#### 研究成果報告書 科学研究費助成事業

今和 元 年 6 月 3 日現在

機関番号: 12612

研究種目: 挑戦的研究(萌芽)

研究期間: 2017~2018

課題番号: 17K19152

研究課題名(和文)振動子強度ゼロのキラル分子の円偏光発光サイエンスとEL素子への応用

研究課題名(英文)Science of zero oscillator strength for circularly polarized luminescence and

their application for light emitting diodes

#### 研究代表者

平田 修造 (Hirata, Shuzo)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・助教

研究者番号:20552227

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 4.900.000円

研究成果の概要(和文): 蛍光の遷移双極子モーメントが小さい新規光学活性分子を合成し発光収率および円偏光発光特性を中心とする光物性を評価した。最高占有軌道と最低非占有軌道の間に光学活性炭素を配置した分子の中には、円偏光発光の二色性因子の絶対値(|g|)が分散状態では1×10-3近傍に留まるが、結晶化薄膜状態では10-2の中盤の|g|値を示す分子が存在することを見出した。またこれらキラル分子は分散状態から凝集結晶化における発光の消光特性が十分に抑制される結果、キラル分子の凝集薄膜としては大きな発光収率を示し、マイクの急速の過速が発光性性を示した。 口秒の高速の遅延蛍光特性を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義 蛍光の遷移双極子が著しく小さい光学活性分子においても、凝集に伴う円偏光発光の二色性の大きな増加が観測 されたことは、凝集時の円二色性や円偏光発光の増幅機構に関する新しい知見を与える可能性がある。さらに蛍 光の遷移双極子が著しく小さい光光之名性の今子の凝集状態の形成が、ディスプレイで必要とされることが確認さ きな発光収率、大きな円偏光発光二色性の全てを持ち合わせる材料を得るための一つの指針になることが確認さ れた。

研究成果の概要(英文): Novel chiral conjugated molecules with significant small oscillator strength for fluorescence (F) were synthesized. The chiral molecules that a chiral carbon is located between the highest occupied molecular orbital and the lowest unoccupied molecular orbital showed circularly polarized luminescence with absolute value of dissymmetry factor (|g|) of 10-3 when they were doped in solutions or solid films. On the other hand, |g| of the molecules largely increased up to  $5\times10$ -2 in their crystalline thin films. Emission yield ( PL) of the molecules did not decrease between doped condition and aggregated crystalline state because of no large Davydov splitting due to the significant small F value. One of the chiral molecules showed large PL as well as large |g| in crystalline state.

研究分野: 光化学

キーワード: 円偏光発光 遅延蛍光 振動子強度 ダビドブ分裂 凝集誘起発光

# 様 式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19(共通)

## 1.研究開始当初の背景

有機 EL ディスプレイでは外光反射を抑 制してコントラストを上げるために 1/4 波 長板と偏光板が用いられるが、偏光板で半 分の光が吸収され効率が低下している(図 1 左)。もし図 1 の右図ように高い効率で EL 発光層から直接発光寿命がマイクロ秒程度 と短く且つ2色性の高い円偏光発光(CPL)が 放射されれば、高輝度且つ高効率の EL が偏 光板で吸収されることなく外部に取り出さ れることで問題が解決される。図2には、 発光量子収率( $\Phi_{PL}$ )と CPL の 2 色性因子の絶

対値(|g|)の関係であるが、 に示す性能を有する CPL 材 料を生み出していくことが、CPL 材料の有用性を主張し ていく上での必要条件であるが、その領域の性能を示す 材料は未だ実現されていない。

2012 年に希少金属を用いずに電気エネルギーを 100% 光エネルギーに変換可能な熱活性化遅延蛍光(TADF)分 子が報告されている 1)。またその遅延蛍光の寿命はマイ クロ秒オーダーであり、ミリ秒近傍やそれ以上の発光寿 命を有する発光体で問題となる高輝度時のアニヒレーシ ョンによる電光変換効率の低下が生じにくいという特徴 がある。研究代表者らはこれまでに TADF と CPL を示す 分子を初めて報告した 2)。しかし、この分子の㎏値は 10-3 程度と小さく、TADF を含めた  $\Phi_{PL}$ も 20%程度と低い。 それゆえ、高速の TADF、大きな  $\Phi_{PL}$ 、さらに大きな|g|値の全てを示す分子材料を見出すことが重要となる。

