

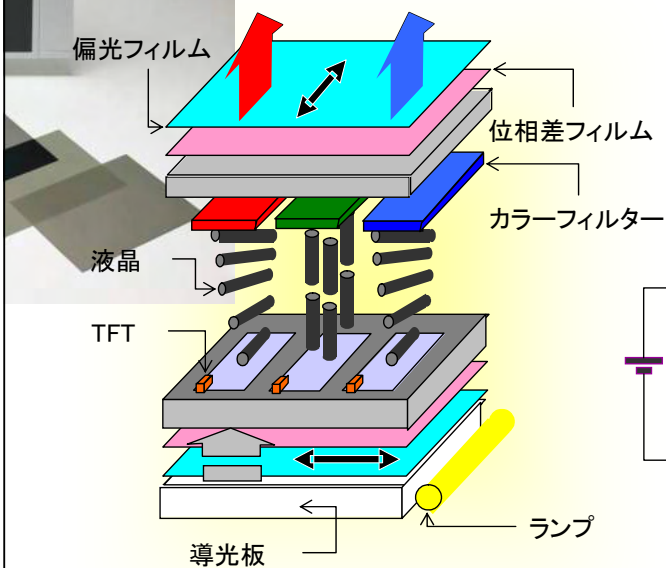
高効率有機EL材料の開発

住友化学 筑波研究所
善甫 康成、秋野 喜彦、石田 雅也、石飛 昌光、栗田 靖之
海洋開発研究機構
新宮 哲、西川 憲明、数納 広哉

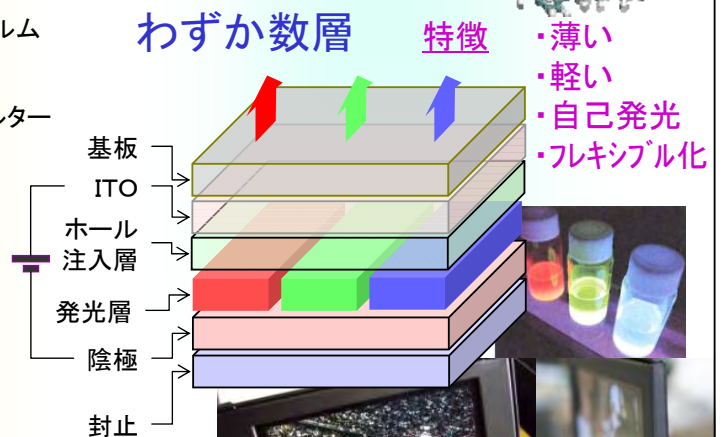
SUMITOMO CHEMICAL

LCDから高分子有機ELへ

液晶ディスプレイの構造



高分子LEDの構造



数十層に及ぶ光学シート

CDT社提供

時間依存密度汎関数法(TDDFT)

Kohn-Sham equation (Hohenberg and Kohn 1964, Kohn and Sham, 1965)

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_a V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_a) + V_{e-e} + \mu_{XC}(n(\vec{r})) \right\} \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

$$\text{where } n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2$$

多体効果

基底状態の理論

Time-Dependent Kohn-Sham equation (Runge and Gross 1984)

