

2023 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	相澤 直矢
研究機関名	大阪大学
所属部署名	工学研究科応用化学専攻
役職名	助教
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	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

1925 年にドイツの物理学者フリードリヒ・フントは「同一の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」という経験則を提案した。このフントの規則は、多電子原子や分子の基底状態や励起状態において広く成り立つ。例えば、数多くの有機化合物の三重項励起状態は、一重項励起状態より低エネルギーで、両状態のエネルギー差 ΔE_{ST} は正であると知られている。2022 年に研究担当者らは、負の ΔE_{ST} を持つ有機発光材料の開発に世界ではじめて成功し、有機 EL デバイスへの応用が可能であることを示した。この一重項-三重項逆転 (Inverted Singlet-Triplet, IST) 材料は、三重項励起状態を低エネルギーの一重項励起状態に速やかに変換する理想的な有機 EL 用発光材料として期待できる。そこで、本研究では IST 材料の実用化に向けた材料およびデバイス開発を行う。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の確立を目指す。

今年度は、負の ΔE_{ST} に加えて、有機 EL デバイスに用いるために適切な HOMO、LUMO 準位や高い発光量子収率を両立する材料の開発に取り組んだ。その結果、実際の有機 EL デバイスにおいて外部量子効率 24%を示す材料の開発に成功した。これは、既存の IST 材料 HzTFEX₂ を用いたデバイスの 1.4 倍の効率である。今後、高効率化の要因を詳細に解析し、さらなる材料開発にフィードバックする。

創発コミュニティ内の共同研究として、発光材料の大規模仮想スクリーニングのための分子構造生成や計算スキームの構築を進めた。また、負の ΔE_{ST} が期待できる新奇な分子骨格の共同研究を開始した。これらの共同研究は、本研究課題を多角的に展開するための重要な基盤となる。