

## 量子分子動力学法に基づく発光材料の電気伝導度および

## 発光デバイスシミュレータの開発

○坪井秀行<sup>1</sup>、松浦麻子<sup>1</sup>、Chutia Arunabhiran<sup>1</sup>、朱 志剛<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、  
久保百司<sup>1,2</sup>、Carlos A. Del Carpio<sup>1</sup>、宮本 明<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>科学技術振興機構さきがけ(〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

<sup>3</sup>東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

【緒言】有機エレクトロルミネッセンス(EL)デバイスは、自発光薄型フルカラーディスプレイを実現する素子として期待を集めている。しかし、電子および正孔の移動度の制御、発光効率や発光色の制御などディスプレイ実現に向けて課題も多く、分子レベルの材料特性に立脚し、実際の素子構造も考慮したデバイスシミュレータの開発が求められている。本研究では、当研究室で開発した量子分子動力学プログラム“Colors”で得た分子軌道の空間分布とエネルギー準位から有機ELデバイス各層材料の電気伝導度を求め[1]、これを基に有機ELデバイス特性を予測するマルチスケール発光デバイスシミュレータを開発した。

【方法】発光層材料の電子状態を求めるために、当研究室で開発した量子分子動力学プログラム“Colors”を用いた。また、発光デバイスシミュレーションには、モンテカルロ法に基づく新たに開発したプログラムを用いた。

【結果】代表的発光層材料である Alq(Tris(8-hydroxyquinoline) aluminum)分子の電子状態の計算結果を実験値とともに表 1 に示す。表 1 からわかるとおり、バンドギャップが実験値 2.76 eV に対して 2.799 eV と良く一致した結果を得ることに成功した。また、バンドギャップのみでなく HOMO および LUMO のエネルギー準位の値も実験値と良い一致を示しており、本手法により系の電子状態が精度良く再現できていることがわかる。また図 1 に開発したマルチスケール有機ELデバイスシミュレータの模式図を示す。同シミュレータはデバイス各層をその電子移動度および正孔移動度に応じてそれぞれ仮想メッシュに細分化し、各メッシュに分子レベルで評価した電気伝導情報を付与して、モンテカルロ法によりデバイス全体の特性を予測するように設計して開発した。これにより移動度と膜厚の関係などデバイス設計に有効な知見を与えることができる。

表 1 Alq の HOMO 及び LUMO のエネルギー準位、エネルギーギャップの計算結果と実験値

	計算値	実験値
エネルギーギャップ (eV)	2.799	2.76
HOMO (eV)	-5.645	-5.65
LUMO (eV)	-2.846	-2.89

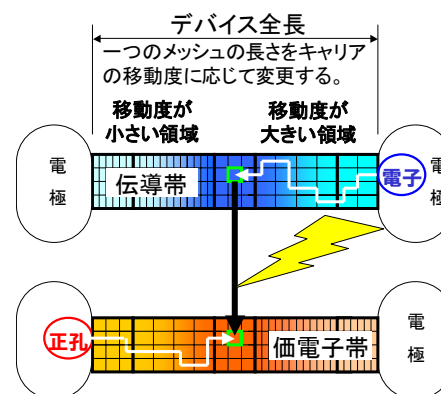


図 1 開発したマルチレベル有機ELシミュレータの模式図