

3/17, 2012

スーパーコンピュータ「京」を知る集い

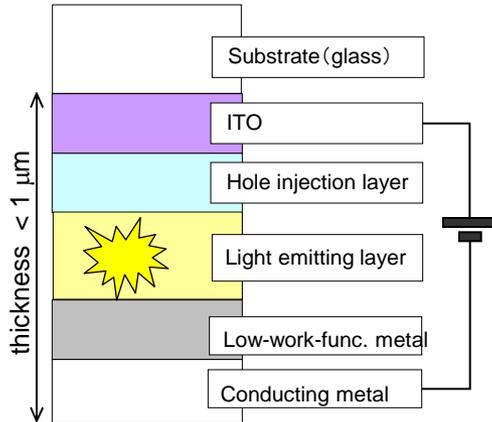
光る有機材料の開発 と 計算機シミュレーション

法政大学 情報科学部
善甫 康成

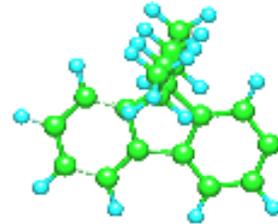
高分子発光材料の展開



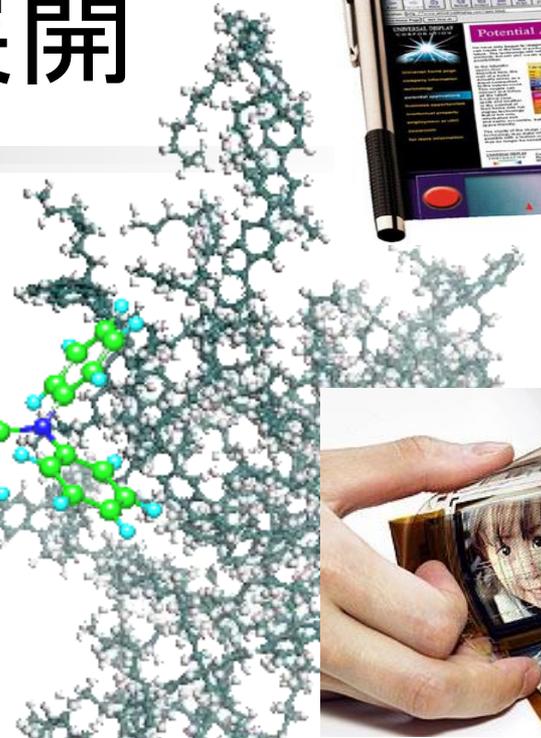
有機発光材料



高分子の多様性



プロセス
インクジェット/
リソグラフィー



天井照明



壁照明

フレキシブル
スクリーン



ロールスクリーンTV

フラットパネル ディスプレイ

液晶

低い、光の利用効率

Filter Type

