平成 29 年度

九州大学情報基盤研究開発センター

民間利用成果報告書

提出日：平成　30 年　4 月　5 日

利用課題名		計算科学を利用した新規有機 EL 用発光材料の開発				
課題責任者	企業名	株式会社 Kyulux 印				
	フリガナ 氏名	ﾉｳﾂｶ ﾅｵﾄ 能塚　直人 印	部署名	開発部	職位	研究員
	連絡先	住　所：〒　819-0388 E-mail：n.notsuka@kyulux.com		TEL 092-834-9518 FAX 092-834-9618		
利用期間		平成　29 年　4 月　1 日　～　平成　29 年　9 月　30 日				
利用成果公開延期希望の有無		☑ 即時公開　・　☐ 公開延期（成果公開予定：　平成　　年　　月）				

※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大 2 年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受付番号	4	受付日 平成 30 年 4 月 9 日	受付印	上田

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1） 利用目的

計算科学により、希金属を利用しない新機構の高効率有機電界（EL）発光材料「熱活性型遅延蛍光（TADF）材料」の設計・開発を行う。

2） 利用意義

分子設計に量子化学計算手法を導入し、高性能を示すTADF分子構造の予測することによって研究開発を促進させる。

3） 必要性

有機ELの発光機構はスピン統計則により一重項励起子と三重項励起子がそれぞれ1:3で生成する。そのため全ての励起子を効果的に発光へと寄与させられる発光材料の設計が必要である。TADF材料は三重項-一重項間の逆系間交差をそのエネルギー差（ΔE_{ST}）をゼロへと近付けることで理論的にすべての励起子を発光へと利用できる。本計画では小さなΔE_{ST}を示す発光材料の予測および材料の結合解離エネルギー算出へ計算機を利用し、高効率・高耐久を示す材料を開発する。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

社内独自のシステムを導入したため、貴学のシステムを使用せず

2） 社会・経済への波及効果の見通し

3） その他

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

無し

2) 利用に関して生じた問題点など

無し

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

無し

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

無し

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします

無し