

京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書

令和3年 4月 30日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団

会 長 藤 洋 作 様

所 属 部 局 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点

職 名 教授

氏 名 深澤 愛子

助 成 の 種 類	令和2年度 ・ 研究活動推進助成			
申請時の科研費 研究 課 題 名	非ベンゼン系共役電子系の特性を生かした革新的な有機光・電子材料の創出			
上記以外で助成金を 充 当 した 研 究 内 容	なし			
助成金充当に関 わる共同研究者	(所属・職名・氏名) なし			
発表学会文献等	[1] J. Usuba, M. Hayakawa, S. Yamaguchi, A. Fukazawa, <i>Chem. Eur. J.</i> 2021 , <i>27</i> , 1638-1647. [2] 砂山, 田巻, 早川, 山口, 深澤, 日本化学会第101春季年会 A17-1am-04, 2021年3月19日. [3] 薄葉, 深澤, 日本化学会第101春季年会 A17-3pm-05, 2021年3月21日.			
成 果 の 概 要	研究内容・研究成果・今後の見通しなどについて、簡略に、A4版・和文で作成し、添付して下さい。(タイトルは「成果の概要／報告者名」)			
会 計 報 告	交付を受けた助成金額	1,000,000	円	
	使用した助成金額	1,000,000	円	
	返納すべき助成金額	0	円	
	助成金の使途内訳	費 目	金 額	
		試薬購入費	525,690	
		実験器具, 消耗品購入費	208,350	
		寒剤購入費	27,716	
実験廃棄物処理費		37,620		
英文校閲サービス利用料	200,624			
当財団の助成に つ い て	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。) 貴財団の助成金に採択していただいたおかげで何とか研究実験を実施することができ、令和2年度の学術変革領域研究(A)計画研究、および令和3年度科研費・基盤研究(B)の採択につなげることができました。心より御礼申し上げます。また、他の民間財団の研究助成と異なり、申請や報告書の作成にかかる労力が少ないため、研究時間の確保につながりました。基礎研究を継続するためのセーフティーネットとして、大変ありがたく思いました。			

成果の概要／深澤愛子

(研究課題名: 非ベンゼン系共役電子系の特性を活かした革新的な有機光・電子材料の創出)

1. 研究内容

本研究では、基礎科学と材料科学の両面にブレイクスルーをもたらす新しい光・電子機能性有機材料を生み出すことを究極のゴールに設定し、非ベンゼン系共役電子系の特徴を凝集系での突出した光・電子機能性へ結びつけることを目的に研究に取り組んだ。「非ベンゼン系共役電子系の特徴を真に優れた物性や機能に結びつけるためには、どのような分子設計を施せばよいか」という学術的「問い」のもと、独自の分子設計をもとに未踏物性や機能の探求に取り組んだ。本助成期間においては、(1) かさ高い置換基をもたない安定な反芳香族化合物の創出と分子間相互作用や物性の解明、(2) π 拡張型ペンタフルバレンの合成と突出した電子受容性の開拓に取り組んだ。

2. 研究成果

(1) かさ高い置換基をもたない安定な反芳香族化合物の創出と物性探究

かさ高い置換基をもたない種々の 8π 電子系ジチエノ[*a,e*]ペンタレンの合成に成功し、芳香性の低い芳香環であるチオフェンを $4n\pi$ 電子系に縮環させることにより、強力な反芳香族性と高い熱安定性を兼ね備えた反芳香族化合物の創製が実現できることを示した。さらに、親水性の側鎖をもつ誘導体の一つが、溶液中での自発的な会合体形成によりサーモクロミズムを示すことを見出した^[1]。

上記の知見をさらに発展させ、ペンタレンの C=C 結合の一部を C=N 結合に置き換えたチオフェン縮環型 1,4-ジアザペンタレン(TAP)の合成に成功した。本化合物は、優れた電子求引基である C=N 結合により高い電子受容性を有していることに加え、剛直な 4 環式平面骨格の外周部に C-H 結合を 4 つしかもたないため、高密度な積層に極めて有利な特徴を備えている。実際に、結晶構造解析により、TAP が面間距離 3.3 Å を下回る密な積層構造を形成することを明らかにした。また、理論計算の結果、高密度な積層構造の形成には C=N 結合の導入による交換反発力の軽減が重要であることを確認した^[2]。

(2) π 拡張型ペンタフルバレンの合成と突出した電子受容性の開拓

フラレン類に匹敵する電子受容性と多電子還元に対する堅牢性をあわせもつ π 電子系を、異なるトポロジーをもつ分子骨格で実現することを目指し、ペンタフルバレン同士が直接連結した π 共役オリゴマーおよびポリマーを独自に設計した。第一歩として、オリゴマーの合成法の確立に取り組み、ベンゼン縮環部位をもつペンタフルバレンの二量体、三量体を微量ながら得ることに成功した。電気化学測定の結果、二量体はフラレン C_{60} に迫る還元電位をもつだけでなく 4 段階の可逆な酸化還元過程を示し、少なくとも 4 電子還元体まで安定に存在し得ることが実験的に確認された^[3]。

[1] J. Usuba, M. Hayakawa, S. Yamaguchi, A. Fukazawa, *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 1638–1647.

[2] a) J. Usuba, A. Fukazawa, *manuscript in preparation*. b) 薄葉, 深澤, 日本化学会第 101 春季年会 A17-3pm-05, 2021 年 3 月 21 日.

[3] 砂山, 田巻, 早川, 山口, 深澤, 日本化学会第 101 春季年会 A17-1am-04, 2021 年 3 月 19 日.

3. 今後の見通し

上述の予備的成果は「非ベンゼン系共役電子系の特徴を真に優れた物性や機能に結びつけるためには、どのような分子設計を施せばよいか」という学術的問いに明確な道筋をつけたものであると位置付けられ、これらをもとにした研究提案が令和3年度科研費補助金・基盤研究(B)に採択された。従来のベンゼン系共役電子系では極めて実現が困難であった光・電子機能への挑戦を念頭に、強力に研究を展開していく予定である。