一方で近年通常の蛍光分子の2量体や凝集構造を用い て|g|の増強が報告されてきている 3)。このような分子で の頃の増強には励起子相互作用が関係していると考えら

非円偏光発光分子

円偏光発光分子

有機EL %波長板 偏光板 %波長板 偏光板

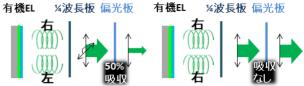


図 1 有機 EL ディスプレイにおける円偏光発光 のメリット

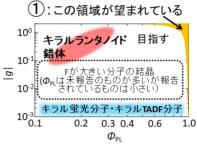


図 2  $\Phi_{PL}$  と|g|のベンチマーク



図3Fが大きい分子の懸念される  $\Phi_{PL}$ と|g|のトレードオフの関係

れている 4)。一般的には大きな励起子相互作用には個々の分子の遷移双極子モーメント(F)が大 きいことが必要と考えられるが、そのlgl値の増強のメカニズムには依然不明瞭な点がある。ま た、一般的に励起子相互作用が強い系では、しばしば  $oldsymbol{\mathrm{H}}$  会合により、個々の分子の  $oldsymbol{\mathrm{F}}$  が相殺さ れるため  $arPhi_{
m PL}$  が小さくなるという問題があり、大きな  $arPhi_{
m PL}$  と大きな $art|_{
m g}$ arthetaの両立が難しいことが予 想される(図 3)。一方で、TADF 分子を示す分子の中にはFが限りなく小さい分子が存在するが、 そのような系では凝集時の励起子相互作用が小さいため、ダビドブ分裂が生じにくく  $\Phi_{PL}$ の低 下が生じにくいことが予想され、凝集薄膜での大きな  $\Phi_{\rm PL}$ が期待される。しかし、そのような F が小さいキラル分子の会合状態における  $\Phi_{PL}$  と|g|の両者を追究した研究はなされていない。

#### 2.研究の目的

本研究では、キラルな構造を有する  $F \approx 0$  の TADF 分子を新規に合成し、それらの分散膜およ び凝集薄膜での発光収率や円偏光発光特性を評価する。特に電界発光素子への応用を視野に凝 集薄膜をもちいて大きな発光量子収率と大きな円偏光発光の2色性因子の発現を目指す。

## 3.研究の方法

(1) 量子化学計算による TADF と CPL を示すキラル分子の設計

表 1 に示す 6 種類のキラルドナーア クセプター分子を中心に、量子化学計 算により、最低一重項励起状態(S<sub>1</sub>)と基 底状態(S<sub>0</sub>)間のエネルギー、S<sub>1</sub>S<sub>0</sub>遷移の 振動子強度(F)、S<sub>1</sub>と最低三重項励起状 態 $(T_1)$ 間のエネルギー差 $(\Delta E_{ST})$ を推定 した。これらの分子では、HOMO と LUMO が分離されているため、 $\Delta E_{\rm ST}$  が 小さくなる傾向があり、TADF の発現 が予想される。

Type 1 の分子 D-A1~4 では、キラル 炭素が HOMO と LUMO の相対的な配 置に関与しない位置に存在している。 一方で Type 2 の分子 D-A5 と D-A6 で は HOMO と LUMO の間にキラル炭素 が存在し、HOMO と LUMO の間の関

表 1 D-A1~6 の分子構造と量子化学計算による 光学特性の推定

分子 略名	分子構造	Туре	S <sub>1</sub> (eV)	T <sub>1</sub> (eV)	ΔE <sub>ST</sub> (eV)	F	номо	LUMO
D-A 1ª	o\$o+o	1	2.874	2.862	0.012	0.0004	**	
D-A 2ª	026-05°	1	2.412	2.405	0.007	0.0001	* <b>9</b> 60	: <b>: : :</b>
D-A 3ª	04600g	1	2.620	2.613	0.007	0.0000	* <b>\$</b> (\$\disp\disp\disp\disp\disp\disp\disp\disp	ં અ
D-A 4ª	% €010}0	1	2.783	2.772	0.011	0.0004	% X	
D-A 5 <sup>b</sup>	900	2	1.961	1.922	0.038	0.0015	200	***
D-A 6 <sup>b</sup>	\$\frac{1}{2}	2	2.432	2.416	0.017	0.0000	48,	