プラズマ ディスプレイ
BAM の劣化

はじめ青っぽく、
後に赤っぽくなる

Light Emitting

LED アレイ
GaN LED

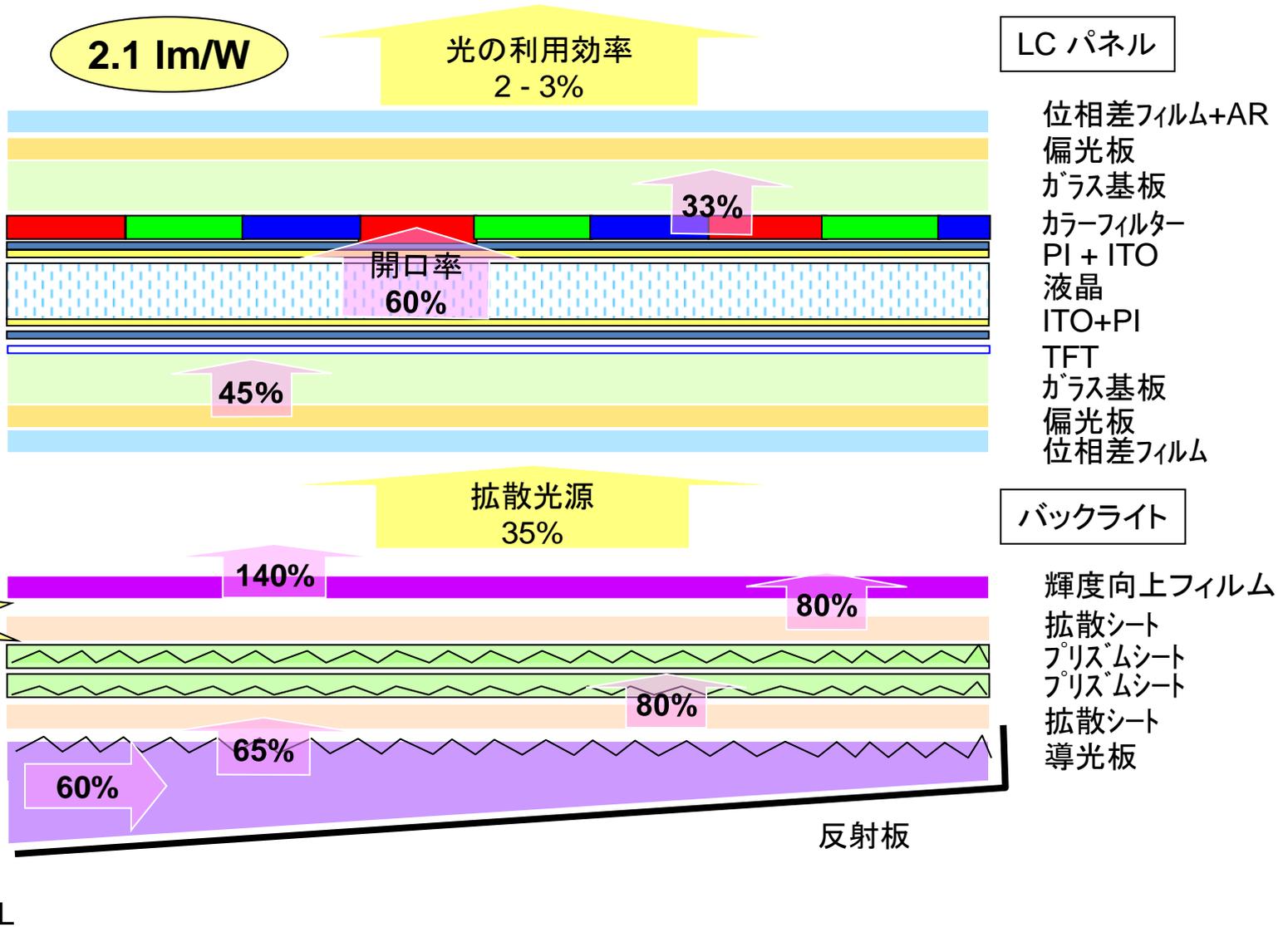
外での利用

有機 LED
低分子系
高分子系

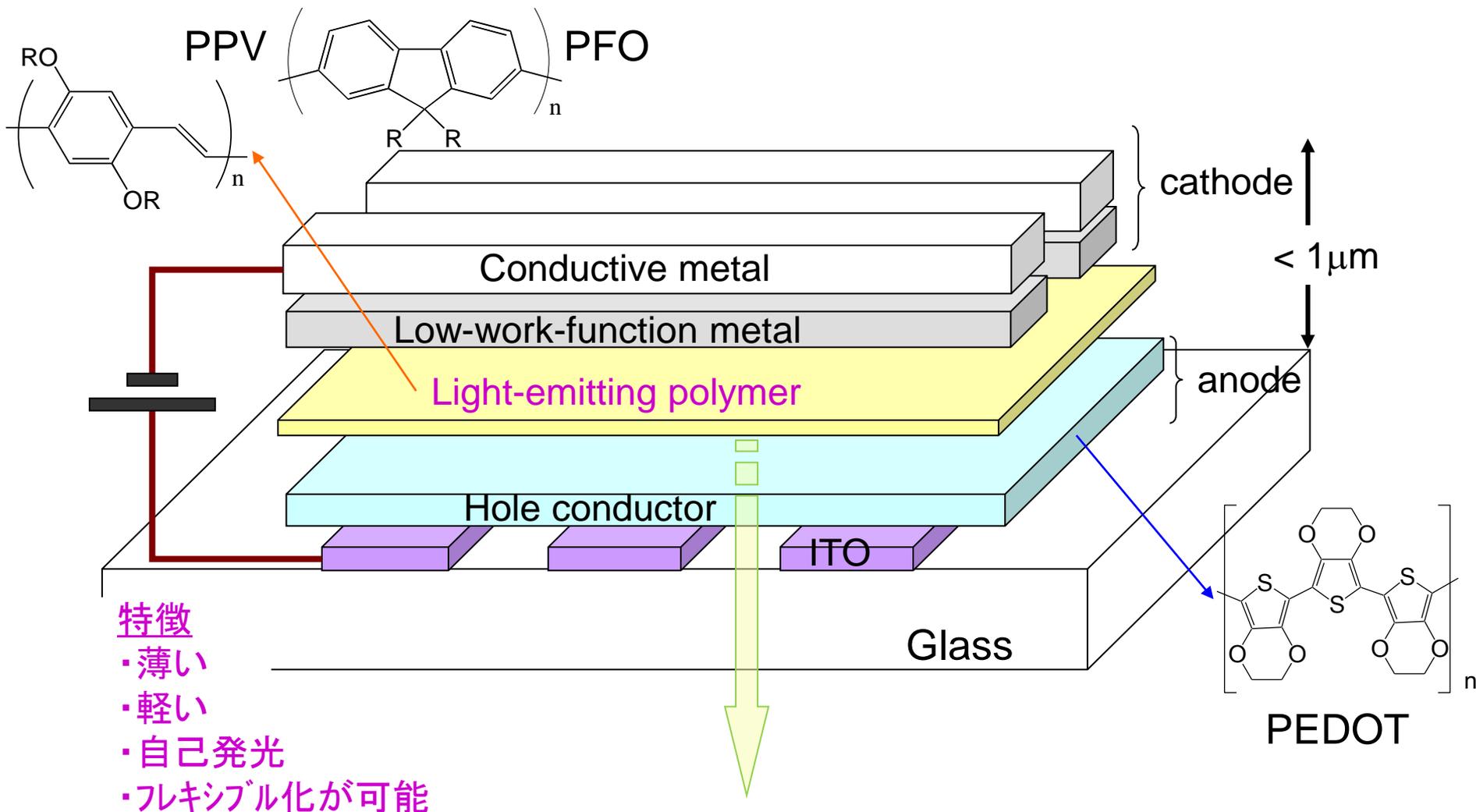
蒸着過程が必須
塗布可能



LCDの構造と光の利用効率



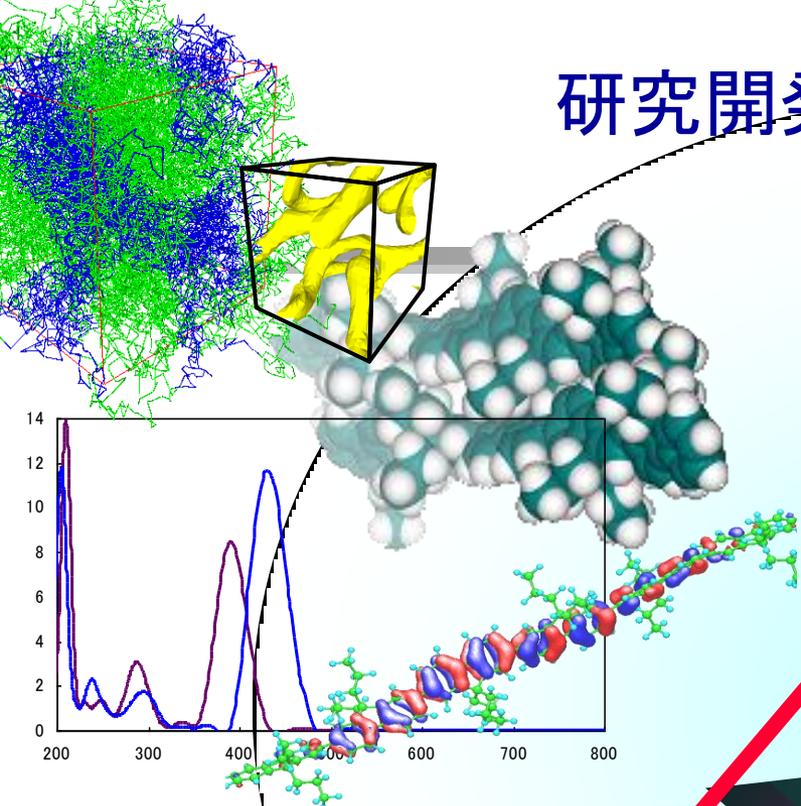
高分子LEDの素子構造



特徴

- ・薄い
- ・軽い
- ・自己発光
- ・フレキシブル化が可能

研究開発プロセス



新材料の創出

合成・加工技術

シミュレーション技術

