

2025/7/25
令和7年度教授着任講演会

適切な分子設計に基づく 機能分子材料の開拓



氏名 山田 重之
所属 分子化学系
職位 教授
生年月 1980年11月生
年齢 44歳
出身 大阪府

自己紹介～研究歴とお世話になった先生方～ ★有機合成化学（有機フッ素化学・有機金属化学・フロー化学）



★有機材料化学



発光材料

外部からエネルギーを受けて光を放出する材料
主な用途: LG社HPより転載
＜分子設計＞
電子を励起させられるπ共役構造
さらに…固体や液体状態(凝集状態≠溶液状態)で発光させるには?
→分子運動を抑制させる設計が必要

液晶材料

主な用途: 液晶ディスプレイ
Crystal → Heating → Liquid Crystals (Smectic A, Nematic) → Heating → Isotropic Liquid
Cooling → Cooling → Cooling
＜分子設計＞
結晶性を司る剛直構造(π共役構造)と液体性を司る柔軟鎖構造

発光機能＋液晶機能の融合

主な用途: フレキシブルデバイス



LG社HPより転載

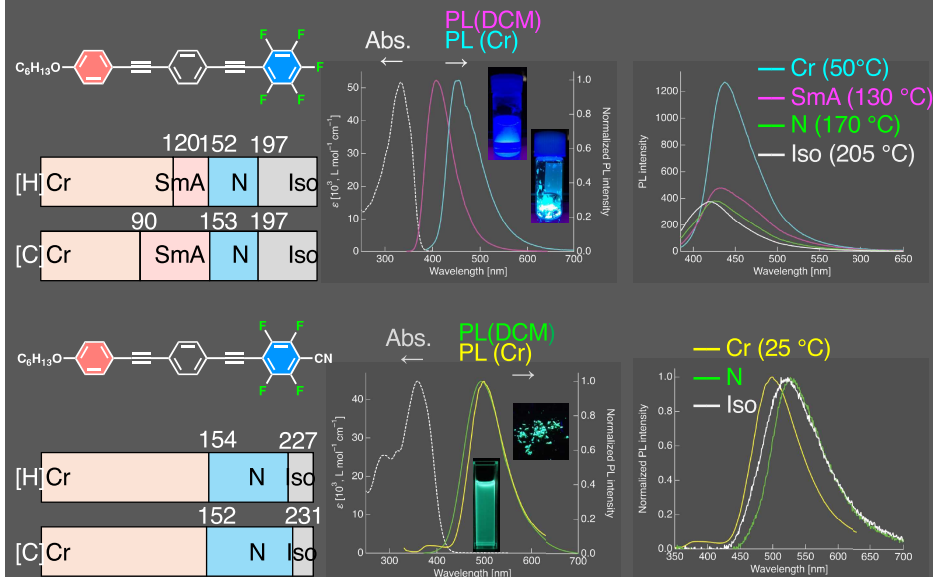


Samsung社HPより転載

＜分子設計＞

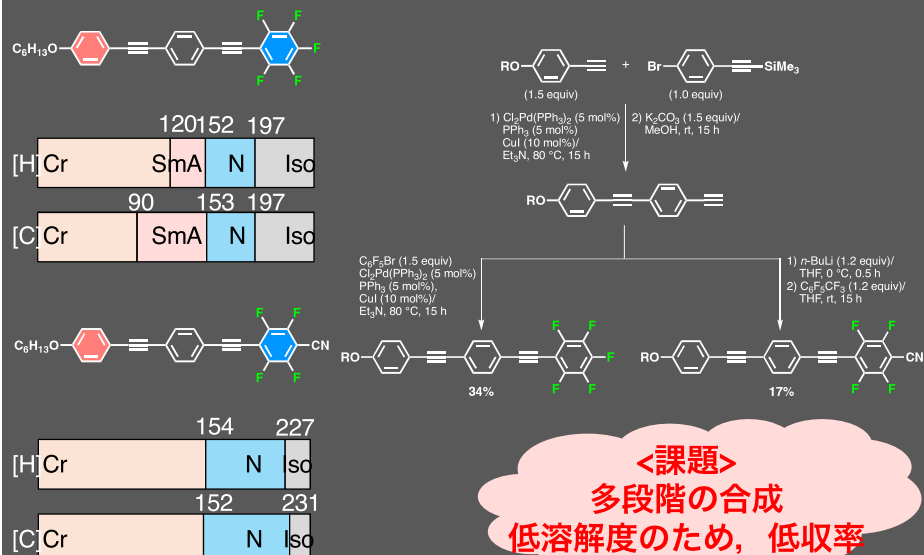
Luminescent π-conjugated core Flexible chain

