

ピンポイント分子設計による革新的な機能性材料開発手法の提案

(MOLFEX¹・京大福井セ²) ○上島 基之¹、佐藤 徹²

Innovative Methods for Developing Functional Materials by Providing Pinpoint Molecular Design (¹MOLFEX, Inc., ²Fukui Fundamental Institute, Kyoto University) ○ Motoyuki Uejima¹, Tohru Sato²

Vibronic couplings play an important role in expressing any molecular functionality involving electrons and photons. Controlling vibronic couplings facilitates the theory-driven design of various functional molecules. The design method is an unprecedented type of theoretical design method that can propose new functional molecules by visualizing the site that is an obstacle to the expression of function in the starting molecular structure and removing the obstructive factor with pinpoint accuracy by chemical modification. This method enables the steady development of materials in a short period at a low cost.

Keywords : Photophysical Chemistry, Organic Photochemistry, Radiation and Non-radiation, UV-Vis-NIR Spectroscopy, OLED Materials

振電相互作用は、電子や光が関わるあらゆる分子機能の発現において重要な役割を果たす。その制御により様々な機能性分子の設計が可能となる。その設計手法は、出発分子構造で機能発現の障害となっている部位を可視化し化学修飾によりピンポイントでその阻害要因を取り除くことにより新規な機能性分子を提案できる、従来にないタイプの理論設計手法¹である(Fig. 1)。これにより短期間かつ低コストで着実な材料開発が可能となる。

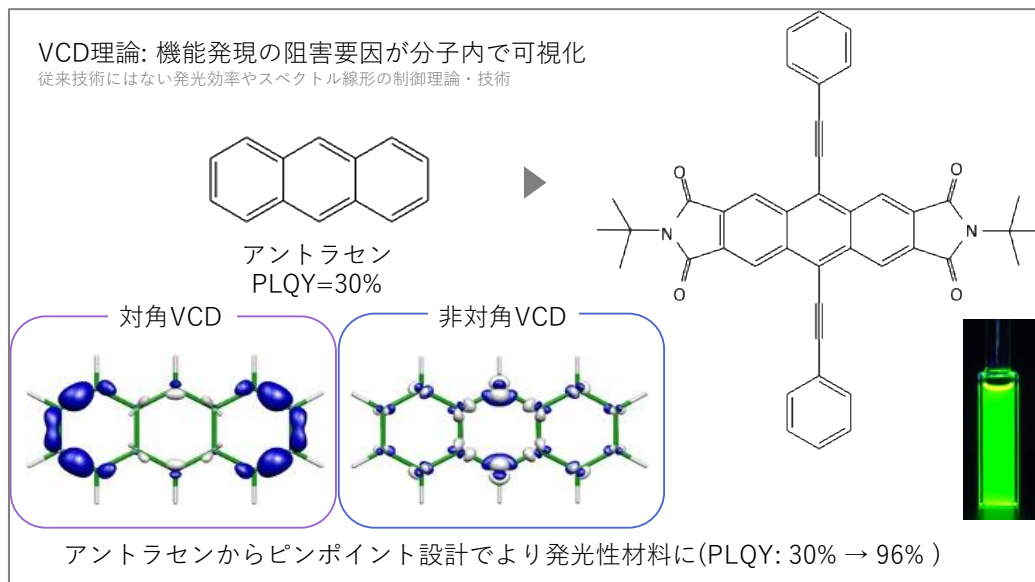


Fig. 1: Development of functional materials using the vibronic coupling theory^{1,2}

1) T. Kato, N. Haruta, T. Sato, “Vibronic Coupling Density –Understanding Molecular Deformations, Springer”, Singapore (2021).

2) Uejima *et al.*, *Chem. Phys. Lett.*, **80**, 602 (2014).