

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	瀬川泰知
研究機関名	自然科学研究機構分子科学研究所
所属部署名	生命・錯体分子科学研究領域 錯体物性研究部門
役職名	准教授
研究課題名	革新的有機半導体を指向した周期的3次元 $\pi$ 共役構造体の創製
研究実施期間	2023年4月1日～2024年3月31日

### 研究成果の概要

本研究では、3次元に周期的に $\pi$ 共役が連なった有機構造体の系統的合成法および構造解析法を確立し、結晶性低分子半導体と高分子半導体の利点を併せもつ新たな機能性材料の創出を目的として研究を行っている。具体的には、非平面 $\pi$ 共役分子をユニットとして設計・合成し、高効率な結合形成反応によって3次元 $\pi$ 共役構造体を組み上げる。並行して、3次元的に $\pi$ - $\pi$ スタックで繋がった結晶性有機半導体材料を指向し、 $\pi$ スタック可能な面を複数もつ非平面 $\pi$ 共役分子の合成を行っている。2023年度は、多数のチオフェンをもつ非平面環状分子の合成、および高い結晶性をもつ3次元周期構造体の合成、を行った。

今回我々は、3,4位でチオフェンが5つもしくは6つ環状につながった分子の合成に初めて成功した。反応活性であるチオフェンの2,5位を無置換のまま、パラジウムを用いたカップリング反応と続くニッケルを用いたホモカップリング反応の組み合わせによって、目的の化合物が得られた。これら新規環状分子は、チオフェンを含む様々な非平面 $\pi$ 共役分子を合成するプラットフォームとなり、3次元 $\pi$ - $\pi$ スタックによる等方的なキャリア輸送材料開発へと応用が可能である。

次に、高い結晶性をもつ3次元周期構造体の合成を行った。cubic対称性をもつ3次元周期構造体のユニット候補分子として正方形分子ヘテロ[8]サーキュレンを選定し、溶解性と周期構造体形成反応が可能な部位を併せもつヘテロ[8]サーキュレンの合成に成功した。正方形分子に対して様々な重合反応を試みたところ、ある条件下において非常に高い結晶性をもつた3次元周期構造体を得られた。粉末X線回折によってcubic対称性をもつ格子であることが明らかになった。微結晶1粒のサイズが1マイクロメートル以下であるためX線結晶構造解析では放射光を用いても非常に難しいが、電子顕微鏡を用いた電子回折結晶構造解析によって3次元周期構造体の構造決定に成功した。