



名古屋大学
NAGOYA UNIVERSITY



九州大学
KYUSHU UNIVERSITY



配布先：文部科学記者会、科学記者会、名古屋教育記者会、九州大学記者クラブ

2026 年 7 月 22 日

報道機関 各位

AI×量子化学で色純度の高い青色発光材料を発見 ～設計から素子作製・評価まで一気通貫、材料開発を劇的に加速～

【本研究のポイント】

- ・次世代有機 EL ディスプレイに不可欠な「色純度の高い青色発光」と「高い発光効率」を両立する、安価で合成が容易なホウ素を含まない材料の開発に成功した。
- ・約 2 万種の仮想分子ライブラリを生成し、量子化学計算^{注 1)}と AI(機械学習)を連携させることで、膨大な候補群から有望な分子を高速に見いだす手法を構築した。
- ・AI による分子設計から有機 EL 素子作製・評価までを一気通貫で完了させ、時間と開発コストを劇的に削減する「データ駆動型材料開発」の圧倒的な有用性を実証した。

【研究概要】

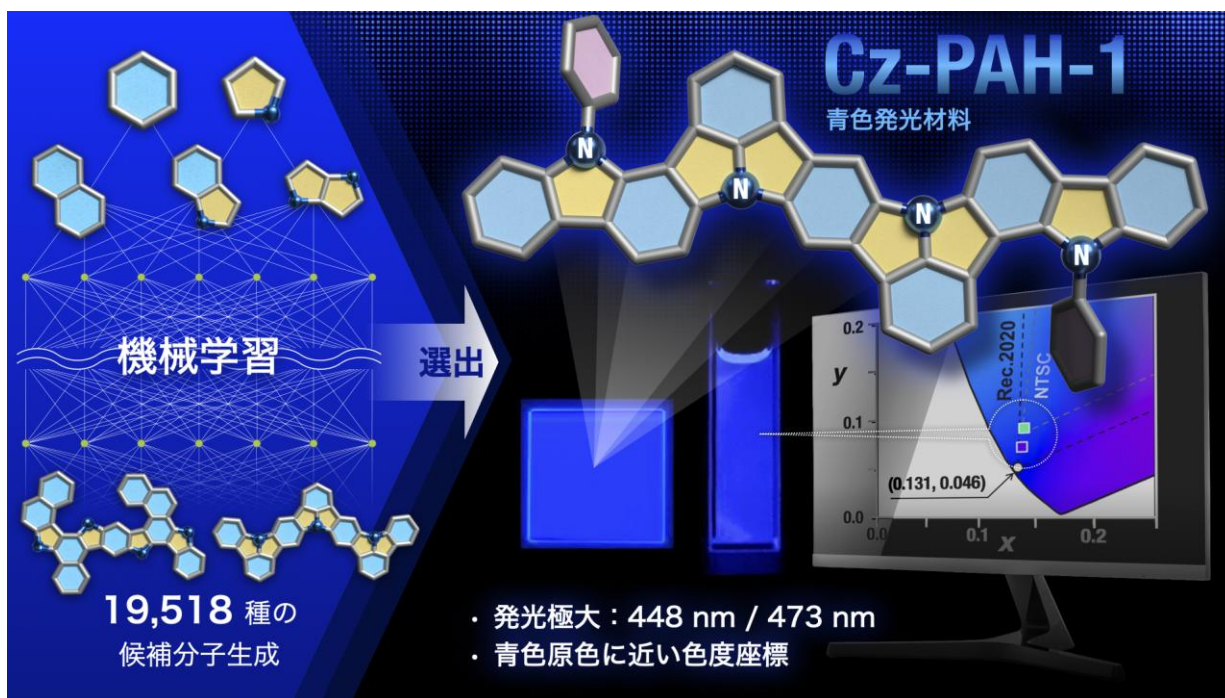
名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所(WPI-ITbM※)の羽飼 雅也 博士後期課程学生、藤本 和宏 特任准教授、山口 茂弘 教授、柳井 毅 教授、九州大学高等研究院の安田 琢磨 教授らの研究グループは、機械学習と量子化学計算を連携させ、ホウ素を含まない青色発光材料を探索する「データ駆動型」手法を開発しました。

