

2024 年度
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

研究担当者	相澤 直矢
研究機関名	大阪大学
所属部署名	大学院工学研究科
役職名	テクノアリーナ准教授
研究課題名	励起一重項と三重項のエネルギー逆転の創発
研究実施期間	2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

フントの規則より、同一電子配置において、最大のスピン多重度を持つ状態が最低エネルギーを持つ。よって、励起三重項は一重項よりエネルギーが低く、それらのエネルギー差 ΔE_{ST} は正であると知られている。本研究では負の ΔE_{ST} を示す一重項-三重項逆転材料を開発し、希少金属フリーの高性能有機 EL デバイスを実現する。さらに、多数の電子配置から創発する負の ΔE_{ST} の基礎科学を開拓し、デバイス性能の飛躍的な向上に繋がる学理を確立する。

今年度は、量子化学計算を活用して、負の ΔE_{ST} を持つ 10 種類の有機発光材料を設計し、それらの合成に成功した。特に優れた発光特性を示した一重項-三重項逆転材料を有機 EL デバイスに応用し、理論限界に近い高い外部量子効率 35%を達成した。本成果の事業化に向けて、特許出願を行った。

また、創発研究者の原渕祐博士との共同研究を実施し、量子化学計算と機械学習を逐次的に繰り返すベイズ最適化により、速い逆項間交差を示す新材料を、少ない計算回数で効率的に探索する研究を報告した。材料のスクリーニングに加え、機械学習モデルから逆項間交差速度定数と相関する分子構造記述子を特定し、分子設計指針の抽出に成功した。さらに、その分子設計指針に関して、量子化学計算に基づき物理化学的解釈を行った (T. Won et al. *Chem. Sci.* accepted, DOI: 10.1039/D5SC01903F)。