物性、実用特性評価技術

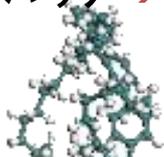
構造解析技術

開発のループと技術の融合・複合化

夢とアイデアは「研究開発」そのもの

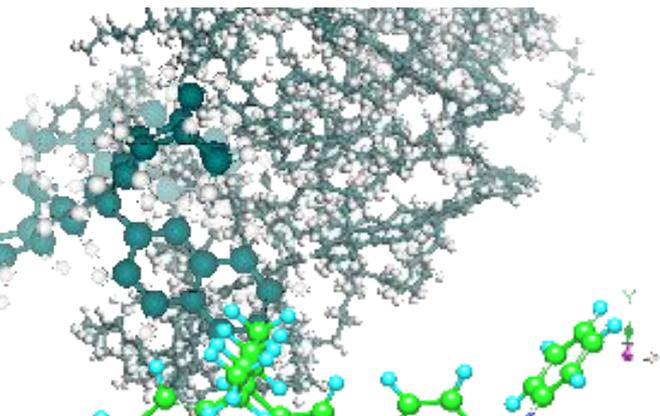
研究開発の進め方

- スピード → 明確なターゲット
- 協力体制 → プロジェクト体制
- フィードバック → 設計/ 作成/ 分析



どの段階でも、

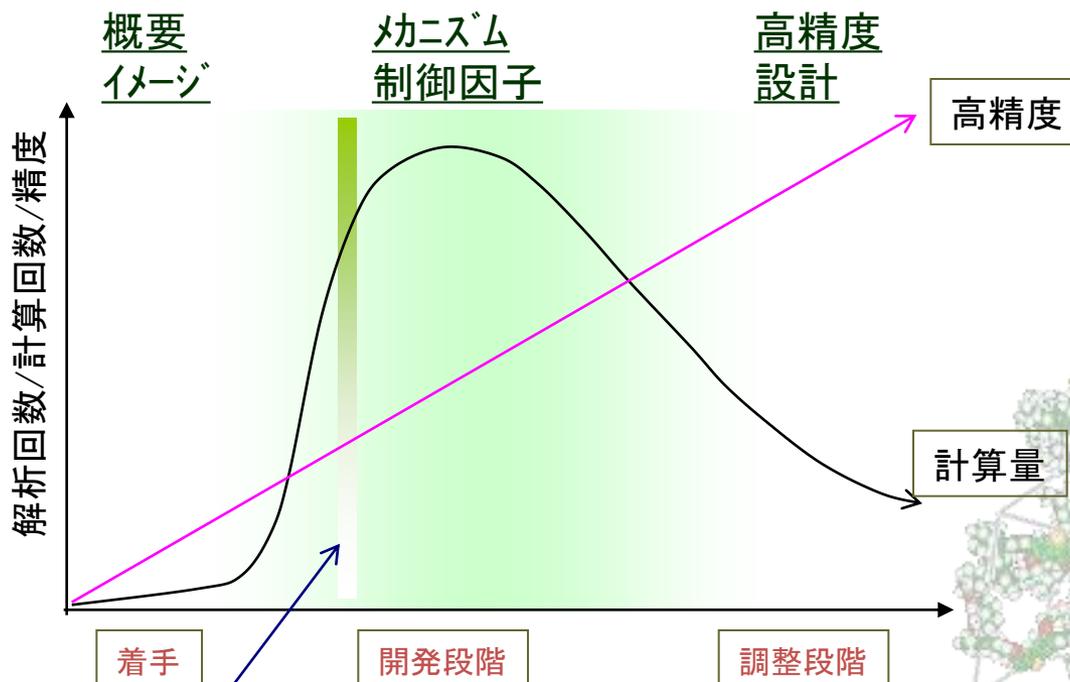
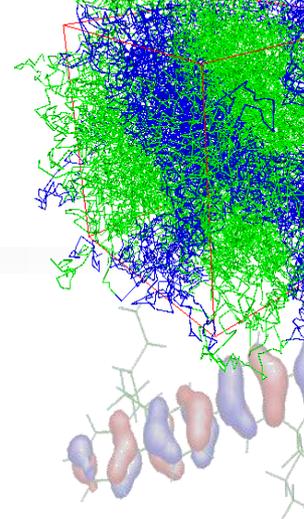
- ✓ 必要なのは変革のアイデア
- ✓ 異なった視点
- ✓ 違った文化



