

部局長確認欄

2008 年 4 月 日

学 長 様

(研究所代表者)

学部等	理学系研究科
分野・学科・研究室等	分子科学専攻
職・氏名	教授・小関史朗 印
連絡先	(内)2770, 072-254-9702
E-mail	shiro@c.s.osakafu-u.ac.jp

2 1 世紀科学研究所開設申請書

大阪府立大学 2 1 世紀科学研究所の設置及び運営に関する実施要項第 2 条第 1 項の規定により、2 1 世紀科学研究所の開設を下記のとおり申請します。

記

- 1 研究所名（英文名も併記すること。）
- 分子エレクトロニックデバイス研究所
- The Research Institute for Molecular Electronic Devices

2 研究所代表者を含む研究員

1	所属	理学系研究科分子科学専攻
	職・氏名	教授・小関史朗
	連絡先	(内) 2770, 072-254-9702, 居室: A2-2116S
	E-mail	shiro@c.s.osakafu-u.ac.jp
2	所属	理学系研究科分子科学専攻
	職・氏名	准教授・麻田俊雄
	連絡先	(内) 2768, 072-254-9722, 居室: A2-2117S
	E-mail	asada@c.s.osakafu-u.ac.jp

3	所属	大学院工学研究科 電子・数物系専攻
	職・氏名	教授・内藤裕義
	連絡先	(内) 2284, 072-254-9266, 居室: B11-302
	E-mail	naito@pe.osakafu-u.ac.jp
4	所属	大学院工学研究科 電子・数物系専攻
	職・氏名	助教・小林隆史
	連絡先	(内) 2256, 072-254-9266, 居室: B11-301
	E-mail	tkobaya@pe.osakafu-u.ac.jp
5	所属	大学院工学研究科 電子・数物系専攻
	職・氏名	助教・永瀬 隆
	連絡先	(内) 2278, 072-254-9266, 居室: B11-301
	E-mail	nagase@pe.osakafu-u.ac.jp

6	所属	大学院工学研究科 物質・化学系専攻 応用化学分野
	職・氏名	教授・水野一彦
	連絡先	(内) 5885, 072-254-9289, 居室: B5-6C68
	E-mail	mizuno@chem.osakafu-u.ac.jp
7	所属	大学院工学研究科 物質・化学系専攻 応用化学分野
	職・氏名	准教授・池田 浩
	連絡先	(内) 5882, 072-254-9389, 居室: B5-6C65
	E-mail	iked@chem.osakafu-u.ac.jp
8	所属	大学院工学研究科 物質・化学系専攻 応用化学分野
	職・氏名	助教・前多 肇
	連絡先	(内) 5890, 072-254-9294, 居室: B5-6C73
	E-mail	maeda-h@chem.osakafu-u.ac.jp

9	所属	大学院工学研究科 物質・化学系専攻 応用化学分野
	職・氏名	教授・中澄博行
	連絡先	(内) 5798, 072-254-9320, 居室: B5-5A07
	E-mail	nakazumi@chem.osakafu-u.ac.jp
10	所属	大学院工学研究科 物質・化学系専攻 応用化学分野
	職・氏名	准教授・八木繁幸
	連絡先	(内) 5796, 072-254-9324, 居室: B5-6A05
	E-mail	yagi@chem.osakafu-u.ac.jp

3 研究所の設置目的

近年のデバイス開発には分子レベルでの研究が必須である．特に近年は有機 EL ディスプレイに注目が集まっており，その材料の性能向上のために分子レベルでの研究が多数行われている．分子レベルでの理論設計および解析，合成および実験解析，デバイス設計および評価の三本柱で新規機能性材料の研究を進めていくために本研究所を組織するものである（下図参照）．有機 EL デバイスに用いるための発光材料（分子）の設計と合成，およびそれらを用いた有機 EL デバイスの作成と評価を行うことを設置当初の目的とする．さらに，有機 EL デバイスにとどまらず，分子レベルでの多種多様なデバイス設計・開発を目的とし，発展的共同研究をめざす．

