翔¹, ○藤邨 颯¹, 永瀬 隆^{1, 2}, 小林 隆史^{1, 2}, 麻田 俊雄^{1, 2}, 内藤 裕義^{1, 2}

(1. 大阪府立大, 2. 大阪府立大分子エレクトロニックデバイス研)

Y. Nakajima¹, ○H. Fujimura¹, T. Nagase^{1, 2}, T. Kobayashi^{1, 2}, T. Asada^{1, 2}, H. Naito^{1, 2}

(1. Osaka Pref. Univ., 2. RIMED)

E-mail: hayate.fujimura.oe@pe.osakafu-u.ac.jp

1. はじめに

一般に有機発光ダイオード (OLED) の発光層には、ゲスト・ホスト系が用いられる。ホスト材料としては 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (CBP) などが用いられるが、ゲスト材料の最低空軌道(LUMO)、最高被占軌道 (HOMO)は、必ずしも CBP の HOMO-LUMO 間に存在しているとは限らない。一例として Fig. 1 に CBP、BC-CY6 の化学構造と合わせて発光層のバンド図を示す[1]。このようなバンド構造の発光層は多用されているが、半導体物理の視点からは、フェルスター機構によるホストからゲストへの効率的なエネルギー移動がない限りゲストのみからの発光は観測されないと考えられる。

本研究では、分子力学法 (MM)、分子動力学法 (MD)、量子化学計算 (QM)[2]を用いて CBP、BC-CY6 のゲスト・ホスト系の軌道エネルギー、状態密度分布の計算を行うことで、CBP から BC-CY6 への正孔注入の機構を明らかにすることを目的とした。

2. 計算方法

はじめに 644 分子の構造最適化された CBP と 42 分子の構造最適化された BC-CY6 から構成される基本セルを作成した。この基本セルを用いて、定圧 (1 atm) 下で 0 K から 1000 K まで 0.3 ns 間で昇温する過程を含む、計 0.5 ns の MM-MD シミュレーションを行った。続いて定圧 (1 atm) 下で 1000 K から 300 K まで 0.3 ns 間で降温する過程を含む、計 0.5 ns の MM-MD シミュレーションを行った。上記の MM-MD シミュレーションにより得られたアモルファス構造を QM 計算の初期構造とした。QM 計算には cam-B3LYP/6-31G(d)法を用いて、軌道エネルギーおよび、アモルファス構造中での状態密度分布の計算を行った。なお、対象とする分子の波動関数の局在性を考慮し、最近接原子間距離が 2.5 Å 以内に存在する分子対の軌道エネルギー差を計算した。

3. 結果

QM 計算により算出した CBP と BC-CY6 の HOMO 準位の状態密度分布を Fig. 2 に示す。ゲスト・ホスト間の HOMO のエネルギー差は平均 0.69 eV となった。ホストからゲストへの正孔注入がカチオンラジカル CBP の半占有軌道 (SOMO) に BC-CY6 の HOMO に存在する電子が移動することで行われるため、カチオンラジカル CBP と BC-CY6 の状態密度分布を計算した。CBP の SOMO と BC-CY6 の HOMO の状態密度分布の計算結果を Fig. 3 に示す。正孔に対する注入障壁は平均 0.05 eV となり、室温で、CBP カチオンラジカルから BC-CY6 へ正孔が容易に注入されることが分かった。

当日は、分子間相互作用を考慮した二量体での計算結果も議論する予定である。

・謝辞 本研究の一部は、科学研究費補助金 (JP17H01265) の助成を受けた。

・参考文献 [1] S. Kumar, *et al.*, ACS Omega. **2**, 5348 (2017).
[2] T. Asada, *et al.*, Org. Electron. **53**, 142 (2018).

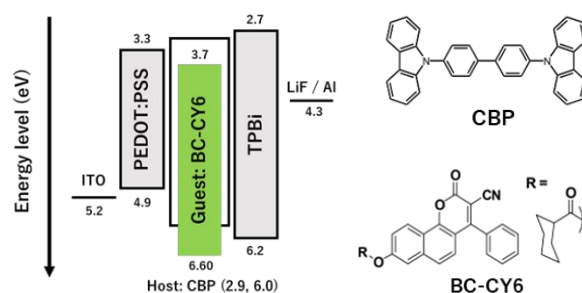


Fig. 1 Band diagram of the OLED and chemical structures of CBP and BC-CY6

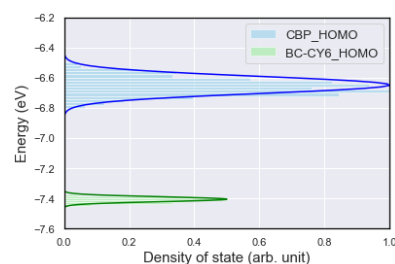


Fig. 2 Density of states of CBP (HOMO) and BC-CY6 (HOMO)

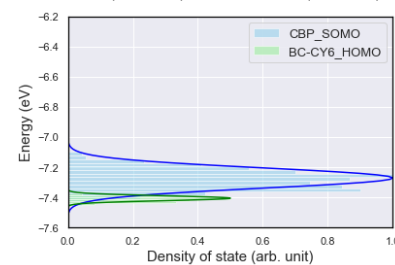


Fig. 3 Density of states of radical cation CBP (SOMO) and BC-CY6 (HOMO)