

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 30 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H01231

研究課題名(和文)精密構造解析・理論化学計算による有機デバイスの基礎科学構築

研究課題名(英文) Fundamental Science of Organic Devices by Precise Structure Analysis and Theoretical Calculations

研究代表者

梶 弘典 (Kaji, Hironori)

京都大学・化学研究所・教授

研究者番号：30263148

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 34,500,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、種々の熱活性遅延蛍光(TADF)材料を新規に設計し、高効率を示す塗布および蒸着系有機EL素子の開発に成功した。また、TADFにおいて最も重要な過程である逆項間交差(RISC)の高速化を目指した設計指針構築を行い、純有機材料の中で世界最速RISCの実現にも成功した。マルチスケールシミュレーションに関しては、複数の分子軌道を考慮することにより、可変パラメータを用いることなく実測の電子および正孔移動度を定量的に再現することに成功した。固体NMRを用いた構造解析に関しては動的核偏極NMRを用いることにより、52 μg という極微量の非晶薄膜について、その分布を含めた分子配向解析に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究において得られた有機EL発光材料の分子設計指針は、現在実用化が進む有機ELのさらなる低コスト化や長寿命化に資する結果である。また、マルチスケールシミュレーションでは、電荷輸送過程を分子レベルで解明し、電荷輸送に関する基礎学理を構築しつつあることに加え、定量的な電荷輸送特性評価により、今後、実際に分子を合成することなく、高移動度材料を開発するための分子設計指針を得ることが可能となり、学術・応用の双方について、その意義は大きい。以上のように、本研究により得られた研究成果は、基礎のみならず応用においても重要であり、このような知の基盤強化により、超スマート社会の実現に大きく寄与すると期待される。

研究成果の概要(英文)：In this research, we succeeded in developing various kinds of novel thermally activated delayed fluorescent emitters that exhibit high device efficiency in organic light emitting diodes. We have also performed molecule-based multiscale charge transport simulations, which successfully reproduced experimentally-obtained charge mobilities by including multiple molecular orbitals in the calculations. This simulation does not use any adjustable parameters, indicating that the method can be used for the prediction of charge mobilities of organic materials. For the structure analysis by solid-state NMR, we have succeeded in analyzing the molecular orientation of a very thin amorphous film (1.5 micrometer, 52 microgram) including the distribution, by using dynamic nuclear polarization technique.

研究分野：材料化学

キーワード：有機デバイス 有機EL 熱活性遅延蛍光材料 電荷輸送 マルチスケールシミュレーション 非晶 固体NMR 動的核偏極NMR

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、有機デバイスの高効率化に関する研究が、国内外で活発に進められている状況にあった。特に、イリジウムや白金などの元素を含まない、水素・炭素・窒素のみからなる有機分子であっても高効率発光が可能な熱活性化遅延蛍光(TADF)材料に関する研究は、当該分野で最もホットな研究の一つになりつつあった。そのような状況の中、申請者らは、量子化学計算による新規発光材料の設計からその合成、デバイス化および解析に至るまでの一連の研究を可能にし、その結果、効率100%で電気を光に変換する、すなわち、内部量子収率100%の有機EL材料の開発に成功した[Kaji et al., *Nature Commun.* **2015**, *6*, 8476]。また、それに続き、種々のTADF材料を開発してきた [Shizu, Kaji et al., *Phys. Rev. Applied* **2015**, *3*, 014001; Suzuki, Kaji et al., *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2015**, *54*, 15231; Wada, Kaji et al., *Appl. Phys. Lett.* **2015**, *107*, 183303; Wada, Kaji et al., *Appl. Phys. Express* **2016**, *9*, 032102 など]。

電荷輸送も有機デバイスにおいて重要な因子である。実験的には、移動度でしか語られない電荷輸送の分子・電子レベルでの理解を可能にするため、我々は特に有機ELへの展開を考え、非晶系に焦点を当て、そのマルチスケールシミュレーションを進めてきた[Suzuki, Kaji et al., *J. Mater. Chem. C* **2015**, *3*, 5549; Uratani, Kaji et al., *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 39128 など]。この有機非晶系における電荷輸送に関するマルチスケールシミュレーションは、欧州ではいくつかのグループが研究を進めているものの、国内では新規性が高いものであった。

2. 研究の目的

本研究では、上述の有機デバイス材料・素子の創製、マルチスケールシミュレーションに加え、固体NMRを中心とした解析を基軸とし、有機ELを中心とした有機デバイスに関する基礎科学の構築およびその基礎科学に基づいた応用研究を目指した。合成からデバイス作製、解析、多階層計算に渡っての研究を包括的に展開できる研究室は世界的に見ても限られている。我々の研究室ではそれらすべての研究を進めてきたことからその展開が可能であり、本申請を通して有機デバイスの基礎的理解を進展させることを主眼とした。

3. 研究の方法

本研究では、有機ELを主とした有機デバイスの包括的な理解のため、デバイス内における各種素過程に対する理論・量子化学計算・マルチスケールシミュレーション、高効率有機デバイスのための分子設計・有機合成・デバイス作製、固体NMRを中心としたデバイス内の有機非晶膜内構造解析を行った。

4. 研究成果

(1) 量子化学計算・マルチスケールシミュレーション

非晶と結晶における電荷輸送挙動の比較

本研究ではこれまでに我々が開発してきた、量子化学計算、分子動力学(Molecular Dynamics, MD)計算、動的モンテカルロ(kinetic Monte Carlo, k_{MC})計算を併用した多階層計算を用い、有機「非晶」薄膜と有機「結晶」薄膜における電荷輸送の比較を行った(図1)。計算前には、非晶凝集体における分子内、また、分子間の構造の乱れ(分布)が、非晶膜における低電荷移動度の起源と予想していたが、予想に反し、これらの構造の乱れの有無にかかわらず、電荷移動度は大きく変化しなかった。一方、非晶凝集体における各分子のエネルギー準位の乱れ(図1A)により、電荷移動度は大きく低下した(図1B)。

今回の研究から、「結晶」薄膜中における電荷移動度と比べ、「非晶」薄膜中での電荷移動度が低い原因は、構造の乱れではなく、エネルギー準位の乱れに因ることが明らかとなった。以上の知見は、今後、高い電荷移動度を有する非晶薄膜の設計に寄与することが期待される(F. Suzuki, et al., *Sci. Rep.*, **8**, 5203 (2018))。

