

2024 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

研究担当者	田中 隆行
研究機関名	京都大学大学院
所属部署名	工学研究科分子工学専攻
役職名	准教授
研究課題名	4 回対称ナノグラフェンを用いた二次元有機構造体の創出
研究実施期間	2024 年 10 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

新たなナノグラフェン化合物の創出に向け、種々の合成検討をおこなった。特に、外周部に置換基のないナノグラフェン化合物が、二次元有機構造体のビルディングブロックとして有用であると考え、一般性が高く大量合成が可能な合成法を模索した。1つの成功例として、ジアザジオキサ[8]サーキュレンの周辺部に置換された tert-ブチル基や N-フェニルエチル基を、サーキュレン骨格形成後にそれぞれ脱離されることにより無置換分子を合成することに成功した。得られた無置換体は特徴的な発光スペクトルを示し、理論計算によるシミュレーションからその帰属をおこなった。現在、同様の合成戦略を利用して新たな 4 回対称性分子の合成を検討中である。

また、大環状化合物に対する酸化的縮環反応により、新たなナノグラフェン化合物が得られることをこれまで明らかにしてきた。チオフェンとピロールから成るオルトフェニレン架橋環状十量体に対する酸化的縮環反応では、アザヘリセンのシクロファン型二量体が選択的に得られることがわかり、その構造や溶液中での動的挙動について解析した。この分子はナノグラフェンフラグメントの積層二量体の構造モデルとみなすことができ、層間相互作用について吸収および発光スペクトル測定により解析した。その他、これに似たナノグラフェン二量体やドナーアクセプタ型多量体モデルについて、単結晶 X 線結晶構造解析や DFT 計算などを用いて詳しく検討中である。