産業での研究開発

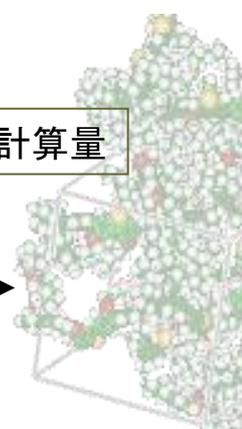
幅広い領域:

分子設計/ 特性解析/ 反応解析/ 最適化/ etc.

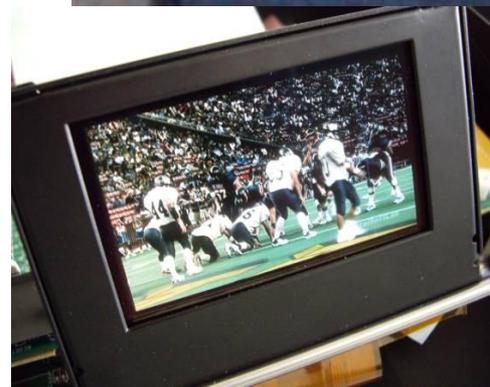
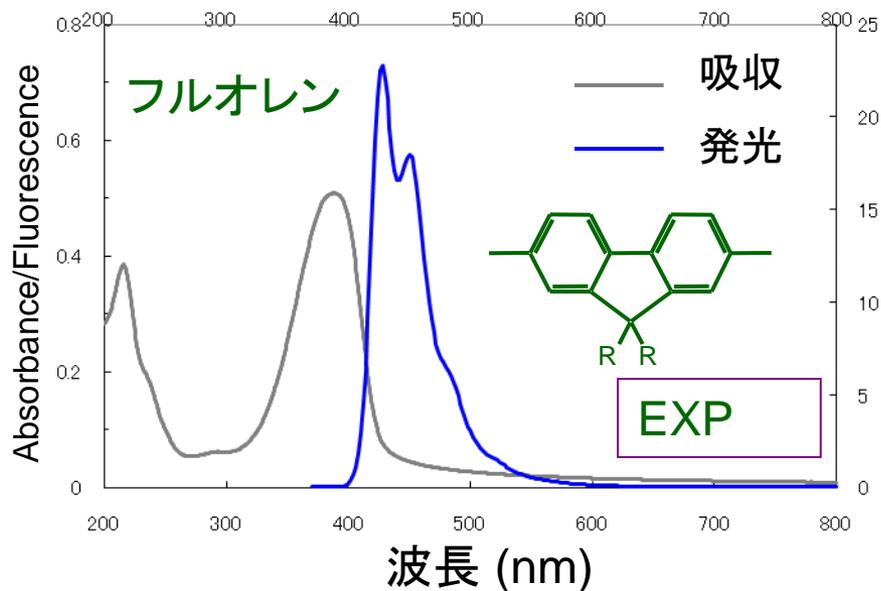
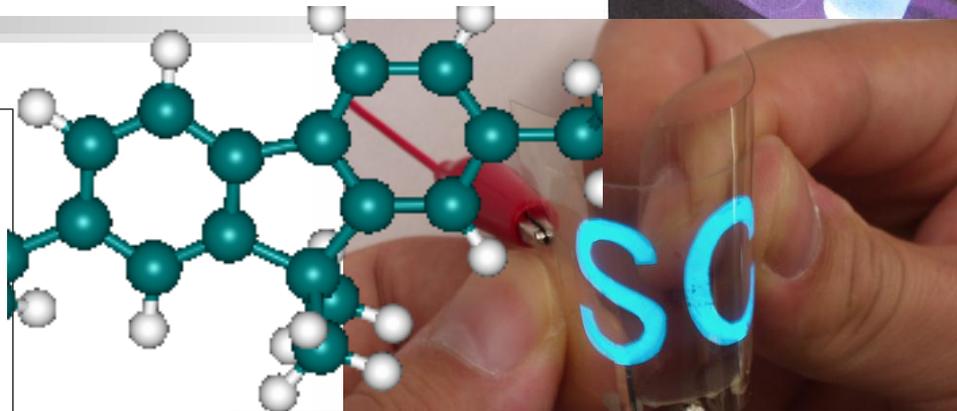
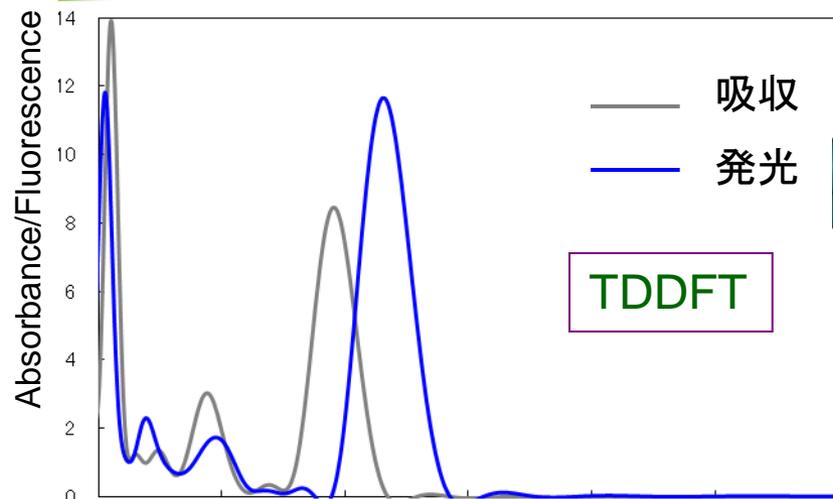


