

総説

J. Jpn. Soc. Colour Mater., 92 [3], 73-81 (2019)

一小特集 顔料技術の最新トレンド

量子化学計算による有機色材の可視スペクトルの予測

野田 智之*†

*キヤノン(株)R&D本部解析技術22開発室 東京都大田区下丸子3-20-2 (〒146-8501)

† Corresponding Author, E-mail: noda.tomoyuki@mail.canon

(2018年11月1日受付, 2018年11月30日受理)

要 旨

本稿では、有機色材の発色性にかかわる量子化学的物性値を量子化学計算により精度良く予測する方法について示した。最もよく使われる密度汎関数法の特徴を、ほかの量子化学計算手法と比較した。精度が高い量子化学計算の計算条件（汎関数、基底、溶媒効果）を複数の色材の種類や量子化学的物性値に関して示した。ベンチマークを参照し、精度が高い計算条件を選択する方法についても示した。量子化学計算ソフトウェアを導入する際に考慮すべき注意点についても述べた。

キーワード：量子化学計算, 吸収スペクトル, 蛍光スペクトル

1. はじめに

量子化学計算の手法は、コンピュータの性能の継続的な進歩を背景に、1990年代以降急速に発展し続けている。1990年代に登場した量子化学計算手法により、溶媒効果を考慮した吸収や蛍光波長計算を実用的な時間と精度で行うことが可能になった。こういった手法には、たとえば密度汎関数法（Density Functional Theory, DFT）、時間依存密度汎関数法（Time Dependent Density Functional Theory, TD-DFT）、IEF-PCM法、Range Separated Hybrid汎関数等がある。本稿では有機色材を例に挙げ可視光領域におけるスペクトル予測について解説する。

有機色材は、置換基や共役系の構造によってスペクトルが変化する。つまり、精密な化学計算により、置換基や共役系の構造が変化した場合に吸収スペクトルなどの予測が可能であることを意味する。

なお、有機色材は、染料などの分子分散性の物質や顔料などの粒子状の物質を含むものとする。ただし、顔料の場合、粒子の形状や大きさの効果を考慮するためには本稿で扱う手法とは別に光学解析を行う必要があり、注意が必要である。

2. スペクトルに影響を与える因子（物理量）

発色性に影響する色材分子の物理量は発色原理により異なるため、まず（1）発色原理を説明し、次に（2）発色原理のおののちについて発色性に影響する因子を説明する。

2.1 発色原理

色材の発色機能は図-1に示す三つの原理に基づく。すなわち、1) 光吸収、2) 発光、蛍光、3) 光反射、光散乱である。

1) 光吸収により発色する色材は、光源から放射された入射光が色材層を通過する間に、可視光領域の特定の波長の光が色材に吸収され、残りの光が透過することによって発色する。図-1の光吸収の反射配置に示すように、色材が光散乱ないし反射層の表面に配置する場合は、色材層を透過した光が光散乱層で散乱されて向きを変えて、最終的に目や測色器に到達して色として感知される。透過配置に示すように、光学フィルターなどでは、透過光が直接目などに到達して色として感知される。この原理に従う例は、蛍光を發せず、隠ぺい力が可視光領域の一部において小さい色材を光散乱層の表面に配置した印刷物である。また、黒色の色材はこの原理に従う。

2) 発光および蛍光により発色する色材は、光や電流、放射性物質からの放射線などのエネルギーが色材により可視光に変換され、色材層から放出され、発色する。この原理に従う例は、蛍光、燐光色素を用いた印刷物である。

3) 光反射、光散乱により発色する色材では、色材層に入射

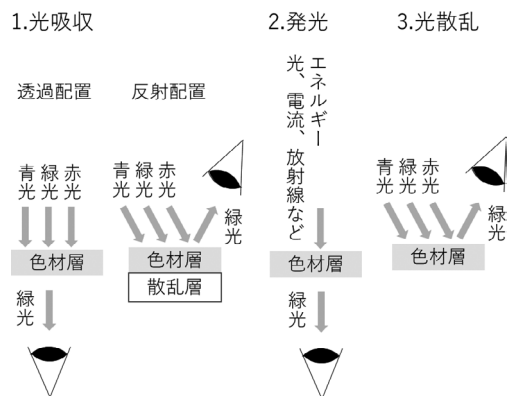


図-1 発色の三原理



〔氏名〕 のだ ともゆき
〔現職〕 キヤノン(株)R&D本部解析技術22開発室
〔趣味〕 テニス, スキー
〔経歴〕 1992年3月東京大学大学院超伝導工学修了。同年キヤノン(株)入社。染料などの有機記録材料の量子化学解析を担当。