

## 次世代有機 E L の高効率化・長寿命化に成功 ～マテリアルズ・インフォマティクスで開発期間を短縮～

### ポイント

- 九州大学が開発した高い発光効率、高い色純度、低コストの有機 E L による発光技術は、実用化に向けてさらなる高効率化と長寿命化が求められていた。
- K y u l u x はマテリアルズ・インフォマティクスを用い、短期間で高効率・長寿命な材料の開発とデバイス構造の最適化に成功した。
- 次世代有機 E L の実用化が加速し、スマートフォン、大型テレビなど広い用途が期待される。

JST（理事長 濱口 道成）は、研究成果最適展開支援プログラム（A-STEP）企業主導フェーズ N e x T E P - B タイプの開発課題「高効率・高純度発色を実現する有機 E L 発光材料」において、目指していた成果が得られたと評価しました。この開発課題は、九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センター 安達 千波矢 教授らの研究成果をもとに、平成 29 年 2 月から令和元年 12 月にかけて株式会社 K y u l u x（キューラックス）（代表取締役社長 安達 淳治、本社 福岡県福岡市）に委託し、事業化開発を進めていたものです。

K y u l u x は量子化学計算と機械学習を組み合わせたマテリアルズ・インフォマティクス<sup>注1</sup>を用い、独自の有機 E L「Hyperfluorescence<sup>TM</sup>（ハイパーフルオレッセンス）」による発光技術の高効率化と長寿命化に成功しました。

材料設計では、用いる新規 T A D F（熱活性化遅延蛍光）材料<sup>注2</sup>の選別にマテリアルズ・インフォマティクスを使い、研究者の知識と量子化学計算を組み合わせる従来の材料開発手法に比べ 10 倍以上のスピードで有望な材料を見いだすことができました。

さらに、電荷のバランスの観点から発光層を最適化し、フルカラー表示に必要な赤・緑・青全ての色で目標の寿命を達成しました。特に赤色では目標の 4 倍の寿命を達成し、長寿命化が最も難しいといわれる青色においても、開発期間中に目標を達成し、プログラム開始時と比べて 100 倍以上の寿命を実現しました。

高効率、長寿命を実現する次世代有機 E L の有力技術になると期待されます。

研究成果最適展開支援プログラム（A-STEP）は大学、公的研究機関などで生まれた研究成果を国民経済上重要な技術として実用化し社会に還元することを目指す技術移転支援プログラムです。企業主導フェーズでは、大学などの研究シーズを用いて企業などが行う、開発リスクを伴う規模の大きい開発を支援し、実用化を後押しします。

※A-STEP企業主導フェーズ（N e x T E P - B タイプ／N e x T E P - A タイプ）は、令和 2 年度より「A-STEP企業主体（マッチングファンド型／返済型）」として公募しています。

URL <https://www.jst.go.jp/a-step/>

## <背景>

有機ELはスマートフォン、大型テレビなどのディスプレイへの普及が進んでいます。現在、赤色と緑色にはりん光<sup>注3)</sup>、青色には蛍光<sup>注4)</sup>を発光原理とした有機ELがそれぞれ使われています。りん光は青色の実用材料が無いことに加え、蛍光に比べて発光効率は良いものの色純度やコスト面で劣っていました。

これに対し、九州大学の安達教授らが見いだしたHyperfluorescence<sup>TM</sup>技術は、TADF材料と蛍光材料を組み合わせた発光技術です。TADFで発生させたエネルギーで蛍光材料を発光させることにより、内部量子効率が100パーセントと、蛍光材料だけの場合の4倍になり、TADFの欠点である色純度の低さを解消します。TADF材料、蛍光材料ともにレアメタルが不要なため、材料コストも低減できます(図1)。りん光に劣らない高効率と蛍光ならではの高い色純度を実現するとともに、りん光材料のようにレアメタルを含まずコストも抑制できる、革新的な発光技術として期待されています。

実用化を目指してさらに高効率化、長寿命化するには、蛍光材料に組み合わせる最適なTADF材料を見いだすことが重要な開発要素です。

従来の材料開発は、技術者が提案した候補材料について量子化学計算で物性を予測し、それに基づいて選んだ材料を合成して評価するという流れでした。有機材料は複数の部位の組み合わせによって、候補が優に百万個を超えるといわれます。従来の方法では膨大な労力を要していました。

## <開発内容>

### 1. マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発

本開発では、機械学習、量子化学計算、実験を統合したマテリアルズ・インフォマティクスのシステム「Kyumatic(キューマティック)」により、短期間で目標を達成しました。