係が直接光学活性の配置になっている。 a:So最適化構造での結果 b:Sz最適化構造での結果 (Gaussian09/B3LYP/6-31G(d,p))

#### (2) 合成分子の光学分割と光物性の計測

合成反応後光学分割カラムを用いて光学分割を行い、その後昇華精製を経て D-A1~6の新規キラル分子の R 体および S 体を合成した。絶対配置は単結晶 X 線構造解析により決定した。これら分子の溶液中、半導体ホスト分子にドープした薄膜、ニート非晶薄膜、ニート結晶薄膜の光物性を評価した。薄膜はスピンコート法により作製し、ニート結晶薄膜は非晶薄膜を真空中でアニールすることで結晶化させたものを用いた。

上記溶液や薄膜の  $\Phi_{PL}$ を積分球システム(C9920-02G, 浜松ホトニクス社製)を用いて計測した。また蛍光寿命は小型蛍光寿命(Quantaurus-Tau, 浜松ホトニクス社製)を用いて評価した。遅延蛍光を示したものに関しては、発光寿命における初期成分の蛍光と遅延蛍光の成分の比からプロンプトの蛍光量子収率( $\Phi_{pf}$ )とプロンプトの蛍光寿命( $\tau_{pf}$ )を決定した。 $\Phi_{pf}$ と $\tau_{pf}$ を用いて蛍光速度定数( $\tau_{pf}$ )を $\tau_{pf}$ により算出し、 $\tau_{pf}$ 1、からの非輻射失活速度定数( $\tau_{pf}$ 2、 $\tau_{pf}$ 3。 $\tau_{pf}$ 4、 $\tau_{pf}$ 5。用いて決定した。 $\tau_{pf}$ 6、 $\tau_{pf}$ 6、 $\tau_{pf}$ 7。

#### (3) LED 特性の評価

D-A1~6の分子の内 CPL 特性を示すドナーアクセプター分子を発光体として用い、真空蒸着法を用いて ITO//αNPD (40 nm)/mCP (10 nm)/光学活性分子発光層(15 nm)/DPEPO (10 nm)/TPBi (40 nm)/LiF (0.8 nm)//Al (150 nm)からなる EL 素子を作製した。EL 外部量子効率評価装置 (C9920-12, 浜松ホトニクス社製)を用いて、電圧、電流、そして発光特性を評価した。

#### 4.研究成果

#### (1) Type 1 の分子の光物性

D-A1~4 の分子に関する溶液状態、非晶薄膜状態、結晶薄膜状態の  $\Phi_{PL}$ 、 $k_f$ 、そして  $k_{nr}$  の結果を表 2 にまとめる。

主っ	D 4.1~4 の 滚流巾	北旦藩腊	結晶薄膜における光物理特性のまとめ
<i>⊼</i> ▽ /.	1)-A 1 ~ 4 (7)冷冽甲。	31.品、思报:	続品連段にのける大物は特件のまとめ

Compounds	溶液⁵			非晶薄膜			結晶薄膜 <sup>b</sup>		
	$\mathcal{D}_{PL}$	<b>K</b> <sub>f</sub>	$k_{nr}$	$\Phi_{PL}$	K <sub>f</sub>	k <sub>nr</sub>	$\Phi_{PL}$	K <sub>f</sub>	k <sub>nr</sub>
		(s <sup>-1</sup> )	(s <sup>-1</sup> )		(s <sup>-1</sup> )	(s <sup>-1</sup> )		(s <sup>-1</sup> )	(s <sup>-1</sup> )
D-A 1	0.16	1.3×10 <sup>7</sup>	$7.2 \times 10^{7}$	0.67	$1.4 \times 10^{7}$	$3.9 \times 10^{7}$	0.57	$1.1 \times 10^{7}$	$3.2 \times 10^{7}$
D-A 2	0.26	$1.7 \times 10^{7}$	$2.0 \times 10^{7}$	0.68	$1.5 \times 10^{7}$	$2.0 \times 10^{7}$	0.76	$1.5 \times 10^{7}$	$1.8 \times 10^{7}$
D-A 3	0.26	$2.9 \times 10^{7}$	$2.9 \times 10^{7}$	0.51	$1.8 \times 10^{7}$	$2.2 \times 10^{7}$	0.28	$1.5 \times 10^{7}$	$2.0 \times 10^{7}$
D-A 4	0.18	$1.5 \times 10^{7}$	$1.5 \times 10^{7}$	0.81	$5.9 \times 10^{7}$	$3.3 \times 10^{7}$	0.44	$9.6 \times 10^{7}$	$2.5 \times 10^{7}$

