

令和元年6月7日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05743

研究課題名(和文) 集積構造依存型発光を示す電子系分子のライブラリ構築と発光機構解析

研究課題名(英文) Library construction and luminescence property analysis of the pi-electronic molecules exhibiting polymorph-dependent luminescence

研究代表者

務台 俊樹 (MUTAI, Toshiki)

東京大学・生産技術研究所・助教

研究者番号：80313112

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：「集積構造依存型発光(PDL)」は、分子の化学構造はそのまま分子集積構造に依存して固体発光特性を制御できるとして注目されるが、詳細な機構解明は道半ばである。本課題では、まずPDLの機構解明に適する「同一の」発光ユニットを有する化合物群を作成した。さらにフェムト秒過渡吸収測定と計算化学から、PDLを示す結晶では発光種が2分子からなる複合体であることを強く示唆する結果が得られ、この複合体の構造の違いがPDLを発現する要因であると結論づけた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

固体有機発光材料は身近な材料であり、発光色など各種物性は合成化学的に分子構造を変えることで制御されている。近年、合成化学の技術によらず有機分子の「集まり方」を変えることで発光特性を制御できる、という研究成果が世界各地から報告されているが、その発光機構の詳細はいまだ明らかではない。本研究は、機構解明に向けた適切な分子群を提供することができたことが第一の成果で、さらに、この発光機構を分子レベルで明らかにする重要な手がかりとなる成果を得ることに成功した。

研究成果の概要(英文)："Polymorph-Dependent Luminescence (PDL)" has attracted attention because it can control the solid-state luminescence property through the molecular aggregation structure without changing the chemical structure of the molecule, however the detailed mechanism is yet to be cleared. In this project, firstly, a group of compounds having the "identical" light-emitting unit suitable for examining the mechanism of PDL was prepared. Furthermore, femtosecond transient absorption measurements and computational chemistry strongly suggested that the luminescent species in the PDL crystal is a complex composed of two molecules, by which we concluded that the difference in the structure of this complex is an important factor in displaying PDL.

研究分野：有機光機能化学

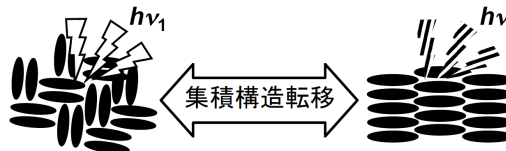
キーワード：蛍光 結晶工学 ナノ構造 ESIPT プロトン移動 イミダゾピリジン 固体発光材料

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

## 1. 研究開始当初の背景

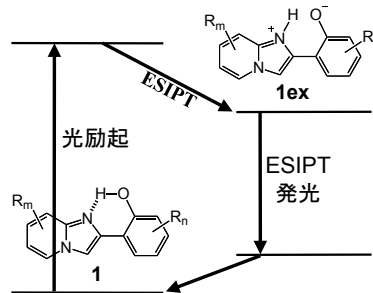
固体で強い発光を示す  $\pi$  電子系有機化合物の創出は学術および応用の両面で極めて重要な課題であり、またそれらの発光特性はこれまで主に合成化学プロセスによる分子構造の構造変換によって制御されてきた。しかし固相では分子間相互作用などを介した無輻射失活の寄与が大きく、溶液中で強い発光を示す物質がしばしば消光することから、かさ高い置換基の導入や包接化、アモルファス化などで発光部位の相互作用を抑制し「発光の低下を防ぐ」という方法論で材料設計がなされてきた。

