

PRESS RELEASE (2024/05/17)

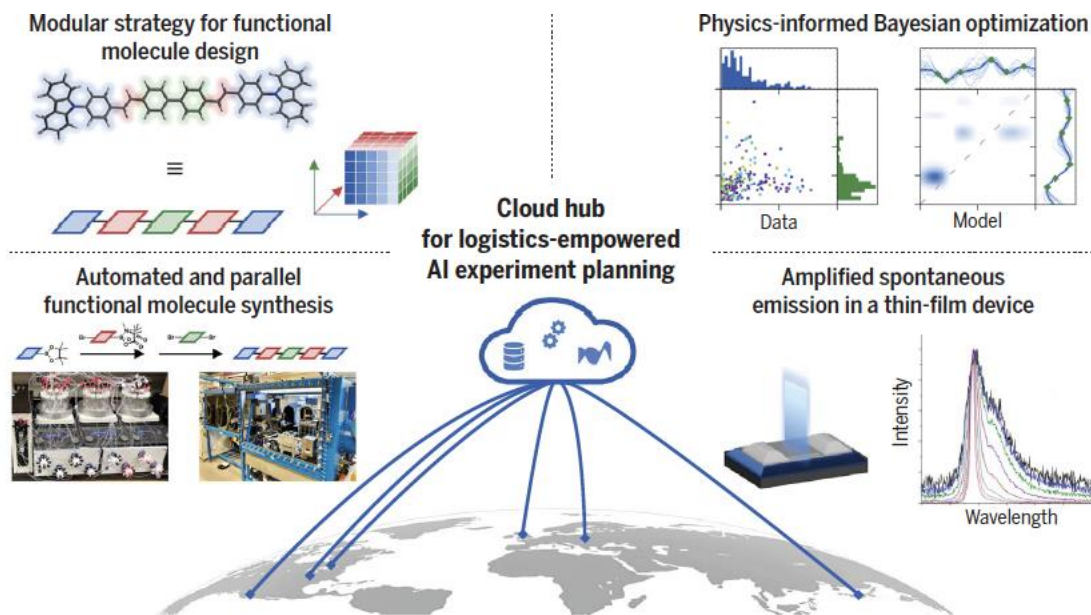
非局在、非同期、閉ループによる有機レーザー発光分子の発見 次世代有機光エレクトロニクスの新展開へ

ポイント

- ① 有機光機能材料の開発には、分子設計・合成と物性・デバイス特性評価の両面を統合した複雑なワークフローが必要となるため、単一の研究室で構築するのは困難でした。
- ② 本研究では、有機薄膜固体レーザーにおける最高レベルの光増幅機能を有する低分子を AI ガイド下において発見することに成功しました。
- ③ 開発された有機レーザー(※1)分子を基礎に、今後更なる低閾値材料の開発が期待されます。

概要

これまで、九州大学・最先端有機光エレクトロニクス研究センター (OPERA) では、新材料開発からデバイスの創製まで、有機半導体レーザーに関する先駆的な研究開発に取り組んで参りました。現在、先端光機能分子の探索には、分子設計・合成と物性・デバイス特性評価の両面を統合した複雑なワークフローが必要となっています。今回、米・加・英・日の5つのラボ(トロント大学、バンクーバー大学、イリノイ大学、グラスゴー大学、九州大学)が材料探索を加速するために協力し、トロント大学で開発された“自動運転ラボ”を使用して2ヶ月間の短期間で1,000個以上の分子を合成・評価し、21個の新しい高性能有機固体レーザー (Organic Solid-State Laser: OSL) 材料を発見しました。本研究は、JSPS 科研費特別推進研究の支援のもとで行われ、2024年5月17日に米国科学雑誌「Science」のオンライン版で公開されました。



有機固体レーザー用低分子ゲイン材料の早期探索のための分散型ワークフローの概要
機能分子設計のためのモジュール戦略、自動化された並列機能性分子合成、物理情報に基づくベイズ最適化、薄膜デバイスにおける光増幅解析を統合する後方支援 AI 実験計画のためのクラウドハブの概念図

【研究の背景と経緯】

現在、有機光機能材料の開発には、分子設計・合成と物性・デバイス特性評価の両面を統合した複雑なワークフローが必要となっていますが、多くの場合、必要な専門知識や研究インフラは複数の場所や時間帯に分散していることが多く、高度な探索パイプラインへの統合を妨げています。この課題はAIによる自動実験とデータ主導の意思決定において特に顕著であり、グローバルに分散した拠点の実験研究のインフラを相乗的に統合するには、データ転送、AIに基づく分子設計、ロジスティクス管理のためにグローバルにアクセス可能な中央クラウドハブが必要です。このような分散型エンジンは、単一の研究室で構築するのは非現実的な材料発見のための分子設計・合成、分光解析・デバイス特性評価のループを効果的に編成することを可能とします。