a: 非脱気トルエン溶媒中の希薄濃度下.b: D-A 1, 2, 3, 4に関してはそれぞれ130℃, 150℃, 150℃, 180℃ で10時間真空 中でアニールすることで結晶化させた. 励起波長は340 nm.

D-A1~4 は大気中の溶液状態では小さな  $\Phi_{PL}$  に留まるが、ニート薄膜状態では大きな  $\Phi_{PL}$  を示した。特に D-A2 に関しては非晶薄膜状態で 68%、結晶化させた薄膜では 80% に迫る  $\Phi_{PL}$  が確認された。D-A1 に関しても 50% を迫る値が確認されている。通常  $\Phi_{PL}$  が大きい分子では  $k_{\rm f}$  も  $10^8$  s<sup>-1</sup> オーダーと大きいが、D-A 1~4 では  $k_{\rm f}$  の値が  $10^7$  s<sup>-1</sup> 程度と小さい。それにも関わらず  $\Phi_{PL}$  が大きいのは  $k_{\rm nr}$  が小さいことに由来している。 $k_{\rm f}$  や  $k_{\rm nr}$  は電子遷移に関係する軌道の重なり 度合いに比例するが  $^{5}$  、D-A 1~4 はその軌道の重なりが小さいため、 $k_{\rm f}$  と  $k_{\rm nr}$  がともに小さくなっている。凝集薄膜状態においても  $\Phi_{PL}$  が大きく低下しない一つの要因としては、1 分子状態における小さな  $k_{\rm f}$  に依存してダビドフ分裂がほとんど生じていないため、 $S_1$  で遷移双極子が相殺されず、その結果  $S_1$  では  $k_{\rm f}$  が内部項間の速度対して小さくならないことに由来していると考えられる

そのような大きな  $\Phi_{PL}$  が観測される一方で、D-A1~4 のキラル分子は溶液状態、非晶薄膜、結晶薄膜ともに CPL 特性を示さなかった。溶液状態において CPL を示さなかった理由としては、表 1 の電子軌道においてキラル炭素が HOMO と LUMO の位置関係に関係ない箇所に配置されているため R 体と S 体の間で HOMO の形状が変化しないことが考えられる。

#### (2) Type 2 の分子の光物性の結果と考察

D-A1~4 のキラル分子は 100% の固体結晶状態で大きな  $\Phi_{PL}$  を示したものの CPL 特性を示さなかった。この原因としてはキラル炭素の位置が HOMO や LUMO の相対位置に関係しない位置に存在していることが考えられた。それゆえ、小さな  $k_f$  を示す D-A 分子において、キラル炭素が HOMO と LUMO の間に配置されるような分子として D-A5 および D-A6 を検討した。

D-A5 では  $k_f$  が孤立分散状態で  $1\times10^7$   $s^1$  に迫り十分に小さくはない。それゆえ結晶状態のように凝集した際にダビドフ分裂が生じ、 $S_1$  エネルギーが下がる。実際 D-A5 は分散状態よりも結晶状態において発光スペクトルのピーク波長( $F_{max}$ )が長波長側にシフトしている(表 3)。この場合 D-A5 のモノマー分子同士の遷移双極子モーメントが相殺されるため、D-A5 の結晶状態では分

散状態と比較して  $k_f$  が著しく小さくなる。実際に D-A5 では分散状態から結晶状態に変化する中で  $k_f$  が  $8.9\times10^6$   $\mathrm{s}^{-1}$  から  $1.9\times10^6$   $\mathrm{s}^{-1}$  まで減少している。結晶化に伴い  $k_f$  が小さくなる一方で  $k_{nr}$  に関してはこの相殺が生じない。 そのため、結晶凝集状態では  $k_f$  が  $k_{nr}$  と比較して小さくなり  $\Phi_{PL}$  が減少する。

