

量子化学計算に基づいた機能性分子設計： イリジウム錯体の発光波長に関する事例

北河 康隆^{*,†}

^{*}大阪大学大学院基礎工学研究科 大阪府豊中市待兼山町1-3 (〒560-8531)

[†] Corresponding Author, E-mail: kitagawa@cheng.es.osaka-u.ac.jp

(2018年9月18日受付, 2018年9月20日受理)

要 旨

量子化学計算は機能性分子の理論設計のツールとして今後ますます進展することが予想される。本解説では、どのように電子状態と機能とを結びつけ、そこから設計指針を導出し、具体的な分子を設計していくかという点に関して、リン光発光を示すイリジウム錯体の発光波長のデザインを例にとり、具体的な分子設計のプロセスを示したい。

キーワード：量子化学計算, 分子設計, イリジウム錯体, リン光発光, 置換基効果

1. はじめに

近年のコンピュータの急速な高速化は、量子化学理論の発達もあいまって、実在する比較的大きな分子の電子状態や物性のシミュレーションを可能としつつある。また、量子化学計算に関する商用ソフトウェアの普及により、これまでは一部の専門家しか扱うことのできなかつた高度な計算手法ですら、実験研究者が研究室レベルで実行できる環境となった。このような背景から、さまざまな分子の電子状態、構造、そして特性に関する量子化学計算が積極的に実行されるようになり、今や理論計算は化学分野において、合成、測定に次ぐ第3のアプローチとしての地位を確立しつつある。このように、実験で説明できないような化学現象を、電子（スピン）構造から明らかにすることが、量子化学計算の現在の重要な役割である。しかしながら、もし分子の特性・機能と電子状態の関係を微視的視点から紐づけることができれば、そこから機能性分子の設計原理の導出が可能となり、ひいては分子自身もデザインしその機能予測までをシミュレーションにより行うことが可能となる。したがって、量子化学計算は、機能性分子の理論設計のツールとして今後ますます進展することが予想される。そこで本解説記事では、どのように電子状態と機能とを結びつけ、そこから設計指針を導出し、具体的な分子を設計していくかという点に関し

て、リン光発光を示すイリジウム錯体の発光波長のデザインを例にとり、具体的な分子設計のプロセスを示したい。

さて近年、薄膜型ディスプレイ材料として、有機EL素子が広く利用されつつある。有機EL素子のような電界励起を用いた場合、原理的に励起1重項と励起3重項の生成比は1:3であるため、リン光性発光材料をその発色団として用いることが、効率という観点から望ましい¹⁾。とくに図-1に示した、2-phenylpyridine (ppy) を配位子として有するIr錯体; *fac*-Ir(ppy)₃ (1) が非常に高い量子収率を示すことを、1999年にForrestらが報告して以降、本錯体ならびにその誘導体は大変注目を集めるようになった²⁾。元来、錯体1の発光色は緑色であるが、ppy配位子に置換基を導入することにより、発光波長を変化させることが可能となる。これまでに、いくつかの錯体が提案されており、発光色が緑から赤ものまで得られている³⁾。ディスプレイ材料として利用するには赤・緑・青の3色が必要であるが、短波長側の発光はスカイブルーまでがあるものの⁴⁾、十分な性能を有する青色発光材料は得られていない。加えて、現在のところ当該錯体におけるカラーチューニングのための置換基導入に関する有効なガイドラインは得られておらず、その



〔氏名〕 きたがわ やすたか
〔現職〕 大阪大学大学院基礎工学研究科 准教授
〔趣味〕 音楽
〔経歴〕 1998年大阪大学理学部化学科卒業, 2003年大阪大学大学院理学研究科化学専攻博士後期課程修了, 同年大阪大学理学研究科助手, 2007年大阪大学理学研究科助教, 2014年より現職。博士(理学)。専門は量子化学, 理論化学, 理論錯体化学。

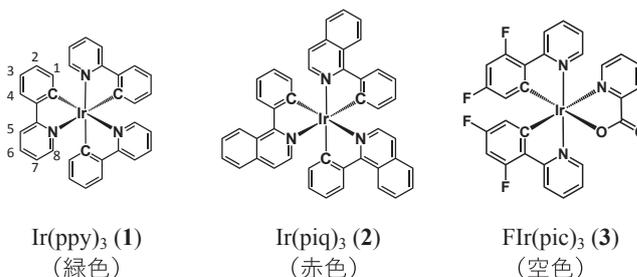


図-1 Ir(ppy)₃錯体 (1)²⁾, ならびに現在報告されている赤色発光 (錯体 (2)³⁾) と空色発光 (錯体 (3)⁴⁾) を示すIr錯体。錯体 (1) の配位子につけた番号は、本文中の置換基導入位置をあらわす。

【図表について】電子ジャーナルサイト「J-STAGE」ではカラーでご覧いただけます。https://www.jstage.jst.go.jp/browse/shikizai/-char/ja/