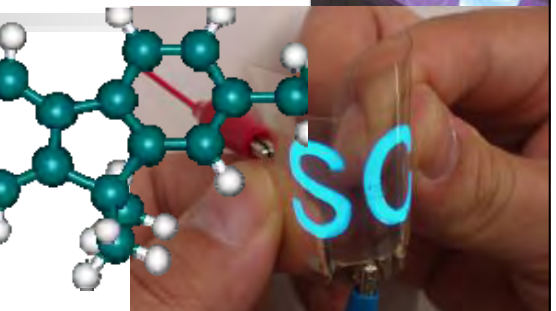
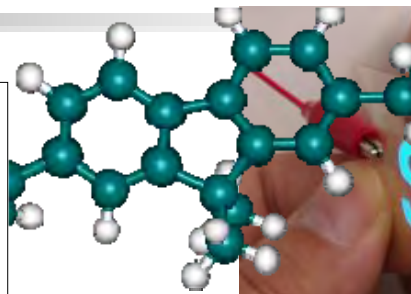
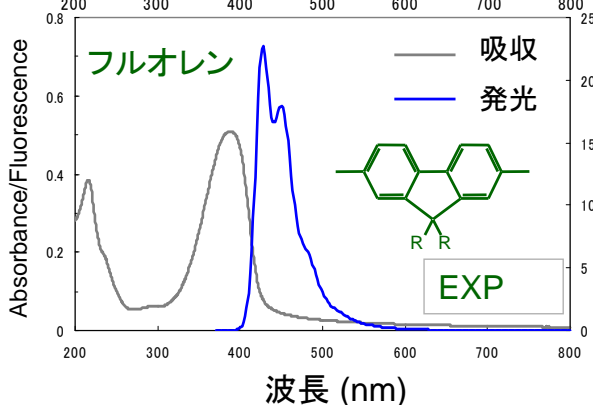
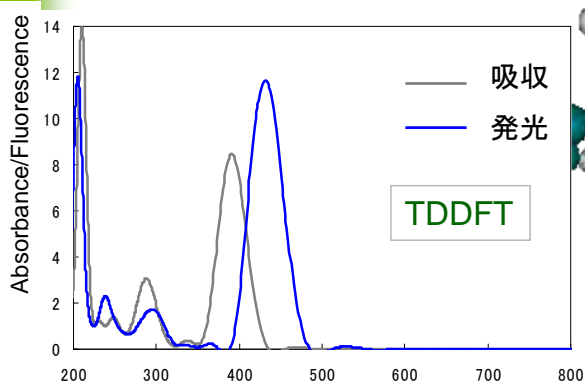
$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + \sum_a V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_a) + V_{e-e} + \mu_{XC}(n(\vec{r}, t)) + V_{ext}(\vec{r}, t) \right\} \psi_i(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\vec{r}, t)$$

