

## 【基盤研究(S)】

理工系 (化学)



### 研究課題名 曲面状 $\pi$ 共役分子の新しい有機化学と材料科学

京都大学・化学研究所・教授

やまご しげる  
山子 茂

研究課題番号：16H06352 研究者番号：30222368

研究分野：有機化学

キーワード：有機合成化学、超分子、ナノカーボン材料

#### 【研究の背景・目的】

フラーレン、カーボンナノチューブ (CNT) など曲面を持つ環状  $\pi$  共役化合物の多くは、優れた電気的特性や光物性を有し、有機電子材料の基盤物質群として興味深い。しかし、そのバルク量での入手は物理的合成法に限られるため、入手可能な基本骨格は大きく限られている。さらに、混合物として得られるため、煩雑な分離・精製が必要である。このため、分子設計に基づく機能・物性の精密化には限界がある。したがって、環状・曲面構造を持つ  $\pi$  共役分子を自由にかつ選択的に合成し、大量に供給できれば、そのインパクトは計り知れない。

代表者は、アームチェア型 CNT の環状最小構成単位であるシクロパラフェニレン (CPP) に着目し、独自の合成法の開発により、大量合成法の確立に成功している。本研究では CPP 類の材料科学への応用を念頭に、新奇曲面  $\pi$  共役分子の高効率・大量合成法の開発を基礎として、得られた化合物の階層化による高次構造体の形成による機能化と、得られた化合物の基礎物性の測定を通じ、有機デバイスへの応用への発展を図る。これらの研究を通じ、曲面  $\pi$  共役分子の有機化学と材料科学の新領域を切り拓くことを目的とする。

#### 【研究の方法】

本研究では主に以下の四項目について検討する。

- ①曲面  $\pi$  共役分子の合成：従来法の発展及び入手容易な CPP の変換法の開発により、 $\pi$  共役系を拡張、および官能基を導入した環状  $\pi$  共役分子群を合成する方法の開発を行う。
- ②曲面  $\pi$  共役分子の階層化：代表者が解明した CPP のホスト・ゲスト化学や配位化学に基づき、①で得た分子をはじめとする環状  $\pi$  共役分子の階層構造の構築と機能化を行なう。

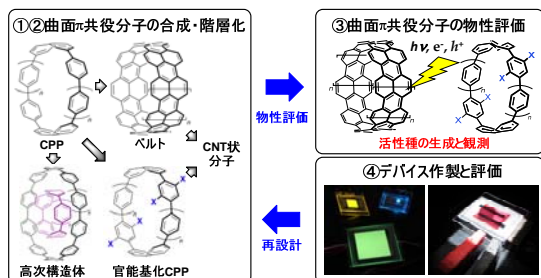


図 1. 主な研究の概要

③曲面  $\pi$  共役分子の物性評価：①②で得た分子の励起状態、酸化還元状態等の不安定状態の物性を、フラッシュフォトリソスやパルスラジオリソス等の時間分解分光法と理論計算を用いて明らかにする。

④デバイス作製と評価：CPP 誘導体を含む曲面  $\pi$  共役分子を有機デバイスに応用した例は皆無である。そこで理論と実験の両面から CPP の分子構造—凝集構造—物性間の相関を解明するため電荷輸送解析計算や電荷移動度の実測、凝集構造の解析を行なう。

#### 【期待される成果と意義】

機能性材料創製の鍵分子である  $\pi$  共役分子の物性向上のために、様々な官能基や置換様式を持つ分子が合成されている。このような研究では既存の母骨格の修飾も重要な研究課題であるが、新奇骨格・構造を持つ  $\pi$  共役分子の創製はより大きな可能性を秘めた、基礎科学における極めて重要な課題である。本研究では、独創的な合成法と新奇性の高いホスト・ゲスト化学に基づき、新しい曲面構造を持つ  $\pi$  共役分子群と高次構造体を創出し、その基礎物性を解明すると共に、デバイスへの応用を目指す。これにより、有機化学の新分野の創出に加え、新しい有機電子材料の可能性を拓くことが期待され、材料科学分野にも強いインパクトを与えるものと確信している。さらに、これらの分子が材料として実用化されることで、社会にも大きく貢献できると考えている。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- “Organoplatinum-Mediated Synthesis of Cyclic  $\pi$ -Conjugated Molecules: Towards a New Era of Three-Dimensional Aromatic Compounds”, S. Yamago, *et al. Chem. Rec.*, **14**, 84-100 (2014).
- “Cycloparaphenylenes and carbon nanorings”, S. Yamago, *et al. Polycyclic Arenes and Heteroarenes: Synthesis, Properties, and Applications*, Qian, M. Ed., John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK, 2015, pp143-162.

#### 【研究期間と研究経費】

平成 28 年度—32 年度 145,600 千円

#### 【ホームページ等】

<http://os.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>  
[yamago@scl.kyoto-u.ac.jp](mailto:yamago@scl.kyoto-u.ac.jp)