具体的には、カルバゾール含有多環芳香族分子(Cz-PAH)^{注 2)}の候補約 2 万種をコンピュータ上で網羅的に生成しました。そのうち約 1,000 分子について量子化学計算を行い、そのデータを AI に学習させることで、残り全候補の発光特性を高速かつ高精度に予測することに成功しました。

予測結果から最も有望な 2 分子(Cz-PAH-1、Cz-PAH-2)を厳選して合成・評価した結果、予測通り極めて波長幅の狭い青色発光(半値幅^{注 3)}17～19 nm)を示しました。さらに、これらを用いた有機 EL 素子は、次世代規格「Rec. 2020」の青色原色に迫る色度座標^{注 4)}と、最大 35.2%の高い外部量子効率^{注 5)}を達成しました。

計算機上の大規模探索から素子作製までを一つの工程として統合した本成果は、次世代ディスプレイの低コスト化・省資源化に直結するだけでなく、候補数が膨大なあらゆる有機機能材料の開発を劇的に加速する基盤技術になると期待されます。

本研究成果は、2026 年 7 月 21 日(現地時間)付ドイツ化学会誌『Angewandte Chemie International Edition』オンライン版に掲載されました。



【研究背景と内容】

有機 EL 素子は、有機分子に電気を流して発光させるデバイスです。鮮やかな映像を表示するには、発光する波長の幅を狭くして不要な色が混ざるのを抑えるとともに、電気エネルギーを効率よく光へ変える必要があります。特に青色発光用の有機 EL 素子では、この色純度と発光効率の両立が重要な課題です。

有機 EL 素子の中では、電気によって生じたエネルギーの一部が、そのままでは発光に使われにくい状態になります。熱活性化遅延蛍光(TADF)材料は、熱の助けを借りてこのエネルギーを発光に利用できる状態へ移します。発光に利用できる状態と、通常は利用しにくい状態との状態のエネルギー差(ΔE_{ST})が小さいことは、この変換を起こしやすくする条件の一つです。

色純度を高める材料の多くでは、硬い多環構造(五員環や六員環が連なった構造)の中にホウ素と窒素を配置した分子骨格が用いられてきましたが、ホウ素の導入には合成上の負担を伴う場合があります。そこで研究グループは、ホウ素を含まず、炭素、水素、窒素からなるカルバゾール含有多環芳香族分子(Cz-PAH)に着目しました。この分子群の中から、狭い波長幅と TADF に適した小さなエネルギー差を両立する新しい骨格を見つけることが課題でした。

量子化学計算は分子の性質を詳しく予測できますが、膨大な候補すべてに適用するには大きな計算資源が必要です。一方、機械学習は多数の候補を高速に評価できます。本研究では、詳しい計算から得た信頼性の高いデータを機械学習に取り込み、計算精度と探索速度の両立を目指しました。

まず、研究グループは独自の分子構造生成法を用いて、五員環と六員環が合計 13 個連結した多環芳香族骨格を系統的に生成しました。カルバゾール構造を少なくとも一つ含むことや、化学結合を矛盾なく表現できることなどを条件に候補を選別し、19,518 種の Cz-PAH から成る分子ライブラリを構築しました。これは、あらゆる有機分子を無制限に生成したものではなく、13 環性 Cz-PAH という化学的に定めた範囲の中で、条件を満たす構造を系統的に列挙したものです(図1)。

