

2P21

量子化学計算による有機層/陰極界面の電子注入制御に関する研究

○山下 格¹, 芹澤和実¹, 大沼宏彰¹, 三浦隆治¹, 鈴木 愛², 坪井秀行¹, 畠山 望¹,
遠藤 明¹, 高羽洋充¹, 久保百司¹, 宮本 明^{2,1}

¹東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6)

²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 EL デバイスは、軽量かつフレキシブルな発光デバイスであり、ディスプレイや照明への応用が期待されている。有機 EL デバイスの発光効率向上に向けて、陰極/有機層界面の電子注入を制御することが重要である。このために、陰極/有機層界面の電子状態を理論的に解明することが求められている。本研究では高分子の青色発光材料 poly-(9,9'-dioctylfluorene) (PDOF) 上に、陰極材料として Ca を堆積させた系について、量子化学計算を用いた電子状態の解析を行い、界面の構造と電子の注入との関係解明を試みた。

【方法】PDOF モデルの作成には古典分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO を用いた。このモデル上に Ca を 300 個、モンテカルロ法を用いて堆積させ、界面モデルを作成した。電子状態の解析には Tight-Binding 量子化学計算プログラム New-Colors を用いた。

【結果】界面モデルとしてポリマー鎖の配列方向の異なる 2 つのモデルを作成した。図 1 にこれらのモデルを示す。各モデルについて、New-Colors を用いて電子状態の解析を行った。図 2 に PDOF の結晶モデルと 2 つの界面モデルの部分状態密度をそれぞれ示す。ここで、0 eV を Ca の結晶におけるフェルミ準位とした。また、点線は各々のモデルにおける HOMO を示す。界面モデルと結晶モデルの結果を比較すると、Ca-4s 軌道と PDOF の伝導帯下端の C-2p 軌道とが相互作用し、C-2p 軌道が不安定化していることがわかる。また、この傾向は横配列モデルよりも、縦配列モデルでより顕著になっていることがわかる。この理由は、図 1 からわかるように、横配列モデルでは側鎖の上に Ca が堆積し、主鎖に広がる C-2p 軌道と Ca に広がる Ca-4s 軌道との距離が遠くなっていることが原因である。

ここで縦配列モデルにおける LUMO を図 3 に示す。Ca に広がる軌道と繋がった形で、PDOF 鎖に沿って分子軌道が広がっている。このことから、縦配列モデルでは容易な電子注入が期待される。以上、界面構造を制御することで、電子注入を制御できることが示唆された。

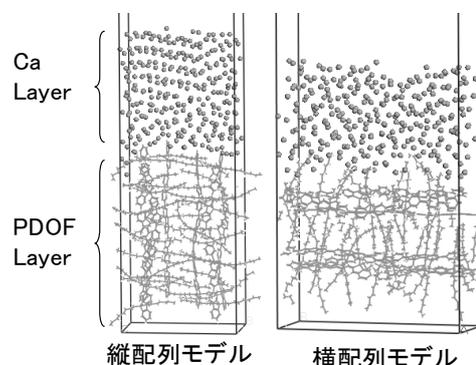


図1 計算モデル

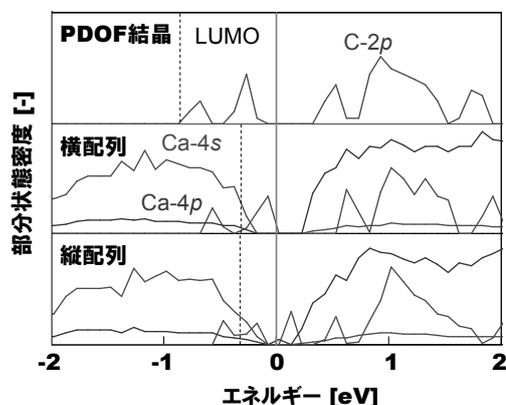


図2 部分状態密度

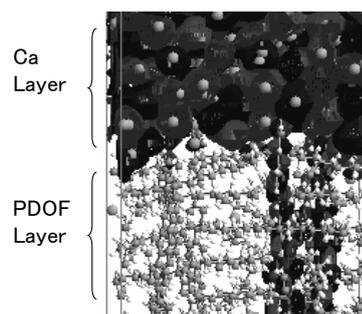


図3 縦配列モデルの分子軌道