

研究成果概要

有機分子の凝集状態における電荷輸送は、基礎的観点からだけでなく、有機エレクトロルミネッセンス(有機 EL)素子などへの応用の観点からも興味を持たれている。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの LAMMPS および Gaussian 09 プログラムを使用し、有機 EL 素子のホスト材料として広く用いられている 4,4'-bis(N-carbazolyl)-1,1'-biphenyl (CBP, 図 1)について、分子の化学構造から電荷輸送プロセスの詳細を理解することを目的とした計算機シミュレーションを実施した[1]。

分子動力学シミュレーションにより、4000 分子の CBP からなる非晶構造を計算した。得られた非晶構造から再配置エネルギーと 2 分子間の電荷移動積分を計算した。さらに、Marcus 理論に基づいて、再配置エネルギーと電荷移動積分から 2 分子間の電荷移動速度定数を算出した。最後に、電荷移動速度定数を kinetic Monte Carlo 法に組み込むことで、CBP の非晶構造における電荷輸送過程をシミュレートし、電荷移動度(μ)の電界強度(F)依存性を算出した。分子動力学シミュレーションには LAMMPS を、再配置エネルギーと電荷移動積分の計算には Gaussian 09 を使用した。図 2 に計算結果と time-of-flight 法による測定結果(Matsusue, N., Suzuki, Y., & Naito, H., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44**, 3691, (2005))を示す。計算結果は測定結果と良好な一致を示した。本研究では、凝集構造中における電荷サイトのエネルギー的なばらつきに加えて、再配置エネルギーに分子が周囲の分子から受ける立体的な影響を考慮している。このことにより、実験結果と良好な一致を示す電荷移動度が得られたと考えられる。

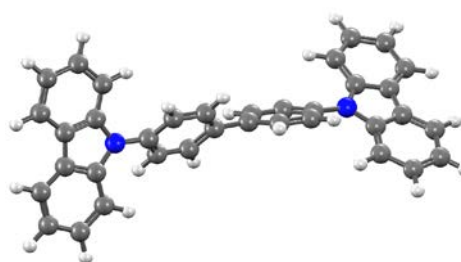


図 1. CBP の分子構造

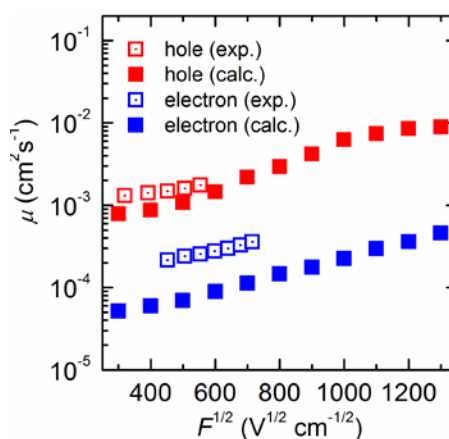


図 2. 電荷移動度の電界強度依存性

発表論文(謝辞あり)

[1] Uratani, H., Kubo, S., Shizu, K., Suzuki, F., Fukushima, T. & Kaji, H. *Sci. Rep.* **6**, 39128, (2016).