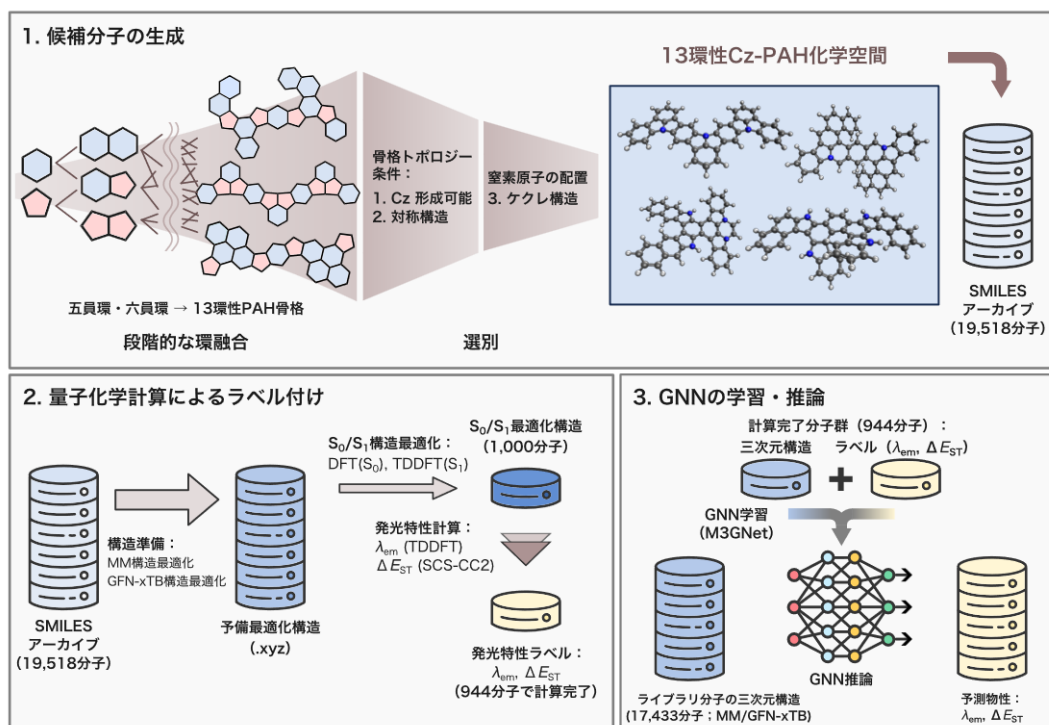


図1： ホウ素を含まない TADF 発光体の探索ワークフローと Cz-PAH 設計空間の概要

次に、19,518 種の中から 1,000 分子を無作為に選び、発光エネルギーと TADF に関係するエネルギー差を量子化学計算で求めました。発光エネルギーには時間依存密度汎関数法(TDDFT)、エネルギー差にはスピン成分スケールリング CC2 法(SCS-CC2)を用い、両方の計算が完了した 944 分子のデータから、グラフニューラルネットワーク (GNN)^{注6)}を用いた機械学習モデルを構築しました。テスト用データに対する決定係数 R^2 は、発光エネルギーで 0.80、エネルギー差で 0.76 でした。続いて、残る 18,518 分子のうち、三次元構造を準備できた 17,433 分子にこのモデルを適用し、少ない計算量で大規模な候補群を評価しました。その結果、今回の分子群では、TADF に有利な小さなエネルギー差を持つ候補が青色側に多く分布する傾向が示され、材料選定の指針が得られました(図2)。

