

プロジェクト名(タイトル):有機光学材料の探索

○野間 大史(1)

(1)理研における所属研究室名: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

全て Gaussian を用い、基底関数は検証のため複数試した

3. 結果

本年度は有機無機ペロブスカイトのスクリーニングに着手した。無機物が入ることで最初苦労したが、ある程度妥当な計算結果を得られるようになった。

励起状態の軌道を可視化することで光起電力効果の起源について考察できた。

4. まとめ

現在昨年度までの計算・実験結果をまとめている。また新たにペロブスカイト系の研究テーマに着手し始めた。この系に関しても現在論文をまとめているので、近いうちに成果として報告できるように努力する。

5. 今後の計画・展望

無機材料にも適用できるようになってきたので、今後もっと幅広い材料群に適用をしていきたい。計算できることから逆算して研究テーマを広げることに挑戦したいと考えている。

6. 利用がなかった場合の理由