<b>=</b> ~	D 4 7 + 1 - 7	じゃょくのナニリ はの火物はも らだ火物中国ファ明だ	
বহ ১	D-A5 めよし	「D-A6 のキラル体の光物性および光物理因子の関係	

Compounds	ドープ薄膜。				結晶薄膜⁵					
	$F_{ m max}$ $\Phi_{ m pf}$		$k_{\rm f}$	g	$F_{\text{max}}$ $\Phi_{\text{pf}}$		$\Phi_{PL}$	$k_{\rm f}$	g	
	(nm)	(%)	(s <sup>-1</sup> )		(nm)	(%)	(%)	(s <sup>-1</sup> )		
D-A5 <sup>c</sup>	528	11	$8.9 \times 10^6$	$1.2 \times 10^{-3}$	534	3.6	7.3	$1.9 \times 10^6$	5.5×10 <sup>-2</sup>	
D-A6 <sup>d</sup>	502	21	$0.8 \times 10^6$	$4 \times 10^{-4}$	482	22	40	$1.4\!\times\!10^6$	$4.0 \times 10^{-2}$	

a: D-A5に関してはmCP中に少量ドーブした場合, D-A6に関してはDPEPO中に少量ドーブした場合, b: 真空下120℃で12h加熱した薄膜, c: 励起光365 nm下のデータ, d: 励起光300 nm下のデータ

一方 D-A6 では  $k_{\rm f}$  が孤立分散状態で  $10^6$  s<sup>-1</sup>以下と非常に小さい。このように  $k_{\rm f}$  が著しく小さい分子の場合、極近距離にお互いの分子が存在したとしても励起子同士のカップリングが小さくなると考えられる。その結果、1 分子状態から 2 分子状態にかけて  $S_1$  エネルギーに大きな変化が生じない。実際、強い励起相互作用が存在する際は、蛍光スペクトルが大きく長波長シフトするが、D-A6 の  $F_{\rm max}$  をみると溶液分散時の 1 分子分散状態より結晶薄膜の  $F_{\rm max}$  が長波長シフトしていることはない。この著しく小さな  $k_{\rm f}$  に由来した弱い励起子相互作用により、結晶時においても $k_{\rm f}$  が減少することなく、 $\Phi_{\rm pf}$  が薄膜状態においても低下せず 22% の値を示す。また残りの 18% は遅延蛍光の収率であり全体の  $\Phi_{\rm PL}$  は 40% であった。また、遅延蛍光の寿命も数マイクロ秒と短いものであった。上記において  $\Phi_{\rm pf}$  が低下しないことは凝集状態においても比較的大きな  $\Phi_{\rm PL}$  値の発現に寄与しており、小さな F を有するキラル分子骨格では凝集状態においても大きな  $\Phi_{\rm PL}$  が得られることが確認される。また D-A6 を用いて 100%0 PD (100%0 NPD (100%0 NPD (100%0 NPD) PEPO (100%0 NPD) (100%0 NPD (100%0 NPD) REPO (100%0 NPD) REPORT REPORT

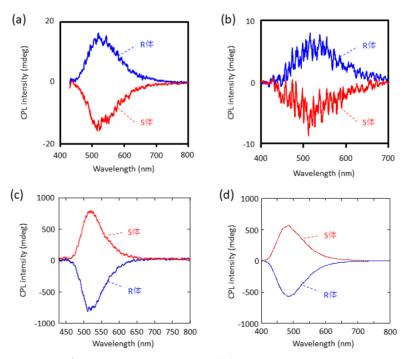


図 4 (a) (R)-D-A5 および(S)-D-A5 のトルエン溶液中の CPL スペクトル. (b) (R)-D-A6 および (S)-D-A6 のトルエン溶液中の CPL スペクトル. (c) (R)-D-A5 および(S)-D-A5 の結晶薄膜の CPL スペクトル. (d) (R)-D-A6 および(S)-D-A6 の結晶薄膜の CPL スペクトル.