材料開発の山

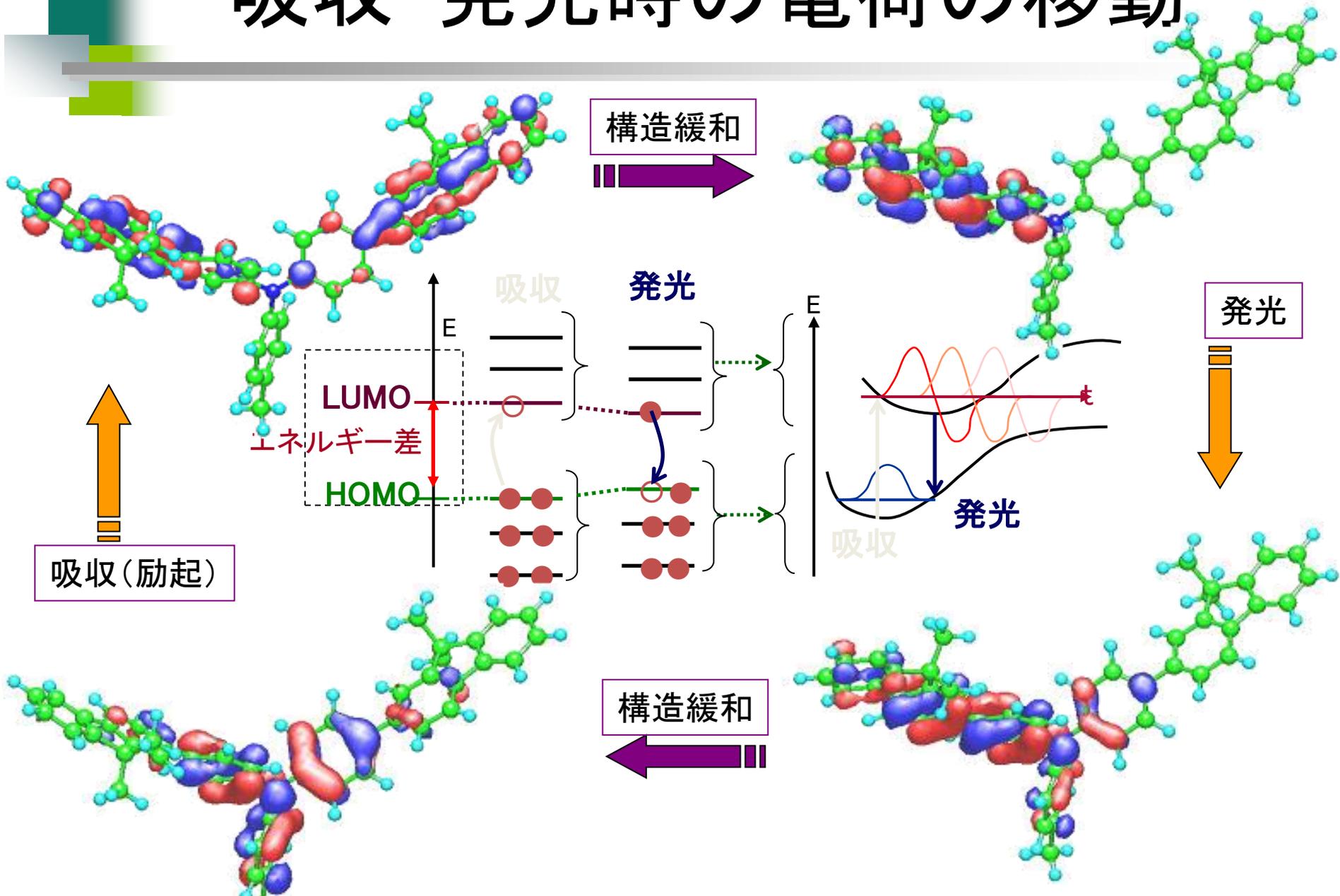
研究開発ステージと精度



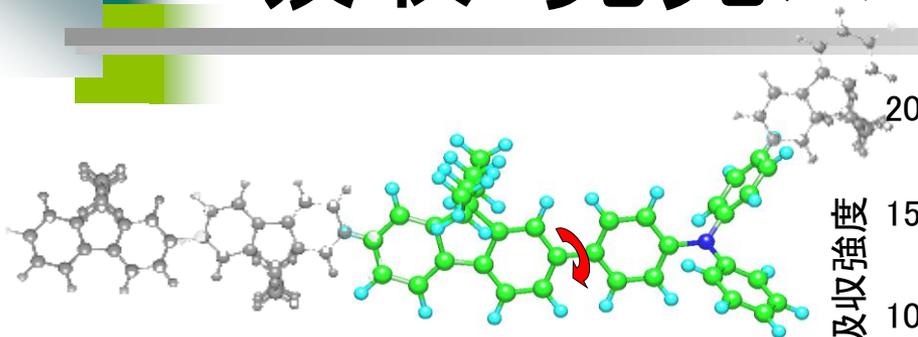
吸収・発光スペクトルの予測



吸収・発光時の電荷の移動

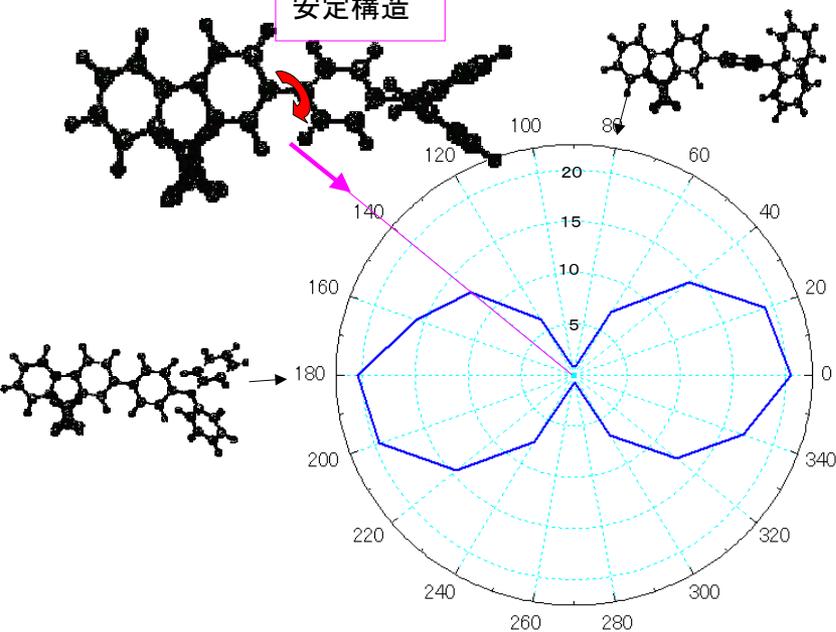


