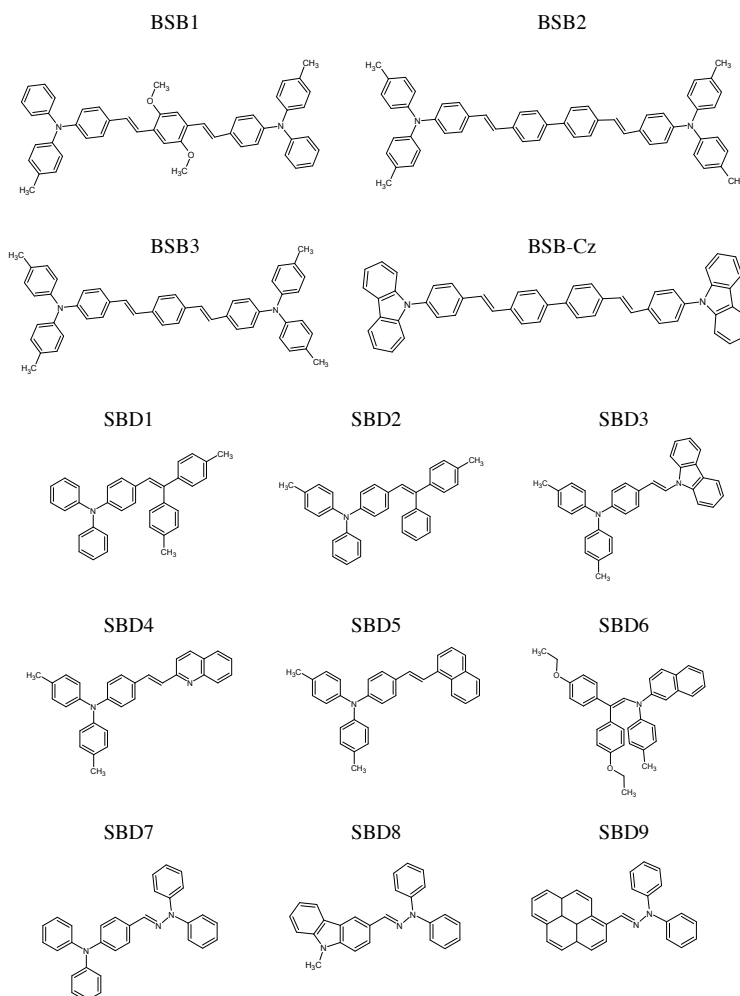


有量子化学計算に基づく電子状態データベースによる  
有機レーザー材料の理論設計指針の探索  
(お茶大基幹研究院<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○森 寛敏<sup>1,2</sup>

Theoretical design of organic laser materials  
based on quantum chemical electronic structure database

(Ochanomizu Univ.<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>2</sup>) ○Hirotoishi MORI<sup>1,2</sup>

**概要** 有機 EL 材料の開発分野では、熱活性遅延蛍光材料の台頭により、元素戦略的材料開発が達成された。一方、同じ有機発光デバイスであっても、有機レーザー材料の開発は、有機 EL 材料の開発に比べ遅れている。その理由の一つに、有機レーザー材料の開発では、発光過程の設計に加え、極力、生成した励起子を失活させないよう、種々の失活過程を全て閉じて行く必要があることが挙げられる。そのような励起子失活過程の一つとして、本研究では特に「励起状態吸収」に着目し、励起状態吸収を精密予測する量子化学計算のスキーム開発と、その結果のデータベース化を検討した。材料候補となる分子群について網羅的な量子化学計算を実施、量子化学に基づくマテリアルズ・インフォマティクスの観点から、有機レーザー材料の開発指針の導出を試みたので報告する。



**方法** 有機レーザー材料候補として用いられた 13 種のスチリルベンゼン誘導体を銕型として、系統的に候補化合物を発生させた。これらの分子は構造の自由度が高い。そこで薄膜中の最安定配座を捉えるため、焼きなまし法を併用した分子動力学計算 (UFF) によって大域的安定構造に近づけた後、(TD)DFT/PBE0/6-31G(d)レベルで  $S_0$  ( $S_1$ ) 構造最適化計算を行った。加えて、得られた構造において励起特性の評価を行った。得られた最適化構造と電子状態をデータベース化し、レーザー発振効率との相関を調査した。

### 結果と考察

ここでは紙面の都合上、概要のみを示す。 $S_0$ - $S_1$  遷移に伴う構造変化を表す RMSD 値は、実験的に求められた放射失活速度定数  $k$  と概ね相関した (図)。 $S_0$ - $S_1$  構造変化の大きさの違いを支配する諸物理量を詳細に検討したところ、良いレーザー材料を作る為にはまず、フランクコンドン領域における  $S_0$ - $S_1$  差電子密度が小さく  $S_0$ - $S_1$  遷移に寄与する軌道の重なりが大きい化合物を作ればよいことが分かった。更

にレーザー材料として望ましいことを保証する為には発光効率を下げる他の無輻射遷移過程が少ないことを確かめる必要がある。更なる詳細は当日報告する。

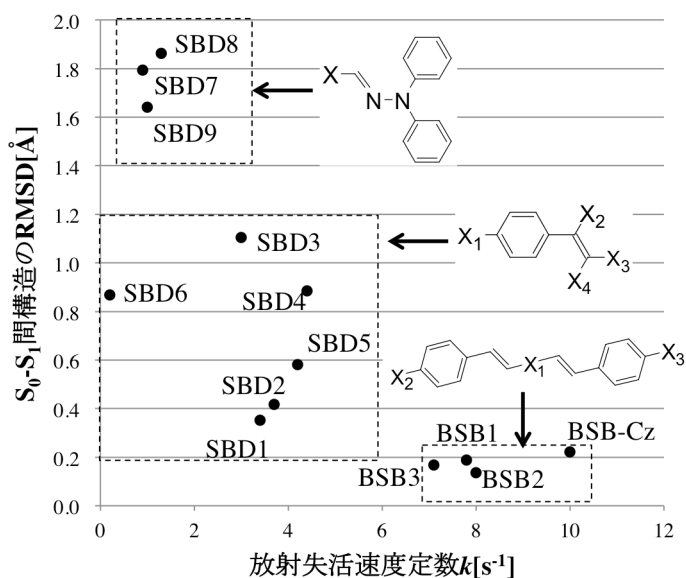


図 13 種のスチリルベンゼン誘導体の  $S_0$ - $S_1$  構造の RMSD と放射失活速度定数  $k$  の実験値の相関 (図中構造式の X は H,C,N,O を含む置換基を表す)

**参考文献** [1] T. Aimonio, Y. Kawamura, K. Goushi, H. Yamamoto, H. Sasabe, C. Adachi Appl. Phys. Lett. (2005), 86, 071110. [2] Y. Kawamura, H. Yamamoto, K. Goushi, H. Sasabe, C. Adachi Appl. Phys. Lett. (2004), 84, 2724.

**謝辞** 本研究の一部は JST-CREST および日揮・実吉奨学会研究助成金の支援により実施された。また、計算には分子科学研究所計算科学研究センターの計算資源を使わせて頂いた。