一方、「溶液中では発光せず固体で強く発光する」という、従来とは正反対の発光挙動である「凝集誘起発光 (Aggregation-Induced Emission: AIE)」を示す化合物が 2001 年以降報告され、さまざまな展開が試みられている。さらに、分子配列に依存して固体発光特性が変化する「集積構造依存型発光」を示す系が近年注目され、報告例が急速に増加している。申請者はこれまでに、2,2':6',2''-テルピリジンの結晶-結晶相転移による固体発光の on-off スwitchングに成功した (*Nature Mater.* **2005**, *4*, 685) のを始めとし、加圧-加熱による分子集積構造の乱れ-回復プロセスに基づくピレン誘導体の発光色スイッチング (*J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129*, 1520; *J. Mater. Chem.* **2011**, *21*, 8347; **2012**, *22*, 20065) など、集積構造依存型発光について先駆的な成果を報告してきた。この系において分子の化学構造は不変であり、合成化学プロセスではなく分子集積構造を制御因子とする固体発光であることから、従来とは異なる新しい有機固体発光物質の実現可能性を示唆している。



分子集積体の発光特性については、従前より主に励起二量体(エキシマー)や  $\pi$ - $\pi$  スタッキング、ドナー・アクセプター相互作用などの分子間相互作用に基づいて議論されてきたが、より詳細な議論のためには、結晶中の分子の空間配置などサブナノメートル領域の考察が重要であると認識されるようになった。しかし、これらの効果について統一的な理解にはほど遠いのが現状である。その大きな要因のひとつが「集積構造依存型発光を示す、同一の発光ユニットから成る化合物群が存在しない」ことにある。これまでの報告例の多くは 2,3 種類の発光を示す化合物であり、発光機構を多角的に評価することは難しい。よって、同一の発光ユニットから成る結晶構造に依存する発光を示す化合物群(ライブラリ)を構築すれば、集積構造依存型発光の詳細な機構解析のための有用な系となり、さらにこの成果を基にした精密な分子設計をおこなうことで、新しい光機能性物質の実現へのブレークスルーになるものと考えた。

分子内水素結合を有する 2'-ヒドロキシフェニルイミダゾ[1,2-a]ピリジン (HPIP, **1**) は、光照射にともなう励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) により双性イオン型励起状態 (**1ex**) となり、溶液中でストークスシフトの大きい ( $\sim 11000\text{cm}^{-1}$ ) 弱い ESIPT 蛍光(量子収率  $\Phi \sim 0.05$ ) を示す。我々は HPIP が 2 種類の結晶構造に依存して色の異なる強い固体 ESIPT 発光 (青緑および黄,  $\Phi=0.4-0.5$ ) を示すことを見出し、加熱による結晶-結晶相転移で発光スイッチングに成功している (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2008**, *47*, 9522)。これまでに固体 ESIPT 発光の結晶構造依存性の詳細な検討 (基盤研究(C)・H20-22; *J. Phys. Chem. A*, **2012**, *116*, 12041)、HPIP の各種誘導体合成と固体発光制御の方法論の確立 (基盤研究(C)・H24-26; *J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 2482) について研究成果を報告してきた。



その過程で、複数の HPIP 誘導体について結晶構造に依存する明確な発光色変化を確認した。特に 6-シアノ HPIP は 3 色の ESIPT 発光を示す異なる結晶を形成し、X 線結晶構造解析と分子軌道計算より、集積構造依存型発光を解析する良いモデル系であることが示された。以上のことより、HPIP 誘導体が集積構造依存型発光を示す化合物群として有力な候補であり、この分野において現状の大きな課題である、分子集積構造と発光特性との関連性を多角的に解析するための有用な素材になると考えるに至った。

## 2. 研究の目的

### (1) 研究期間内に明らかにしようとしたこと

本研究は、HPIP を先導構造とする複数の芳香環が単結合で結ばれた分子について、結晶構造に依存して固相発光が変化する化合物を合成し、分子集積構造と発光特性との関連性を比較検討可能な化合物ライブラリの構築を第一の目的とする。さらに X 線結晶構造解析と光物性測定、計算化学により集積構造依存型発光とそれに関わる励起状態についてサブナノメートル領域の効果を加味して解析、理解し、新しい光機能性物質の実現への道筋を付ける。