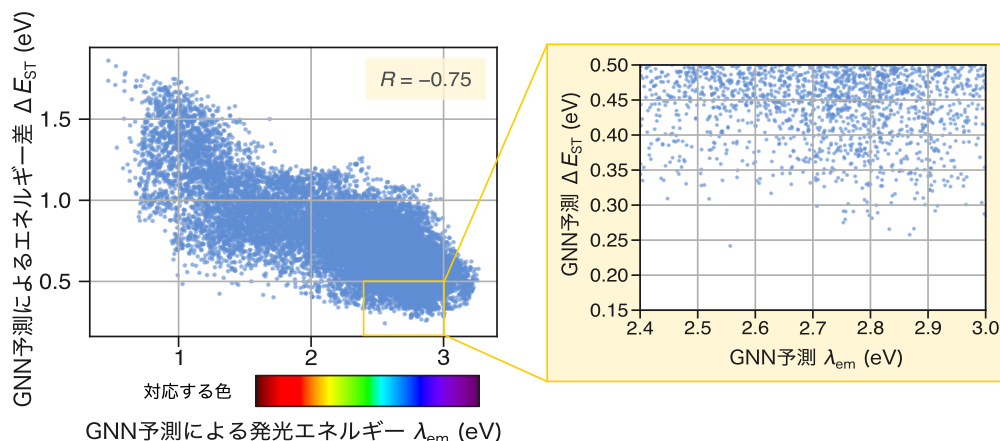


図2： グラフニューラルネットワーク(GNN)によるライブラリ全体の推論と有望分子の抽出

これらの予測をもとに、研究グループは青色発光が期待され、予測されたエネルギー差が小さい上位 50 分子を抽出しました。さらに、より詳しい計算を行い、構造の安定性や合成可能性も考慮して Cz-PAH-1 と Cz-PAH-2 を選定しました(図3上)。

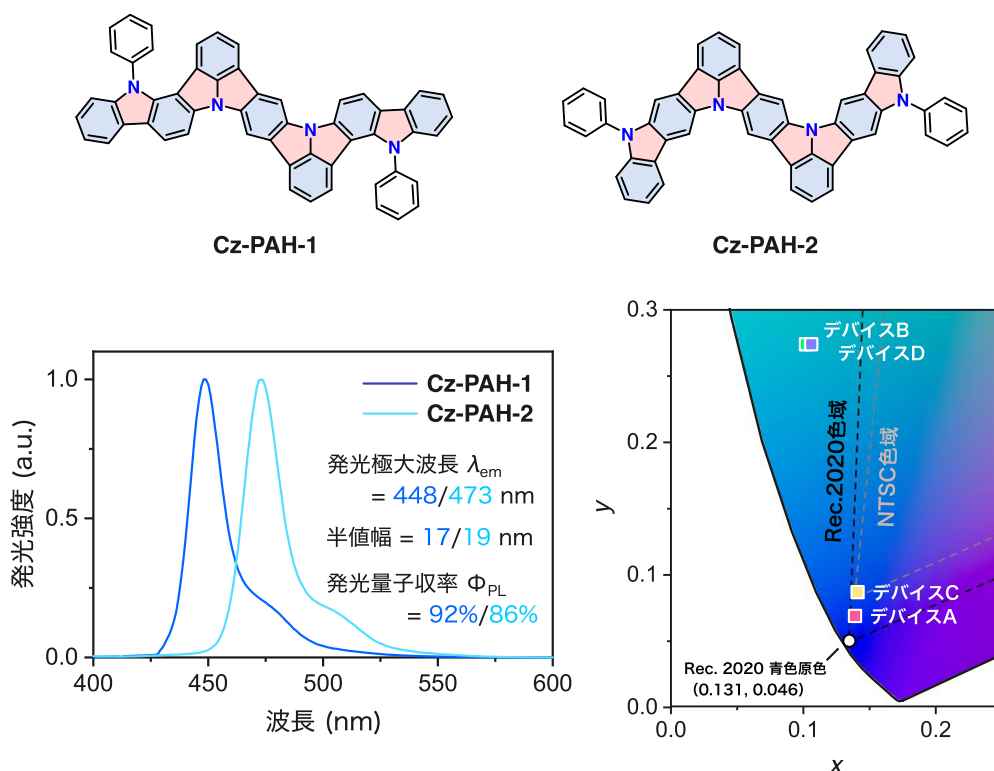


図3: Cz-PAH-1/Cz-PAH-2 の発光特性と有機 EL 素子の発光色評価

選定した二つの候補分子(Cz-PAH-1、Cz-PAH-2)を実際に合成して発光特性を調べたところ、計算の予測通り、極めて波長幅の狭い(半値幅 17~19 nm、nm はナノメートルと読み 10 億分の 1 メートル)鮮やかな青色発光を示しました。また、エネルギーを無駄なく光に変換するために重要な「小さなエネルギー差 ΔE_{ST} 」も予測とよく一致し、薄膜状態での発光量子収率^{注 7)}(発光効率)は 93~99%に達しました。これにより、両分子が優れた TADF 材料として機能することが実証されました。