図 4 の(a)と(b)に示すように、D-A5 および D-A6 のキラル分子は溶液中や固体膜中に孤立分散された状態では  $10^{-3}$  以下程度の小さな|g|値しか示さなかった。一方で、図 4 の(c)と(d)のように薄膜結晶状態では D-A5 および D-A6 のキラル分子はそれぞれ  $5.5\times10^{-2}$  および  $4.0\times10^{-2}$  の CPLの|g|値を示した。この値の向上はレタデーションなどの偏光特性に依存しているわけではないことを確認している。興味深いことに分散状態と結晶状態ではコットン効果が逆転している。このことは分散一分子状態と凝集結晶状態とでは電子遷移における電子の動きが大きく異なっ

ていることを示している。結晶構造を用いた量子化学計算から、いくつかの隣接分子間の ${
m HOMO-LUMO}$  遷移による  ${
m S_1}$  エネルギーは、分子内の  ${
m HOMO-LUMO}$  遷移による  ${
m S_1}$  エネルギーよりも若干小さいことを確認している。それゆえ、結晶状態での  ${
m S_1}$  は分子内の  ${
m HOMO}$  から ${
m LUMO}$  ではなく、ある隣接分子間の電荷移動遷移に由来していると考えられる。ある分子の  ${
m HOMO}$  から隣接する別の分子の  ${
m LUMO}$  の配置においても光学活性の配置が保存されているため、分子間電子遷移による遅延蛍光特性とその  ${
m CPL}$  特性が発現してもおかしくはない。しかし、結晶構造内のさまざまなダイマーの組み合わせの電子遷移ダイポール、磁気遷移ダイポール、そしてそれら  ${
m 2}$  つのダイポールのなす角等を量子化学計算により計算をしているが、実験的に観測される ${
m Ight}$  個の大きな増幅を説明する計算結果はまだ得られていない。

## (3) 新しい知見に関する考察

偏光やレタデーションに依存しない凝集誘起のCPLの|g|値の増幅機構の一つとして強い励起子相互作用の影響が考えられている。しかし、今回蛍光のFが著しく小さく、凝集時の励起子相互作用がほとんどないことが確認される系で観測された凝集誘起の|g|値の大きな増加は、|g|値の増幅の新しいメカニズムが存在することを示唆している。Fが小さい化合物の多くは、H会合状態においてもダビドブ分裂などが生じないため、 $S_1$ では遷移双極子の相殺が生じずFの値が分散状態に対して低下しない。それゆえ凝集構造においても大きな発光収率を維持しやすい。今回 40%付近の  $\Phi_{PL}$  を有する材料における|g|の値は、通常の分散状態の重原子フリー分子の 50 倍程度の大きな値である。しかし EL 素子などに必要とされる  $\Phi_{PL}$  と|g|は、それぞれ 100% 近傍と 1 に迫る値であり、現在の性能は依然として低い。F が小さい分子系において遅延蛍光を用いることで  $\Phi_{PL}$ を大きくする知見は得られてきているため、凝集構造の何に基づいて|g|値が向上していくのかを今後明確にする実験的および理論的なアプローチが必要になってくる。

#### <引用文献>

- (1) H. Uoyama, K. Goushi, K. Shizu, H. Nomura, C. Adachi, Nature, 2012, 492, 234.
- (2) T. Imagawa, S. Hirata, K Totani, T. Watanabe, M. Vacha, Chem. Commun., 2015, 51, 13268.
- (3) J. Kumar, T. Nakashima, T. Kawai, J. Phys. Chem. Lett., 2015, 6, 3445.
- (4) R. Tempelaar, A. Stradomska, J. Knoester, F. C. Spano, J. Phys. Chem. B, 2011, 115, 10592.
- (5) K. Shizu, H. Noda, H. Tanaka, M. Taneda, M. Uejima, T. Sato, K. Tanaka, H. Kaji, C. Adachi, *J. Phys. Chem. C*, **2015**, *119*, 26283.

## 5. 主な発表論文等

### 〔雑誌論文〕(計6件)

Shuzo Hirata, Roles of Localized Electronic Structures caused by π Degeneracy due to Highly Symmetric Heavy Atom-Free Conjugated Molecular Crystals Leading to Efficient Persistent Room-Temperature Phosphorescence, *Adv. Sci.*, Vol. 6, 2019, 1900410, 查読有. DOI: 10.1002/advs.201900410

② Kaishi Narushima, Yasuhiro Kiyota, Takehiko Mori, <u>Shuzo Hirata</u> and Martin Vacha, Suppressed Triplet Exciton Diffusion Due to Small Orbital Overlap as a Key Design Factor for Ultralong-Lived Room-Temperature Phosphorescence in Molecular Crystals, *Adv. Mater.*, Vol. 31, 2019, 1807268, 查読有.

