

事後評価報告書

開発実施企業：株式会社 Kyulux

代表研究者：国立大学法人九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター 教授 安達 千波矢

研究開発課題名：高効率・高純度発色を実現する有機 EL 発光材料

1. 研究開発の目的

本開発は、代表研究者の安達千波矢ら(九州大学)が見出した、新たな熱活性化遅延蛍光(TADF)材料を、高効率の有機 EL 発光材料に利用しようとするものである。

研究者らは一重項励起エネルギーと三重項励起エネルギーとの差(ΔE_{st})が小さくなるように設計されている TADF を用いて、励起状態エネルギーの三重項から一重項へのアップコンバージョンを可能とした。この一重項励起エネルギー状態のエネルギーを近隣の蛍光材料に移動することで、発光スペクトルの半値幅が狭く色純度および発光強度の高い、新たな発光技術 Hyperfluorescence™ を考案した。

本開発では、これら研究成果の実用化を目指して設立されたベンチャー Kyulux 社により、高効率・高純度・長寿命な発光が得られる TADF 材料を世界に先駆けて開発・生産することを目標とした。

2. 研究開発の概要

本開発は、計算科学と AI を基盤とする分子設計技術と、材料純度向上やデバイス層構造制御などの材料設計技術を柱に行った。

まず、分子設計技術の開発においては、有望な新規 TADF 材料を短期間に選別するために Neural Network(NN)モデルを活用した。この手法は、約 1 万の有力な候補材料から分子量や構造を考慮して代表例 300 程度の材料を選択し、量子化学計算を実行する。次にその計算結果を NN モデルに学習させた上で、全候補材料を発光波長、一重項励起エネルギーと三重項励起エネルギーとの差 (ΔE_{st})、結合解離エネルギー等の視点でスクリーニングする。ここで絞られた有望な候補材料についてのみ量子化学計算を行うことで計算量を減らし、計算時間の大幅短縮につなげた。

また、材料設計技術の開発においては、Hyperfluorescence™ 構造の最適化を、効率改善と長寿命化の観点から行った。まず、効率改善のためには TADF 材料の三重項励起状態から一重項励起状態へのエネルギー移動と、TADF の一重項励起状態から蛍光材料の一重項励起状態へのエネルギー移動を迅速に進める必要がある。そこで、蛍光材料と TADF 材料の発光スペクトル解析や材料の分子間距離を制御する知見を基に、最適な構造を設計することで高効率を達成した。次に、長寿命化には、キャリアバランスと呼ばれる発光層内での電子とホール密度分布を最適化する設計が特に重要となる。そこで、発光層に 2 種類のホスト材料を導入することで発光領域を広げ、電荷集中を緩和して寿命の大幅な改善につなげた。特に、赤色に関しては当初目標の 4 倍近い寿命を実現した。

3. 総合所見

開発当初、緑、赤、青の発光色ごとに、色度、発光効率、寿命の目標を設定した。特に、りん光相当の発光効率を持つ長寿命の青色発光材料の実現は長年の課題となっている。結果として緑では全目標を達成し、赤については色度と効率、青については色度が未達となった。しかしながら、3 色すべてにおいて最大の課題点であった寿命に関する当初目標を達成したことは重要な成果である。今回の開発を通して得られた知見を用い、パネルメーカーとの共同開発を進め、市場に受け入れられる TADF 材料の開発を継続することで、りん光に替わる発光材料の商品化に期待したい。

以上