

富士フイルム・機能性材料化学賞

東京大学 教授, JST ERATO 磯部縮退π集積プロジェクト研究総括

磯部 寛之氏

Hiroyuki Isobe

(業績)「大環状芳香族分子の薄膜・固体を活用した多能材料開発」

Development of Multipotent Organic Materials with Macrocyclic Aromatic Molecules



自在な構造設計が可能な有機分子は、現代の材料科学研究に欠かせない物質となっている。なかでも新しい可能性を拓く新奇で高性能な分子材料の開発は、新物質を生み出す点で重要であるのみならず、その構造・物性相関研究により材料機能の理解を深める重要な課題である。

磯部氏は、芳香族分子を輪に連ねた「大環状芳香族分子」の設計・合成を基盤とし、その薄膜・固体を活用し機能性分子材料を開拓した。リン光型有機発光デバイス(OLED)の材料としては、正孔と電子の電荷双方を運搬する両極性電荷輸送材料の開発を端緒とし、リン光剤の理論限界発光を単一物質・単一層で実現する OLED 全能材料を大環状芳香族分子で実現した。さらに、大環状芳香族分子の適用範囲を全固体リチウムイオン電池の負極材料、有機スピンバルブ材料、円偏光発光材料などに拡張し、大環状芳香族分子がさまざまな機能を実現する魅力的な分子材料であることを示した。

以下、代表的な業績を述べる。

1. 大環状芳香族分子を用いた OLED 材料

磯部氏は、簡便な環状化反応による合成、電子的に偏りのない単純な元素組成、そして大環状分子構造という OLED 分子材料の新しい設計戦略に着目した研究を展開している。2016 年には、「電子輸送」「正孔輸送」「電荷再結合」「励起エネルギーの発光剤への授与」というリン光剤ドープ型 OLED 内で求められる全機能を一つの分子材料により実現した。この新分子材料は、一つの層からなる「単層構成デバイス」において、理論限界値である内部発光量子効率 100%に迫る発光効率を実現した。通常、細分化した機能を複数の分子材料に割り当て、5層~8層の有機層により高効率発光を実現する既存デバイスとは一線を画す新構成である。磯部氏の新分子材料は、「単層構成」のみならず、それを「炭素と水素のみ」という極めて単純な元素組成で実現した点でも注目されている。この研究は *Chemical Science* 誌の「Materials Chemistry and Nanoscience」と「Physical Chemistry」の二分野での Top 50 Articles of 2016 として取り上げられるなど、有機化学および周辺分野において注目されている。

2. 全固体リチウムイオン電池の負極分子材料

磯部氏は、ナノカーボン上の原子欠損部を分子で模すための分子設計を展開している。そのなかで 2011 年には、ナフタレンを大環状化した初めての分子[n]シクロ-2,7-ナフチレン([n]CNAP)を設計・合成した。2016 年には、この分子を適切に集積化することで、全固体リチウムイオン電池の電極材料を生み出せることを見いだした。黒鉛の容量限界となる Li1C6 組成を大きく凌駕する Li1.9C6 組成により高電気容量を実現するのみならず、安定した繰り返し充放電、対リチウム電位で 0.4 V という負電極として活用可能な電位を実現した。用いた電解質は LiBH₄ という固体電解質であり、次世代リチウムイオン電池の電極材料を登場させた成果である。磯部氏はさらに、粉末 X 線回折と Rietveld 解析を用いた集積構造・性能相関研究を展開し、高容量負電極を実現するためには、分子中央の開口部を揃え「ナノ細孔」を形づくるのが必須であることを明らかにした。電池分野で提唱されていた「細孔の空いたグラファイト電極」を、分子材料の設計・合成・集積というボトムアップ法により実現し得ることを示した成果である。

3. 大環状分子が実現する多様な新機能

ごく最近、磯部氏は、大環状分子を磁性関連材料へと展開している。例えば、[6]CNAP 薄膜による、スピンバルブ材料の実現や、剛直なキラル筒状分子(有限長カーボンナノチューブ分子)による有機円偏光発光での史上最高となる異方性因子の実現などである。

以上、磯部寛之氏は、多種多様かつ高性能な材料機能を「芳香族分子を環状化するのみ」で実現した。短工程・簡便合成法の工夫により大量合成を可能としながら、分子の環状構造の設計により新機能・高性能を生み出した成果である。これら多様な機能が「炭素と水素のみ」という極めて単純・簡素な元素組成により実現可能であることを明示することで、現代材料科学における構造有機化学研究の重要性をあらためて示す成果ともなっている。よって、同氏の研究業績は、学術振興を目的として材料科学に基礎をおき、技術・産業に寄与する独創的且つ優れたものであり、有機合成化学協会富士フイルム・機能性材料化学賞に値すると認め、ここに選定した次第である。