技術者が提案した材料を基に、コンピューターが材料設計ルールに従って候補材料を1万個以上生成します。その全てではなく、うち数百個の材料を量子化学計算し、結果を人工知能に機械学習させて残りの材料の物性を予測します。予測結果から有望な材料を技術者が選定し、実際に合成して性能を確認します(図2)。候補を絞ってから実験できるので、開発スピードを10倍以上に速められます。さらに実験結果も機械学習して、物性予測精度を高めています。

### 2. 電荷バランスに着目した高効率・長寿命化

有機ELの発光層では、電子と正孔が結合して生じるエネルギーを光に換えます。発光層において発光材料に電気エネルギーを受け渡すホスト材料は、一般に正孔輸送性が高いので、電荷の結合領域は電子輸送層に近い位置に集中しています。

本開発では、発光層内の電子輸送性と正孔輸送性とをバランスさせて電荷が結合する領域を広げ、高効率化と長寿命化を同時に達成しました。

発光層に1種類のホスト材料を使うSingle Host(シングルホスト)<sup>注5)</sup>ではなく電子輸送性のホスト材料を加えて使うCo-host(コホスト)<sup>注6)</sup>にすることによって、発光層内での正孔の輸送性能と電子の輸送性能とをバランスさせました。これによ

り電子輸送層側に偏っていた電荷結合領域を発光層全体に広げ、その結果、注入された電気エネルギーに対して外部に光が放射される割合（外部量子効率）を従来比で20～40パーセント向上し、寿命を最大10倍に伸ばすことに成功しました（図3）。

<期待される効果>

今後、この成果をもとに有機ELの高解像度、高輝度、高効率と低コスト化を実現し、次世代の発光技術として広く普及することが見込まれます。

Hyperfluorescence™を採用することにより、りん光材料を使わずにレアメタルフリーで、赤色、緑色、青色全てが高効率で色純度の高い有機ELディスプレイを実現できます。スマートフォンに適用すれば高輝度、低消費電力に、大型テレビでは消費電力の半減を狙えます。これらによりSDGsの推進にも貢献できます。

多様な機器がインターネットにつながるIoT社会では、人と機器の接点としてディスプレイがますます重要になります。そのような中で有機ELは、しなやかに曲がるものや透明なものなど、ディスプレイに新たな価値を加える技術として注目されています。有機ELは、こうした次世代型ディスプレイの開発も加速し、新たな用途を生み出していくと期待されます。

