

内山元素化学研究室

主任研究員 内山 真伸 (D.Phil.)



(0) 研究分野

分科会: 化学

キーワード: 元素化学、分子変換、物質科学、計算化学、分光学

(1) 研究背景と研究目標

当研究室では有機化学を研究基盤として、周期表を縦断・横断する元素化学を展開し、化学物質の反応、性質、構造について研究します。実験的手法のみならず理論計算的手法も利用して、新しい分子を能動的かつ精密にデザインし、新たな分子変換反応の開発、新合成法の開拓、未知機能の創出に挑みます。元素の様々な組み合わせで構成される分子の反応性・機能が、元素のどのような性質に由来するのかを分子構造・電子構造を理解することによって明らかにし、既存の学問領域にとらわれない新しい学理を探求することを目指します。

(2) 2019年度成果と今後の研究計画(中長期計画2025年度まで)

1. 機能性 π 共役系分子の設計と合成(内山, 村中, 青山)

π 共役系分子は省エネルギー社会、高度情報化社会を支えるオプトエレクトロニクス分野においてキーとなる有機材料として期待されています。私たちは、特異な電子構造を有する新規 π 共役系分子を設計・合成して、得られた分子の性質を様々な分光学的手法を用いて明らかにする研究を行っています。

円偏光発光 (CPL) は、キラルな物質を自然光で励起したときに蛍光やりん光の左右円偏光強度に差が生じる現象であり、CPL スペクトルから発光性物質の励起状態のキラル構造の情報が得られます。強い CPL シグナルを示す物質は、セキュリティインクや 3D ディスプレイ、バイオイメージングなどの高付加価値材料として期待され、基礎科学的な観点のみならず、応用分野からも注目されています。これまでに様々なタイプの CPL を示す物質が報告されていますが、中でもらせん状有機低分子は、分子構造を設計することによって合理的に CPL の波長や強度をコントロールできる可能性を秘めており、各種の応用分野に必要な材料を低コストで作分けするのに最適なターゲットと考えられます。当研究室では DFT 計算を用いて CPL 特性に優れた新規らせん状有機低分子の設計を行い、 $4n\pi$ 電子構造を持つ平面環状分子を切断してらせん状にした新規骨格を合成しました。合成したらせん状分子は分子量が比較的小さいにもかかわらず強い CPL シグナルと大きな異方性因子 (g_{lum}) を示すことを明らかにしました。

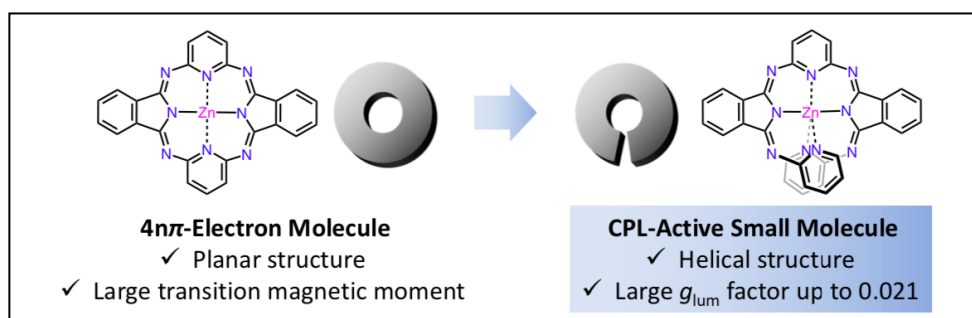


図 1. 円偏光発光性分子の分子設計.

2. 有機半導体材料の構造物性相関(内山, 村中, 青山, 松本, 渡邊)

分子配向した J 会合体薄膜には、その科学的意義においてもオプトエレクトロニクスへの応用においても重要な価値があります。これまでに、高い配向度を有する非イオン性色素の J 会合体を作製し、その光学特性や半導体特性について研究してきました。しかし、J 会合体の形成過程や薄膜中での分布など根源的事象については解明の途上となっています。ビスアゾ色素の真空蒸着膜における J 会合体の分布について、原子間力顕微鏡 (AFM) や偏光顕微鏡などを用いて検討しました。

膜厚の異なる J 会合体薄膜に対して、J 会合体に対応した単色光で偏光顕微鏡観察を行ったところ、J 会合体は深い青紫色を呈しており、薄膜中で局所的に形成していることが分かりました。また、偏光顕微鏡と原子間力顕微鏡を組み合わせた観察により、J 会合体は、大きなグレインの周囲や、小さなグレインが連なっているようなところに、局所的に形成されていることが明らかとなりました。