4 研究所の研究内容

次の三本柱を基に共同研究開発を企画・実施する．

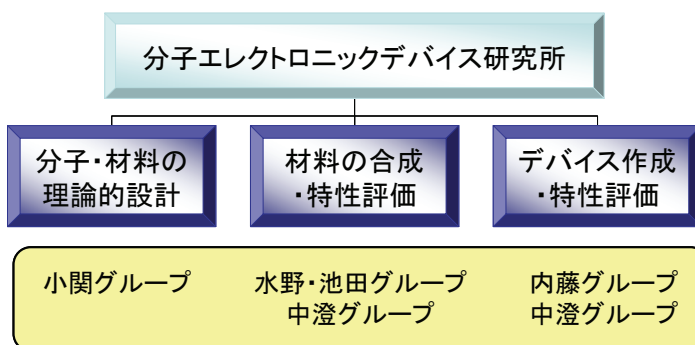
- （１）理論計算およびシミュレーションをもとに発光材料の理論的設計を分子レベルで行う（小関グループ）．
- （２）発光材料の合成とそれらの化学的・物理的特性の評価を行う（水野・池田グループ，中澄グループ）．
- （３）合成した発光材料を用いたデバイスの作成とそれらの特性・性能の検証を行う（中澄グループ，内藤グループ）．

この目的のために毎年複数回の研究会・シンポジウムを開催する．

5 設置期間 2008 年 5 月 1 日 ～ 2011 年 3 月 31 日

研究組織の概要等 (学部・学科間の関係、役割分担等について図などを交えてわかりやすく説明すること。)

本研究所は、下記の様に、大学院2研究科3専攻4グループを中心とする。分子設計を重視するのが特徴で、小関グループは理論的観点からその中心となる。さらに、水野・池田グループと中澄グループは、有機合成化学の観点から、内藤グループはデバイス評価の観点から分子設計に参画する。その後、発光材料の合成と特性評価は、水野・池田グループと中澄グループ、中澄グループと内藤グループはデバイスの作成と特性評価を中心に研究を行う。これまで単独で研究を推進してきたこれらグループが、本研究所によって組織化されて議論を深めることにより、新たな共同研究が展開できる。最終的には大阪府立大学から新概念を有する高性能な分子エレクトロニックデバイスの発信に繋がると期待される。



分子エレクトロニックデバイス研究所 研究組織表				
		発光材料の 理論的分子設計	発光材料の合成 と特性評価	デバイスの作成 と特性評価
院理, 分子化学専攻	小関グループ	◎		
院工, 物質・化学系専攻	水野・池田グループ	○	◎	
院工, 物質・化学系専攻	中澄グループ	○	◎	○
院工, 電子・数物系専攻	内藤グループ	○		◎

研究計画等 (初年度の研究計画、活動計画、運営方針等についてわかりやすく説明すること。)