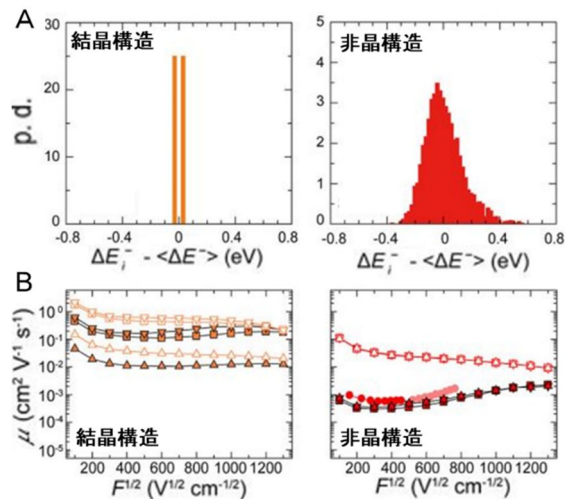


図1 (A) 各分子のエネルギー準位の分布。(B)マルチスケールシミュレーションによる電荷移動度の電界強度依存性。エネルギー準位の分布を考慮しない場合、結晶構造(図中、 \square)と非晶構造(同、 \circ)では、電荷移動度は大きく変わらない。一方、エネルギー準位の分布を考慮した場合、結晶構造(\square)に比べて非晶構造(\circ)の電荷移動度は大きく低下。

複数のフロンティア軌道を考慮した電荷輸送シミュレーション

上述の我々の先行研究を含め、これまでの非晶凝集系に対する移動度の計算においては、正孔輸送に関しては HOMO のみ、電子輸送に関しては LUMO のみが電荷を輸送するものとして取り扱われてきた。本研究では、電荷輸送に関して「他の分子軌道は本当に使われていないのか？」という点を明らかにするべく、他の分子軌道、具体的には、正孔輸送に関しては HOMO のみならず HOMO-p 軌道(p = 1, 2, 3, ...)、電子輸送に関しては LUMO のみならず LUMO+q 軌道(q = 1, 2, 3, ...) も考慮に入れたマルチスケールシミュレーションを行った(図 2A)。その結果、これらの軌道も、HOMO, LUMO のエネルギー準位と近い場合には電荷輸送に大きく寄与することを明らかにし、また、これらの寄与を考慮することにより、電荷移動度の予測性能をさらに向上させることに成功した(図 2B) (S. Kubo & H. Kaji, *Sci. Rep.*, **8**, 13462 (2018))。

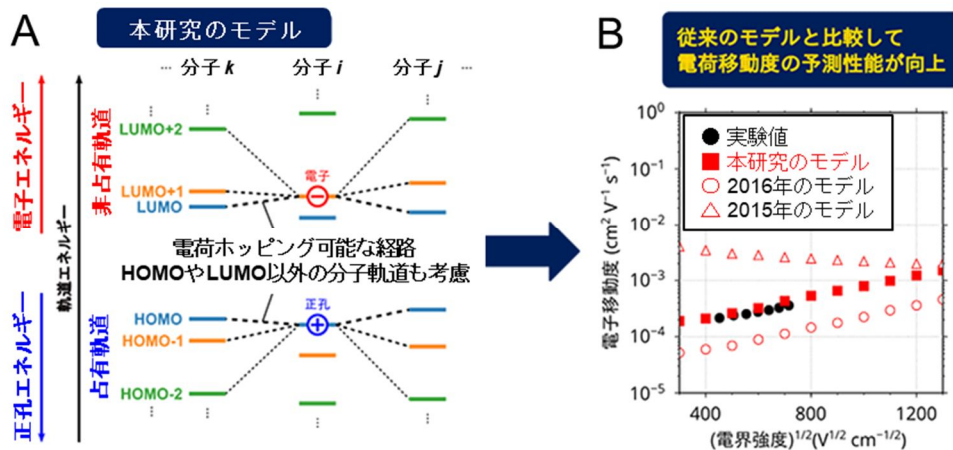


図 2 (A) 本研究における有機非晶膜中の電荷輸送マルチスケールシミュレーションのモデル。有機非晶系においては、分子軌道間の電荷のやり取りにより電荷が輸送される(ホッピング伝導)。ここでは、HOMO, LUMO 以外の軌道も考慮し、その影響を調べた。(B) 電子移動度の電界強度依存性。電荷ホッピング可能な経路として HOMO や LUMO 以外の分子軌道も考慮することにより、以前のモデル(: J. Mater. Chem. C 2015, 3, 5549 および : Sci. Rep. 2016, 6, 39128)では再現できなかった電子移動度の実測データ()が精度よく再現された()。

(2) 分子設計・合成・デバイス作製

エキシプレックスホストを利用した高効率デバイスの開発

現在、高性能な発光材料の設計・開発が国内外で活発に行われているが、実用レベルの輝度では三重項励起子同士が相互作用のため失活(Triplet-Triplet Annihilation)し、発光効率が急激に低下していくという問題があった。今回、我々自身で開発した、極めて優れた特性を有する熱活性遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 発光材料である DACT-II をエキシプレックスホスト(図 3A)中にドーブすることにより、発光分子上の三重項励起子をすばやく一重項励起子に変換させるとともに、ホスト上の三重項励起子もすばやく一重項励起子に変換し、発光分子である DACT-II に迅速にエネルギー移動させることが可能となり、高輝度領域での発光効率を飛躍的に向上させた。この素子設計の結果、発光の低電圧化を達成すると同時に、外部量子収率 (EQE) が最大で 34.2%、1000 cd/m² の高輝度領域においても 31.0% を維持する有機 EL を実現に成功した(図 3B)。

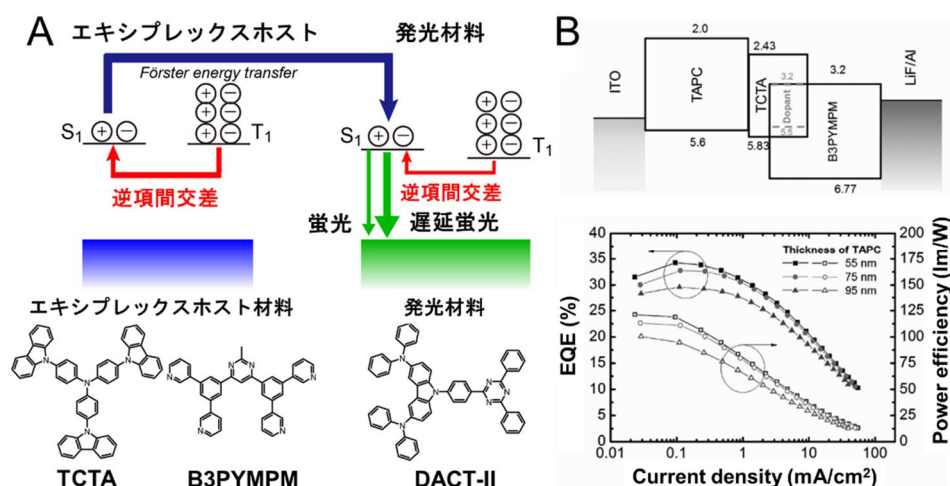


図 3 (A) エキシプレックスホストを用いた有機 EL の概念図。エキシプレックスホスト上で電荷再結合が起こった場合、ホスト上で一重項励起子(S₁)が 25%、三重項励起子(T₁)が 75% の確率で生成するが、エキシプレックスでは S₁-T₁ 間のエネルギー差(ΔE_{ST})が小さいため T₁ から S₁ へ、さらに発光分子の S₁ へとエネルギー移動が迅速に起こる。TADF 発光分子で再結合した場合も、この DACT-II 分子では ΔE_{ST} が小さく、T₁ → S₁ 変換が 100% で起こるため、T₁ 同士の相互作用による発光効率の低下を大幅に低減することが可能となる。(B) 本研究で作製したデバイス構造とその発光特性。

