

導電性高分子の新合成法

研究者所属・職名：化学研究所・名誉教授

ふりがな おざわ ふみゆき

氏名： 小澤 文幸

主な採択課題：

- [基盤研究\(B\)「 \$\pi\$ 共役系高分子の精密合成を志向した高効率C-H結合アリール化触媒の開発研究」\(2011-2013\)](#)
- [基盤研究\(B\)「直接的アリール化重合のための混合配位子触媒の開発」\(2017-2019\)](#)

分野：合成化学

キーワード：直接的アリール化重合、混合配位子触媒、共役系高分子

課題

●なぜこの研究をおこなったのか？（研究の背景・目的）

低炭素社会の実現に向け、有機薄膜太陽電池や有機電解効果トランジスタなどの開発研究が活発に行われている。その基盤材料の一つである π 共役系高分子（導電性高分子）は、現在、パラジウム触媒クロスカップリング重合により合成されているが、原料となる有機金属モノマーの合成に労力を要し、また毒性の強い有機スズ化合物を必要とするなどの問題を抱えている。本研究では、我々が世界に先駆けて開発したパラジウム触媒直接的アリール化重合（有機金属モノマーを使わない新重合法）を用いて、これらの問題の解決を図った。

●研究するにあたっての苦労や工夫（研究の手法）

直接的アリール化重合では、炭素-水素結合の活性化を伴ってクロスカップリング反応（炭素-炭素結合の形成）が起こるが、原料モノマー中に複数存在する炭素-水素結合が非選択的に活性化されると、電子材料として使用できない生成物が生じてしまう。本研究では、混合配位子触媒とよばれる高性能触媒を開発し、この問題を解決した。

導電性高分子を含む発電層

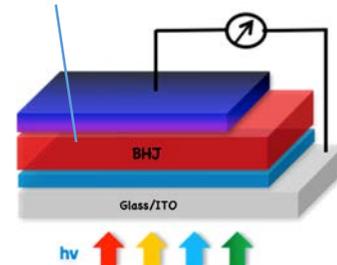


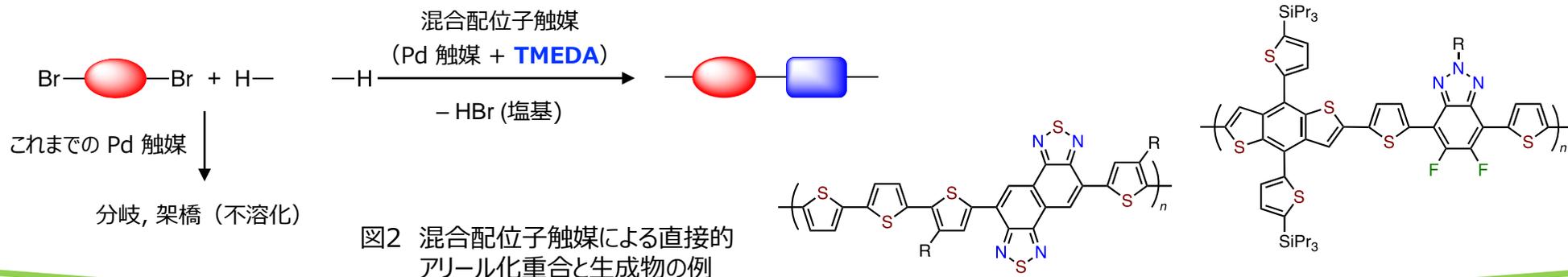
図1 有機薄膜太陽電池のイメージ図

導電性高分子の新合成法

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

本研究のはじめに開発した重合触媒系では、様々なモノマーの重合において非選択的な炭素-水素結合の活性化が起こり、ポリマー鎖に分岐や架橋が生じて生成物が不溶化した。我々は、重合過程の精密解析を行い、この触媒系に、目的生成物を与える「シスルート」と、不溶化などの副反応を引き起こす「トランスルート」が存在することを明らかにした。また、安価な配位子であるテトラエチレンジアミン (TMEDA) を触媒系に添加するだけで、トランスルートが効果的に抑制され、極めて選択性の高い重合が進行することを見出した。混合配位子触媒を用いて合成したπ共役系高分子の材料特性は、既存のクロスカップリング重合生成物に匹敵するもので、有機薄膜太陽電池の光電変換効率は最高で10%程度に達した。



今後の展望

●今後の展望・期待される効果

有機電子デバイスの高性能化をめざし、新たな分子デザインを施したπ共役系高分子が次々と合成されている。その多くは既存のクロスカップリング重合を用いたものである。直接的アリール化重合は、有機金属モノマーを必要としない簡便かつ安全性の高い高分子合成法として注目されてきたが、分岐や架橋の発生を抑制することが難しく、高機能な高分子の合成には利用されてこなかった。本研究の成果は、この状況に大きな変化をもたらすものであり、今後の材料開発を加速することが期待される。