D-π-A型フッ素化ビストラン誘導体



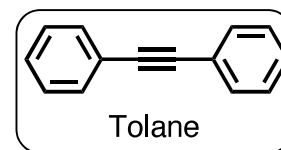
Org. Biomol. Chem. 2017, 15, 5949; Org. Biomol. Chem. 2018, 16, 5609; Appl. Sci. 2019, 9, 1905; 他

D- π -A型フッ素化ビストラン誘導体



Org. Biomol. Chem. 2017, 15, 5949; Org. Biomol. Chem. 2018, 16, 5609; Appl. Sci. 2019, 9, 1905; 他

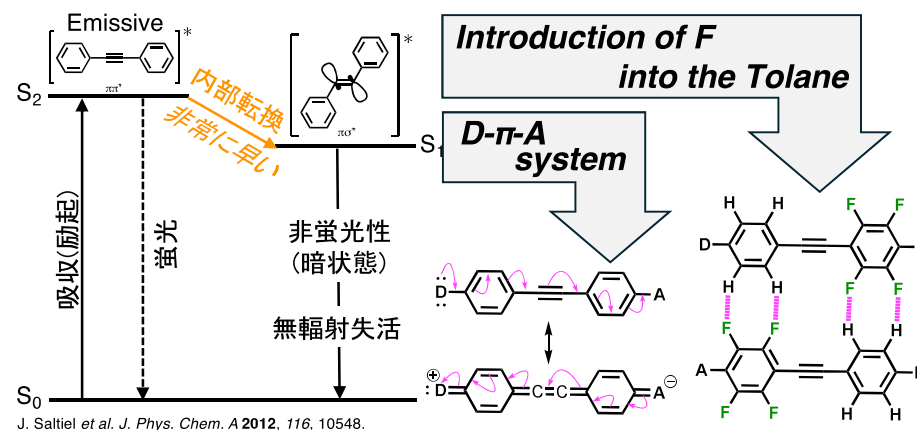
トラン (1,2-シフェニルアセチレン)