立ち上げ初年度としては情報交換を主目的とし、複数回の研究会を開催する。外部からも研究者を招聘し、活発な意見交換を行い、研究の企画・実施をめざす。

1	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 小関史朗</p> <p>①専門領域 理論化学・計算化学</p> <p>②研究所における役割分担 材料分子の理論的設計と全体の取りまとめ</p> <p>③主な業績 (http://fock.c.s.osakafu-u.ac.jp/~shiro/papers.html 参照)</p> <ul style="list-style-type: none"> • M. W. Schmidt, M. S. Gordon, <u>S. Koseki</u>, et al. <i>J. Comp. Chem.</i>, 1993, <i>14</i>(11), 1347. • N. Matsunaga and <u>S. Koseki</u>, <i>Rev. Comp. Chem.</i> ed. by K. B. Lipkowitz, R. Larter, and T. R. Cundari, Indiana U.-Purdue U. at Indianapolis (IUPUI), 2004, Vol.20, Chapter 2, pp.101-152. • <u>S. Koseki</u>, T. Matsushita, and M. S. Gordon, <i>J. Phys. Chem. A</i>, 2006, <i>110</i>(7), 2560. • T. Matsushita, T. Asada, and <u>S. Koseki</u>, <i>J. Phys. Chem. A</i>, 2006, <i>110</i>(49), 13295. • T. Matsushita, T. Asada, and <u>S. Koseki</u>, <i>J. Phys. Chem. C</i>, 2007, <i>111</i>, 6897.
2	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 麻田俊雄</p> <p>①専門領域 理論化学・計算化学・シミュレーション</p> <p>②研究所における役割分担 材料分子の理論的設計とシミュレーション</p> <p>③主な業績 (http://fock.c.s.osakafu-u.ac.jp/~asada/参照)</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>T. Asada</u>, S. Takitani, and S. Koseki, <i>J. Phys. Chem. A</i>, 2005, <i>109</i>(9), 1821. • <u>T. Asada</u>, T. Takahashi, and S. Koseki, <i>Theoret. Chem. Acc.</i>, 2007, in print. http://www.springerlink.com/content/d6312254k3624253/を参照. • <u>T. Asada</u>, S. Nagase, K. Nishimoto, and S. Koseki, <i>J. Phys. Chem. B</i>, 2008, <i>112</i>, in print.
3	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 内藤裕義</p> <p>①専門領域 有機エレクトロニクス</p> <p>②研究所における役割分担 有機デバイスのデバイス物理およびデバイス評価</p> <p>③主な業績</p> <ul style="list-style-type: none"> • N. Matsusue, S. Ikame, Y. Suzuki, and <u>H. Naito</u>, <i>Appl. Phys. Lett.</i> 85, 4046 (2004). • M. Marusaki, <u>H. Naito</u>, Y. Matsuura, and K. Matsukawa, <i>Appl. Phys. Lett.</i>, 86, 191907 (2005). • Y. Shimizu, T. Kobayashi, T. Nagase, and <u>H. Naito</u>, <i>Appl. Phys. Lett.</i> 91, 141909 (2007).
4	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 小林隆史</p> <p>①専門領域 物性物理学</p> <p>②研究所における役割分担 各種分光測定</p> <p>③主な業績</p> <ul style="list-style-type: none"> • S. Ikame, <u>T. Kobayashi</u>, S. Murakami, and H. Naito, <i>Phys. Rev. B</i> 75, 035209 (2007). • H. Azuma, <u>T. Kobayashi</u>, Y. Shim, N. Mamedov, H. Naito, <i>Organic Electronics</i> 8, 184 (2007). • T. Endo, <u>T. Kobayashi</u>, T. Nagase, H. Naito, <i>Jpn. J. Appl. Phys.</i> 46, L1093 (2007). • J. C. Ribierre, T. Aoyama, <u>T. Kobayashi</u>, T. Sassa, T. Muto, and T. Wada, <i>J. Appl. Phys.</i> 102, 033106 (2007).

5	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 永瀬 隆</p> <p>①専門領域 分子エレクトロニクス、ナノエレクトロニクス</p> <p>②研究所における役割分担 単一分子デバイス、有機デバイスの電気特性評価</p> <p>③主な業績</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>T. Nagase</u>, K. Gamo, T. Kubota and S. Mashiko, <i>Microelectron. Eng.</i> 78-79, 253 (2005). • <u>T. Nagase</u>, K. Gamo, T. Kubota, and S. Mashiko, <i>Thin Solid Films</i> 499, 279 (2006). • Y. Noguchi, <u>T. Nagase</u>, R. Ueda, T. Kamikado, T. Kobota, and S. Mashiko, <i>Jpn. J. Appl. Phys.</i> 46, 2683 (2007).
---	---

