（様式４）

二国間交流事業 共同研究報告書

令和 5 年 4 月 17 日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

［日本側代表者所属機関・部局］
京都大学・大学院工学研究科
［職・氏名］
教授・関 修平
［課題番号］
JPJSBP 120209401

1. 事 業 名 相手国: トルコ (振興会対応機関: TUBITAK)との共同研究

2. 研究課題名

（和文） 2次元共役規則構造: COF を中心とした界面超構造の物性制御

（英文） Development of Electroactive Conjugated Organic Framework Superstructures

3. 共同研究実施期間 2020 年 4 月 1 日 ～ 2023 年 3 月 31 日 (3 年 0 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Scientific and Technological Research Council of Turkey
(TUBITAK)・Associate Professor・Erdal Ertas

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		4,750,000 円
内訳	1年度目執行経費	2,375,000 円
	2年度目執行経費	2,375,000 円
	3年度目執行経費	円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	9 名
相手国側参加者等	2 名

＊ 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1 年度目	0	0	0(0)
2 年度目	0	0	0(0)
3 年度目	0	0	0(0)

＊ 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。

受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

本研究「2次元共役規則構造: COF を中心とした界面超構造の物性制御」では, 1)発達した電子共役構造を有する2次元高分子を新たに設計・合成し, 2)この構成ユニットの有する 1 次・2 次構造を系統的に制御し, 3)これが積層構造を構成する際に形成する界面超構造に着目し, 4)国際共同研究の枠組みで電子輸送特性の迅速診断〜構造最適化のループを世界最速で達成し, 5)励起子-電子輸送能・電荷分離界面最適化を志向した材料設計へつなげることを目的として研究を進めた.

研究開始が2020年度となり, 研究全期間を通じ, COVID-19 による国際的な人の往来の制限を受け, 実際の研究者の相互訪問は現段階まで行われていないが, 新たな共同研究立案により2023年に改めて相互訪問を実施することとなった. 上記の研究目的は, 京都大学・Marmara Research Centre 間において, それぞれ物性評価・標的化合物の設計と合成に関する分業体制が確立されていたため, 人的な交流を経ずとも2次元高分子の電子輸送・励起子拡散に関する評価を十分に行うことができた.

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

研究目的 1)発達した電子共役構造を有する2次元高分子を新たな設計・合成では, 特にπ共役高分子の基本骨格構造をリンカーとして有し, β-ketoenamine 型の結合を介したコア分子を中心とした発達共役型平面状高分子の合成を進めた. 研究目的 2)1 次・2 次構造を系統的な制御では, リンカー中のアントラセンユニットの結合回転角を精密に制御することによって, 2次元平面構造だけでなく, その3次元積層構造を顕著に変化させることが可能であることを明らかにした. 研究目的 3)積層構造形成における界面超構造においては, 構造体内界面の光エネルギーを端緒とする触媒的化学反応の制御と, 面内・面間における電子輸送特性の最適化に取り組み, 最終的に従来の分子性有機半導体材料に比肩・凌駕する共役2次元 COF の提案を行った. 研究目的 4)国際共同研究の枠組み無くして本研究の推進は考えられず, 研究目的 5)励起子-電子輸送能・電荷分離界面最適化を, 上述の光エネルギーの化学変換をその出口として実証することにつなげた.

全体として, 本研究で得られた共役二次元 COF に関する研究成果は, 化学的安定性・電子材料特性の協奏のための重要な分子設計指針を与えるだけでなく, その電子特性制御における最重要因子を見極めるための重要な知見を与えたと考えている.

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

トルコ・TUBITAK Erdal Ertas 博士は COF の設計・合成に関する第一人者であり, 当初 TUBITAK・京都大学において設計・合成と物性評価・制御の徹底した分業体制により研究計画を立案した. 研究初期においては, COF 試料の授受のみによって当初計画の研究を十分に遂行でき, COVID－19の影響を最小限に食い止めることができたが, 長らく続く国際交流の停止により, 評価により COF 化学構造の最適化と再合成に遅延が感じられるようになった. 本研究では, これを TUBITAK の協力の下, 京都大学で迅速再合成を行うことで解決し, 結果として発達した共役構造を有する2次元 COF の迅速合成と基礎物性評価を京都大学内で行い, 物性評価ののち, 構造フィードバックサイクルを回すシステムを確立することができた. 3年目の延長に伴い, 最終段階で相互訪問を計画していたが, 国際的な人流再開の直後, トルコを襲った大地震の影響を

直接的に受け，現在までに未だ直接的な人的交流は行えていないが，それ無くしても余りある交流成果が上記のように得られたと考えている．

(4)社会的貢献（社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか）

特に研究目的 3)における構造体内界面の光エネルギーを端緒とする触媒的化学反応の制御と，面内・面間における電子輸送特性の最適化は，新しいエネルギー変換のための材料の提案として極めて重要な成果が得られたと考えている．発表された論文のひとつは，TOP5％論文に位置づけられるほど注目を集めており，現代におけるエネルギー問題解決の一助となったと考える．

(5)若手研究者養成への貢献（若手研究者養成への取組、成果）

京都大学において本研究にかかわる修士号取得者 2 名・取得見込み者 1 名，博士号取得者 1 名・取得見込み者 1 名，TUBITAK 側での研究参加者のうち学位取得者・取得見込み者 2 名を数えている．
日本側参加者の 1 名は，若手研究者として JST さきがけプログラムに採択されるなど，顕著な若手育成における貢献があった．

(6)将来発展可能性（本事業を実施したことにより、今後どの様な発展の可能性が認められるか）

研究期間中に相互訪問はかなわなかったが，2021 年リモートで行われた PACIFICHEM 国際会議において共通のシンポジウムを開催し，この議論を踏まえて新しい共同研究を 2023 年度，相互訪問のうえでスタートさせる予定である．

(7)その他（上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください）例：大学間協定の締結、他事業への展開、受賞など

本研究成果を踏まえ，JST 研究プログラムに応募を行う予定としている．また，上述の成果をもとに，発達共役 2 次元材料に関する国際研究コンソーシアムを，日本学術振興会国際先導研究などとして新たに展開する計画を検討している。