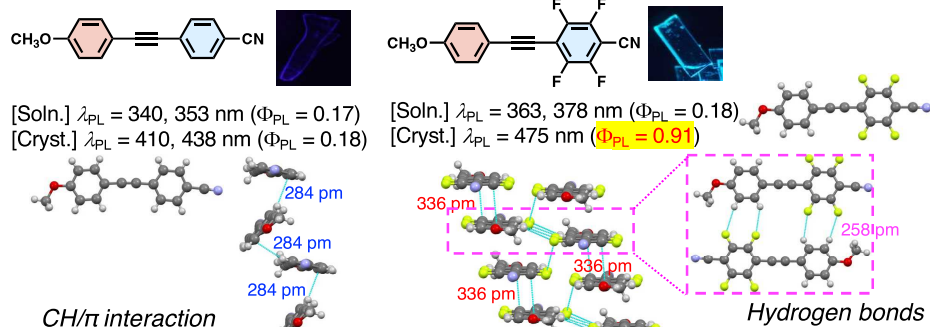
➢ 直線分子

➢ 短い π 共役 ➔ 液晶分子のメソゲン

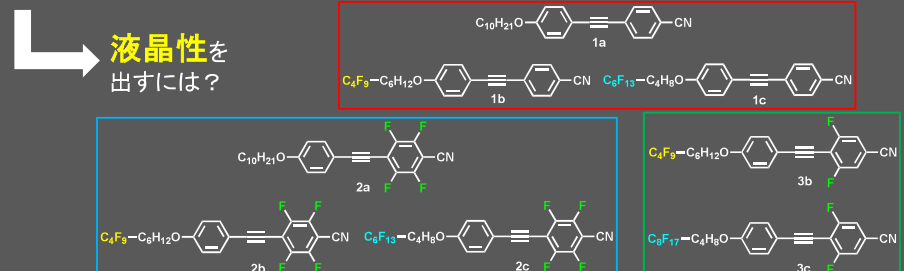
➔ **しかし**…光励起で生成する直線構造の $\pi\pi^*$ 励起状態(蛍光性)から速やかな内部転換でtrans-bent構造の $\pi\sigma^*$ 励起状態(非蛍光性)へ



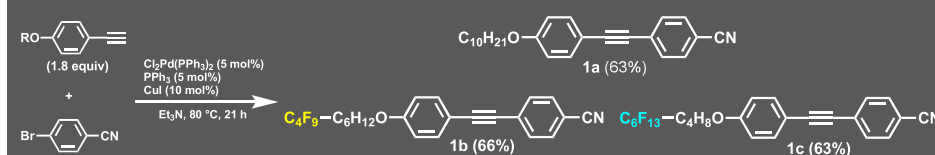
D- π -A型トラン vs. D- π -A型フッ素化トラン



New J. Chem. 2020, 44, 6704; Molecules 2021, 11, 450; New J. chem. 2022, 46, 3392.

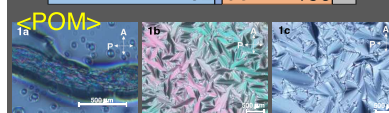


(A) 非フッ素化トラン

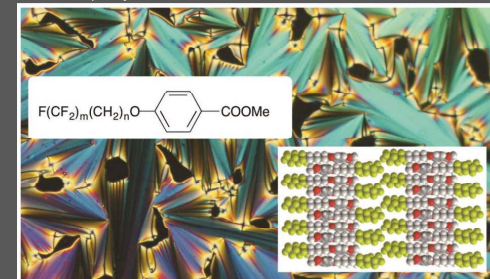


<DSC> (Scan rate: 5 °C min⁻¹, under N₂)

1a	Cr	Cr	N	Iso
	69	87	92	
1b	Cr	Cr	SmA	Iso
	85	92	134	
1c	Cr	Cr	SmA	
	92	96	158	

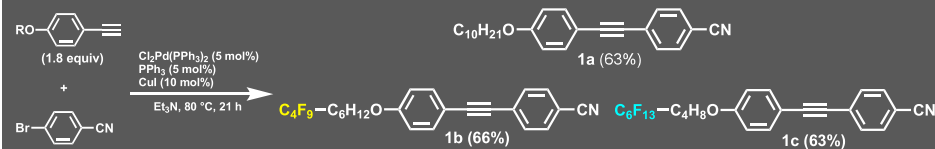


<参考 Liq. Cryst. 2018, 45, 11>



Mol. Syst. Des. Eng. 2022, 7, 720.

(A) 非フッ素化トラン

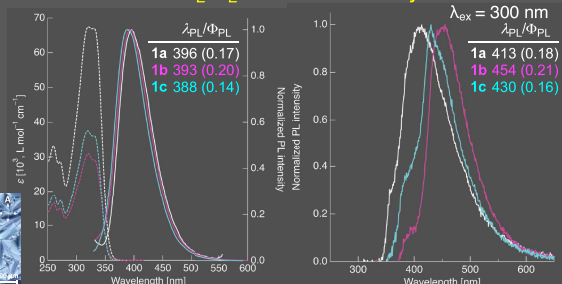


<DSC> (Scan rate: 5 °C min⁻¹, under N₂)

