

未踏探索空間における革新的物質の開発
2021年度採択研究代表者

2021年度 年次報告書

山口 茂弘

名古屋大学 トランスフォーマティブ生命分子研究所
教授

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

§ 1. 研究成果の概要

光電子機能の中でも「発光」は多岐にわたる応用から重要な現象である。本研究では、未踏光機能の実現を目的に、多環 π 骨格に多種のヘテロ元素を組み込んだ「ヘテロ π 電子系」を対象とし、励起状態における多様な素過程(励起ダイナミクス)の理解と複合的制御に基づいた物質探索の手法を確立し、秀逸な分子システムを創出することに挑む。この本質的な課題に対し理論と実験の融合により取り組み、次の 5 つの成果を得た。

- 1) 多環リード骨格の創出を狙い、ホウ素を中心部に組み込んだ完全縮環型多環芳香族炭化水素や、発光性 J 会合体形成のための有用なリード骨格の創出に成功した。
- 2) 超高速スピン変換が可能な発光材料の開発を進め、ヘテラボリン骨格をリード骨格とし高速な一重項 \leftrightarrow 三重項のスピン変換の鍵となる項間交差/逆項間交差速度を種々の元素の相乗効果を活用して制御する技術の開発を行った。UHD ディスプレイに求められる理想的なウルトラピュアブルーEL をほぼ 100%の内部量子効率で実現した。
- 3) フェルミの黄金律に基づく 3 種類の遷移速度計算(光吸収・発光、項間交差、無輻射失活)のプログラムの開発に成功した。本プログラムを用いた遷移速度定数の計算値に基づいて、今後、未踏の光機能分子の合理的設計が可能になると期待できる。
- 4) 超解像イメージングのためのリード骨格の創出を目指し、これまで開発してきた超耐光性蛍光色素骨格の耐光性発現の原理の解明に取り組んだ。また、これらの色素の生物学的応用として、ミトコンドリア動態の解明に有用な超耐光性蛍光プローブを開発した。
- 5) 新たなカテゴリーの発光分子系として赤色発光性ラジカルの創製を行い、この骨格を発光ドーパントに用いた高効率有機 EL の作製に成功した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 山口グループ

- ① 研究代表者: 山口 茂弘
(名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・多環リード骨格の創製
 - ・光エレクトロニクスにおける有用性の実証
 - ・蛍光イメージングにおける有用性の実証
 - ・新形態・新カテゴリー分子系の創出

(2) 安田グループ

- ① 主たる共同研究者: 安田 琢磨
(九州大学稲盛フロンティア研究センター 教授)
- ② 研究項目
 - ・多環リード骨格の創製
 - ・光エレクトロニクスにおける有用性の実証

(3) 藤本グループ

- ① 主たる共同研究者: 藤本 和宏
(名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 特任准教授)
- ② 研究項目
 - ・高精度量子ダイナミクス手法の確立
 - ・速度定数の網羅的計算の自動化
 - ・多元素 in silico スクリーニングの実施

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Fully fused boron-doped polycyclic aromatic hydrocarbons: their synthesis, structure-property relationships, and self-assembly behavior in aqueous media”, H. Narita, H. Choi, M. Ito, N. Ando, S. Ogi and S. Yamaguchi, *Chem. Sci.*, 13, 1484-1491 (2022).
- 2) “Achieving Ultimate Narrowband and Ultrapure Blue Organic Light-Emitting Diodes Based on Polycyclo-Heteraborin Multi-Resonance Delayed-Fluorescence Emitters”, I. S. Park, M. Yang, H. Shibata, N. Amanokura, T. Yasuda, *Adv. Mater.*, 34, 2107951 (2022).