蒸着法による高効率青色 TADF 材料の開発

高特性な深い青色を示す有機 EL 素子の開発が困難を極めており、取り組むべき重要な課題であった。本研究では、新たに青色熱活性遅延蛍光材料を設計・開発し、青色有機 EL 素子においても、25.9%の EQE を得るとともに、さらに光取り出しを工夫することにより 33.3%の EQE を得ることに成功した(図4)。それまでの高特性 TADF 系青色有機 EL 素子は、発光波長がやや長く、多くはスカイブルーであったのに対して、我々の素子では、その発光波長が 471 nm、CIE 座標としては(x, y) = (0.15, 0.22)と深い青色を発現している。これらの結果により、これまでより色再現性に優れたディスプレイ、照明への応用が可能になると期待された (Miwa, T. *et al.*, *Sci. Rep.*, 7, 284 (2017))。

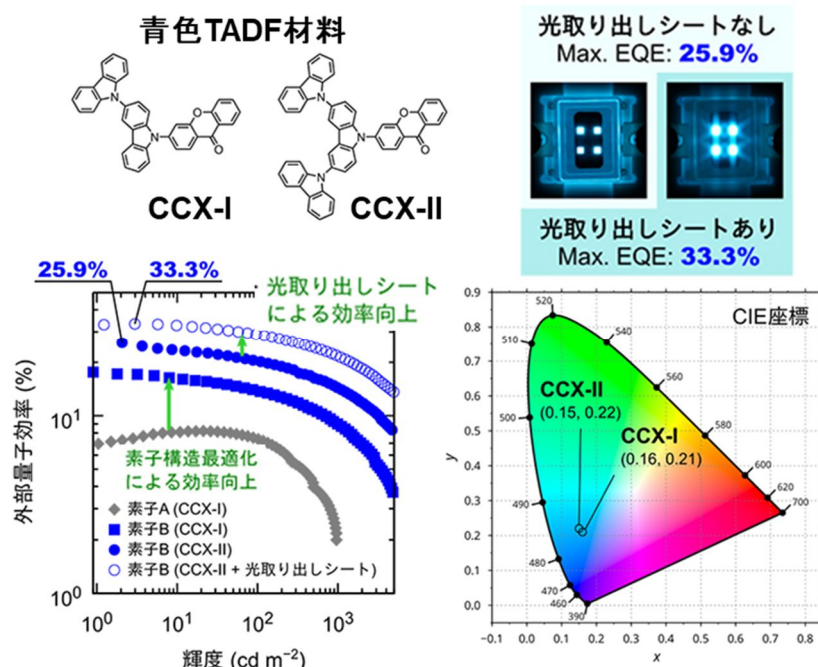


図4 本研究で用いた青色 TADF 材料とその発光特性 (発光写真、外部量子効率、CIE 座標)。

アダマンタン置換による高効率青色熱活性遅延蛍光材料の開発

本研究では、MA-TA, FA-TA, PA-TA と名付けた材料(図5)においてアダマンタンという置換基を導入するだけで、塗布成膜性、高い熱安定性、深い青色発光、高い外部量子収率という、塗布系深青色有機 EL 素子の高性能化に必要な要素を同時にすべて大幅に向上させることに成功した(図5、表1)。様々な溶媒への溶解性が向上したことにより、ハロゲンを含んだ溶媒を用いる必要がなく、環境負荷を低減させることが可能であるとともに、塗布系有機 EL 素子においても積層化を可能としている。また、耐熱性の向上により、素子の長寿命化が期待される。さらに、希少な元素、高価な元素を用いることなく、炭素、窒素、水素のみから構成される分子で高特性を実現している。発光波長はそれぞれ 465, 454, 448 nm、CIE 座標としては (x, y) = (0.15, 0.19), (0.15, 0.13), (0.15, 0.10) と従来に比べて深い青色を発現している。特に、MA-TA, FA-TA は、青色の深さの指標である CIE y 座標が 0.2 および 0.15 以下の塗布系 TADF 材料としては世界最高の外部量子収率を示した。PA-TA は、CIE y 座標が 0.1 以下の塗布系 TADF 材料として世界 2 番目の外部量子収率を示した。以上の通り、多岐にわたる高性能化を同時に実現することを可能にしたアダマンタン置換は、今後、さらなる高性能化をもたらす新たなアプローチとして、有機 EL はもとより、様々な分野において大きな波及効果を与えることが期待される (Y. Wada, *et al.*, *Adv. Mater.*, 30, 1705641, (2018))。

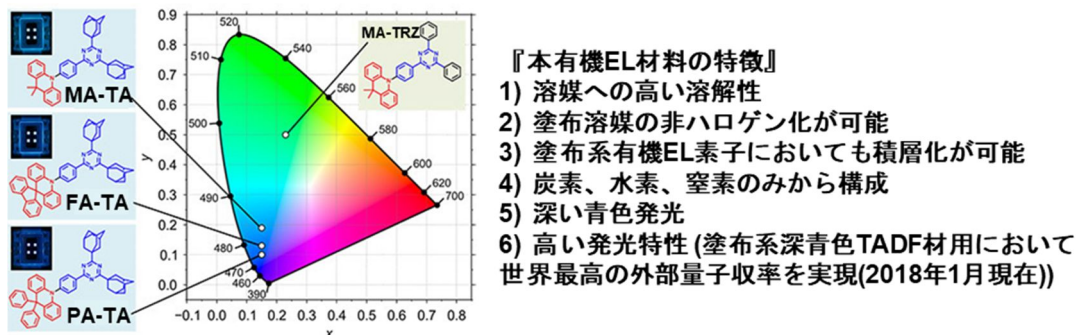


図5 (左図): 今回開発した有機 EL 材料 (MA-TA, FA-TA, PA-TA) の分子構造とそれらを用いた有機 EL 素子の発光の様子、CIE 座標における位置づけ。従来の材料 (MA-TRZ) と比べて、大幅にブルーシフトし、深青色が得られた。

