



HOKKAIDO UNIVERSITY

# AMBITIOUS LEADER'S PROGRAM

Fostering Future Leaders to Open New Frontiers in Materials Science

## スピン軌道相互作用の計算 とその応用：有機 EL に 用いられるイリジウム錯体 における発光過程



小関 史朗 教授

大阪府立大学大学院理学系研究科 教授

2021年11月26日(金) 13:00~14:30

Zoom によるオンライン講演会

URL : <https://us06web.zoom.us/j/89161359828?pwd=d0prN1IxcjZwZkJxKzZlQ0s1SCtQZz09>

ミーティング ID: 891 6135 9828 パスコード: 784501

スピン軌道相互作用の量子化学計算を用いた応用研究の例として、有機 EL (OLED と呼ばれる) に用いられるイリジウム錯体に関する研究結果を紹介する。

発光効率の高い有機 EL デバイスでは、燐光が用いられる。高い発光効率の燐光を得るためには、スピン軌道相互作用の大きな重元素を含むイリジウム錯体や白金錯体が用いられる。これらの錯体の電子状態および発光過程を解釈するには、スピン軌道相互作用の効果を見積もる必要がある。本研究では、多配置 SCF (MCSCF) オービタルを用いた多配置参照配置間相互作用 (MRCI) 波動関数を用いてスピン軌道相互作用積分を見積もり、Fermi の黄金則に基づいて発光スペクトルの形状を予測した。また、無輻射過程である  $S_1 \rightarrow S_0$  遷移、 $S_1 \rightarrow T_1$  遷移および  $T_1 \rightarrow S_0$  遷移の速度を見積もり、燐光スペクトルに与える効果についても考察した。これらの結果にもとづいて、発光効率の高い錯体を設計するための理論的手法を提案していく。さらに、次世代デバイスと考えられている遅延蛍光を用いたデバイス (TADF) についても言及する予定である。

連絡先：北海道大学大学院理学研究院化学部門 武次徹也

(Tel: 011-706-3535, E-mail: take@sci.hokudai.ac.jp)