6	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 水野一彦</p> <p>②専門領域 有機光化学・有機合成化学・有機金属化学</p> <p>③研究所における役割分担 蛍光性芳香族化合物の光反応性の検討</p> <p>④主な業績 (http://www.chem.osakafu-u.ac.jp/ohka/ohka5/papers.html 参照)</p> <ul style="list-style-type: none"> • Hayamizu, T.; Maeda, H.; <u>Mizuno, K.</u> <i>J. Org. Chem.</i> 2004, 69(15), 4997–5004. • <u>Mizuno, K.</u>; Tachibana, Y.; Konishi, G.; Chiyonobu, K.; Maeda H. <i>J. Chin. Chem. Soc.</i> 2006, 53(1), 75–78. • Ohashi, M.; Maeda, H.; <u>Mizuno, K.</u> <i>Chem. Lett.</i> 2006, 35(5), 482–483. • Mukae, H.; Maeda, H.; Nashihara, S.; <u>Mizuno, K.</u> <i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i> 2007, 80(6), 1157–1161. • Tamai, T.; Watanabe, M.; Maeda, H.; <u>Mizuno, K.</u> <i>J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.</i> 2008, 46(4), 1470–1475.
7	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 池田 浩</p> <p>②専門領域 有機光化学・電子移動化学・発光化学</p> <p>③研究所における役割分担 熱発光機構の解明と有機ラジカル EL への応用研究</p> <p>④主な業績 (http://www.chem.osakafu-u.ac.jp/ohka/ohka5/ikeda/list_of_pub.html 参照)</p> <ul style="list-style-type: none"> • <u>Ikeda, H.</u>; Akiyama, K.; Takahashi, Y.; Nakamura, T.; Ishizaki, S.; Shiratori, Y.; Ohaku, H.; Goodman, J. L.; Houmam, A.; Wayner, D. D. M.; Tero-Kubota, S.; Miyashi, T. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2003, 125, 9147–9157. • Namai, H.; <u>Ikeda, H.</u>; Hoshi, Y.; Mizuno, K. <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2007, 46, 7396–7398. • <u>Ikeda, H.</u>; Hoshi, Y.; Namai, H.; Tanaka, F.; Goodman, J. L.; Mizuno, K. <i>Chem. Eur. J.</i> 2007, 13, 9207–9215. • Namai, H.; <u>Ikeda, H.</u>; Hoshi, Y.; Kato, N.; Morishita, Y.; Mizuno, K. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2007, 129, 9032–9036. • Ikeda, T.; <u>Ikeda, H.</u>; Takahashi, Y.; Yamada, M.; Mizuno, K.; Tero-Kubota, S.; Yamauchi, S. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2008, 130, 2466–2472.

8	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 前多 肇</p> <p>②専門領域 有機合成化学・有機光化学・有機ケイ素化学</p> <p>③研究所における役割分担 発光性有機ケイ素化合物の設計と合成</p> <p>④主な業績 (http://www.chem.osakafu-u.ac.jp/ohka/ohka5/maeda.html 参照)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ <u>Maeda, H.</u>; Nishimura, K.; Mizuno, K.; Yamaji, M.; Oshima, J.; Tobita, S. <i>J. Org. Chem.</i> 2005, 70(24), 9693–9701. ・ <u>Maeda, H.</u>; Maeda, T.; Mizuno, K.; Fujimoto, K.; Shimizu, H.; Inouye, M. <i>Chem. Eur. J.</i> 2006, 12(3), 824–831. ・ <u>Maeda, H.</u>; Nanai, Y.; Mizuno, K.; Chiba, J.; Takeshima, S.; Inouye, M. <i>J. Org. Chem.</i> 2007, 72(23), 8990–8993.
---	---