### (2) 学術的な特色・独創的な点及び予想された結果と意義

有機固体光機能性物質において、分子集積構造と光機能性との関連性評価の重要性は従前より認識されているものの、結晶多形や超分子構造の作成とその構造解析が必ずしも容易ではないこと、理論計算の困難さ (大規模系に対する定量的予測精度限界) などの点から、依然としてその理解は不十分と言わざるを得ない。本研究においては、同一の発光ユニットから成る集積構造依存型発光を示す化合物ライブラリの構築により、分子集積の効果を多角的に考察することが可能となり、この課題の解決に向けて大きく寄与するものと考えている。

本研究の目的である化合物ライブラリの構築を達成するためには、(i) 分子集積構造の変化に敏感な発光特性、(ii) さまざまな結晶構造を形成しやすい化学構造、の二つの条件を満たす分子を設計する必要がある。このために、ESIPT 発光という分子内電荷分離状態が関与し周囲の環境変化に敏感な発光を発現し、その一方で、基底状態では電子が局在化しておらず、二つの芳香環が単結合で結ばれたフレキシブルな化学構造を有する **HPIP** を発光ユニットとして選択したところに独創性がある。

計算化学については、分子集積体のような大規模系に対して第一原理高精度計算の直接適用は困難であるため、高速・高精度でありながら有用かつ適用可能な計算手法を工夫する。すなわち、量子化学と古典力学を組み合わせた手法 (ONIOM 法) や、分子単位でフラグメント分割して並列高速化を図る手法 (FMO 法) を使用する。さらに時間依存密度汎関数法と組み合わせた FMO 法 (FMO-TDDFT 法) は定量的な励起状態予測が可能であり、これを適用することで分子集積構造と発光特性との関連性を高い精度で明らかにできると考えている。

本研究で得られる成果は、有機固体物質の分子集積構造と発光特性および励起状態をより高い精度で理解するものとして関連分野に大きな波及効果が見込まれ、この成果に基づき研究を展開することで学術および実用の両面で有用な新しい有機固体発光物質群の創成に繋がる。

### 3. 研究の方法

本研究は、次の三つの方針にしたがって遂行した。

#### (1) **HPIP** を先導構造とする誘導体合成、結晶作成と構造解析および発光測定

ESIPT 発光を示す **HPIP** 誘導体について、置換基の電子供与/求引性や立体構造、数、位置を変えて種々合成した。これらのうち結晶多形を示すものを収集して構造解析および発光測定をおこない、目的の化合物ライブラリの構築を目指した。

#### (2) 固体 ESIPT 発光特性と分子集積構造との関連づけと理解

分子集積構造に起因する固体発光特性の差違について、X 線結晶構造解析や各種分光法を利用し知見を集積した。高精度の分子軌道計算も駆使し固体発光特性が変化する要因を検討した。

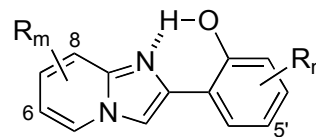
#### (3) 外部刺激による分子集積構造制御を用いた固体発光材料の検討

分子集積構造制御を可能とする分子設計をおこない、熱や圧力、溶媒などの外部刺激に対する発光応答性も明らかにし、発光制御可能な新しい有機固体発光材料への展開を目指した。

### 4. 研究成果

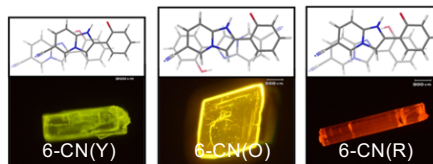
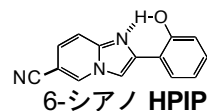
#### (1) クロロ置換 **HPIP** の結晶多形依存型発光

**HPIP** に種々の置換基  $R_m, R_n$  を入れた誘導体を合成し、その結晶構造と固体発光特性を調べた。その結果、結晶多形依存型発光 (PDL) を示す誘導体を見出し、**HPIP** がライブラリの基本骨格として有用であることをあらためて確認できた。なかでもクロロ体 (5'-, 6- または 8-位置換体) はいずれも PDL を示したことから、分子構造、結晶構造、発光特性との関連性を明らかにすることを目的に高精度計算による分子集合体の励起状態解析をおこなった。その結果、励起状態分子とそれに隣接する基底状態分子からなる二分子を ESIPT 発光種として計算したところ、発光特性を定量的に評価することに成功した。