吸収・発光スペクトルの予測

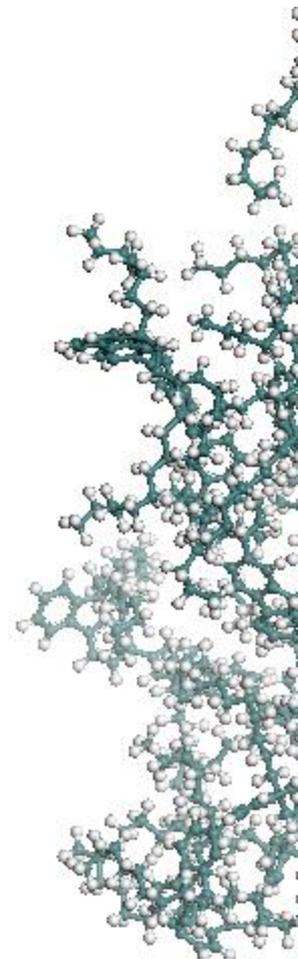
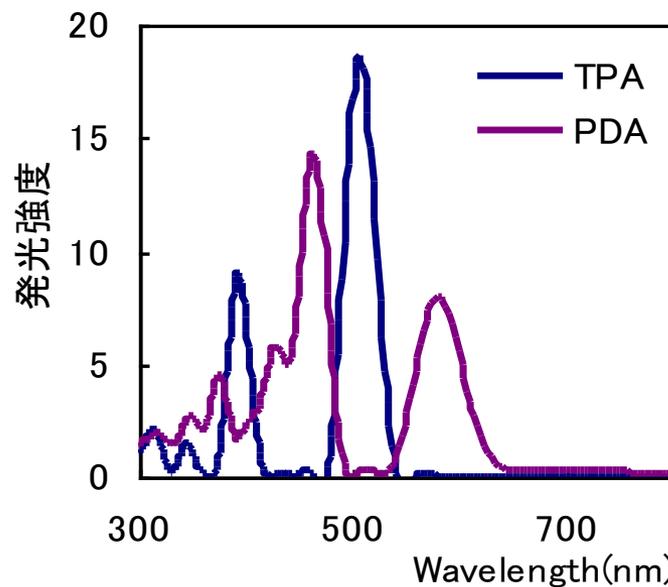
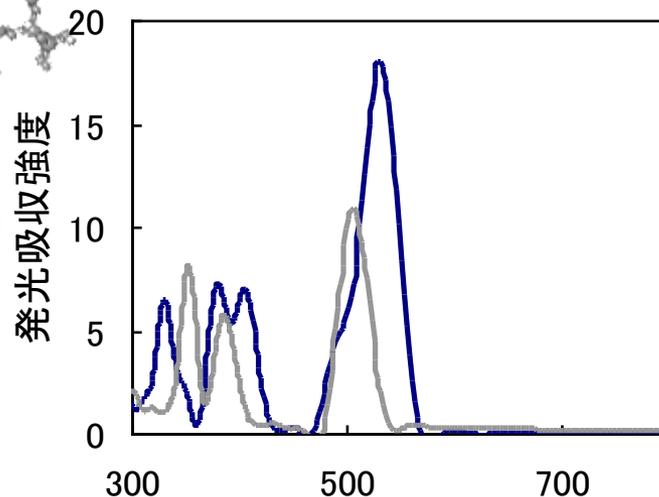