DOI:10.1002/adma.201807268

Shuzo Hirata, Intrinsic Analysis of Radiative and Room-Temperature Nonradiative Processes Based on Triplet State Intramolecular Vibrations of Heavy Atom-Free Conjugated Molecules toward Efficient Persistent Room-Temperature Phosphorescence, *J. Phys. Chem. Lett.*, Vol. 9, 2018, 4251-4259、查読有.

DOI:10.1021/acs.jpclett.8b01711

Shuzo Hirata, Ultralong-Lived Room Temperature Triplet Excitons: Molecular Persistent Room Temperature Phosphorescence and Nonlinear Optical Characteristics with Continuous Irradiation. *J. Mater. Chem. C*, Vol. 6, 2018, 11785-11794,查読有.

DOI: 10.1039/C8TC01417E

Shuzo Hirata, Recent Advances in Materials with Room-Temperature Phosphorescence: Photophysics for Triplet Exciton Stabilization, *Adv. Opt. Mater.*, Vol. 5, 2017, 1700116, 查読有. DOI: 10.1002/adom.201700116

Shuzo Hirata, Martin Vacha, Large Reverse Saturable Absorption at the Sunlight Power Level Using the Ultralong Lifetime of Triplet Excitons, *J. Phys. Chem. Lett.*, Vol. 8, 2017, 3683-3689, 查 読有.

DOI:10.1021/acs.jpclett.7b01456

## 〔学会発表〕(計7件)

平田修造、高効率分子蓄光に向けた三重項からの輻射と非輻射過程の解析、日本化学会第 99 回春季年会 特別企画 ルミネッセンス化学アンサンブル:発光の未来を探る, 1S8-05, 甲南大学岡本キャンパス, 2019年3月.

② 平田修造、遷移双極子が小さい光学活性分子材料:円偏光遅延蛍光と円偏光室温蓄光、千葉大学分子キラリティーセンター定例研究会、千葉大学西千葉キャンパス、2019年1月 平田修造、分散系共役分子および凝集系共役分子結晶の室温長寿命三重項励起子のサイエンスと機能、2018年度高分子・ハイブリッド材料研究センター(PHyM)若手フォーラム、東北大学片平キャンパス、2018年11月.

Shuzo Hirata, Intrinsic Analysis of Radiative Process, Intramolecular Vibrational Room-Temperature Nonradiative Process, and Quenching Process from Triplet State for Heavy Atom-Free Conjugated Structures, 2018 年光化学討論会, 3A05, 2018 年 9 月

Shuzo Hirata, Intrinsic Analysis between Radiative Process and Room-Temperature Nonradiative Process based on Intramolecular Vibrations from Triplet State of Heavy Atom-free Aromatics toward Efficient Persistent Room-temperature Phosphorescence, 2018 International Seminar on Advanced Materials Research 2018 ISAMR, 2018 年 8 月.

<u>平田修造</u>、振動状態を考慮に入れたスピン禁制から見えてくる共役分子の三重項からの輻射・非輻射過程の本質、学振 142 委員会 ABC 合同部会、東京理科大学神楽坂キャンパス、2018 年 7 月.

Shuzo Hirata, Photofunctional Materials Using Long-Lived Room-Temperature Triplet Excitons, Royal Society of Chemistry Symposia on Electronic and Photonic Materials, The National Institute for Materials Science, 2017 年 11 月.

#### [図書](計2件)

<u>平田修造</u>、バッハマーティン、環状高分子の合成と機能発現、単一分子分光法による環状 共役高分子のコンフォメーションおよび励起状態の解析、シーエムシー出版、2018 年、 319-328.

② <u>平田修造</u>、繊維学会誌、超剛直有機媒体による芳香族分子の励起子蓄積機能を利用した光機能性材料、Vol. 73、Issue 9、2017 年、336-341.

[產業財産権] 319-328 出願状況(計1件)

名称:円偏光発光材料および円偏光発光材料を用いた物品

発明者:平田 修造 ,濱田 雅裕 ,金子 昌厳

権利者:日本化薬株式会社、国利大学法人電気通信大学

種類:特許

番号:2018-219440 出願年:2018年 国内外の別:国内