

## GCOE特別講演会報告書

開催日時： 2008年4月8日 午後1:30～3:30

開催場所： 理学部6号館 571号室

講師： ドイツBAFS社 研究員 永田勇樹

演題： “Atomistic Simulation of Charge Mobility in Amorphous Alq3:  
Origin of Poole-Frenkel Behavior”

近年、有機 LED の性能や寿命が大幅に改善され、フラットディスプレイの有望な素材として注目されているが、このような有機 LED の材料の中で、アモルファス Alq3 は実験・理論の両面から電荷移動の研究対象となってきた。しかし、アモルファス有機材料中での電荷移動のメカニズムはまだ未知の部分が多い。その一つが、Poole-Frenkel 振る舞いと呼ばれる電荷移動度の電場に対する非線形振る舞いである。様々な理論的モデルを使って Poole-Frenkel 振る舞いが説明されてきたが、それらはお互い矛盾した仮定を抱えている。今回の講演では、分子動力学シミュレーションを用いて、理論モデルで用いられた仮定を検証し、Poole-Frenkel 振る舞いのメカニズムについて、お話いただいた。

永田氏は昨年化学専攻より博士号を取得し、現在ドイツBAFS社で活躍している。物理化学系の研究室より 20 名ほどの参加があり、特に、院生から多くの質問があり、活発な議論が交わされた。



(理・化学 谷村吉隆 記)