表 1：今回、新規に開発した TADF 材料 (MA-TA, FA-TA, PA-TA) を用いた有機 EL 素子の特性とガラス転移温度(T_g)。

	λ / nm	CIE 座標 (x, y)	EQE (%)	T_g / °C
MA-TA	465	(0.15, 0.19)	22.1	147
FA-TA	454	(0.15, 0.13)	11.2	207
PA-TA	448	(0.15, 0.10)	6.7	186

(3) 固体 NMR を用いた有機非晶膜の構造解析

有機 EL 素子等で用いられる有機薄膜は、その作製法によって非晶状態を保ちながらも内在する分子は配向することが知られている。この分子配向は、非晶質材料の科学という基礎的な面のみならず、有機 EL 素子からの光取り出し効率や素子中での電荷移動度の向上という素子特性の面においても極めて重要である。有機 EL 素子の分子配向に関しては、これまで様々な解析が行われていたが、既存の測定法では、系全体の分子配向度が平均値としてのみ得られ、実際の分布を含めた解析は不可能であった。

それに対し、固体 NMR 法は、上述の各手法では不可能であった、分子の配向を「分布」を含めて解析することが可能である。しかし、その一方で、固体 NMR は上述の手法に比べて測定感度が極端に低いという大きな問題を抱えている。そのため、有機薄膜 1 枚での測定は、これまで困難を極めていた。そこで本研究では、動的核偏極 (Dynamic Nuclear Polarization, DNP)-NMR 法と呼ばれる感度増感法に注目した。DNP を利用することで、理論上、同一温度で最大 660 倍の感度向上が得られる。

今回、我々は、この DNP-NMR を用い、上述の有機薄膜 1 枚の NMR 測定を試み、わずか 52 μg の非晶薄膜内での分子配向を、その分布も含めて定量的に解析することに成功した。本研究では、電子スピンソースとなるラジカル分子をドープした電子輸送材料 POPy₂ (図 6a) の非晶薄膜を塗布、あるいは蒸着法により作製した試料 (図 6b) について DNP-NMR 測定を行い (図 6c) 配向解析を行うのに十分な S/N 比を持った NMR スペクトルを得ることに成功した (図 6d)。また、これらのスペクトルの解析から、図 6e に示した配向分布を得ることができた。蒸着膜では POPy₂ の P=O 軸が基板に対して垂直に配向する傾向がある一方、塗布法ではランダムに配向しているという明確な結果が得られた。本研究は固体 NMR 法により有機デバイス材料の配向分布を明らかにした初めての例である (K. Suzuki *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 14842, (2017))。

