

## 2020年度 利用報告書

### 有機光学材料の探索

利用者氏名:

○野間 大史(1)

(1)創発物性科学研究センター ソフトマター物性研究チーム

#### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

光学物性の理解は現在かなり進んでおり、計算による予測の精度が著しく向上しつつある。そのためこれまでの論文に関して、理論計算による機構の説明や定量的解析を要求されることが多々あった。これまで共同研究者に計算をお願いしていたが、より深い研究を行うために自分で計算し理解することが重要であると考え利用を開始した。とりわけ光物性に関して研究を行っており、

#### 2. 具体的な利用内容、計算方法

○分子の最安定コンフォメーションの計算

○HOMO-LUMO の軌道ならびに交換積分や振動子強度の計算

○最安定2分子間距離の計算・距離を固定し2分子の最安定角度の計算

全て Gaussian を用い、基底関数は検証のため複数試した

#### 3. 結果

本年度が初めてスパコンを利用し計算を始めたため、過去の研究で共同研究者によって行ってもらった計算の再現を行い、無事成功した。その後、共同研究者にアドバイスを頂きながら、現在開発中の分子の三重項励起状態と一重項励起状態のエネルギー準位差( $\Delta E_{ST}$ )をTD-DFT法により見積もった。これは自分が調べている分子が、熱活性遅延蛍光(TADF)を示すことに気づき、どのように分子構造を工夫すればさらに性能を向上できるか計算から探索した。その結果、いくつか有望な設計が見いだされ現在実際に分子合成をチームのテクニカルスタッフの方をお願いしている。

#### 4. まとめ

色々と最初とまどったが何とか自分で計算を走らせ、必要な情報を得るところまで成功した。自分で計算が出来ること知

りたいことを自分のタイミングで計算でき、非常に有望なツールだと認識している。TADF材料はあくまで研究の一部であり、他にも電荷移動錯体なども調べており、それらについても計算化学により物性を予測していきたい。

#### 5. 今後の計画・展望

ドナー・アクセプター分子からなる共結晶材料で本当に電荷移動が起きるかどうかを、予め理論計算により議論できるように現在文献を読んで勉強している。近いうちに自分で出来るようにしたい

#### 6. 利用がなかった場合の理由