

機能性分子をアSEMBルして実用的な素子を構成するためには、個々の分子の機能を高めることに加えて、それらの分子を2次元ないしは3次元で規則配列させる方法を開拓する必要がある。そのためには分子自身が安定な3次元の結晶をつくるよう分子設計するか、または2次元の規則構造を持った結晶表面の上に分子を結合させるかする必要がある。

昨年度は に関連して、無機結晶の結晶面の安定性がどのように決まるのかを、炭酸塩結晶を例として報告した。また、ナノレベルの摩擦測定により分子の配列状態を直接調べることができることも報告した。本年度は に関連して光機能性分子の開発状況、および に関連して相転移による有機結晶の構造変化について報告する。

1. 有機 EL 用発光用 Ir 錯体の分子設計

中心金属として Ir を用いた錯体は高輝度・高効率の発光を示すことが知られている。発光は金属と配位子の間の電荷移動、配位子間の電荷移動など、さまざまなメカニズムで起こるので、配位子を含めて分子設計を行うことにより、性能の向上が期待できる。

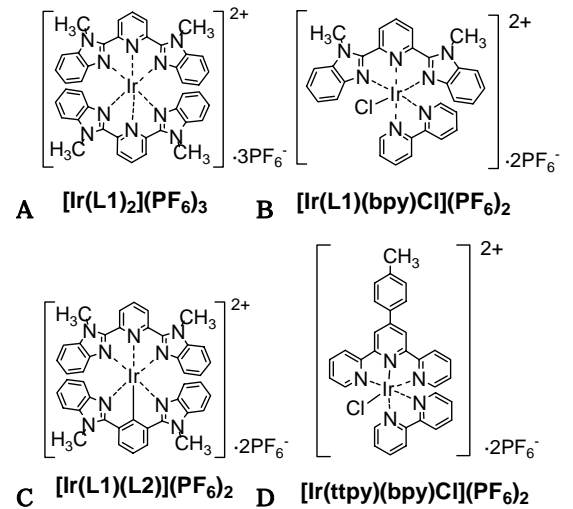
本研究では分子設計の方針を定める目的で右図 A-D のように (NNN), (NCN) などの3座配位子を持った錯体を合成し、分子構造と発光効率の比較を行った。その結果、右図下に示した L1, L2 などの π -ドナー性を持つ配位子が金属-配位子間の電荷移動の効率を上げることが分かった。特に Ir-C 結合を作る L2 配位子を持つ錯体 C は最も大きな輻射速度を持つことが分かった。以上の結果をまとめ、Yutaka *et al.*, *Inorg. Chem.*, **44**, 4737-4746 (2005) に報告した。

2. 有機結晶の相変化と不安定性

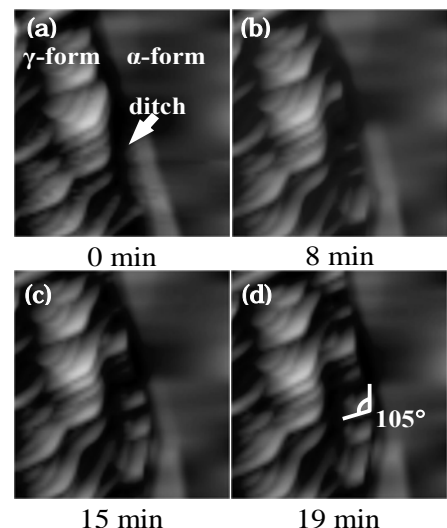
有機物を結晶にして用いるとき、その安定性がしばしば問題となる。そこで、水素結合で分子が結びついている有機結晶二種類について、相転移の過程を調べた。

グリシン結晶については 晶として生成したものを高湿度下、型種結晶と接触させておくと、溶液を媒介として相転移が起こることが分った。右図は結晶表面での転移過程を直接原子間力顕微鏡によって捉えたものである。境界部分に溝がありここに水溶液があると考えられる。この結果を Ito *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **275**, e1691-e1695 (2005) に報告した。

D,L-メチオニンについては、温度を上げると 晶から 晶への固相転移が起こると言われていた。本研究では温度を上げながらラマンスペクトルを測定することにより、正確な相転移温度を定め、分子のコンホメーション変化と熱膨張、結晶のひび割れ、ステップ構造との関係を明らかにした。この結果を Yamanobe-Hada *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **275**, e1739-e1743 (2005) に報告した。



L1: 2,6-bis(1-methyl-benzimidazol-2-yl)pyridine
 L2: 1,3-bis(1-methyl-benzimidazol-2-yl)benzene
 tpy: 4'-(4-methylphenyl)-2,2':6',2''-terpyridine



水分の存在下で 晶 晶の相転移を起こしているグリシン結晶表面の原子間力顕微鏡像 ($7.62 \mu\text{m} \times 7.62 \mu\text{m}$). Ito *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **275**, e1694 (2005, Elsevier) より引用.