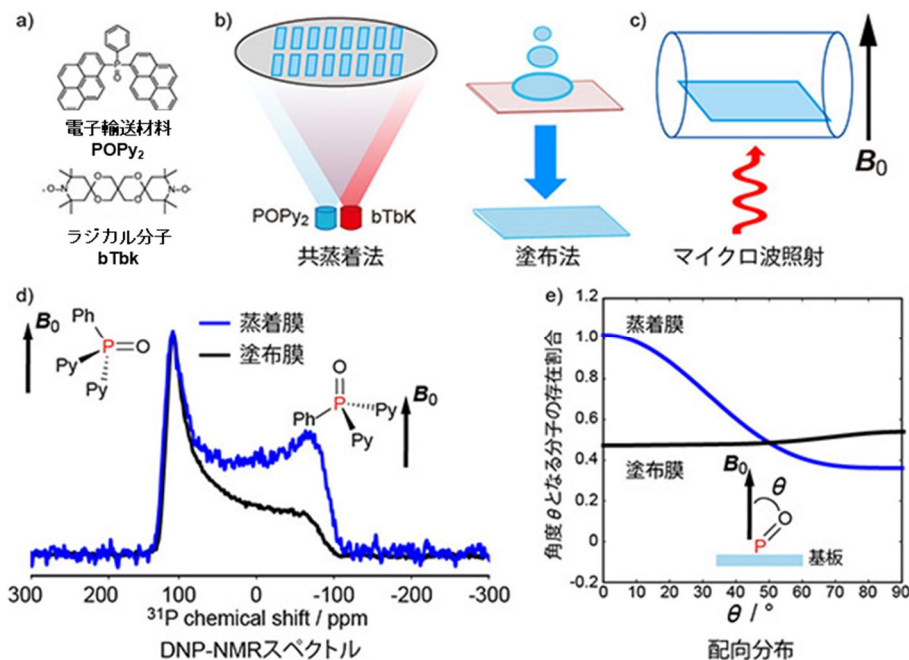


図 6 a) 本研究で使用した有機半導体材料とラジカル分子の構造。b) 試料作製法の概略図。共蒸着法と塗布法により試料を作製。c) DNP-NMR 実験の概略図。有機半導体薄膜試料にマイクロ波を照射し、NMR スペクトルを測定。d) 得られた DNP-NMR の化学シフト異方性スペクトル。試料の作製法の違いにより、NMR スペクトルが、すなわち、分子の向きの分布が大きく異なっていることがわかる。e) 実際の分子の配向分布。蒸着膜は P=O 軸が基板に対して配向する傾向がある一方、塗布膜はランダムに配向していることが明らかとなった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計32件（うち査読付論文 30件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Kusaka, Y., Hasegawa, T. and Kaji, H.	4. 巻 123
2. 論文標題 Noise Reduction in Solid-State NMR Spectra Using Principal Component Analysis	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 10333-10338
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.9b04437	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Zu, GQ., Kanamori, K., Maeno, A., Kaji, H., Nakanishi, K. and Shen, J.	4. 巻 10
2. 論文標題 Ambient-Dried Highly Flexible Copolymer Aerogels and Their Nanocomposites with Polypyrrole for Thermal Insulation, Separation, and Pressure Sensing	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Polymer Chemistry	6. 最初と最後の頁 4980-4990
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9py00751b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Shiota, K., Toda, T., Oshita, K., Fujimori, T., Kaji, H., Maeno, A. and Takaoka, M.	4. 巻 228
2. 論文標題 The Effect of Gas Emission on the Strength of Composite Products Derived Using Alkali-Activated Municipal Solid Waste Incineration Fly Ash/Pyrophyllite-Based Systems	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemosphere	6. 最初と最後の頁 513-520
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemosphere.2019.04.177	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ghosh, S., Tsutsui, Y., Suzuki, K., Kaji, H., Honjo, K., Uemura, T. and Seki, S.	4. 巻 4
2. 論文標題 Impact of the Position of Imine-Linker over Optoelectronic Performance of -Conjugated Organic Frameworks	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Mol. Syst. Des. Eng.	6. 最初と最後の頁 325-331
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8me00079d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fukushima, T., Ishibashi, H., Suemasa, D., Nakamura, R., Yomogida, M., Isono, T., Satoh, T. and Kaji, H.	4. 巻 57
2. 論文標題 Synthesis and characterization of cyclic P3HT as a donor polymer for organic solar cells	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Polym. Sci., PartB: Polym. Phys.	6. 最初と最後の頁 266-271
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/polb.24779	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhang, DD., Suzuki, K., Song, XZ., Wada, Y., Kubo, S., Duan, LA. and Kaji, H.	4. 巻 11
2. 論文標題 Thermally Activated Delayed Fluorescent Materials Combining Intra- and Intermolecular Charge Transfers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 7192-7198
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.8b19428	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Cai, M., Zhang, D., Xu, J., Hong, X., Zhao, C., Song, X., Qiu, Y., Kaji, H. and Duan, L.	4. 巻 11
2. 論文標題 Unveiling the Role of Langevin and Trap-Assisted Recombination in Long Lifespan OLEDs Employing Thermally Activated Delayed Fluorophores	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interfaces	6. 最初と最後の頁 1096-1108
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.8b16784	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Wada, Y., Nakagawa, H., Matsumoto, S., Wakisaka, Y. and Kaji, H.	4. 巻 -
2. 論文標題 Molecular Design Realizing Very Fast Reverse Intersystem Crossing in Purely Organic Emitter	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ChemRxiv	6. 最初と最後の頁 1-21
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.26434/chemrxiv.9745289.v1	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Fujioka, R., Fukushima, T., Oishi, N., Koshiba, Y., Takechi, C., Horike, S., Kaji, H. and Ishida, K.	4. 巻 59
2. 論文標題 Improving NIR sensor detectivity of BODIPY/C-60 bulk heterojunction photodiode	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Jpn. J. Appl. Phys.	6. 最初と最後の頁 SGGG04
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab641f	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shizu, K., Adachi, C. and Kaji, H.	4. 巻 -
2. 論文標題 Effect of Vibronic Coupling on Correlated Triplet Pair Formation in the Singlet Fission Process of Linked Tetracene Dimers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. A	6. 最初と最後の頁 in press
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.0c03041	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shibano, M., Ochiai, H., Suzuki, K., Kamitakahara, H., Kaji, H. and Takano, T	4. 巻 -
2. 論文標題 Thermally Activated Delayed Fluorescence Benzyl Cellulose Derivatives for Nondoped Organic Light-Emitting Diodes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Macromolecules	6. 最初と最後の頁 in press
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.macromol.9b02644	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kubo Shosei, Kaji Hironori	4. 巻 8
2. 論文標題 Parameter-Free Multiscale Simulation Realising Quantitative Prediction of Hole and Electron Mobilities in Organic Amorphous System with Multiple Frontier Orbitals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 13462 ~ 13462
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-018-31722-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tani Keita, Yashima Toru, Miyanaga Kanae, Hori Kazushige, Goto Kenta, Tani Fumito, Habuka Yume, Suzuki Katsuaki, Shizu Katsuyuki, Kaji Hironori	4. 巻 47
2. 論文標題 Carbazole and Benzophenone Based Twisted Donor-Acceptor Systems as Solution Processable Green Thermally Activated Delayed Fluorescence Organic Light Emitters	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1236 ~ 1239
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.180438	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sasabe Hisahiro, Sato Ryo, Suzuki Katsuaki, Watanabe Yuichiro, Adachi Chihaya, Kaji Hironori, Kido Junji	4. 巻 6
2. 論文標題 Ultrahigh Power Efficiency Thermally Activated Delayed Fluorescent OLEDs by the Strategic Use of Electron-Transport Materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Optical Materials	6. 最初と最後の頁 1800376 ~ 1800376
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adom.201800376	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Osada Kohei, Goushi Kenichi, Kaji Hironori, Adachi Chihaya, Ishii Hisao, Noguchi Yutaka	4. 巻 58
2. 論文標題 Observation of spontaneous orientation polarization in evaporated films of organic light-emitting diode materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Organic Electronics	6. 最初と最後の頁 313 ~ 317
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.orgel.2018.04.026	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Dong-dong, Suzuki Katsuaki, Song Xiao-zeng, Wada Yoshimasa, Kubo Shosei, Duan Lian, Kaji Hironori	4. 巻 11