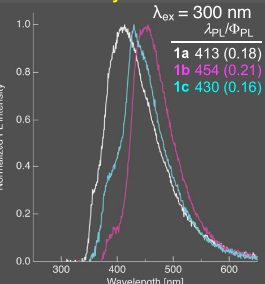
1a	Cr	69	Cr	87	N	92	Iso
1b	Cr	85	Cr	92	SmA	134	Iso
1c	Cr	92	Cr	96	SmA	158	Iso



<Abs & PL in CH₂Cl₂>

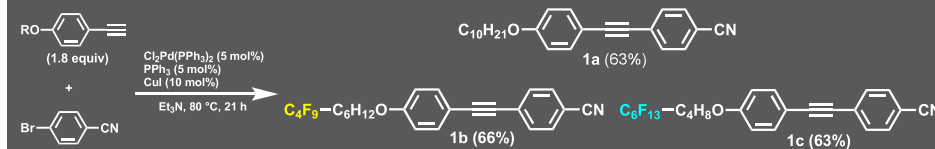


<PL in Crystal>



Mol. Syst. Des. Eng. 2022, 7, 720.

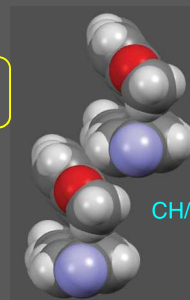
(A) 非フッ素化トラン



Crystallographic study

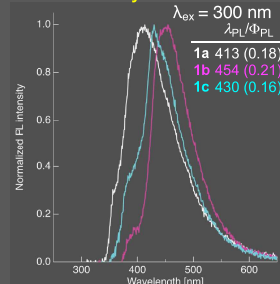


Herringbone structure
(not H/F hydrogen bonds)



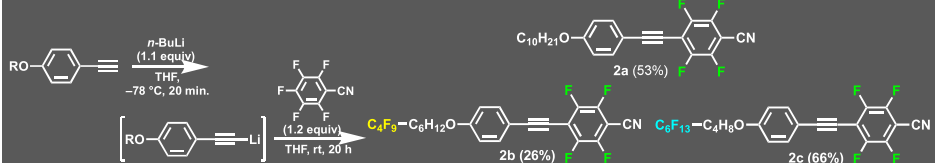
CH/ π 294 pm

<PL in Crystal>



Mol. Syst. Des. Eng. 2022, 7, 720.

(B) 四フッ素化トラン

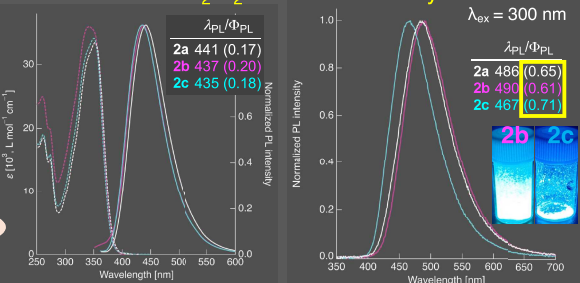


<DSC> (Scan rate: 5 °C min⁻¹, under N₂)

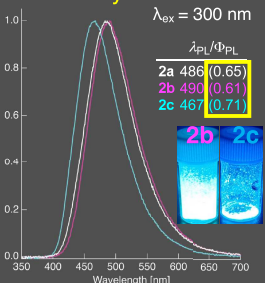
2a	Cr	72	Iso
2b	Cr	109	Iso
2c	Cr	113	Iso

The LC phase
did not appeared!!