<参考図>

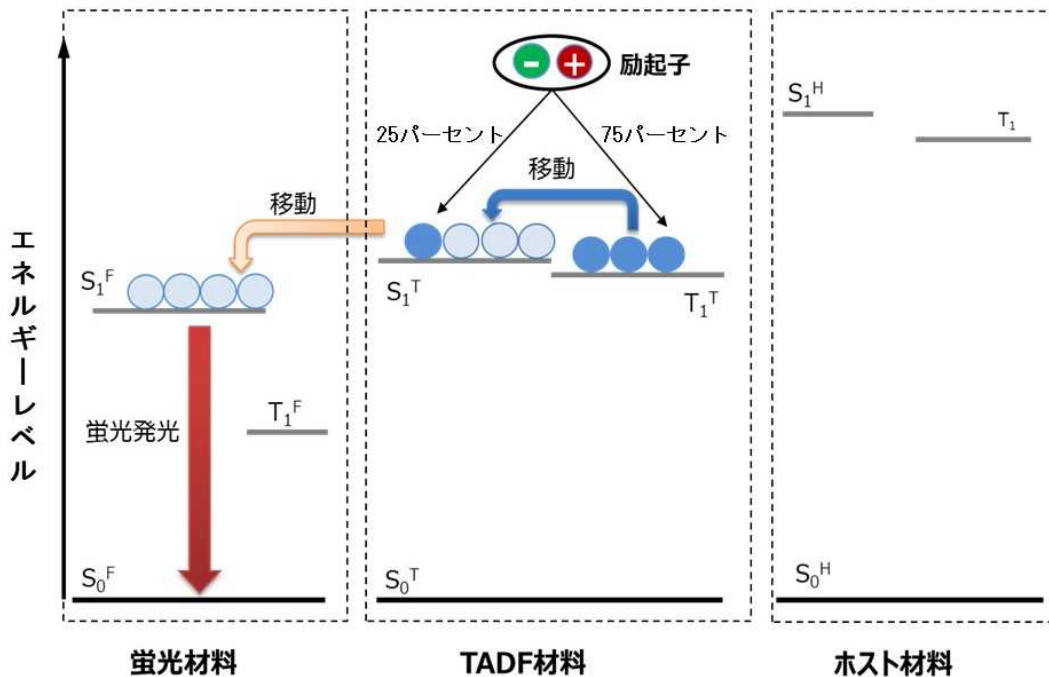


図1 Kyuluxの有機EL「Hyperfluorescence™」技術

発光層は、蛍光材料、TADF材料、ホスト材料から構成されている。TADF材料中では励起子（半導体または絶縁体中で電子と正孔の対がクーロン力によって束縛状態となったもの）の25パーセントが一重項励起状態（ $S_1^T$ ）に、75パーセントが三重項励起状態（ $T_1^T$ ）となる。TADF材料では、三重項励起状態に入った励起子が一重項励起状態に移動する。次に、励起子がTADF材料の一重項励起状態から蛍光材料の一重項励起状態（ $S_1^F$ ）に移動して蛍光発光が生じる。なお、ホスト材料は発光層内での電子およびホールの輸送性能を決めている。

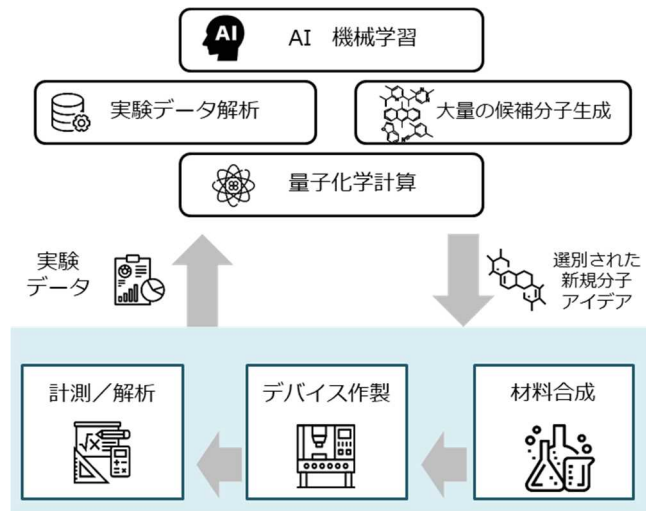


図2 Kyuluxのマテリアルズ・インフォマティクス「Kyumatric」

Kyumatricは機械学習、量子化学計算、大量の候補分子生成、実験データ解析などの機能で構成されており、選別された新規分子アイデアを提示する。合成した材料の物性などの評価結果をフィードバックして材料物性の予測精度を高める。Kyuluxは今後、新規材料を用いたデバイスの評価結果もフィードバックして、材料探索だけでなくデバイスの最適化にも適用範囲を拡大することを計画している。