9	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 中澄博行</p> <p>②専門領域 有機材料化学・機能性色素化学</p> <p>③研究所における役割分担 有機色素系発光材料の開発</p> <p>④主な業績</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ <u>中澄博行</u>, 八木繁幸, <i>有機合成化学協会誌</i>, 2008, 印刷中. ・ S. Yagi, T. Ohta, N. Akagi, and <u>H. Nakazumi</u>, <i>Dyes and Pigm.</i>, 2008, 77, 525-536. ・ T. Hayashi, X. Xao, H. Fujiwara, T. Sugimoto, <u>H. Nakazumi</u>, S. Noguchi, and H. Aruga-Katori, <i>Inorg. Chem.</i>, 2007, 46, 8478-8480. ・ <u>H. Nakazumi</u>, T. Ohta, H. Etoh, T. Uno, C. L. Colyer, Y. Hyodo, and S. Yagi, <i>Syn. Metals</i>, 2005, 153, 33-36. ・ <u>H. Nakazumi</u>, C. L. Colyer, K. Kaihara, S. Yagi and Y. Hyodo, <i>Chem. Lett.</i>, 2003, 32, 804-805.
---	--

10	<p>研究員の概要</p> <p>①氏名 八木繁幸</p> <p>②専門領域 有機合成化学・機能性色素化学・超分子化学</p> <p>③研究所における役割分担 有機デバイス用機能性 π 電子系材料の開発</p> <p>④主な業績</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ <u>S. Yagi</u> and H. Nakazumi, <i>Top. Heterocycl. Chem.</i>, ed. by L. Strekowski, Springer-Verlag, Heidelberg, in press (2008). ・ <u>S. Yagi</u>, Y. Hyodo, M. Hirose, H. Nakazumi, Y. Sakurai, and A. Ajayaghosh, <i>Org. Lett.</i>, 2007, 9, 1999-2002. ・ <u>S. Yagi</u> and H. Nakazumi, <i>Functional Dyes</i>, ed. by S.-H. Kim, Elsevier, Oxford, Chapter 6, pp. 215-255 (2006). ・ M. Ezoe, <u>S. Yagi</u>, H. Nakazumi, M. Itou, Y. Araki and O. Ito, <i>Tetrahedron</i>, 2006, 62, 2501-2510. ・ S. W. Thomas III, <u>S. Yagi</u> and T. M. Swager, <i>J. Mater. Chem.</i>, 2005, 15, 2829-2835.
----	--