<Abs & PL in CH₂Cl₂>

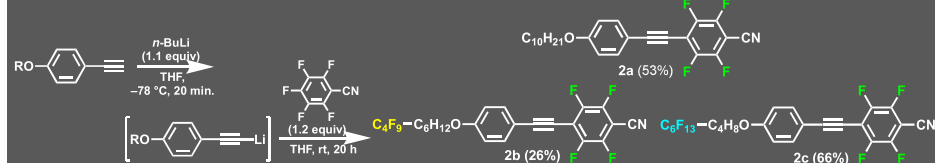


<PL in Crystal>

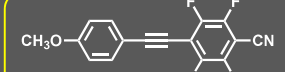


Molecules 2023, 28, 2764.

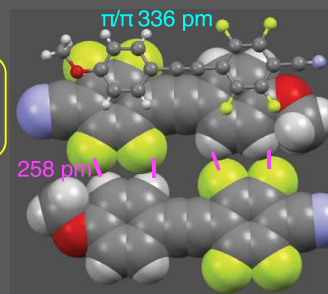
(B) 四フッ素化トラン



Crystallographic study



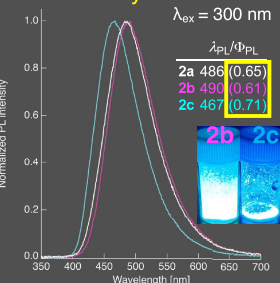
H/F hydrogen bonds
to suppress
non-radiative
deactivation



π/π 336 pm

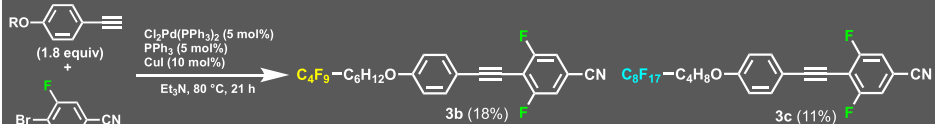
258 pm

<PL in Crystal>

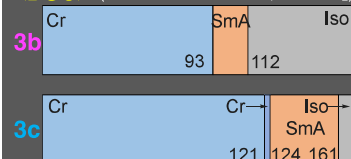


Molecules 2023, 28, 2764.

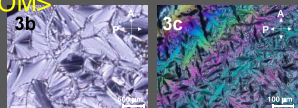
(C) ニフッ素化トラン



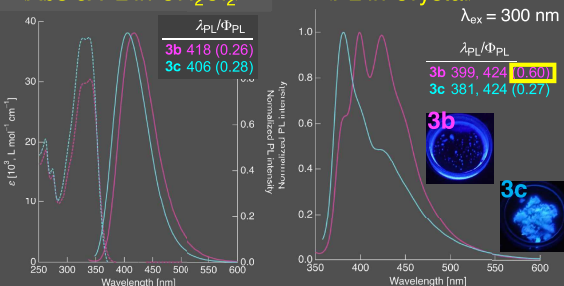
<DSC> (Scan rate: 5 °C min⁻¹, under N₂)