実際の構造は単純ではない！

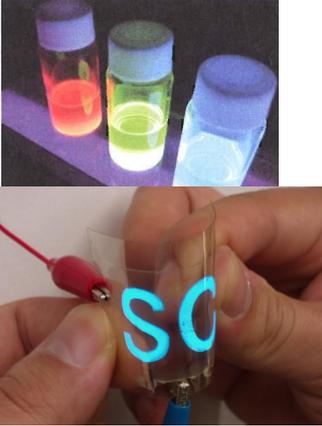
安定構造



二面角と発光強度

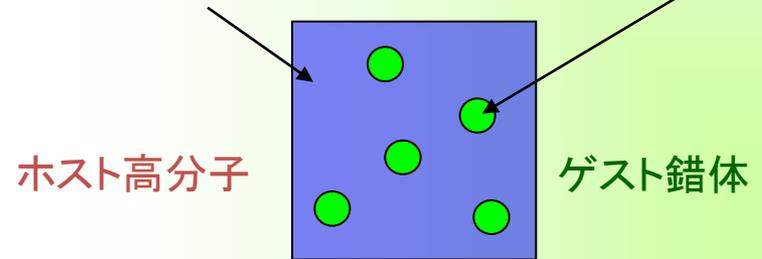
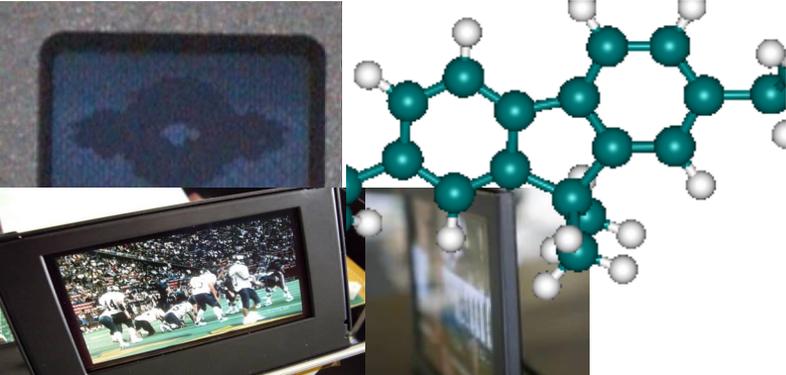
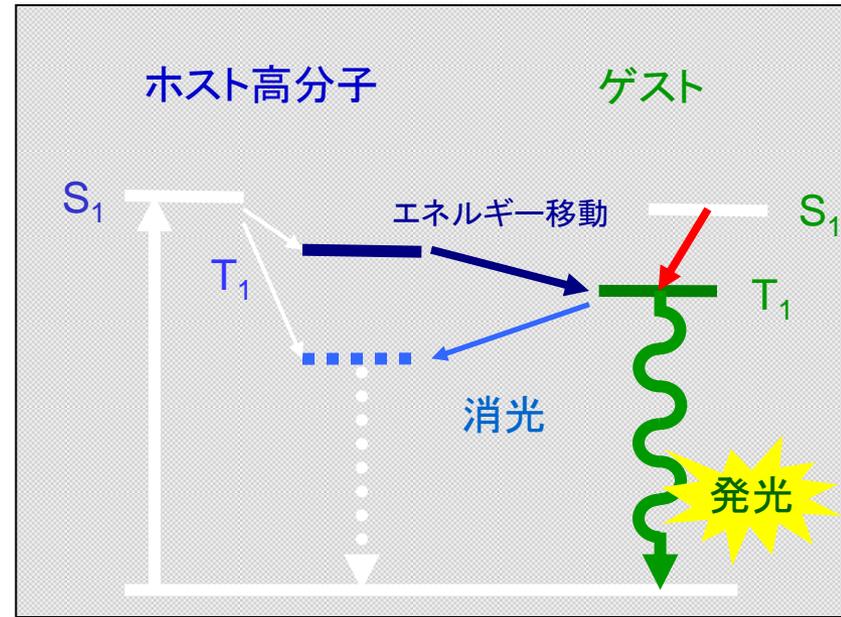
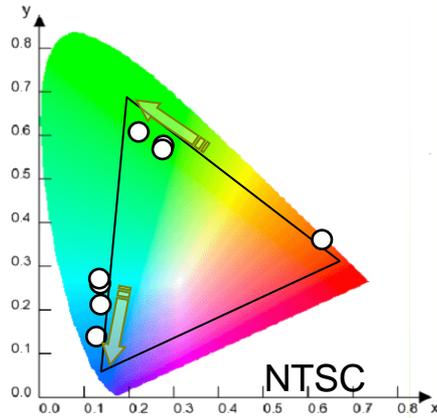
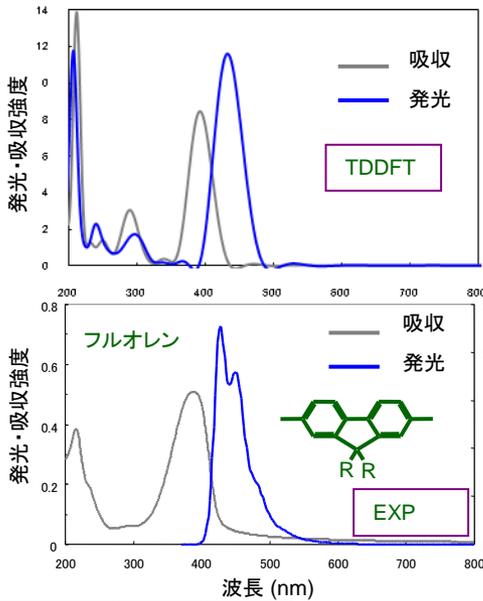


