

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 励起状態の仮想スクリーニングによる革新的有機半導体の探索と実用

2. 個人研究者名

相澤 直矢（理化学研究所創発物性科学研究センター 研究員）

3. 事後評価結果

熱活性化遅延蛍光（TADF）材料は、イリジウムや白金を利用したリン光材料を代替する次世代の有機 EL 材料として注目を集めているが、マイクロ秒オーダーと長すぎる遅延蛍光寿命がデバイスの劣化や高輝度時の発光効率の低下の原因となり、実用化されていない。相澤研究者は有機半導体の弱いスピン-軌道相互作用に基づく逆項間交差の速度定数(k_{RISC})を、量子化学計算により予測する新しい方法を開発した。また、この予測法を活用して発光材料を設計・合成し、従来より k_{RISC} が二桁大きな実用的材料を創製して、貴金属を使用した既存の発光材料と比べ高輝度・高効率な有機 EL デバイスの実現に成功した。この成果の社会実装に向けて、発光材料の特許出願を行い、国内材料メーカーとの共同研究も開始されている。

本研究では、研究者のアイデアによる研究立案、従来困難だった逆項間交差速度定数の精密計算手法の開発とそれをを用いたバーチャルスクリーニング、化合物合成、デバイス創製という、研究の歯車がうまく噛み合って回り、TADF の学理が進展し、最終的に実用にとどく画期的な材料が見つかり、優れた成果が上がったと言える。また計算手法開発は、本研究領域 2 期生の原遡祐研究者との共同研究が大きな役割を果たしており、領域内の連携がうまくいった好例となっている。

（2021 年 10 月追記）

本課題は、新型コロナウイルスの影響を受け、6 ヶ月間期間を延長し、ベイズ最適化を活用した仮想スクリーニングによる有機発光材料の開発、過渡電子スピン共鳴による高次三重項励起状態を介した項間交差の実証、一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギー逆転を示す有機発光材料の開発を行った。

その結果、海外研究グループとの連携が進み、TADF の特性を理解する上で重要な項間交差の微視的機構に関する新たな実験的知見が得られ、データ科学的手法を用いた実用材料開発がさらに進展した。