



有機材料の発光特性シミュレーション 高効率有機発光材料の開発

研究・開発機関 : 住友化学(株)
 利用施設 : (独) 海洋研究開発機構 地球シミュレータ
 計算規模 : 計算速度 7.8Tflops (243 ノード)
 利用ソフトウェア : 時間依存密度汎関数法 (TDDFT)*

Before

●有機LED(有機EL)発光素子に用いられる高分子有機材料の発光・吸収スペクトルを精度よくシミュレーションすることは、計算量が膨大になるため、これまで不可能でした。

After

○地球シミュレータを利用して、時間依存密度汎関数法(TDDFT)で解析を行うことにより、高分子有機材料の分子構造から、発光材料として特に重要な発光スペクトルという光学特性を予測することが可能になりました。

背景と目的

有機LED(有機EL)発光素子は、自発光で視認性や応答速度に優れ、低消費電力であることなど優れた特性があり、次世代の表示素子として大いに期待されています。また素子構造の単純化が容易であることから、大型基板にも対応でき、製造コスト的にも優位性があります。高分子LEDは、図1に示すように、陰極と陽極の間に高分子を用いた発光層を挟んだ単純な構造をしていることから、薄い表示装置として仕上げることも可能であり、フレキシブルディスプレイに用いることも期待されています。

高分子LED表示素子の開発の鍵を握る高分子有機材料は、構造的にも電子的にも多様性があるため、目的の物性をもつ分子構造を探索するには、様々な組み合わせを試す必要があります。

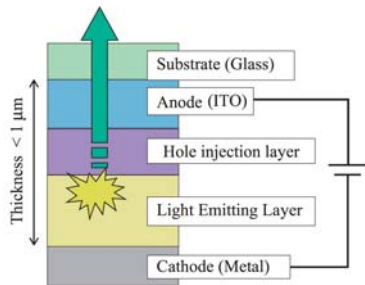


図1. 高分子LEDの構造

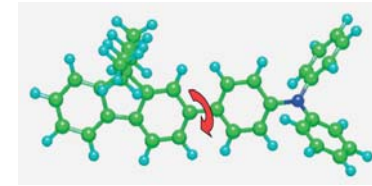


図2. 高分子LED材料の構造例(アミンを共重合させたフルオレン)

利用成果

これら材料の開発において、最近の計算技術の進歩により、光の吸収・発光スペクトルなどの材料物性を比較的精度よく計算することが可能になってきました。

励起状態を表す時間依存密度汎関数法

(TDDFT)は、電子状態を時間依存させることにより、発光など励起状態に関わる現象を比較的良好に記述できる手法として最近注目されている方法です。このTDDFTを用いて、青色の高分子LED材料として知られている9,9-ジアルキルフルオレンについて吸収・発光スペクトルを求めた結果を図3に示します。得られたスペクトル形状およびピーク位置を実験結果と比較してみると、非常によく一致していることが分かります。

TDDFT解析を行うことにより、分子構造から、発光材料として特に重要な発光スペクトルという光学特性を予測することが可能になりました。また、大規模な系で詳細な電子状態解析をすることにより、発光部周辺の状態密度に関する知見も得られるようになりました。今後は、必要な光学特性に合わせ、分子構造を変える設計も可能になるものと期待されます。

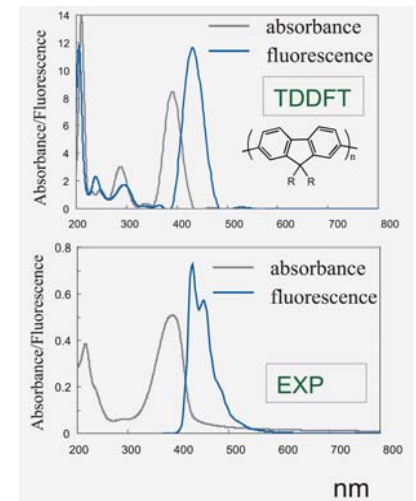


図3. フルオレンの光吸収・発光特性の計算結果(上)と実測結果(下)

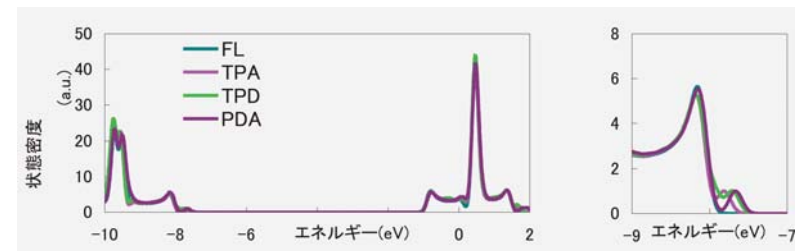


図4. フルオレン、及びフルオレン-アミンから構成される化合物の状態密度の計算例