

相澤 直矢

理化学研究所創発物性科学研究センター／科学技術振興機構
研究員／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)。2019 年度は、同領域の 2 期生の原 祐先生と共同で、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を、量子化学計算により予測する方法を提案した。20 種類の既存材料に本手法を適用したところ、 10^2 s^{-1} から 10^7 s^{-1} におよぶ実験値を平均絶対対数誤差 0.24 で予測することに成功した。また、本手法とベイズ最適化を活用した仮想スクリーニングを実施し、 10^8 s^{-1} 以上の高い逆項間交差速度定数を示す分子を見出した。

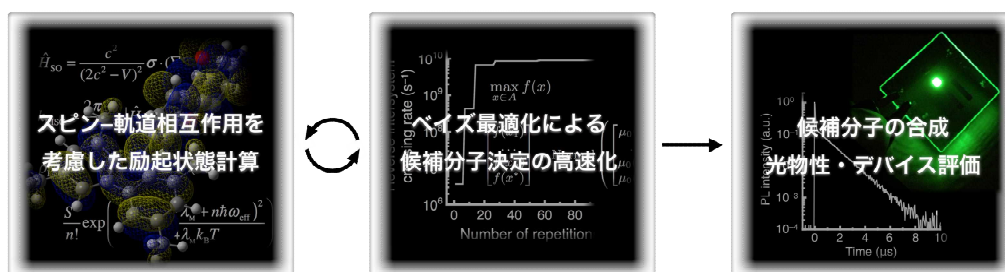


図 1 研究概略