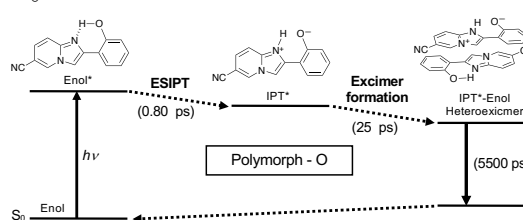


#### (2) 6-シアノ **HPIP** の発光機構解析

6-シアノ体 (6CN-**HPIP**) が三種類の結晶多形 (**6-CN (Y)**, **6-CN (O)** および **6-CN (R)**) を形成し、それぞれ黄色、橙色、赤色の PDL を示すことを以前報告している (*CrystEngComm*, 2014, 16, 3890)。そこでフェムト秒過渡吸収分光法による励起状態解析をおこない、発光機構の詳細を検討した。まずテトラヒドロフラン (THF) 溶液中ではエノール形からの ESIPT が 0.6 ps の時定数で起こり、続いてねじれ構造に 6 ps で変化した後、70 ps で無放射失活することが確認された。



結晶では、三つの時定数 ( $\tau_1, \tau_2, \tau_3$ ) が観測され、 $\tau_1$  および  $\tau_3$  はそれぞれ ESIPT 過程と発光寿命に帰属された。ESIPT の時定数 ( $\tau_1$ ) はサブピコ秒であり、**6-CN (Y)** < **6-CN (R)** < **6-CN (O)** の順であった。これは各結晶多形における基底状態エノール体の O-N 距離に対応しており、短い O-N 距離で ESIPT がより速いことが明らかとなった。



数十ピコ秒の  $\tau_2$  は、結晶の TD-DFT 計算との対応からヘテロエキシマー形成過程に帰属され、その大きさは **6-CN (R)** < **6-CN (O)** < **6-CN (Y)** の順であった。この差異について考察した結果、基底状態エノール

	$\tau_1$ /ps	$\tau_2$ /ps	$\tau_3$ /ns
<b>6-CN(Y)</b>	0.30 ± 0.1 (90%)	45 ± 5 (6%)	8.0 (4%)
<b>6-CN(O)</b>	0.80 ± 0.3 (68%)	25 ± 5 (24%)	5.5 (8%)
<b>6-CN(R)</b>	0.50 ± 0.2 (69%)	11 ± 3 (12%)	2.0 (18%)



ル型の二面角が大きいほど、また  $\pi$ - $\pi$  スタック二量体のパッキングのずれが大きいほど  $\tau_2$  が大きい、すなわちヘテロエキシマー形成が遅いことがわかった。以上の結果は、PDLにおいて二分子の発光種の関与を強く示唆することを実験的に示したものであり、PDLの機構解析に向けた重要な成果であると位置付けている。

### (3) 七員環構造を有する新規 ESIPT 発光性分子の開発

**HPIP** およびその誘導体は分子内水素結合を含む六員環を有している。そのため **HPIP** 部位は結晶中でほぼ平面構造をとり、芳香環がつくる二面角は最大で  $6^\circ$  程度である。

そこで、分子内水素結合を保持しながらコンホメーションの自由度を与える分子設計として、2'-ヒドロキシフェニル部位を 2-位から 8-位に移動した **8HPIP** を合成した。**8HPIP** は 7-H と 6'-H との立体障害によりねじれ構造を取り、分子内水素結合を含む歪んだ七員環を形成することを予想した。また立体障害の効果を確認することを目的として、立体障害のより小さいチエニル基を持つ **8HTIP**、より大きな立体障害が期待される 6'-位にフッ素を持つ **8FHPIP** もあわせて合成した。また、固体で強い ESIPT 発光を示す **MeHBI** の異性体かつ **8HPIP** の類似体の **4HPBI** についても発光特性を検討した。

