

2021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

OLED を代表に有機発光材料は様々な分野で活躍し、現在も盛んに研究が行われている。本研究では現在行なっている有機材料の発光特性を計算により評価・スクリーニングすることで研究開発の加速を目的としている。

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

これまで開発した分子並びに、その類似誘導体(まだ合成は行っていない)ものを中心に、三重項励起状態と一重項励起状態のエネルギー準位差(ΔE_{ST})ならびにその振動子強度をTD-DFT法により見積もった。 ΔE_{ST} が小さく、振動子強度の大きな分子群は熱活性遅延蛍光(TADF)を示すため、OLEDの発光材料として有望であるからである。これは昨年度の計算でいくつか有望なものが見つかったため本年度も引き続き評価を行なった。

また電荷移動錯体に関しても励起状態を計算し、吸収・発光スペクトルを実験結果と照らし合わせ、観測された物性に関して考察を行なった。

4. まとめ

TADF材料のスクリーニング手法として計算が有効であることを改めて確認できた一方、スクリーニングの結果と実験結果の齟齬に悩まされた一年であった。これは実際の実験条件(薄膜中)と計算で仮定している真空条件でコンフォメーションが大きく異なるものほど、誤差が生じていると考えている。実験結果らどのような分子が誤差が生じやすいかを蓄

積し、今後のスクリーニングに活かしたい。

5. 今後の計画・展望

計算に関してかなりスムーズに利用できるようになってきた。より多く活用し、多数の分子をスクリーニングし有望な分子を発見したい

6. 利用がなかった場合の理由