2. 論文標題 Thermally Activated Delayed Fluorescent Materials Combining Intra- and Intermolecular Charge Transfers	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 7192 ~ 7198
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.8b19428	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Toda Akihiko, Taguchi Ken, Nozaki Koji, Fukushima Tatsuya, Kaji Hironori	4. 巻 18
2. 論文標題 Superheated Melting Kinetics of Metastable Chain-Folded Polymer Crystals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 3637 ~ 3643
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.8b00416	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toda Akihiko, Yamamura Ryosuke, Taguchi Ken, Fukushima Tatsuya, Kaji Hironori	4. 巻 18
2. 論文標題 Kinetics of "Melting" of Sucrose Crystals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 2602 ~ 2608
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.8b00234	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zu Guoqing, Kanamori Kazuyoshi, Maeno Ayaka, Kaji Hironori, Nakanishi Kazuki	4. 巻 57
2. 論文標題 Superflexible Multifunctional Polyvinylpolydimethylsiloxane-Based Aerogels as Efficient Absorbents, Thermal Superinsulators, and Strain Sensors	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 9722 ~ 9727
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201804559	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zu Guoqing, Kanamori Kazuyoshi, Shimizu Taiyo, Zhu Yang, Maeno Ayaka, Kaji Hironori, Nakanishi Kazuki, Shen Jun	4. 巻 30
2. 論文標題 Versatile Double-Cross-Linking Approach to Transparent, Machinable, Supercompressible, Highly Bendable Aerogel Thermal Superinsulators	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 2759 ~ 2770
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.8b00563	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Furitsu, Kubo Shosei, Fukushima Tatsuya, Kaji Hironori	4. 巻 8
2. 論文標題 Effects of Structural and Energetic Disorders on Charge Transports in Crystal and Amorphous Organic Layers	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 5203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-018-23204-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Wada Yoshimasa, Kubo Shosei, Kaji Hironori	4. 巻 30
2. 論文標題 Adamantyl Substitution Strategy for Realizing Solution-Processable Thermally Stable Deep-Blue Thermally Activated Delayed Fluorescence Materials	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 1705641 ~ 1705641
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.201705641	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Dongdong, Song Xiaozeng, Cai Minghan, Kaji Hironori, Duan Lian	4. 巻 30
2. 論文標題 Versatile Indolocarbazole-Isomer Derivatives as Highly Emissive Emitters and Ideal Hosts for Thermally Activated Delayed Fluorescent OLEDs with Alleviated Efficiency Roll-Off	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 1705406 ~ 1705406
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.201705406	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Katsuaki, Kubo Shosei, Aussenac Fabien, Engelke Frank, Fukushima Tatsuya, Kaji Hironori	4. 巻 56
2. 論文標題 Analysis of Molecular Orientation in Organic Semiconducting Thin Films Using Static Dynamic Nuclear Polarization Enhanced Solid-State NMR Spectroscopy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 14842 ~ 14846
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.201707208	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Suzuki Katsuaki, Adachi Chihaya, Kaji Hironori	4. 巻 25
2. 論文標題 Solution-processable thermally activated delayed fluorescence emitters for application in organic light emitting diodes	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Society for Information Display	6. 最初と最後の頁 480 ~ 485
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/jsid.598	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Senes Alessia, Meskers Stefan C. J., Greiner Horst, Suzuki Katsuaki, Kaji Hironori, Adachi Chihaya, Wilson Joanne S., Janssen and René A. J.	4. 巻 5
2. 論文標題 Increasing the horizontal orientation of transition dipole moments in solution processed small molecular emitters	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 6555 ~ 6562
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c7tc01568b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Shizu Katsuyuki, Miwa Takuya, Wada Yoshimasa, Ogata Isamu, Kaji Hironori	4. 巻 30
2. 論文標題 Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitter with a Symmetric Acceptor-Donor-Acceptor Structure	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Photopolymer Science and Technology	6. 最初と最後の頁 475 ~ 481
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2494/photopolymer.30.475	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Wada Yoshimasa, Kaji Hironori	4. 巻 4
2. 論文標題 Dipole Moment in the Excited State: An Important Property for TADF Hosts	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chem	6. 最初と最後の頁 2018 ~ 2019
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chempr.2018.08.016	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kayahara Eiichi, Sun Liansheng, Onishi Hiroaki, Suzuki Katsuaki, Fukushima Tatsuya, Sawada Ayaka, Kaji Hironori, Yamago Shigeru	4. 巻 139
2. 論文標題 Gram-Scale Syntheses and Conductivities of [10]Cycloparaphenylene and Its Tetraalkoxy Derivatives	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 18480 ~ 18483
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.7b11526	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kimura Tomoki, Shimizu Taiyo, Kanamori Kazuyoshi, Maeno Ayaka, Kaji Hironori, Nakanishi Kazuki	4. 巻 33
2. 論文標題 Aerogels from Chloromethyltrimethoxysilane and Their Functionalizations	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 13841 ~ 13848
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.7b03013	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shimizu Taiyo, Kanamori Kazuyoshi, Maeno Ayaka, Kaji Hironori, Doherty Cara M., Nakanishi Kazuki	4. 巻 33
2. 論文標題 Transparent Ethenylene-Bridged Polymethylsiloxane Aerogels: Mechanical Flexibility and Strength and Availability for Addition Reaction	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Langmuir	6. 最初と最後の頁 4543 ~ 4550
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.langmuir.7b00434	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ghosh, S., Nakada, A., Springer, M.A., Kawaguchi, T., Suzuki, K., Kaji, H., Baburin, I., Kuc, A., Heine, T., Suzuki, H., Abe, R. and Seki, S.	4. 巻 -
2. 論文標題 Identification of Prime Factors to Maximize the Photocatalytic Hydrogen Evolution of Covalent Organic Frameworks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Am. Chem. Soc.	6. 最初と最後の頁 in press
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.0c02633	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計64件（うち招待講演 46件 / うち国際学会 31件）