シクロヘキサン溶液中でいずれの化合物も発光は弱く ( $\Phi < 0.06$ )、また **4HPBI** を除いてノーマルおよび ESIPT 由来の二色発光を示した。**4HPBI** はノーマル発光のみを示した。X線結晶構造解析より、**8HPIP** は分子内水素結合が確認され歪んだ七員環を形成していた。芳香環の二面角は約  $45^\circ$  であった。**8HTIP** も分子内水素結合を形成していたが二面角は約  $3.3^\circ$  であり、ほぼ平面であった。このコンホメーションの違いは立体障害の大きさに起因するものと考えられる。一方、**8FHPIP** の二面角は約  $58^\circ$  と **8HPIP** よりも大きく、分子内ではなく分子間で水素結合を形成していた。また **4HPBI** は **8HPIP** に近いねじれ構造をとり、分子内水素結合形成も確認された。

これらの微結晶粉末を 330 nm で励起したところ、**8HPIP** および **8HTIP** は 528 nm および 471 nm にストークスシフトの大きな効率よい ( $\Phi \sim 0.45$ ) 発光を示し、種々の検討から ESIPT に由来する発光であると推定された。一方、分子内水素結合を形成していない **8FHPIP** は 387 nm にごく弱い発光 ( $\Phi = 0.03$ ) が見られた。以上の結果は、七員環構造を持つ ESIPT 発光を示す新しい分子群の設計につながるものである。

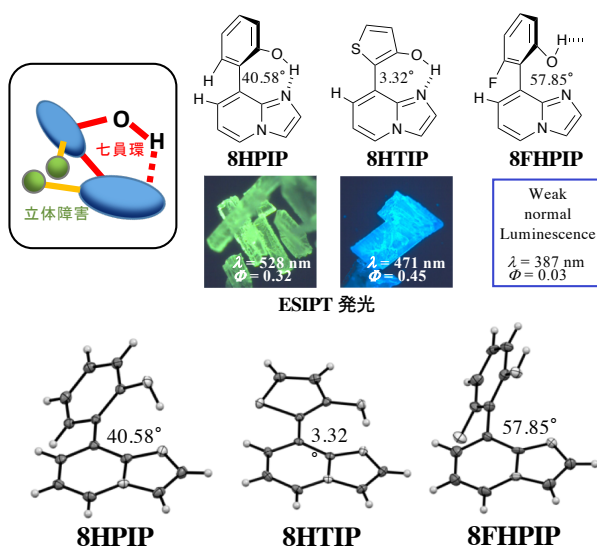
興味深いことに、**MeHBI** の異性体である **4HPBI** は固体で二色発光を示したものの、発光量子収率は非常に小さかった ( $\Phi \leq 10^{-2}$ )。発光 ( $k_f$ ) および無放射失活 ( $k_{nr}$ ) の速度定数を見積もったところ、**8HPIP** と比較して **4HPBI** の  $k_{nr}$  は二桁大きかった。**4HPBI** の ESIPT 状態では **MeHBI** のような典型的なケト体を描けないことから、この励起種の熱失活過程が非常に効率よいものと考えられる。

### (4) グラフ理論に基づくトポロジー共鳴エネルギー (TRE) を利用した ESIPT の評価

分子の励起状態を評価する計算手法の単純化と高速化を視野に、グラフ理論に基づくトポロジー共鳴エネルギー (Topology Resonance Energy, TRE) 法に着目し、ESIPT を示すさまざまな分子に適用してその有用性を探った。その結果 TRE 法は、定量的な評価には注意を要するものの、HF 法や DFT 法よりも計算時間が大幅に短縮できることから、分子設計における、多数の分子構造の候補からのスクリーニングに利用できる可能性が示された。