【研究の内容と成果】

本研究では、有機薄膜固体レーザーにおける最高レベルの光増幅機能を有する低分子をAIガイド下において発見することに成功しました。分子探索における一般的な合成ボトルネックを克服するために、ビルディング・ブロック・ベースの戦略を用いました。反復的な鈴木・宮浦カップリングを利用して、モジュラー前駆体から有機レーザー分子を合成するための2段階ワンポット・プロトコルを開発しました。高い光増幅材料候補群を形成するためのビルディングブロックの組み立ては並列化され、異なるロボット合成プラットフォーム上で自動化されました。そして、自動テスト・ワークフローによって、定常状態および時間分解分光法による溶液相の光学特性評価で信頼性の高い分光結果を可能にするまで精製を繰り返すことで材料の高純度化を進め、安定した光増幅（レーザー）特性を確保しました。実験結果は、クラウドハブの機械学習ベースに供給され、量子化学シミュレーションから得られた物理的知識と統合され、次の材料設計にループされることで、材料の絞り込みを進めて行きました。このマルチサイト・ディスカバリー・エンジンの開発・運用を通じて、グローバルに分散した5つのラボが分子設計、合成、物性評価までをシームレスに連携することで、光増幅断面積が改善された21個の新規有機レーザー分子の創出に至りました。

【今後の展開】

有機光エレクトロニクスにおけるフロンティアの課題に取り組む本研究は、分子設計・合成、コンピュータサイエンス、光物性・デバイス物性等の異なる専門分野を有する多数のチームが、グローバルに時空を超えて協力することで、AI時代の分散型研究の雛形を示すことができました。今後、本フレームワークを拡張し、分散した研究リソースを柔軟に統合することで、より迅速に様々なデバイスにおける高性能な有機機能材料の探索を進めて行きます。現在、有機固体レーザーは、柔軟性、効率、幅広い波長可変性等のユニークな特性を提供可能であることから、XRディスプレイをはじめ、通信から医療機器に至るまで、様々な産業に革命をもたらす可能性があり、幅広い産業用途が期待されています。今回、開発された有機レーザー分子を基礎に、今後、更なる低閾値材料の開発を進めていきます。

【用語解説】

(※1) 有機レーザー

有機分子は蛍光、りん光、TADF（熱活性化遅延蛍光）などの発光機能に加え、光増幅機能を有していることから、レーザーデバイスへの展開が期待されています。現在では、溶液レーザーから完全固体型レーザーへの開発が進展し、光励起及び電気励起デバイスの両面から研究開発が進められています。これまでOLEDで進められてきた発光分子の分子構造を基礎に、低閾値化の有機レーザー分子の創製とデバイスの実現は、ポストOLEDデバイスとして大きな期待が寄せられています。

【謝辞】

本研究は JSPS 科研費特別推進研究（23H05406）、科研費国際先導研究（23K20039）の助成を受けたものです。

【論文情報】

掲載誌：Science

タイトル：Delocalized, asynchronous, closed-loop discovery of organic laser emitters

著者名：Felix Strieth-Kalthoff †, Han Hao †, Vandana Rathore, Joshua Derasp, Théophile Gaudin, Nicholas H. Angello, Martin Seifrid, Ekaterina Trushina, Mason Guy, Junliang Liu, Xun Tang, Masashi Mamada, Wesley Wang, Tuul Tsagaantsooj, Cyrille Lavigne, Robert Pollice, Tony C. Wu, Kazuhiro Hotta, Leticia Bodo, Shangyu Li, Mohammad Haddadnia, Agnieszka Wołos, Rafał Roszak, Cher Tian Ser, Carlota Bozal-Ginesta, Riley J. Hickman, Jenya Vestfrid, Andrés Aguilar-Granda, Elena L. Klimareva, Ralph C. Sigerson, Wenduan Hou, Daniel Gahler, Slawomir Lach, Adrian Warzybok, Oleg Borodin, Simon Rohrbach, Benjamin Sanchez-Lengeling, Chihaya Adachi*, Bartosz A. Grzybowski*, Leroy Cronin*, Jason E. Hein*, Martin D. Burke*, Alán Aspuru-Guzik*

D O I : 10.1126/science.adk9227

【お問合せ先】

<研究に関すること>

九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター センター長 安達千波矢 教授

電話：092-802-6920 FAX：092-802-6921

Mail：adachi@cstf.kyushu-u.ac.jp

<報道に関すること>

九州大学 広報課

TEL：092-802-2130 FAX：092-802-2139

Mail：koho@jimu.kyushu-u.ac.jp