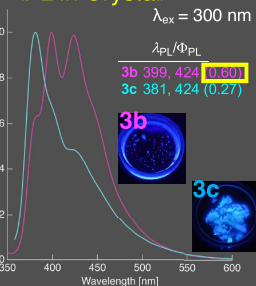
<POM>



<Abs & PL in CH₂Cl₂>



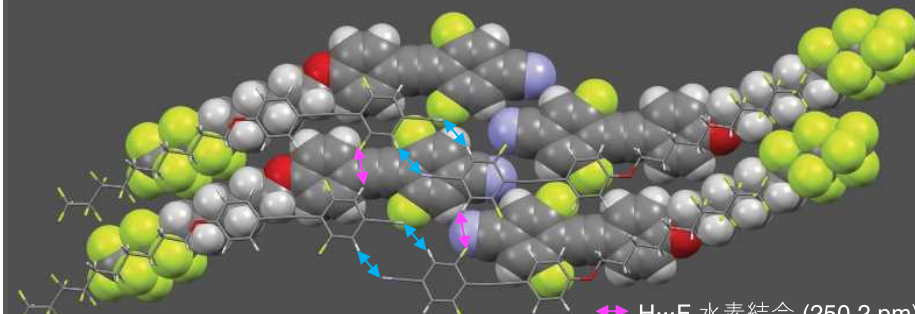
<PL in Crystal>



J. Mol. Liq. 2024, 393, 123545.

(C) ニフッ素化トラン

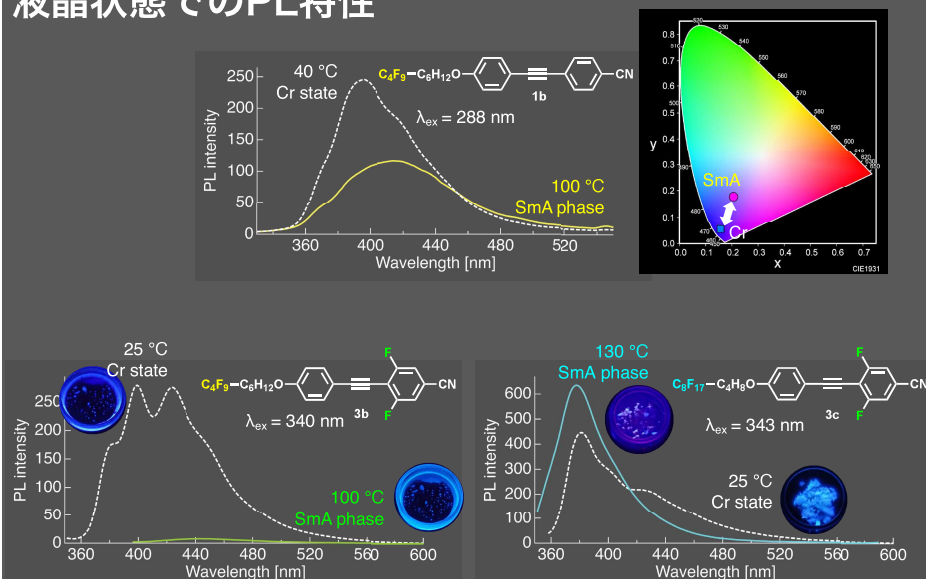
Crystal Structure of 3b



$\text{H}\cdots\text{F}$ 水素結合 (250.2 pm)
 $\text{H}\cdots\text{N}$ (246.6 pm)
 $\pi\cdots\pi$ 相互作用 (339.2 pm)

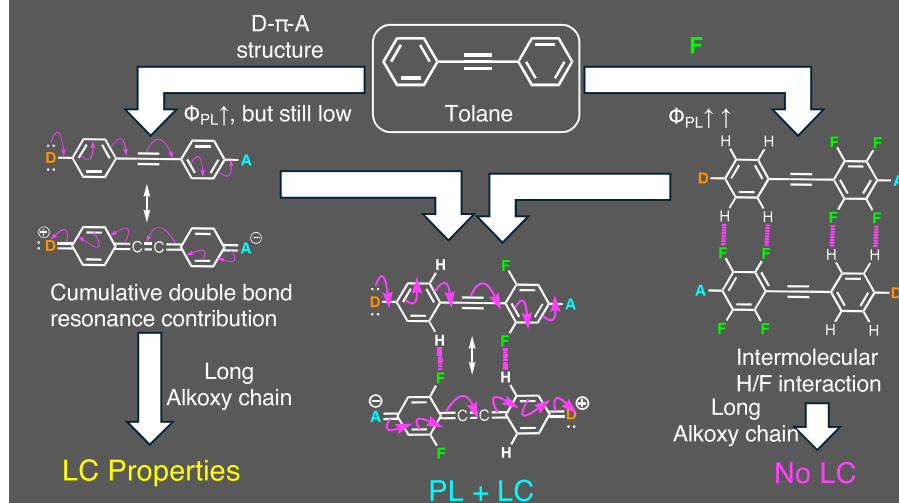
J. Mol. Liq. 2024, 393, 123545.