さらに、これらの分子を発光材料として用いた有機 EL 素子を作製し、その性能を評価しました。その結果、次世代の超高精細映像規格「Rec. 2020」の青色原色に極めて近い、高純度な青色発光を実現しました(図3下)。加えて、発光の仕組みを最適化した素子においては、電気エネルギーを光に変換する効率(最大外部量子効率)が 35.2%という極めて高い値を記録しました。

【成果の意義】

本研究の新規性は、候補分子の大規模生成、詳しい計算、機械学習による選別、分子合成、発光測定、素子評価を一つの探索工程としてつないだ点にあります。これにより、機械学習による候補選定を実際の材料開発につなげられることを、2 種類の分子で検証しました。

また、ライブラリ全体の予測から、TADF に有利な小さなエネルギー差を持つ候補が青

色側に多いという傾向を見だし、今後の分子設計に利用できる知見を得ました。本研究で示した方法は、候補数が膨大な他の有機機能材料の効率的な探索にも展開できる可能性があります。

とりわけ、計算負荷の高い量子化学計算を一部の分子に集中し、得られたデータを機械学習によって大規模な候補群へ展開する構成は、探索の精度と速度を両立する実践的手法です。候補生成から合成、発光測定、有機 EL 素子での評価までを連続させ、ホウ素を含まない分子骨格から狭帯域青色発光材料に到達したことは、この探索手法が実際の材料開発に結びつくことを示す成果です。

さらに、今回得られた分子設計の知見を、より広い含窒素多環芳香族分子群へ展開するとともに、能動学習による計算データの効果的な追加や自動合成システムとの連携を進めることで、有望な候補をさらに効率よく見いだせる可能性があります。本研究で確立した探索工程は、有機 EL 材料にとどまらず、候補数が膨大な多様な有機機能材料の開発を加速する基盤技術になると期待されます。

本研究は、以下の事業・共同利用研究施設の支援のもとで行われたものです。

科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST(JPMJCR2105)
研究プロジェクト:「励起ダイナミクス制御に基づく光機能性ヘテロ π 電子系の創製」
研究代表者:山口 茂弘
研究期間:2021 年 10 月～2027 年 3 月

日本学術振興会 科学研究費補助金 挑戦的研究(開拓)(JP24K21248)
研究プロジェクト:「量子重ね合わせ状態を利用した光機能分子の新境地開拓」
研究代表者:安田 琢磨
研究期間:2024 年 6 月～2028 年 3 月

日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤 B(JP25K01848)
研究プロジェクト:「超高速スピン変換に立脚した重畳蛍光の分子科学と新展開」
研究代表者:安田 琢磨
研究期間:2025 年 4 月～2028 年 3 月

日本学術振興会 学術変革領域研究(A)(JP25H01253)
研究プロジェクト:「 π 分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学」
研究代表者:山口 茂弘
研究期間:2025 年 4 月～2030 年 3 月

日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤 A(JP24H00449)
研究プロジェクト:「遷移速度理論と多配置電子論の拡張融合:逆項間交差と Proton 共役電子移動の分子論構築」
研究代表者:柳井 毅
研究期間:2024 年 4 月～2028 年 3 月

科学技術振興機構 先端国際共同研究推進事業 ASPIRE(JPMJAP2508)
研究プロジェクト:「カーボンを基盤とした材料・生体インターフェイス科学」
研究代表者:伊丹 健一郎
研究期間:2025 年 12 月～2031 年 3 月

日本学術振興会 国際共同研究加速基金(国際先導研究)(JP22K21346)
研究プロジェクト:「動的元素効果デザインによる未踏分子機能の探究」
研究代表者:山口 茂弘
研究期間:2022 年 12 月～2029 年 3 月