励起状態分子内プロトン移動 (ESIPT) 過程を芳香族性の観点から広く概観した。計算対象分子の大部分の ESIPT プロセスに対して、第一励起電子状態の互変異性体 (ケト体) は、励起状態エノール体よりも大きなトポロジー共鳴エネルギー (TRE) を持つことが分かった。一方、励起状態で互変異性体がエノール体よりも芳香族性が著しく小さい場合には、反応に対してかなりのエネルギー障壁が生じる。このように、励起状態における芳香族性は ESIPT 過程が進行する決定的な因子ではないが、非常に重要な因子である。

ESIPT の統計学的調査より、ほとんどの ESIPT 過程で互変異性体の芳香族性がエノール体よりも大きいことを明らかにしたが、一方でそれは ESIPT の発生の必要条件ではない。また現実的な ESIPT 過程では、原理的に  $TRE(T^*) < TRE(N^*)$  の可能性があることを指摘した。もしそうであれば、ケト形の非芳香族構造をより低いエネルギーによって補償することができる。またこの結果を、光化学的ペリ環状反応の TRE に基づくこれまでの議論と組み合わせることで、励起状態種の TRE 概念を確立できた。すなわち、励起電子状態にある共役系は、その電子状態に大きな正の TRE を有する場合には、芳香族系とみなすことができる。



## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 14 件)

- ① Yukihide Ishibashi, Mako Murakami, Koji Araki, **Toshiki Mutai**, Tsuyoshi Asahi, “Excited-State Intramolecular Proton Transfer Process of Crystalline 6-Cyano-2-(2'-hydroxyphenyl) Imidazo[1,2-*a*]Pyridine, as Revealed by Femtosecond Pump-Probe Microspectroscopy”, *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123(17), 11224–11232. 査読有, DOI: 10.1021/acs.jpcc.9b01044
- ② 務台 俊樹, 「固体 ESIPT 発光材料の新展開」, *光化学*, **2019**, 50(1), 10-16. 査読無, DOI: [https://photochemistry.jp/doc/koukagaku/vol50\\_1J.pdf](https://photochemistry.jp/doc/koukagaku/vol50_1J.pdf)
- ③ **Toshiki Mutai**, Tatsuya Muramatsu, Isao Yoshikawa, Hirohiko Houjou, Masaru Ogura, “Development of Imidazo[1,2-*a*]pyridine Derivatives with an Intramolecular Hydrogen-bonded 7-Membered Ring Exhibiting Bright ESIPT Luminescence in the Solid State”, *Org. Lett.* **2019**, 21(7), 2143–2146. 査読有, DOI: 10.1021/acs.orglett.9b00455
- ④ Yusuke Takahashi, Takuya Uehara, Chihiro Matsushashi, Minoru Yamaji, **Toshiki Mutai**, Isao Yoshikawa, Hirohiko Houjou, Kota Kitagawa, Tomoyoshi Suenobu, Shojiro Maki, Takashi Hirano, “Spectroscopic properties of push-pull 2-(4-carboxyphenyl)-6-dimethylaminobenzothiazole derivatives in solution and the solid state”, *J. Photochem. Photobiol. A* **2019**, 376, 324–332. 査読有, DOI: 10.1016/j.jphotochem.2019.03.021
- ⑤ Hirohiko Houjou, Taku Kato, Hongyi Huang, Yoshikazu Suzuki, Isao Yoshikawa, **Toshiki Mutai**, “Re-evaluation of the tert-Butyl Method in Crystal Engineering of Salicylideneanilines by Simultaneous Observation of Photochromism and Thermochromism in Single Crystals”, *Cryst. Growth Des.* **2019**, 19(2), 1384–1390. 査読有, DOI: 10.1021/acs.cgd.8b01764
- ⑥ Hirohiko Houjou, Yuki Hoga, Yi Lan Ma, Hiroto Achira, Isao Yoshikawa, **Toshiki Mutai**, Kazunari Matsumura, “Dinuclear fused salen complexes of group-10 metals: Peculiarity of the crystal structure and near-infrared luminescence of a bis(Pt-salen) complex”, *Inorg. Chim. Acta* **2017**, 461, 27–34. 査読有, DOI: 10.1016/j.ica.2017.01.031
- ⑦ Hirohiko Houjou, Yoshikazu Suzuki, Qian-Wen Shen, Isao Yoshikawa, **Toshiki Mutai**, “Synthesis and properties of salicylaldehydes fine-tuned by modular assembly using “plug-and-socket” type extendibility”, *Chem. Eur. J.* **2017**, 23(34), 8286–8294. 査読有, DOI: 10.1002/chem.201701141
- ⑧ Hirohiko Houjou, Keisuke Yagi, Isao Yoshikawa, **Toshiki Mutai**, Koji Araki, “Effects of interaction between the chelate rings and  $\pi$ -conjugated systems in fused salphen complexes on UV-Vis-NIR spectra”, *J. Phys. Org. Chem.* **2017**, 30(6), e3635. 査読有, DOI: 10.1002/poc.3635
- ⑨ 務台 俊樹, 荒木 孝二, 「固体で高効率発光を示すイミダゾピリジン誘導体の合成 - ESIPT 発光特性とその結晶構造依存性」, *有機合成化学協会誌*, **2017**, 75(4), 330-339. 査読無, DOI: 10.5059/yukigoseikyokaishi.75.330
- ⑩ Naoko Nishina, **Toshiki Mutai**, Jun-ichi Aihara, “Excited-State Intramolecular Proton Transfer and Global Aromaticity”, *J. Phys. Chem. A*, **2017**, 121(1), 151–161. 査読有, DOI: 10.1021/acs.jpca.6b11684
- ⑪ Hiroto Achira, Yuki Hoga, Isao Yoshikawa, **Toshiki Mutai**, Kazunari Matsumura, Hirohiko Houjou, “Effects of Semi-flexible Linker on Mechanochromic Photoluminescence of a Bis(Pt-salen) Complex”, *Polyhedron* **2016**, 113(-), 123–131. 査読有, DOI: 10.1016/j.poly.2016.04.022

