

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

昨年度に引き続き、有機無機ペロブスカイトのスクリーニングを行った。計算によるスクリーニングが進んだ一方で、実際に計算で有望と思われる材料合成ならびに材料評価に多くの時間を費やしたが、論文成果としてまとめられ現在執筆を行っている。

4. まとめ

本年度は少し実験を重点的に行なったが、HOKUSAI による計算は計算を進める上で非常に重要であった。

5. 今後の計画・展望

ペロブスカイトに限らず今後もっと幅広い材料群に適用をしていきたい。一方、ある程度計算ができるようになり、スクリーニングを広く行ったものの、材料として設計できなかったものも多かったため、そのあたりしっかり考慮して設計・計算を行い、限られたリソースを効率よく使用していきたい。

6. 利用がなかった場合の理由