日本学術振興会 学術変革領域研究(A)(JP24H02268)
研究プロジェクト:「ロドプシンの機能発現メカニズムの統合的理解と機能向上」
研究代表者:井上 圭一
研究期間:2024 年 4 月～2029 年 3 月

日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤 S(JP25H00429)
研究プロジェクト:「分子ナノカーボンバイオロジーの開拓」
研究代表者:伊丹 健一郎
研究期間:2025 年 4 月～2030 年 3 月

日本学術振興会 学術変革領域研究(A)(JP25H01266)
研究プロジェクト:「in-silico 探索と機能場モデリングの融合による高度 π 分子システムの設計と理解」
研究代表者:柳井 毅
研究期間:2025 年 4 月～2030 年 3 月

文部科学省・共同利用・共同研究システム形成事業「学際領域展開ハブ形成プログラム」(JPMXP1323015482)
研究プロジェクト:「マルチスケール量子ー古典生命インターフェース研究コンソーシアム」
研究代表者:井上 圭一
研究期間:2023 年 10 月～2033 年 3 月

計算科学研究センター(Research Center for Computational Science) 施設利用(24-IMS-C082, 25-IMS-C083)
研究代表者:柳井 毅
研究期間:2024 年 4 月～2025 年 3 月, 2025 年 4 月～2026 年 3 月

【用語説明】

注1)量子化学計算:

量子力学の原理に基づき、分子のエネルギーや発光特性などをコンピュータで予測する方法。

注2)カルバゾール含有多環芳香族分子(Cz-PAH):

炭素と水素からなる六角形(芳香環)が多数連なった骨格に、「カルバゾール構造」を

組み込んだ分子群。カルバゾール構造とは、窒素原子(冒頭の図中の「N」と書かれた青い球)を含む五角形と、その両隣の六角形が合体した部分を指す。

注3)半値幅:

発光スペクトルの最大強度の半分となる位置で測った波長の幅。値が小さいほど色純度が高いことを示す。

注4)次世代規格「Rec. 2020」の青色原色に迫る色度座標:

色度座標は色を数値で表す方法。Rec. 2020 は超高精細映像向けの国際的な色域規格で、青色原色の座標は(0.131, 0.046)。

注5)外部量子効率:

有機 EL 素子へ注入した電子数に対し、素子の外へ取り出された光子数の割合。

注6)グラフニューラルネットワーク(GNN):

原子と化学結合のつながりから、分子の構造と性質の関係を学習する機械学習手法。

注7)発光量子収率:

物質が吸収した光子数に対し、発光として放出した光子数の割合。

【論文情報】

雑誌名:Angewandte Chemie International Edition

論文タイトル: Machine-Learning-Guided Discovery of Boron-Free Narrowband Blue Thermally Activated Delayed Fluorescence Emitters

著者:羽飼 雅也、Jie Sun、Jun Hyeon Lee、藤本 和宏*、山口 茂弘、安田 琢磨*、柳井 毅*(*責任著者)

DOI: [10.1002/ange.2731055](https://doi.org/10.1002/ange.2731055)

※【WPI-ITbMについて】(<http://www.itbm.nagoya-u.ac.jp>)

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所(ITbM)は、2012年に文部科学省の世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)の1つとして採択されました。

ITbMでは、精緻にデザインされた機能をもつ分子(化合物)を用いて、これまで明らかにされていなかった生命機能の解明を目指すと共に、化学者と生物学者が隣り合わせになって融合研究をおこなうミックス・ラボ、ミックス・オフィスで化学と生物学の融合領域研究を展開しています。「ミックス」をキーワードに、人々の思考、生活、行動を劇的に変えるトランスフォーマティブ分子の発見と開発をおこない、社会が直面する環境問題、食料問題、医療技術の発展といったさまざまな課題に取り組んでいます。これまで10年間の取り組みが高く評価され、世界トップレベルの極めて高い研究水準と優れた研究環境にある研究拠点「WPI アカデミー」のメンバーに認定されました。