$$\text{where } n(\vec{r}, t) = \sum_i |\psi_i(\vec{r}, t)|^2$$

外部刺激

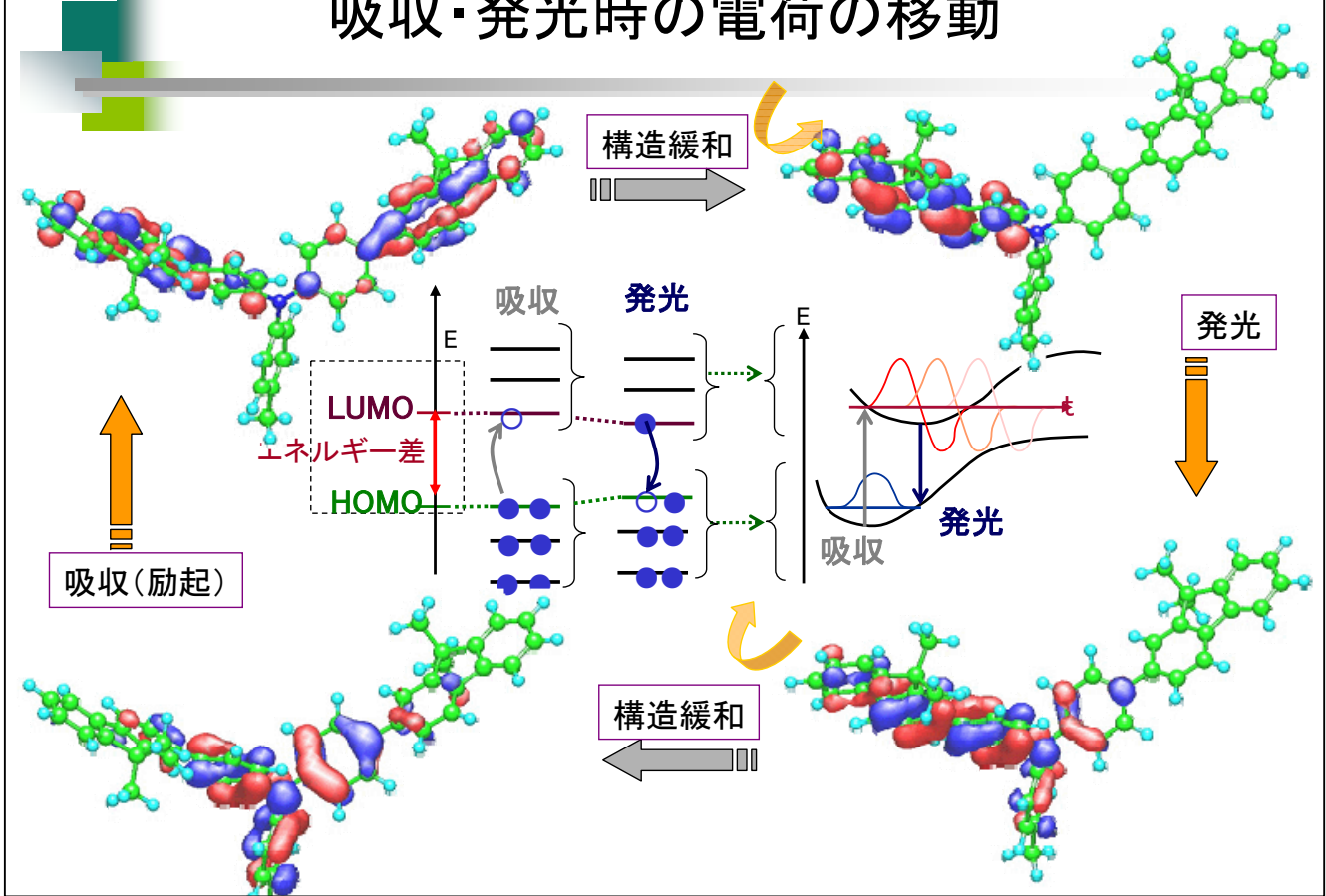
励起, ダイナミクス... → 光学特性など

吸収・発光スペクトルの予測

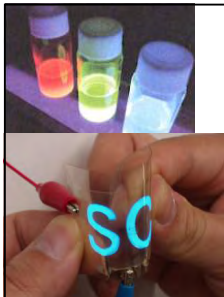


CDT社提供

吸収・発光時の電荷の移動

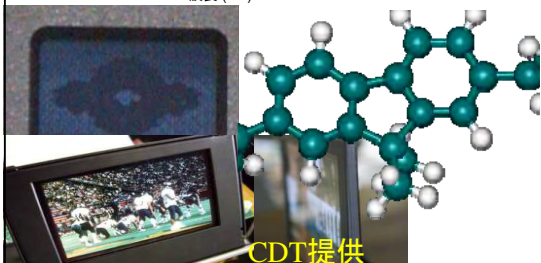
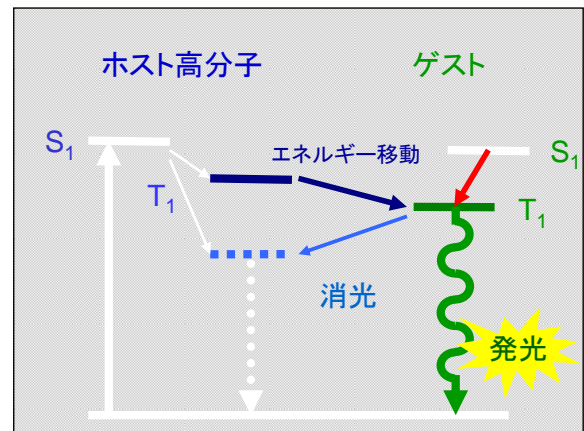
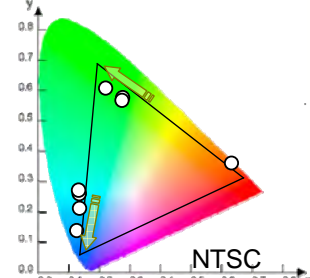
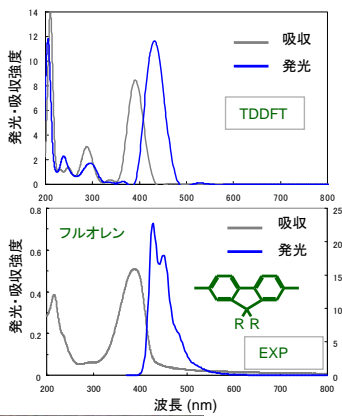


高い発光効率を実現するには



蛍光材料
吸収・発光スペクトルの予測

さらに、
燐光材料(三重項材料)



