

ゲスト-ホスト系非晶質薄膜におけるゲスト分子の完全配向

(九大・分子システム¹, 九大・OPERA², JST-ERATO³, 名大院・理⁴,
九大・シス情⁵, 九大・WPI-I²CNER⁶, ふくおか IST・i³-OPERA⁷)

○小簗剛^{1,2,3}, 相良雄太², 田中啓之^{2,4},
興雄司^{3,5}, 中村望^{2,6}, 藤本弘^{2,7}, 安達千波矢^{1,2,3,6,7}

**Complete Orientation of Guest Molecules Doped in Glassy Host Matrix
(Program for Leading Grad. Sch., Kyushu Univ.¹, OPERA, Kyushu Univ.²,
JST-ERATO³, Grad. Sch. Sci., Nagoya Univ.⁴, Grad. Sch. Info. Sci. Eng.,
Kyushu Univ.⁵, WPI-I²CNER, Kyushu-Univ.⁶, i³-OPERA, Fukuoka IST⁷)**

○Takeshi Komino^{1,2,3}, Yuta Sagara², Hiroyuki Tanaka^{2,4}, Yuji Oki^{3,5},
Nozomi Nakamura^{2,6}, Hiroshi Fujimoto^{2,7}, Chihaya Adachi^{1,2,3,6,7}

【序】有機デバイスにおける電気および光学特性の向上を目的として、過去10年余りの間に非晶質薄膜の分子配向秩序が盛んに調べられてきた [1]。初期の研究ではニート薄膜が主な研究対象であったが、有機ELの発光効率が劇的に向上することから、発光層に用いられるホスト-ゲスト系薄膜の分子配向が最近注目を集めている [1,2]。実際に、これまで、ホスト分子の種類 [3,4] や成膜中の基板温度 [5] がゲスト分子の配向に影響を及ぼすことが報告されている。しかしながら、ゲスト分子が完全に水平配向した例は報告されておらず、さらに、ゲスト分子の配向秩序の熱的安定性も明らかにされていない。

そこで、我々は、これらゲスト分子の配向秩序に関する基礎的な知見を得るために、長い棒状分子が水平配向性を示すことに着目した。Cis-BOX2は、高いEL発光効率を示す棒状分子である。この分子を用いて、完全配向を得るための方法と、形成された配向秩序の熱的安定性を調べたので報告する。

【完全水平配向 [6]】実験に用いた分子を図1(a)に示す。可視領域で透明なCBP、mCBP、TPBiから成るホストマトリックスにCis-BOX2を6wt%の濃度でドーピングし、ガラス基板上に15nmの薄膜を成膜した。成膜後、基板（薄膜の裏面側）を半円筒型の石英プリズムにマッチングオイルを介して固定し、プリズム側からCis-BOX2の光励起発光強度を基板法線の周りの角度に対して測定した。

図1(b)-(d)にp偏光の発光強度の角度依存性を示す。測光波長は510nmであり、各プロットは基板法線方向(0°)の強度で規格化してある。得られた実験結果を光学モードシミュレーションにより解析することで、分子の配向秩序パラメータSを調べることができる。このSは、すべてのゲスト分子が基板に対して水平、無秩序、垂直に配向している場合、それぞれ-0.5、0、1の値をとる。図1(b)-(d)のように、300Kで成膜した場合、Cis-BOX2の分子配向はホストマトリックスに弱く依存し、 $S = -0.41 \sim -0.42$ となることが分かった。このことは、3種のうちどれをホストマトリックスに選んだ場合においても、Cis-BOX2が基板に対

して同程度に水平配向する傾向を示唆する。さらに、成膜中の基板温度を 200 K にすると、分子配向のホストマトリックス依存性が強まることを見出した。特に、CBP ホストマトリックスにおいてこの傾向は顕著であり、CBP 中で *Cis*-BOX2 分子が完全に水平配向する結果を得た ($S = -0.50$)。現時点で完全配向形成に関する詳細な機構は明らかでないが、我々はこのことについて、ホストの表面平滑性や分子密度が関係しているのではないかと考えている。

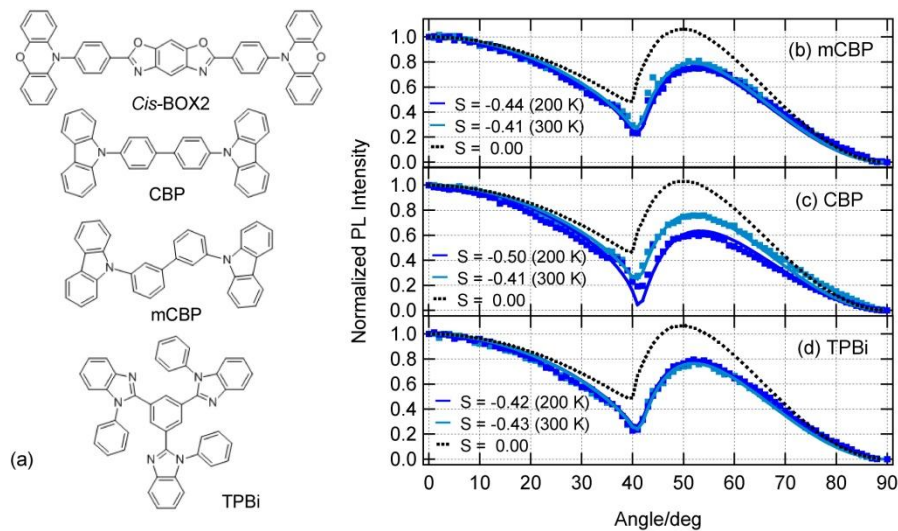


図 1 (a) 用いた材料の分子構造 (b) mCBP、(c) CBP、(d) TPBi をホストマトリックスに用いた 6wt%-*Cis*-BOX2 (15 nm) 薄膜における角度依存発光測定結果

【分子配向の熱的安定性 [6]】 ニート薄膜では、形成された分子配向秩序がガラス転移温度 (T_g) 以上でアニールを行うことによりランダム化することが知られている。ドープ膜ではどうなるのかを調べるために、200 K で成膜した薄膜をいくつかの温度でアニールし、その分子配向秩序を計測した。その結果、ドープ膜においてもゲスト分子の配向秩序がアニールによりランダム化し、その温度はホストマトリックスの T_g 付近であることを見出した。

【謝辞】

本研究は、最先端研究開発支援プログラムおよび科研費若手(B) (16K17972) の助成により実施されたものである。また、本研究の一部は、文部科学省 WPI 研究プログラムの支援のもとに実施されたものである。

【参考文献】

1. Yokoyama, D. *J. Mater. Chem.* **2011**, 21, 19187.
2. Kaji, H., Suzuki, H., Fukushima, T., Shizu, K., Suzuki, K., Kubo, S., Komino, T., Oiwa, H., Suzuki, F., Wakamiya, A., Murata, Y., Adachi, C., *Nat. Commun.* **2015**, 6, 8476.
3. Moon, C.-K., Kim, K.-H., Lee, J.-W., Kim, J. *J. Chem. Mater.* **2015**, 27, 2767.
4. Mayr, C., Brütting, W., *Chem. Mater.* **2015**, 27, 2759.
5. Komino, T., Tanaka, H., Adachi, C. *Chem. Mater.* **2014**, 26, 3665.
6. Komino, T., Sagara, Y., Tanaka, H., Oki, Y., Nakamura, N., Fujimoto, H., Adachi, C. *Appl. Phys. Lett.* **2016**, 108, 24116.