液晶状態でのPL特性



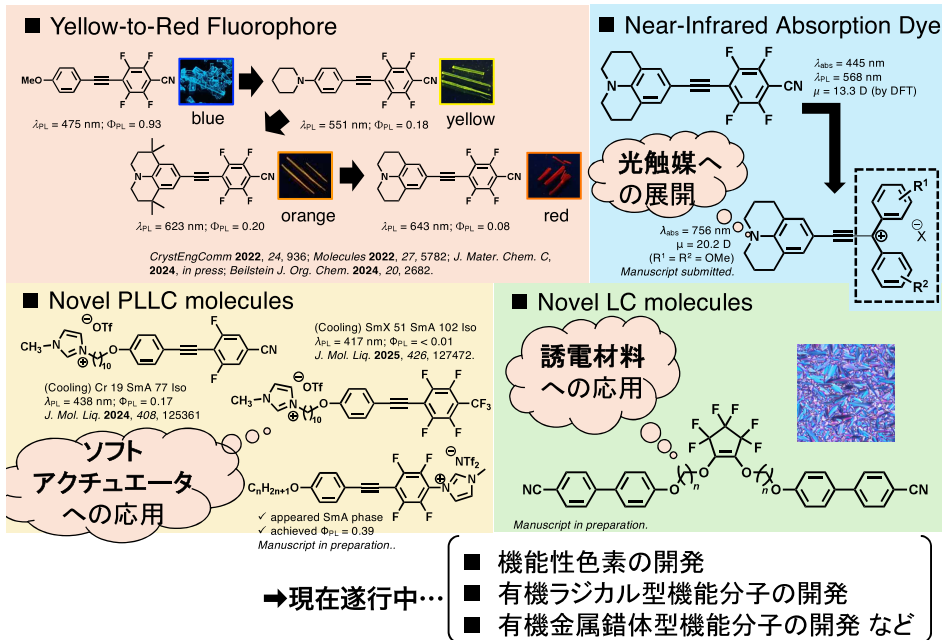
J. Mol. Liq. 2024, 393, 123545.

まとめ



Mol. Syst. Des. Eng. 2022, 7, 720; J. Fluorine Chem. 2022, 261-262, 110032; Molecules 2023, 28, 2764; J. Mol. Liq. 2024, 393, 123545.

その他と今後の研究展望



謝辞

石原 孝 元教授
 Paul Knochel教授
 吉田 潤一 名誉教授
 山崎 孝 元教授
 堤 治 教授

教授 今野 勉
 助教 安井 基博



単結晶X線構造解析
 吾郷友宏 先生(兵庫県立大)

温度可変粉末X線回折測定
 原 光生 先生(香川大)
 櫻井庸明 先生(京都工繊大)

学生(山田G)

宮野和也 (2018修士)
 盛田雅人 (現 茨城大)
 田中剛志 (2019修士)
 光田 晶 (2019修士)
 佐藤公哉 (2020修士)
 西澤彰人 (2020修士)
 宇都慧司 (2021修士)
 王 逸舟 (2024博士)
 片岡光樹 (2021修士)
 高橋佑輔 (2023修士)
 吉田圭吾 (2023修士)
 小林和紀 (D2)

乾 聡来登 (2024修士)
 Nur Faqiha (2022学士)
 安田朋弘 (2022学士)
 左 嘉琪 (M2)
 江口優人 (M2)
 北岡勇人 (M2)
 任 毅 (M2)
 平見匡宏 (2024学士)
 佐武紘弥 (M1)
 中野瑛偉 (M1)
 今里聖哉 (B4)
 スウ メイコウ (B4)

研究資金

💰 科研費
 💰 池谷科学技術振興財団
 💰 旭硝子財団
 💰 イオン工学振興財団
 💰 藤森科学技術振興財団
 💰 村田学術振興財団
 💰 松籙科学技術振興財団
 💰 増屋記念基礎研究振興財団
 💰 フジシール財団
 💰 小笠原敏晶記念財団

ご清聴
 ありがとうございました