[学会発表] (計 17 件)

- (1) 招待および依頼講演
- ① 「有機超分子の発光化学 結晶多形を利用して固体発光を制御する」, 近畿大学 第 13 回光エネルギーセミナー, 近畿大学, 2018.07.03.
- ② “Organic supramolecules showing stimuli-responsive luminescence”, **Toshiki MUTAI**, Feringa Academic Alumni Symposium, Chemistry for the Future, Groningen University, Netherlands, 2017.09.15.
- ③ 「結晶を温める・すりつぶす ～ 発光がスイッチングする有機結晶」, 務台 俊樹, C2-03, 第 6 回 CSJ 化学フェスタ 2016 (日本化学会), タワーホール船堀, 2016.11.15.
- ④ 「有機超分子の発光化学」, 城西大学セミナー, 城西大学 (埼玉県), 2016.07.08.
- ⑤ 「有機超分子の発光 一分子をどのように集め、光らせるか」, 第 13 回 日本写真学会光機能性材料セミナー 一光機能性を活かす構造制御技術一, 東京工芸大学, 2016.06.20.
- (2) 一般講演
- ① 分子内水素結合を含む七員環を有するイミダゾピリジン誘導体の固体発光と置換基効果, 鈴木 陸人, 務台 俊樹, 吉川 功, 北條 博彦, 小倉 賢, 日本化学会第 99 春季年会, 2PB-080, 2019.03.17.
- ② 七員環型分子内水素結合を有する縮環イミダゾールの固体発光特性, 務台 俊樹, 村松 達也, 吉川 功, 北條 博彦, 小倉 賢, 第 27 回有機結晶シンポジウム, O-31, 2018.10.28.
- ③ ヒドロキシフェニルイミダゾ[1,2-*a*]ピリジン誘導体の集積構造依存発光特性と 2 分子間相互作用に関する理論的研究, (長崎工技セ,<sup>1</sup>東大生研<sup>2</sup>) 三木 伸一,<sup>1</sup> 重光 保博,<sup>1</sup> 務台 俊樹,<sup>2</sup> 第 41 回ケモインフォマティクス討論会, 1P14, 2018.10.26.

