

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ  
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

相澤 直矢

科学技術振興機

さきがけ研究者

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

## § 1. 研究成果の概要

安価・軽量・フレキシブル・プリンタブル・希少金属フリーといった利点を有する有機半導体の開発は、有機 EL をはじめとする次世代電子デバイスの根幹を担う重要な課題である。本研究では、相対論的量子化学計算とベイズ最適化を組み合わせることで、励起状態の仮想スクリーニングを効率的に行う。さらに、候補分子の合成からデバイス特性評価までの一貫した実験研究を推進し、革新的な発光特性を有する有機半導体の創出を目的とする(図 1)。2018 年度は、有機半導体の弱いスピン-軌道相互作用に基づく項間交差の速度定数を、量子化学計算により予測することに成功した。また、この計算を活用して、新規の有機発光材料を設計・合成し、有機 EL 素子へ応用した。合成した有機発光材料は、貴金属を使用した既存の発光材料と比べ、優れた発光特性を示すことを見出した。

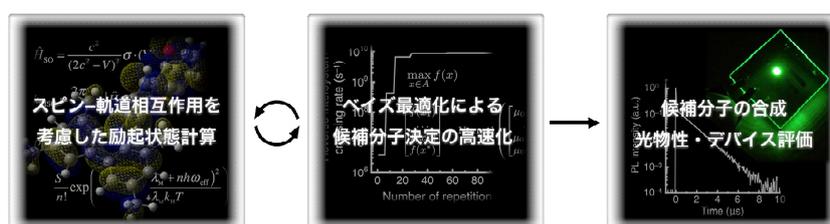


図 1 研究概略

## § 2. 研究実施体制

- ① 研究者: 相澤 直矢 (科学技術振興機構 さきがけ研究者)
- ② 研究項目
  - ・研究の実施と統括