7 研究所の運営にかかる経費の概要

初年度の平成 20 年度は 2 回ほどの研究会を開催する予定。経費は共催等により補填する予定である。

8 参考となる書類の添付

- ・ 「研究所名」に係る運営等に関する事項を記した書類（運営要綱等）。
- ・ その他、参考となる資料。

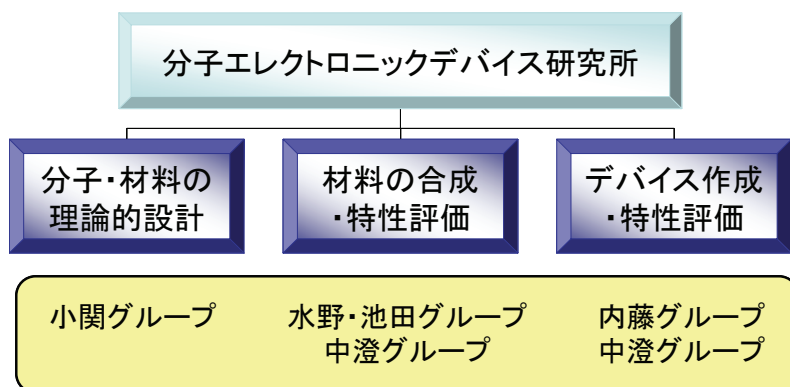
別紙（研究所概要と研究所運営要綱）を添付する。

21 世紀科学研究所

分子エレクトロニックデバイス研究所 設置要綱

○設置目的

近年のデバイス開発には分子レベルでの研究が必須である。特に近年は有機 EL ディスプレイに注目が集まっており，その材料の性能向上のために分子レベルでの研究が多数行われている。分子レベルでの理論設計および解析，合成および実験解析，デバイス設計および評価の三本柱で新規機能性材料の研究を進めていくために本研究所を組織するものである（下図参照）。有機 EL デバイスに用いるための発光材料（分子）の設計と合成，およびそれらを用いた有機 EL デバイスの作成と評価を行うことを設置当初の目的とする。さらに，有機 EL デバイスにとどまらず，分子レベルでの多種多様なデバイス設計・開発を目的とし，発展的共同研究をめざす。



○研究内容の概要

次の三本柱を基に共同研究開発を企画・実施する。

- (1) 理論計算およびシミュレーションをもとに発光材料の理論的設計を分子レベルで行う（小関グループ）。
- (2) 発光材料の合成とそれらの化学的・物理的特性の評価を行う（水野・池田グループ，中澄グループ）。
- (3) 合成した発光材料を用いたデバイスの作成とそれらの特性・性能の検証を行う（内藤グループ，中澄グループ）。

この目的のために毎年複数回の研究会・シンポジウムを開催する。

○研究員リスト

大学院理学系研究科	分子科学専攻	教 授・小関史朗
大学院理学系研究科	分子科学専攻	准教授・麻田俊雄
大学院工学研究科	電子・数物系専攻	教 授・内藤裕義
大学院工学研究科	電子・数物系専攻	助 教・小林隆史
大学院工学研究科	電子・数物系専攻	助 教・永瀬 隆
大学院工学研究科	物質・化学系専攻	教 授・水野一彦
大学院工学研究科	物質・化学系専攻	准教授・池田 浩
大学院工学研究科	物質・化学系専攻	助 教・前多 肇
大学院工学研究科	物質・化学系専攻	教 授・中澄博行
大学院工学研究科	物質・化学系専攻	准教授・八木繁幸

○研究所連絡先

学部・分野等 大学院理学研究科 分子科学専攻 理論化学・計算化学研究室
電話番号 072-254-9702

2008 年 5 月 1 日

21 世紀科学研究所

分子エレクトロニックデバイス研究所 設置要綱

(趣旨)

- 第 1 条 本要綱は、大阪府立大学 21 世紀科学研究所の設置および運営に関する実施要領
第 2 条第 1 項の規定に基づいて設置する「分子エレクトロニックデバイス研究所」
(以下、「研究所」という)の運営に関し、必要な事項を定める。

(設置目的)

- 第 2 条 研究所の設置目的は次のものとする。
- (1) 理論計算およびシミュレーションをもとに発光材料の理論的設計を分子レベルで行う。
 - (2) 発光材料の合成とそれらの化学的・物理的特性の評価を行う。
 - (3) 合成した発光材料を用いたデバイスの作成とそれらの特性・性能の検証を行う。

(運営組織)

- 第 3 条 研究所に次のスタッフを置く。

- (1) 教 授
- (2) 准教授
- (3) 助 教
- (4) 客員研究員

- 第 3 条の 2 研究所長は、大阪府立大学に本籍を置き本研究所の研究員である者の中から互選する。

(任期)

- 第 4 条 研究所長の任期は、3 年以内とする。ただし、再任は妨げない。

(設置場所)

- 第 5 条 研究所は、研究所長の研究室に置く。

(運営会議)

- 第 6 条 研究所の運営に関する事項を審議するため、研究所運営会議（以下、「運営会議」という）を置く。

- 第 6 条の 2 委員会は次の者をもって組織する。
本研究所に所属する教授、准教授、助教、研究員。

(雑則)

- 第 7 条 この要綱に定めるもののほか、研究所の管理運営に関し必要な事項は、運営会議で定める。

附則

(施行期日)

- 1 この規則は、2008 年 5 月 1 日から施行する。