- ④ 分子内水素結合を介した七員環を有するイミダゾピリジン誘導体の固体発光特性, 務台俊樹, 村松 達也, 吉川 功, 北條 博彦, 小倉 賢, 2018 光化学討論会, 2P079, 2018.09.06.
- ⑤ ESIPT 発光を示す分子内水素結合 7 員環化合物の電子状態解析 (長崎工技セ,<sup>1</sup>長崎大工,<sup>2</sup>東大生研<sup>3</sup>) 重光 保博,<sup>1,2</sup> 務台 俊樹,<sup>3</sup> 第 48 回複素環化学討論会, 1P-28, 2018.09.03.
- ⑥ 分子内水素結合を含む七員環を有するイミダゾピリジン誘導体の結晶構造依存性発光, 村松 達也, 務台 俊樹, 吉川 功, 北條 博彦, 小倉 賢, 日本化学会第 98 春季年会, 3PC-085, 2018.03.22.
- ⑦ 分子内水素結合を介した七員環を形成するイミダゾ[1,2-*a*]ピリジン誘導体の結晶構造と発光特性, 務台 俊樹, 村松 達也, 吉川 功, 北條 博彦, 小倉 賢, 第 26 回有機結晶シンポジウム, P-35, 2017.11.03
- ⑧ クロロフェニルイミダゾ[1,2-*a*]ピリジン誘導体の集積構造依存発光の理論解析, (長崎工技セ,<sup>1</sup>東大生研<sup>2</sup>) 三木 伸一,<sup>1</sup> 重光 保博,<sup>1</sup> 務台 俊樹,<sup>2</sup> 第 47 回複素環化学討論会, 1P-88, 2017.10.26.
- ⑨ 6-Cyano-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazo[1,2-*a*]pyridine 結晶のフェムト秒顕微過渡吸収分光, (愛媛大院理工<sup>1</sup>・東大生研<sup>2</sup>) 石橋 千英<sup>1</sup>, 村上 眞子<sup>1</sup>, 務台 俊樹<sup>2</sup>, 荒木 孝二<sup>2</sup>, 朝日 剛<sup>1</sup>, 日本化学会第 97 春季年会, 3C5-42, 2017.03.18.
- ⑩ 6-Cyano-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazo[1,2-*a*]pyridine 結晶の蛍光ダイナミクス, (愛媛大院理工<sup>1</sup>・東大生研<sup>2</sup>) 村上 眞子<sup>1</sup>, 石橋 千英<sup>1</sup>, 務台 俊樹<sup>2</sup>, 荒木 孝二<sup>2</sup>, 朝日 剛<sup>1</sup>, 2016 年日本化学会中四国支部大会, 1B02, 2016.11.05.

[図書] (計 1 件)

- ① 光化学フロンティア 未来材料を生む有機光化学の基礎, 編集: 水野 一彦, 宮坂 博, 池田 浩, 化学同人 (2018), (総頁数: 400). 担当: 「6.2 有機固体発光 - 分子間相互作用の制御と利用」, pp. 136-143.

[その他]

- (1) アウトリーチ活動
  - ① 「発光のサイエンス ～身のまわりの物から最先端化合物まで～」, 東京都立竹早高等学校 理数研究校特別講演会, 1, 2 年生 約 15 名, 2019.02.19.
  - ② 「発光の科学 ～身のまわりの物から最先端化合物まで」, 私立鶴沼高等学校・理数科 1, 2 年生 約 100 名 2016.07.12.

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名: 重光 康博

ローマ字氏名: (SHIGEMITSU, Yasuhiro)

所属研究機関名: 長崎大学

部局名: 工学研究科

職名: 教授

研究者番号 (8 桁): 50432969

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。