高い発光効率を実現するには



蛍光材料
吸収・発光スペクトルの予測

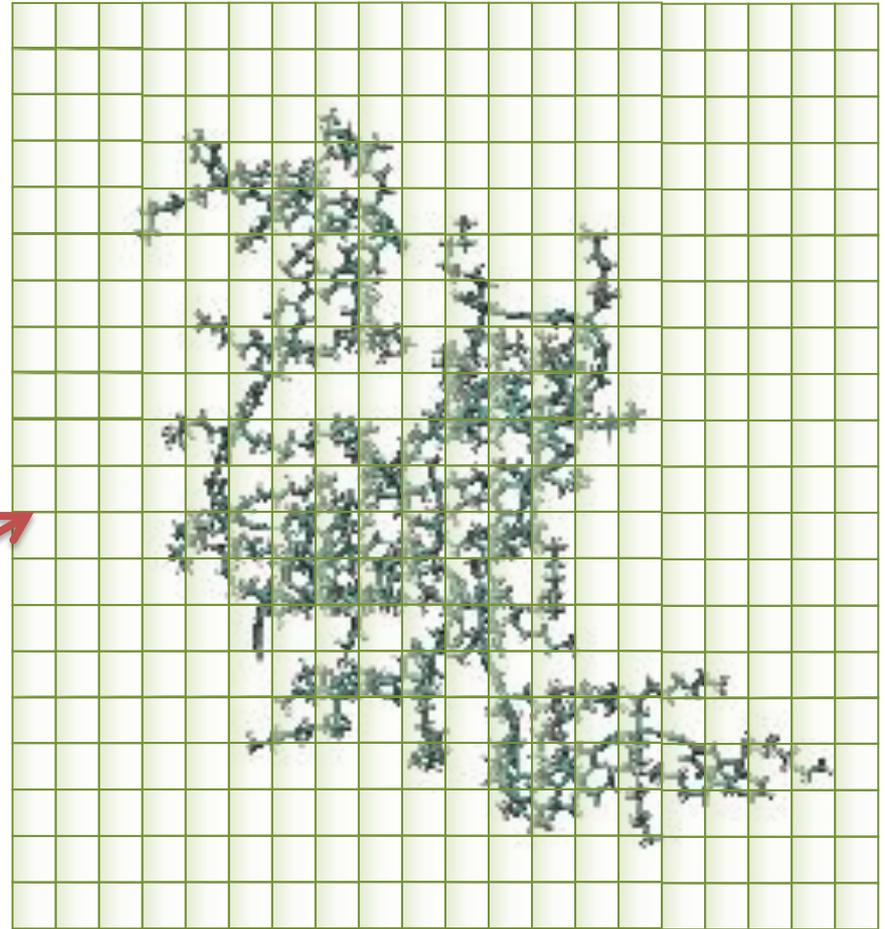
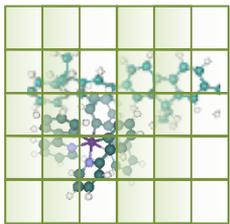
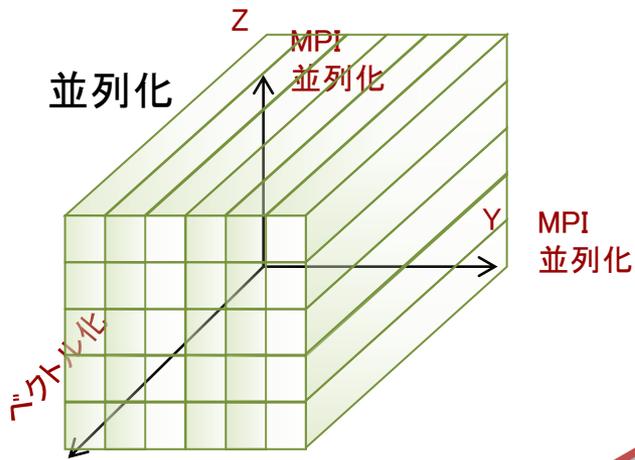
さらに、
燐光材料(三重項材料)



T1のエネルギー配置が重要 → T1の予測

実時間実空間の解析法と並列化

もっと大きな解析が可能になる！



並列化のための分割法が鍵

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

応用例）高分子の発光吸収スペクトル

- ✓ シミュレーションにより実験に先行して材料設計

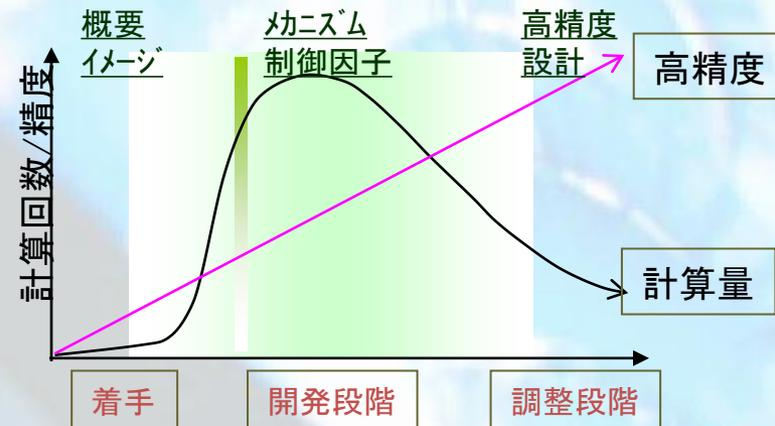
開発の方向を
明確にする！

活用）原理原則 ⇒ モデル化

- ✓ 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

役に立つ計算材料科学

- ✓ 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

おわり

何かご質問は？