CDT提供

ホスト高分子 ゲスト錯体

T1のエネルギー配置が重要 → T1の予測

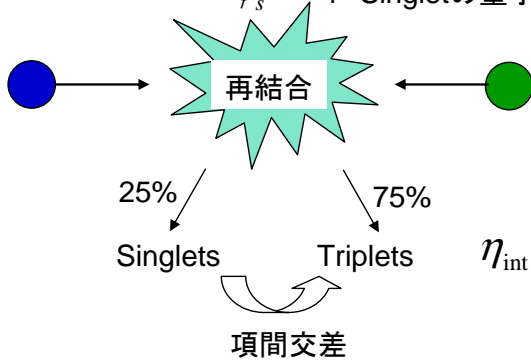
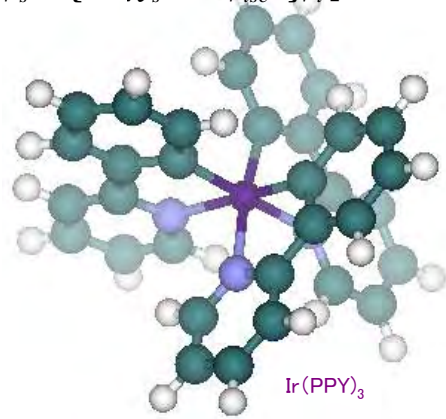
燐光材料が注目される理由

高効率 & 長寿命

外部量子効率: η_{ext}

$$\eta_{ext} = \eta_p \cdot \eta_{int} = \eta_p \cdot \gamma [\chi_s (1 - \phi_{isc}) \phi_s + \{1 - \chi_s (1 - \phi_{isc})\} \phi_t]$$

- η_p : 取り出し効率
- χ_s : Singlet生成比
- γ : キャリアバランス因子
- ϕ_s : Singletの量子効率



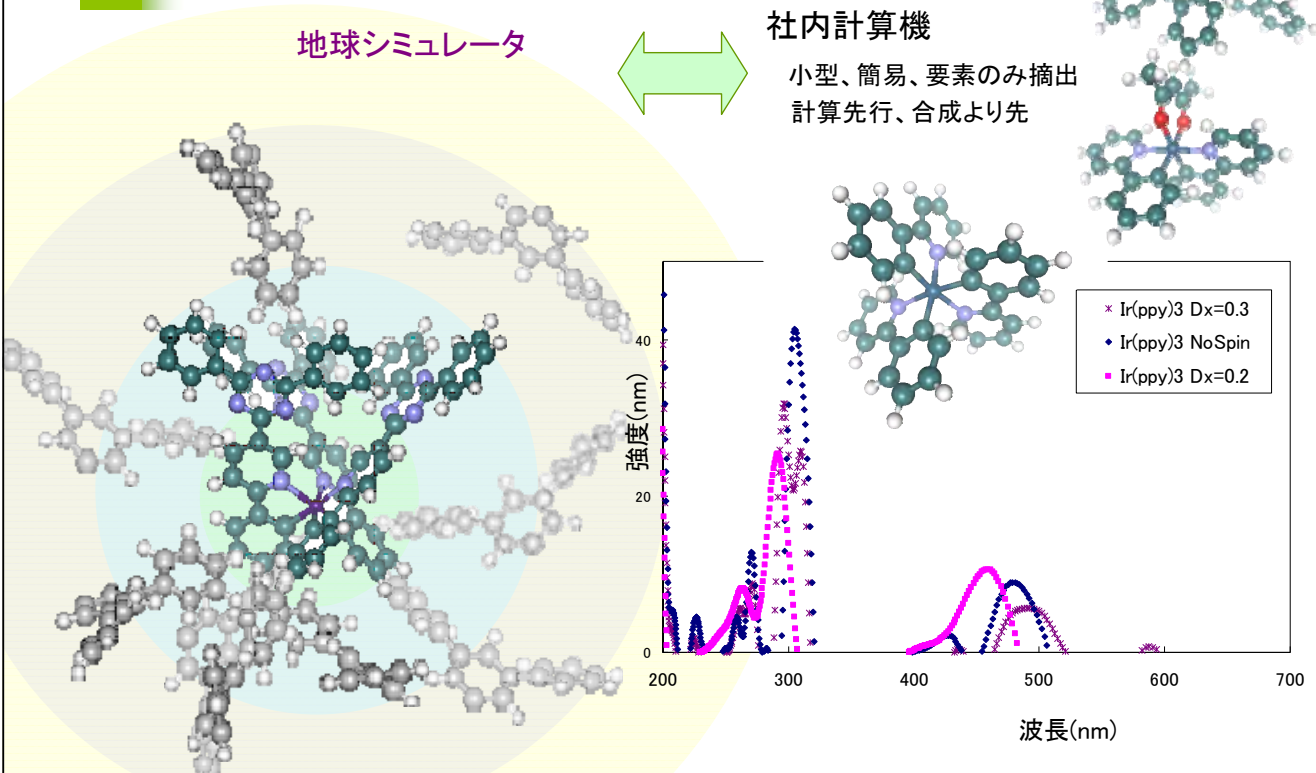
燐光ならば、理想的であれば
100%の内部量子効率も可能(!)

