

独創的原理に基づく革新的光科学技術の創成
2020年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

赤木 和夫

立命館大学 総合科学技術研究機構
招聘研究教授

円偏光発光材料の開発に向けた革新的基盤技術の創成

主たる共同研究者:

今井 喜胤 (近畿大学 理工学部 准教授)

椿 一典 (京都府立大学 大学院生命環境科学研究科 教授)

西川 浩之 (茨城大学 大学院理工学研究科(理学野) 教授)

森 直 (大阪大学 大学院工学研究科 准教授)

研究成果の概要

高分子および低分子グループは、以下の 6 種類の革新的な物質群の開発に成功した:①光応答性キラル液晶を用いて、アキラル共役コポリマーへのらせん誘起と円偏光発光のヘリシティ制御の実現、②温度でキラル反転するキラル液晶を不斉反応場としてらせん状共役コポリマー群を合成し、この物質からの RGB 色円偏光発光(CPL)の発現とキラリティ制御、③側鎖型液晶性ポリパラフェニレンと軸不斉ビナフチルからなる混合微粒子分散系を調製し、再現性のある CPL 発現の確認、④水酸基を架橋したバイノールに、最大6ユニットのフェニルアセチレンを導入した化合物の合成と高い CPL 活性の観察、⑤カルバゾロファンのパリマー化の初めての成功と CPL 発現の確認、⑥合理的な分子設計の遂行のため、電気および磁気遷移モーメントを可視化する理論的アプローチの構築と、理論に沿った化合物の合成。

評価およびデバイスグループは、5 種の新規デバイスの作成と新しい物性発現を確認した:①光学不活性なイリジウム(Ir)錯体を用いた磁気円偏光有機発光ダイオード(MCP-OLED)の開発、②光学不活性な各種金属含有フタロシアニン発光体からの MCPL の発現、③凝集状態で CPL を示すりん光性 Pt 錯体および CPL と凝集誘起増強発光を示す Zn 錯体の開発、④赤・緑・青・黄色(RGBY)を発光する MCPL デバイスの開発、⑤近赤外(NIR)領域でりん光を示す Ir 錯体に基づく NIR-OLED の作製。

理論グループは、分子構造とキラル発光の相関を解明し、量子化学計算に基づく CPL 材料の効率的な分子設計を目的に、材料候補骨格の自動生成、励起状態コンフォメーションなどを考慮しながら、引き続き複数のアプローチで検討を重ねた。実証実験として、シクロデキストリンに様々な多環式芳香族化合物を修飾することで、優れた非対称性因子(g 値)を示す分子を見出した。また、キラル物性の方向依存性と材料設計への応用に関する知見を得た。

【代表的な原著論文情報】

1. “Particle Dispersion System Consisting of Helically Assembled Liquid Crystalline Poly(*para*-phenylene) Derivatives with Reproducible Chiroptical Properties”, K. Horie, S. Kondo, K. Akagi, *J. Mater. Chem. C*, **11**, 943-952 (2023). (Inside Back Cover に採用)
2. “Synthesis and Properties of V-Shaped Xanthene Dyes with Tunable and Predictable Absorption and Emission Wavelengths”, A. Yamagami, K. Kiyotaki, S. Wakabayashi, N. Egami, K. Kawano, S. Futaki, A. Imayoshi, K. Tsubaki, *J. Org. Chem.*, **87**, 2336-2344 (2022).
3. “External Magnetic Field-Driven Ambidextrous Circularly Polarize Electroluminescence from Organic Light-Emitting Diodes Containing Racemic Cyclometalated Iridium(III) Complexes”, K. Hara, A. Morimoto, K. Matsudaira, S. Suzuki, S. Yagi, M. Fujiki, Y. Imai, *ChemPhotoChem.*, **6**, e202100253 (2022).

4. “Aggregation-induced circularly polarized phosphorescence of Pt(II) complexes with and axially chiral BINOL ligand”, D. Tauchi, T. Koida, Y. Nojima, M. Hasegawa, Y. Mazaki, A. Inagaki, K. Sugiura, Y. Nagaya, K. Tsubaki, T. Shiga, Y. Nagata, H. Nishikawa, *Chem. Commun.*, **59**, 4004-4007 (2023). (Inside Back Cover に採用)
5. “Controlling Anisotropic Properties by Manipulating the Orientation of Chiral Small Molecules”, J. Wade, F. Salerno, R. C. Kilbride, D. K. Kim, J. A. Schmidt, J. A. Smith, L. M. LeBlanc, E. H. Wolpert, A. A. Adeleke, E. R. Johnson, J. Nelson, T. Mori, K. E. Jelfs, S. Heutz, M. J. Fuchter, *Nat. Chem.* **14**, 1383-1389 (2022).