1. 発表者名 志津 功將、安達 千波矢、梶 弘典
2. 発表標題 一重項励起子分裂における振電相互作用の可視化手法の開発
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 ○和田 啓幹、中川 博道、松本 壮馬、脇坂 安晃、梶 弘典
2. 発表標題 超高速な逆項間交差を示す純有機発光材料の実現とデバイス化
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 ○河村 佳歩、祐本 晋太郎、勝俣 潤哉、和田 啓幹、鈴木 克明、梶 弘典、丸本 一弘
2. 発表標題 熱活性化遅延蛍光材料を用いた発光電気化学セルの電荷状態のオペランドESR分光研究
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 Realization of organic light-emitting diodes with very fast reverse intersystem crossing
3. 学会等名 The Second International Conference of Polymeric and Organic Materials in Yamagata University (IPOMY) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 ○和田 啓幹, 中川 博道, 松本 壮馬, 脇坂 安晃, 梶 弘典
2. 発表標題 構造制御に基づいた超高速逆項間交差 TADF 材料の設計と $kRISC > 10^7 \text{ s}^{-1}$ の実現
3. 学会等名 「有機EL討論会」第29回例会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 Effective use of locally excited triplet states in TADF systems
3. 学会等名 International Conference on Electronic Materials Leading the Future (ICE-MLF2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 In silico material design for organic light-emitting diodes
3. 学会等名 第35回京都賞先端技術部門 受賞記念ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 A new material design realizing energy matching of 1CT, 3CT, and 3LE states in TADF systems
3. 学会等名 The 11th Asian Conference on Organic Electronics 2019 (A-COE 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 A new material design for TADF and TADF-assisted-fluorescence OLEDs
3. 学会等名 13th China-Japan Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 有機発光材料の分子設計と有機 EL デバイスの精密解析
3. 学会等名 J O E M アカデミー 2 0 1 9 第 3 回 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 動的核偏極(DNP)法による超高感度 NMR 測定と材料への応用 (依頼講演)
3. 学会等名 第68回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 計算科学を用いた有機 EL 材料のハイスループット探索とマルチスケールシミュレーション (依頼講演)
3. 学会等名 第68回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 Multiscale charge transport simulation
3. 学会等名 XXIVth International Krutyn Summer School 2019 (IKSS2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 Thermally activated delayed fluorescence, TADF
3. 学会等名 XXIVth International Krutyn Summer School 2019 (IKSS2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 Development of excellent materials and multiscale charge transport simulation for organic light-emitting diodes
3. 学会等名 SPIE Photonic Devices + Applications 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 In silico Discovery of Emitters and Charge Transporters for Organic Light-Emitting Diodes
3. 学会等名 OSA Optical Devices and Materials for Solar Energy and Solid-state Lighting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 High-Throughput Computational Screening for Excellent Organic Light-Emitting Materials, Multiscale Charge Transport Simulation, and DNP-NMR Analysis
3. 学会等名 OIST沖縄科学技術大学院大学 機器分析セッション講演会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 High-Throughput Computational Screening for Excellent Organic Light-Emitting Materials and Multiscale Charge Transport Simulation
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 高分子の化学構造-溶液NMRの利用から固体NMRによる解析へ
3. 学会等名 KIPS高分子講座 第2回講義（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森脇 千騎、久保 勝誠、梶 弘典
2. 発表標題 多階層計算によるホスト-ゲスト非晶系の電荷輸送特性解析
3. 学会等名 有機EL討論会 第28回例会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 TADF, Multiscale Simulation, and DNP-NMR
3. 学会等名 The 3rd Frontiers of Organic Semiconductor Lasers (3FOSLs) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木 克明、梶 弘典
2. 発表標題 各種機能性材料への DNP-NMRの適用
3. 学会等名 NMR共用プラットフォームシンポジウム2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 TADF-OLEDs, Multiscale simulation, and DNP-NMR
3. 学会等名 A Scotland-Japan Symposium Jointly Organised by RSE and JSPS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Katsuaki Suzuki
2. 発表標題 The development of highly efficient TADF emitters and solid-state NMR study of organic semiconducting materials
3. 学会等名 A Scotland-Japan Symposium Jointly Organised by RSE and JSPS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 In silico material design, multiscale simulation, and DNP NMR for OLEDs
3. 学会等名 France-Japan Workshop on OptoElectronics&Photonics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 有機デバイス解析とNMR
3. 学会等名 第12回「分析技術セミナー」先進材料とNMR分析(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 高分子の化学構造-溶液NMRの利用から固体NMRによる解析へ
3. 学会等名 KIPS高分子講座2018(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 和田 啓幹, 久保 勝誠, 梶 弘典
2. 発表標題 アダマンタン置換: 高効率・高耐熱・塗布型・深青色 TADF 材料の実現
3. 学会等名 有機EL討論会 第26回例会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 Highly-Efficient Wet-Processable and Stable TADF Materials for Deep-Blue OLEDs
3. 学会等名 3rd International TADF Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Katsuaki Suzuki
2. 発表標題 Recent progress on highly efficient organic light emitting diodes and application of dynamic nuclear polarization enhanced NMR to organic semiconducting materials
3. 学会等名 SPIE Optics + Photonics 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 Development of TADF-OLEDs and multiscale charge transport simulations
3. 学会等名 The 10th Asian Conference on Organic Electronics (A-COE 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 In silico discovery of emitters and charge transporters for organic LEDs
3. 学会等名 The 12th SPSJ International Polymer Conference (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 有機EL材料・デバイスのハイスループット開発
3. 学会等名 日本学会議 化学委員会 材料化学分科会 (第24期・第3回) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 高効率深青色TADF有機ELの実現に向けて
3. 学会等名 2018年光化学討論会 シンポジウム II: 熱活性化遅延蛍光 (TADF) で切り拓く次世代有機EL発光材 (OLED) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 計算科学による分子・デバイスデザイン: 高性能有機 EL 材料およびデバイスのハイスループット開発
3. 学会等名 日本セラミックス協会 秋季シンポジウム S4. セラミックス材料・ハイブリッド材料のボトムアッププロセスの新展開 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 動的核偏極(DNP)法によるNMRの超高感度化と材料への展開
3. 学会等名 第 67 回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 TADF materials, multiscale simulations, and dynamic nuclear polarization NMR for OLEDs
3. 学会等名 12th International Conference on Electroluminescence and Optoelectronic Devices (ICEL2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 有機発光材料の分子設計と有機ELデバイスの精密解析
3. 学会等名 有機エレクトロニクス材料研究会 JOEMアカデミー 2018第3回 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 非晶質有機薄膜中での電荷輸送解析
3. 学会等名 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス (SDM) 研究会、応用物理学会シリコンテクノロジー分科会モデリング研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 In silico design of TADF, multiscale charge transport simulation, and DNP-NMR
3. 学会等名 EPSRC-JSPS Core to Core Grant Symposium on Frontier in Organic Optoelectronics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 祐本 晋太郎 勝俣 潤哉 大澤 文也 和田 啓幹 鈴木 克明 梶 弘典 丸本 一弘
2. 発表標題 熱活性化遅延蛍光材料における電荷・励起子状態のESR分光研究
3. 学会等名 第57回電子スピンサイエンス学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 脇坂 安晃、和田 啓幹、梶 弘典
2. 発表標題 幅広い極性を有するホスト中において高効率発光を示すTADF材料の光物性評価および素子特性評価
3. 学会等名 有機EL討論会 第27回例会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 志津 功將
2. 発表標題 光化学過程の起源を視覚的に理解する - 数式を使わない量子化学を目指して -
3. 学会等名 分子エレクトロニックデバイス研究所 (RIMED) 第20回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 志津 功將
2. 発表標題 光化学を直感的に理解する - 材料化学のための新しい量子化学 -
3. 学会等名 セミナー “化学千一夜” 「あすの化学への夢を語ろう」 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Katsuyuki Shizu
2. 発表標題 Visual Understanding of Electronic Transitions and Its Applications to Luminescent Materials for Organic-Light Emitting Diode
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC Langkawi 2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 TADF, Multiscale Simulation, and DNP-NMR
3. 学会等名 3rd Frontiers of Organic Semiconductor Laser (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森脇 千騎、久保 勝誠、梶 弘典
2. 発表標題 多階層計算によるホスト-ゲスト系有機EL発光層の電荷輸送解析
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 澤田 彩日、久保 勝誠、茅原 栄一、山子 茂、梶 弘典
2. 発表標題 多階層計算によるシクロパラフェニレン非晶薄膜の凝集構造および電荷輸送解析
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 福島 達也、石橋 寛隆、末政 大地、中村 亮介、蓬田 昌伸、磯野 拓也、佐藤 敏文、梶 弘典
2. 発表標題 環状P3HTの合成と有機薄膜太陽電池への応用
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 祐本 晋太郎、勝俣 潤哉、大澤 文也、和田 啓幹、鈴木 克明、梶 弘典、丸本 一弘
2. 発表標題 熱活性化遅延蛍光発光ダイオードの電荷状態のオペランドESR分光研究
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 In silico discovery of highly efficient dry and wet processable TADF materials for blue-to-green OLEDs
3. 学会等名 2nd International TADF Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 Multiscale hopping-type charge transport simulation: the prediction and molecular-level analysis
3. 学会等名 SPIE Optics + Photonics conference 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 Computer-Assisted Material Design Toward Highly Efficient Dry and Wet Processed OLEDs and Multiscale Charge Transport Simulations
3. 学会等名 The 7th International Meeting on Information Display (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Katsuaki Suzuki, and Hironori Kaji
2. 発表標題 In Silico Material Design for Highly Efficient OLEDs and Multiscale Charge Transport Simulations
3. 学会等名 The 4th International Conference on Advanced Electromaterials (ICAE 2017) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Katsuyuki Shizu
2. 発表標題 Enhanced Electroluminescence from Delayed-Fluorescence Emitters by Suppressing Nonradiative Decay
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Hironori Kaji
2. 発表標題 Organic light-emitting diodes (OLEDs): Design-synthesis-fabrication, multiscale simulation, and DNP-NMR
3. 学会等名 ACS National Meeting and Exposition (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Katsuyuki Shizu
2. 発表標題 Purely Organic Delayed Fluorescence Emitters for Organic Light-Emitting Diodes
3. 学会等名 International Symposium on Pure & Applied Chemistry (ISPAC) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Katsuyuki Shizu
2. 発表標題 Organic light-emitting diodes using symmetric donor-acceptor-type delayed fluorescence emitters
3. 学会等名 International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE9) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 志津功將、尾形勇武、三輪卓也、和田啓幹、梶弘典
2. 発表標題 対称的なアクセプター・ドナー・アクセプター型構造をもつ高効率熱活性化型遅延蛍光材料の開発
3. 学会等名 The 34th International Conference of Photopolymer Science and Technology (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 羽深 夢、八嶋 徹、谷 敬太、鈴木 克明、志津 功將、梶 弘典
2. 発表標題 塗布成膜可能な青色および緑色熱活性化型遅延蛍光材料の光物性および有機EL特性
3. 学会等名 第66回高分子討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 梶 弘典
2. 発表標題 NMR for material Science and toward the introduction of DNP-NMR
3. 学会等名 大阪大学蛋白質研究所セミナー, 高分極核スピンの拓く未来 - 動的核分極 (DNP) 法の最前線 - (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 和田 啓幹、久保 勝誠、梶 弘典
2. 発表標題 アダマンタン置換に基づく深青色塗布型TADF低分子材料の開発
3. 学会等名 第65回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長田 航平、合志 憲一、梶 弘典、安達 千波矢、石井 久夫、野口 裕
2. 発表標題 有機半導体材料の自発的配向分極現象と分子間相互作用の相関
3. 学会等名 第65回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 佐藤 瞭、笹部 久宏、鈴木 克明、安達 千波矢、梶 弘典、城戸 淳二
2. 発表標題 超低消費電力緑色熱活性化遅延蛍光有機EL素子の開発
3. 学会等名 第65回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計3件

