

1C08 分子軌道エンジニアリングによる単一分子発光素子の新規提案

(九大先導研) ○野崎大二郎、吉澤一成

【序】有機EL素子は、高効率な電子-光変換系としてフラットパネルディスプレイへの応用という観点から注目を集めている。簡易な応用の面で既に実用化はされているものの、オプトエレクトロニクスデバイスとしてはまだ基礎的段階にあり、発光効率や寿命などにおいてその課題は多い。有機EL素子の目標の一つは、出来るだけ高い効率で発光を起こすこと、つまり単一分子発光に他ならない。これまでに提案された単一分子発光素子は、従来の有機ELで用いた電子輸送材料と正孔輸送材料を単に発光層の分子の両側に連結させる単純なモデルであったが、その単一分子内での正孔と電子の輸送の効率に関する見解については何も提案されておらず、高効率の単分子発光素子を構築する上でそのキャリアの振る舞いに関する見解を得ることは重要な課題である[1]。

【設計方法】本研究では、フェニルアセチレン骨格を有する dendritic 構造における集光過程に関する研究成果[2,3]で得られた以下の原理を応用し、単一分子発光素子を設計し理論的に考案した。その原理とはメタフェニレン基が π 共役を分断し、 π 軌道を局在化させ高効率で電子と正孔を輸送できるというものである。図1に考案した分子 **1** を示す。まず分子中央に発光部としてペリレンを置き、その両脇に正孔輸送を担うフェニルアセチレンオリゴマーをメタ位で連結し、さらにその右側を部分的にフッ素置換し、これを電子輸送部とした。

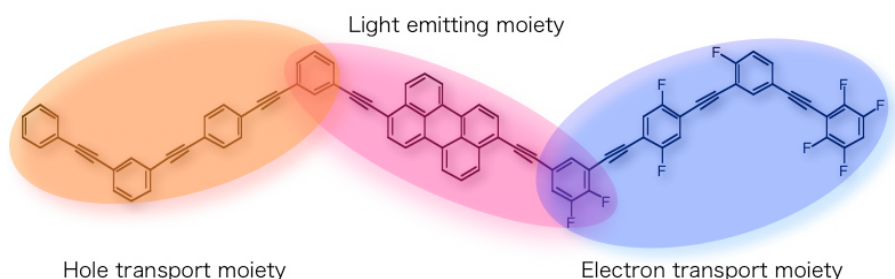


図1. 単一分子発光素子の設計に用いた分子 **1**.

【結果と考察】図2に B3LYP/6-31G**の精度で計算した分子 **1** の分子軌道とそのエネルギーを示す。部分的なフッ素置換によりこの分子の対称性は崩されている。またフッ素原子の電子吸引効果により、これらの分子軌道の分布はそのエネルギーに応じて周辺から中心へと局在している。これらの局在軌道は電子とホールを発光部に効率的に輸送するエネルギー勾配を持った分子軌道を持っている。この分子に仕事関数が 4.8eV の金電極を陽極として、2.8eV のカルシウム電極を陰極として図3のように接続しバイアスをかければ、ホールと電子は、分子の末端で局在化している HOMO-2 と LUMO+2 からそれぞれ注入され、高効率な分子内でのキャリア輸送を経て、中央のペリレン部位で単一分子発光が起こるものと期待され

る。図2の分子軌道図はB3LYP/6-31G**レベルで計算されているが、PM3法でも他の密度汎関数法でも分子軌道の分布やそのエネルギーの相対的な関係にはほとんど変わりが無い。分子軌道のデザインにより機能制御をするこの方法を応用すれば、単一分子発光素子の可能性が広がるものと考えている[4]。

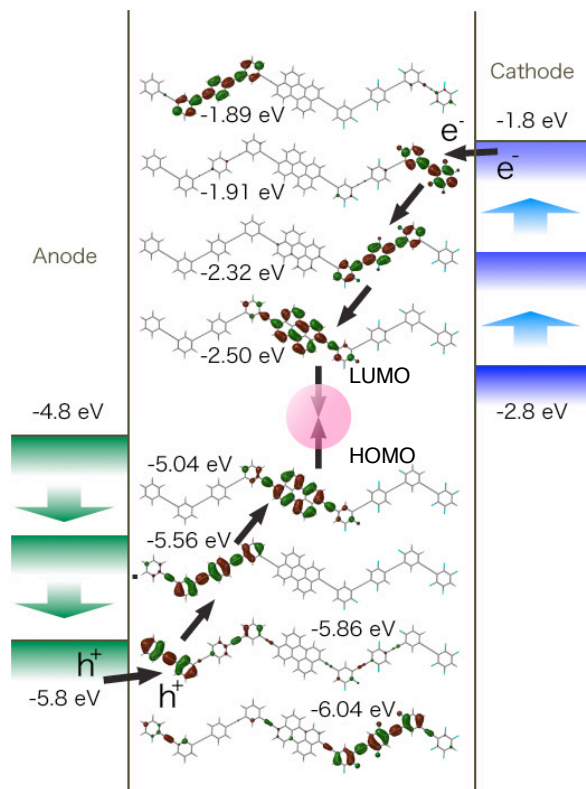


図2. 分子1のフロンティア分子軌道.

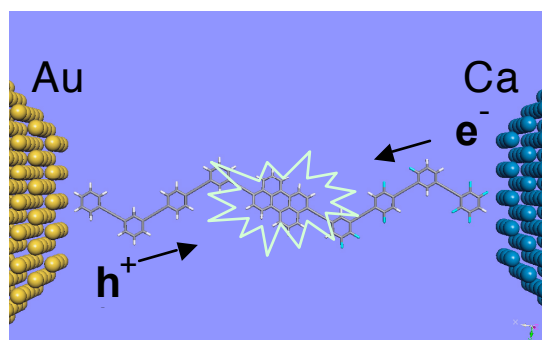


図3. 単一分子発光素子の概略.

【今後の展望】 この系では金属電極と分子の相互作用によるクエンチング等の効果を考慮していないため、今後はそれらも考慮に入れた高効率な単一分子発光素子の設計を行う必要がある。

【参考文献】

- [1] Y. Wada, M. Tsukada, M. Fujihira, K. Matsushige, T. Ogawa, M. Haga, S. Tanaka, Jpn. J. Appl. Phys. 39 (2000) 3835.
- [2] Z. Xu, J. S. Moore, Acta Polym. 45 (1994) 83.
- [3] T. Tada, D. Nozaki, M. Kondo, K. Yoshizawa, J. Phys. Chem. B 107 (2003) 14204.
- [4] D. Nozaki, K. Yoshizawa, Chem. Phys. Lett. *in press*.