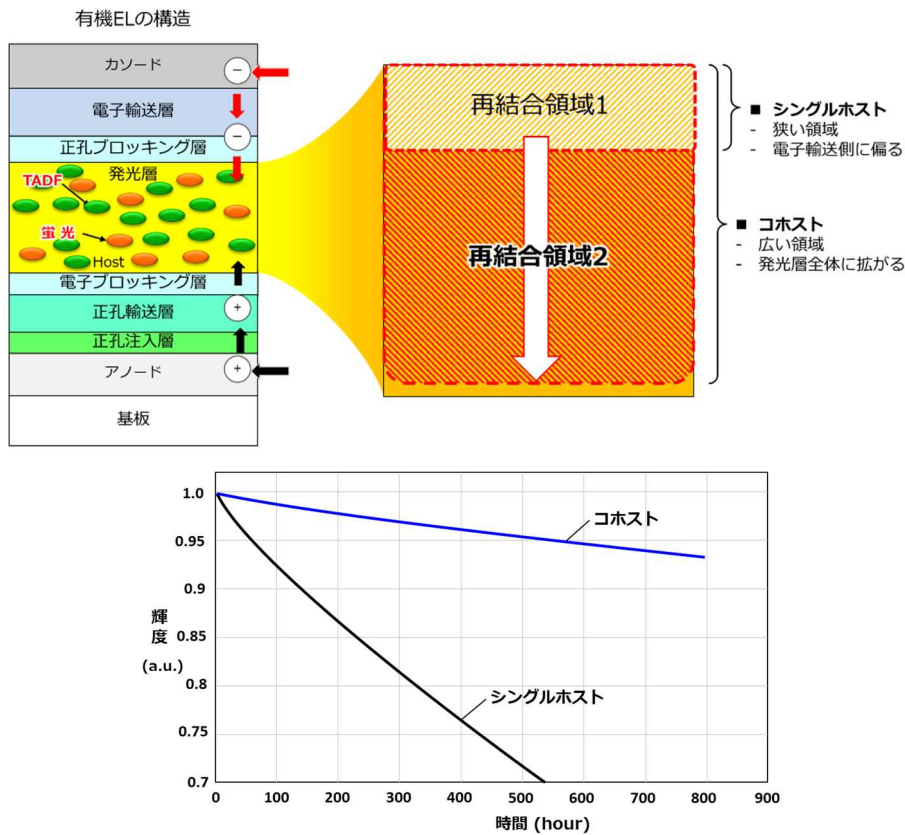


図3 電荷バランスに着目した有機ELの高効率・長寿命化

コホストによりこれまで電子輸送層側に偏っていた電荷結合領域を発光層全体に広げた(上)。その結果ホストの配合比を最適化でき、輝度が5パーセント低下するまでの時間が10倍以上と、長寿命化を実現した(下)。

## <用語解説>

### 注1) マテリアルズ・インフォマティクス

物質特性をコンピューター上で高精度に計算した材料データベースと人工知能を使って材料を探索する手法の総称。これまで研究者の経験と直感に依存してきた材料探索に比べ、時間とコストを大幅に削減できる。

### 注2) TADF (熱活性化遅延蛍光) 材料

TADFはThermally Activated Delayed Fluorescenceの略。有機材料の一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギー準位の差を小さくすることによって三重項のエネルギーを一重項に遷移させ、内部量子効率100パーセントの発光を実現したもの。レアメタルが不要で材料コストが低減できる。一般に発光スペクトルの幅が広く、ディスプレイに応用するには色純度が低いという欠点がある。

### 注3) りん光

有機材料が三重項励起状態（電子スピンの向きが同方向の状態）から基底状態に戻る際に発光する光のこと。通常、常温では三重項からの発光は起こらないが、イリジウムなど重元素を導入することで常温での発光が可能になった。一重項のエネルギーも活用でき、内部量子効率（注入された電気エネルギーが有機EL内部で光に変換される割合）100パーセントを実現した。赤色、緑色発光にはりん光材料が使用されているが、青色では、りん光材料の寿命が極端に短いため蛍光材料が使われている。また、蛍光に比べ発光スペクトルの幅が広いため色純度が低く、レアメタルのイリジウムが高価なためコストが高いという欠点がある。

### 注4) 蛍光

有機材料が一重項励起状態（電子スピンの向きが互いに逆向きの状態）から基底状態に戻る際に発する光のこと。発光スペクトルの幅が狭く色純度の高い発光が特長だが、与えられた電気エネルギーの25パーセントしか利用できないため効率が低い。現在青色発光には蛍光材料が使われている。


### 注5) Single Host (シングルホスト)

発光層に1種類のホスト材料を用いる方法。

### 注6) Co-Host (コホスト)

有機ELの発光層はホスト材料に発光材料をドーブしたものである。そのホスト材料を2種類用いる手法をコホストという。有機ELの性能の向上を目的として使われる。

## <本成果が貢献しうる持続可能な開発目標（SDGs）>

<b>12</b> つくる責任 つかう責任 	目標 12	持続可能な消費と生産のパターンを確保する
	SDGsは、平成27年9月の国連総会において採択された「持続可能な開発のための2030アジェンダ」の中核となる「人間、地球および繁栄のためのより包括的で新たな世界共通の行動目標」です。 <a href="https://www.unic.or.jp/activities/economic_social_development/sustainable_development/2030agenda/">https://www.unic.or.jp/activities/economic_social_development/sustainable_development/2030agenda/</a>	

### <お問い合わせ先>

#### <開発内容に関すること>

藪田 明（ヤブタ アキラ）

株式会社Kyulux 開発企画室

〒819-0388 福岡県福岡市西区九大新町4-1 福岡市産学連携交流センター227号

E-mail : info[at]kyulux.com

#### <JSTの事業に関すること>

沖代 美保（オキシロ ミホ）

科学技術振興機構 産学共同開発部

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

Tel : 03-5214-8995 Fax : 03-5214-0017

E-mail : jitsuyoka[at]jst.go.jp

#### <報道担当>

科学技術振興機構 広報課

〒102-8666 東京都千代田区四番町5番地3

Tel : 03-5214-8404 Fax : 03-5214-8432

E-mail : jstkoho[at]jst.go.jp

株式会社Kyulux 事業開発部

〒819-0388 福岡県福岡市西区九大新町4-1 福岡市産学連携交流センター227号

E-mail : info[at]kyulux.com