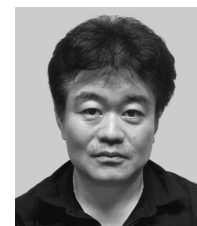


小西 玄一氏 (東京工業大学物質理工学院・准教授)

Gen-ichi Konishi



### (業績)「機能性有機蛍光色素の合成とデバイスおよび分子イメージングへの応用」

Synthesis of Functional Organic Fluorescent Dyes for Advanced Devices and Molecular Imaging

有機蛍光色素は、発光材料や分子イメージングの鍵となる物質であり、多様な用途に応じた性能(光吸収・発光波長、発光効率、環境応答性、生体適合性等)が求められる。欲しい物性をもつ蛍光色素の設計には、基盤となる $\pi$ 電子系化合物の励起状態の構造や性質の解明、理論化学による発光性の予測、最新の有機反応を駆使した力量ある合成が三位一体とならねばならない。小西氏は、構造有機化学と物理有機化学の視点から、基盤となる $\pi$ 電子系骨格の性格を見極め、適切な官能基の導入により、斬新かつ実用性に優れた機能性蛍光色素や液晶材料を開発してきた。得られた分子の特徴は、極めてシンプルな構造で、導入するマトリックスに対する加工性や非侵襲性に優れ、それぞれのデバイスに必要とされる高い性能を発揮した。以下、代表的な業績を紹介する。

#### 1. 分子イメージングの革新

バイオイメージングや極性評価に有用なソルバトクロミック蛍光色素の長年の課題は、幅広い極性範囲で大きく発光色を変化させながら高量子収率を維持すること、長時間の蛍光顕微鏡分析に耐えられる光安定性の両立であった。ピレン骨格に適切なドナーとアクセプターを導入することにより、これらを実現した。さらにこの色素を用いて、細胞膜の脂質層の相状態を高感度で解析する手法を開発した。最近、細胞のイベントの長時間ライブイメージング可能な低毒性・非侵襲性のソルバトクロミック蛍光色素の開発にも成功している。これらは生命科学研究に大きなインパクトを与えるものである。その他、病理診断に用いる次世代の近赤外光源(ファイバーレーザー)で励起可能な二光子蛍光色素の開発と生体深部観察の実現、トリハロメタン類を発光と分解で選択的に検出可能な蛍光色素など、実用性に優れた材料を多数開発している。

#### 2. 凝集誘起発光色素の開発

触媒的C-Nクロスカップリング反応を活用して、大きく振じれたアルキルアミノ基を種々の多環芳香族化合物に導入し、高性能の凝集誘起発光(AIE)色素を開発した。分子系により触媒が異なり、Buchwald-Hartwig法、含窒素ヘテロ環カルベン(NHC)など当時、最先端

の触媒を用いることで、過去に合成が困難だった色素群を構築した。特に9,10-ビス(アルキルアミノ)アントラセンは、既存のAIE色素の中でも高量子収率で粘度応答性にも優れており、様々な応用が行われている。さらに、溶液中における消光過程を追究し、無輻射失活がAIEの原理とされてきた分子の回転ではなく、ポテンシャルエネルギー面の円錐交差へのアクセスであり、この分子ではデューワーベンゼン中間体が観察されることを発見した。AIEの原理は固体状態での発光ではなく、溶液中での失活過程を積極的に設計することに意義があると提唱し、世界標準になっている。

#### 3. 有機 $\pi$ 電子系デバイスの開発

AIEの原理の妥当性を示すために、スチルベン $C=C$ 二重結合まわりをやわらかなアルキレン基で括った「橋かけスチルベン」を創出し、AIE特性を獲得することに成功した。さらにこの骨格をメソゲンとして用いたネマチック液晶を開発した。橋かけ構造により、相転移温度の大幅な低下(150℃以上)とネマチック相の誘起することができた。これまで、長い共役長をもつ有機半導体を液晶化すると、高温での液晶相発現や固体の相が発現しやすく、有機エレクトロニクス材料の高性能化のボトルネックとなっていた。有機半導体への橋かけ構造の導入による液晶性の付与は、材料開発のためのブレイクスルーになると期待される。また、蛍光性の橋かけスチルベン液晶が室温ネマチック液晶を示すことに着目し、ネマチック相の電場応答性を生かした新概念の発光デジタルスイッチデバイスの開発に成功している。

以上のように小西氏は、有機合成化学と物性科学、分光学、計算化学を駆使して、斬新かつ実用性のある有機 $\pi$ 電子蛍光色素分子を創製した。同氏は、必要とされる分析対象やデバイスに役立つ有機分子を合理的に設計し、合成する匠であり、現代社会における有機合成化学の重要性を顕著に示すことにも成功している。同氏の研究業績は、学術のみならず産業の発展にも寄与する独創的かつ優れたものであり、有機合成化学協会富士フィルム・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。