地球シミュレータの活用

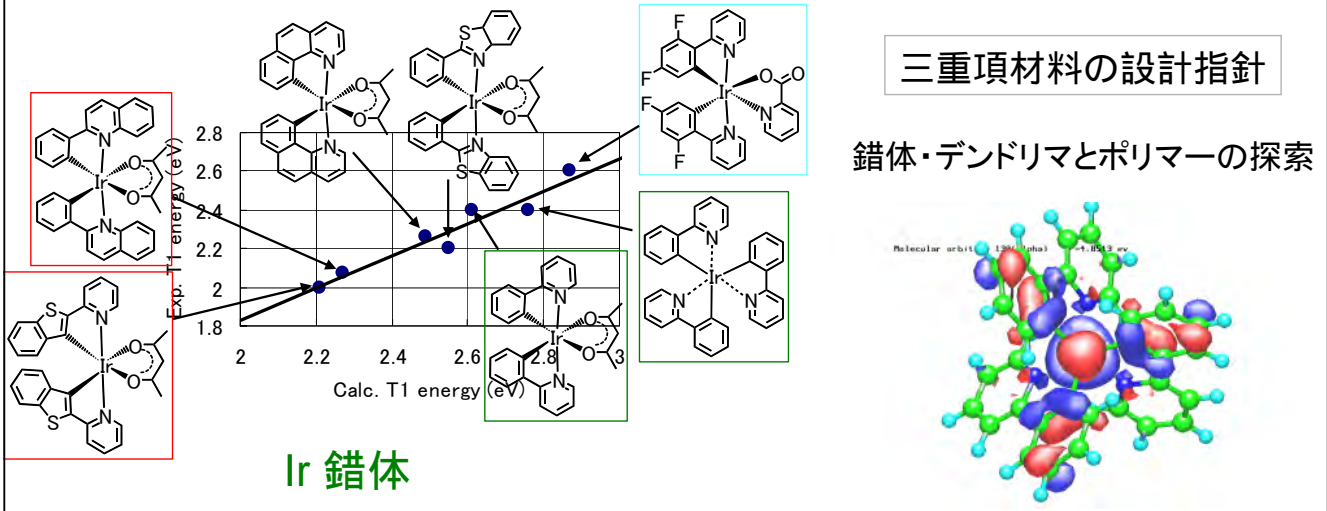
地球シミュレータ

社内計算機

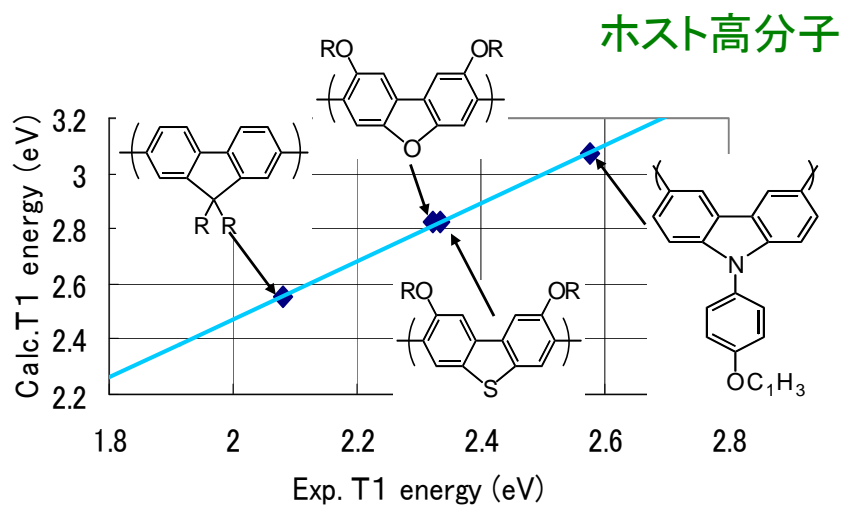
小型、簡易、要素のみ抽出
計算先行、合成より先



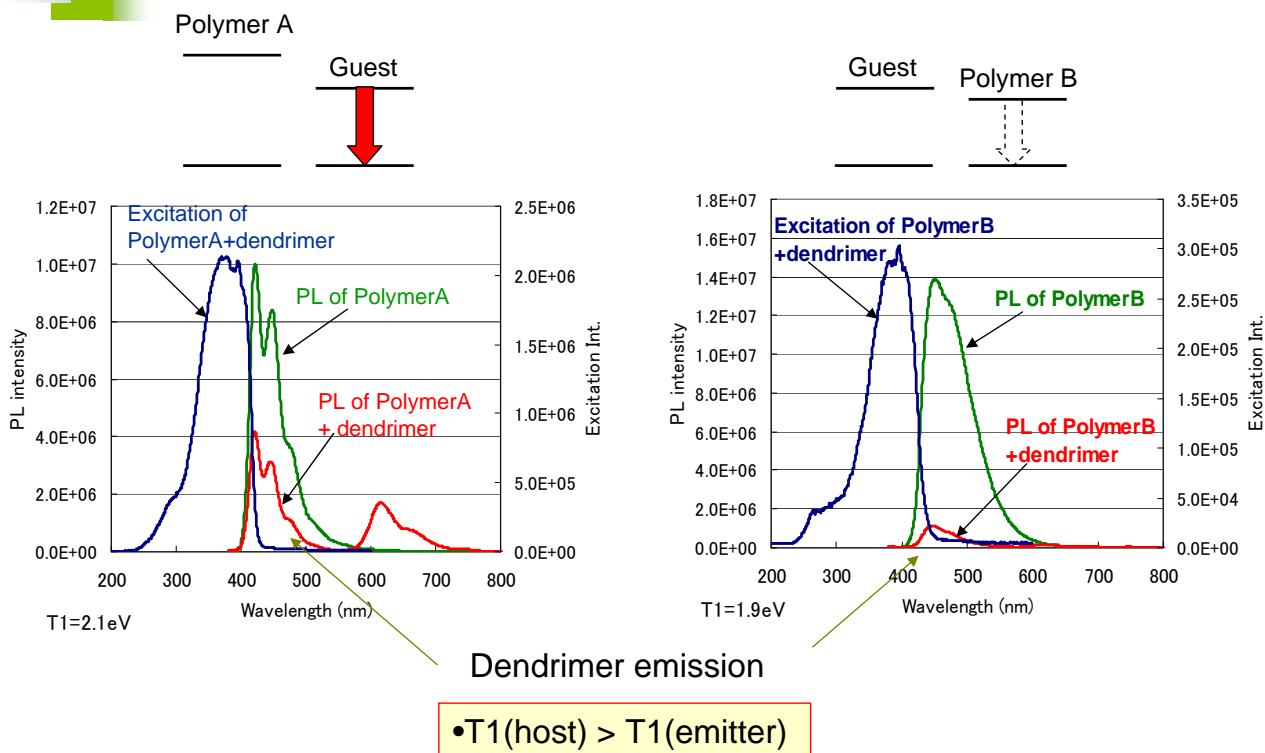
錯体のモデリング



ホスト高分子のモデリング



実験結果



結論

高分子発光材料の開発（夢の実現へ）

- ✓ 構造が非常に簡単、省エネルギー
- ✓ 塗布、インク化により、大面積化が可能

計画) 燐光材料の開発へ

- ✓ シミュレーションにより実験に先行して材料設計

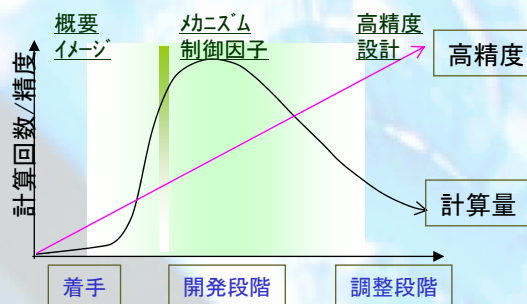
開発の方向を
明確にする！

活用) 原理原則(ES)とモデル化(社内)

- ✓ TDDFT計算向き(実空間実時間)
- ✓ 物理量の計算が容易
- ✓ 一度の計算で全スペクトルがわかる

産業での計算材料科学

- ✓ 幅広い領域
- ✓ 研究開発ステージと計算精度



研究開発ステージと計算精度