1. 著者名 梶 弘典	4. 発行年 2019年
2. 出版社 高分子学会	5. 総ページ数 5
3. 書名 高分子 68巻 有機EL素子の高効率化～有機材料の中で最も速い逆項間交差の実現、さらに高分子系への展開に向けて～	

1. 著者名 和田 啓幹, 梶 弘典	4. 発行年 2019年
2. 出版社 化学工業社	5. 総ページ数 13
3. 書名 化学工業 70巻 1号 有機ELにおける熱活性化型遅延蛍光(TADF)現象の活用 - その材料開発と今後の課題	

1. 著者名 梶 弘典、久保 勝誠	4. 発行年 2018年
2. 出版社 株式会社 技術情報協会	5. 総ページ数 12
3. 書名 有機ELに関する発光効率向上、部材開発、新しい用途展開	

〔出願〕 計14件

産業財産権の名称 化合物、発光材料および有機発光素子	発明者 梶弘典、和田啓幹、 久保勝誠	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、PCT/JP2018/017704	出願年 2018年	国内・外国の別 外国

産業財産権の名称 化合物、発光材料および有機発光素子	発明者 梶弘典、和田啓幹、 久保勝誠	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、107115425 (TW)	出願年 2017年	国内・外国の別 外国

産業財産権の名称 分子設計方法、プログラム、ホスト材料、発光分子および有機発光素子	発明者 佐藤徹、伊藤彰浩、 梶弘典、鈴木克明、 上辺将士	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2017-214686	出願年 2017年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 分子設計方法、プログラム、ホスト材料、発光分子および有機発光素子	発明者 佐藤徹、伊藤彰浩、 梶弘典、鈴木克明、 上辺将士	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、PCT/JP2018/041412	出願年 2018年	国内・外国の別 外国
産業財産権の名称 一重項分裂材料、三重項増感剤および化合物	発明者 梶弘典、志津功将、 檜垣壮太郎、安達千 波矢	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2017-144035	出願年 2017年	国内・外国の別 国内
産業財産権の名称 化合物、発光材料、遅延蛍光体、有機発光素子、酸素センサー、分子の設計方法およびプログラム	発明者 梶弘典、和田啓幹、 中川博道	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2018-179327	出願年 2018年	国内・外国の別 国内
産業財産権の名称 COMPOUND, LIGHT EMITTING MATERIAL AND ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT	発明者 梶弘典、和田啓幹、 久保勝誠	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、16/611,972 (US)	出願年 2019年	国内・外国の別 外国
産業財産権の名称 化合物、発光材料、遅延蛍光体、有機発光素子、酸素センサー、分子の設計方法およびプログラム	発明者 梶弘典、和田啓幹、 中川博道	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、PCT/JP2019/037565	出願年 2019年	国内・外国の別 外国
産業財産権の名称 有機発光素子、積層体および発光方法	発明者 梶弘典、鈴木克明、 和田啓幹、中川博 道、安達千波矢	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2019-111566	出願年 2019年	国内・外国の別 国内
産業財産権の名称 アクリルポリマー、発光材料および有機発光素子	発明者 梶弘典、和田啓幹、 山岡英徳	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2019-154720	出願年 2019年	国内・外国の別 国内
産業財産権の名称 COMPOUND, LIGHT EMITTING MATERIAL AND ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT	発明者 梶弘典、和田啓 幹、久保勝誠	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、WO/2018/207750	出願年 2018年	国内・外国の別 外国
産業財産権の名称 SINGLET FISSION MATERIAL, TRIPLET SENSITIZER, COMPOUND, AND THIN FILM	発明者 梶弘典、志津功 将、檜垣壮太郎、 安達千波矢、合志	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、WO/2019/022120	出願年 2019年	国内・外国の別 外国
産業財産権の名称 化合物、発光材料および有機発光素子	発明者 梶弘典、和田啓 幹、中川博道	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、特願2018-179327	出願年 2018年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 化合物、発光材料および有機発光素子	発明者 梶弘典、和田啓幹、 久保勝誠	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、2017-092244	出願年 2017年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

近年の研究業績 http://molmat.kuicr.kyoto-u.ac.jp/research-j.html
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	志津 功將 (Shizu Katsuyuki) (10621138)	京都大学・化学研究所・助教 (14301)	
研究分担者	鈴木 克明 (Suzuki Katsuaki) (90747859)	京都大学・化学研究所・助教 (14301)	