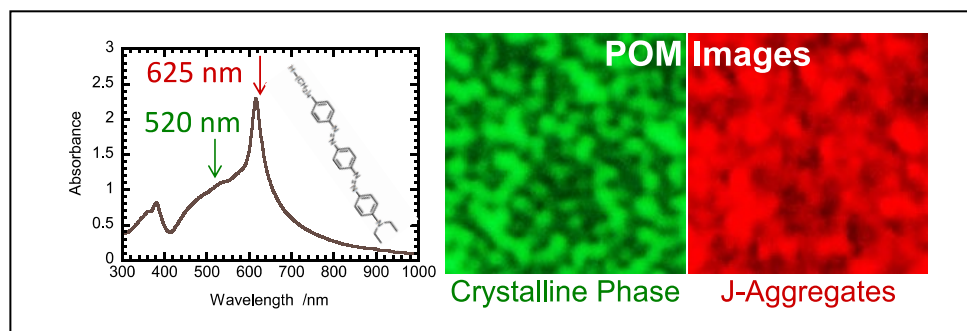


図 2. ビスアゾ色素蒸着膜におけるJ会合体の局所的形成

(3) 研究室メンバー

(2019年度)

(主任研究員)

内山真伸

(専任研究員)

青山哲也、村中厚哉

(パートタイマー)

宇津木美恵子、Ouyang Xingmei、中野

亜沙子、伊藤-美紀子

(研修生)

手塚則亨、Yang Zekun、浅野規仁、

田中裕介、森本賢介、行森大貴、渡部衛、

池内俊也、Li Bixiao、小山田健太、

橋新崇広、原田芽生、村山智崇、

渡邊勇一郎、大澤泰生、坂本京花、

下川拓己、高木泰成、藤岡昌汰、

半澤郁美、三橋隆章、片原聖矢、

根本雅也

(4) 発表論文等

1. “Preparation, Spectroscopic Characterization and Theoretical Study of a Three-Dimensional Conjugated 70 π -Electron Thiophene 6-Mer Radical Cation π -Dimers”, Toshihiro Fujiwara, Atsuya Muranaka,* Tohru Nishinaga,* Shinobu Aoyagi,* Nagao Kobayashi, Masanobu Uchiyama, Hiroyuki Otani, and Masahiko Iyoda*, **J. Am. Chem. Soc.**, 142, 5933–5937 (2020).
2. “Ring-Opened Hemiporphyrazines: Helical Molecules Exhibiting Circularly Polarized Luminescence”, Yusuke Tanaka,# Tomotaka Murayama,# Atsuya Muranaka,* Eiyu Imai, and Masanobu Uchiyama* (#: equal contribution), **Chem. Eur. J.**, 26, 1768–1771 (2020).
3. “Design of Photostable, Activatable Near-Infrared Photoacoustic Probes Using Tautomeric Benzophthalocyanine as a Platform”, Naoyuki Toriumi,* Norihito Asano, Takayuki Ikeno, Atsuya Muranaka, Kenjiro Hanaoka, Yasuteru Urano, and Masanobu Uchiyama*, **Angew. Chem. Int. Ed.**, 58, 7788–7791 (2019).
4. “Organic Monolithic Natural Hyperbolic Material”, Yeon Ui Lee, Olivier P. M. Gaudin, KwangJin Lee, Eunyoung Choi, Virginie Placide, Kazuto Takaishi, Tsuyoshi Muto, Pascal André, Atsuya Muranaka, Masanobu Uchiyama, Fabrice Mathevet, Tetsuya Aoyama, Jeong_Weon Wu,* Anthony D’Aléo,* and Jean-Charles Ribierre*, **ACS Photonics**, 6,1681–1689 (2019).
5. “A Solvent-free and Vacuum-free Melt-processing Method to Fabricate Highly Crystalline Organic Semiconducting Layers for Organic Electronic Applications”, Jean-Charles Ribierre*, Li Zhao, Xiao Liu, Emmanuelle Lacaze, Benoît Heinrich, Stephane Méry, Piotr Sleczkowski, Yiming Xiao, Frédéric Lafolet, Daisuke Hashizume, Tetsuya Aoyama, Masanobu Uchiyama, Jeong Weon Wu, Elena Zaborova, Frederic Fages,

Anthony D'Aléo,* Fabrice Mathevet,* and Chihaya Adachi*, **J. Mater. Chem. C**, 7, 3190–3198 (2019).

Laboratory Homepage

<https://www.riken.jp/research/labs/chief/chem/index.html>