

**京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書**

2021 年 4月 26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 京都大学大学院工学研究科

職 名 助教

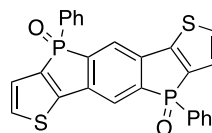
氏 名 東野 智洋

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	ヘテロールの特徴を組み合わせたハイブリッド型分子の創成と機能開拓			
上記以外で助成金 を 充 当 した 研 究 内 容				
助成金充当に関 わる共同研究者	(所属・職名・氏名)			
発表学会文献等	(この研究成果を発表した学会・文献等) 石田圭一、東野智洋、今堀博、「ヘテロール縮環構造の精密導入によるチオフェン縮環ナフトジホスホールの物性制御」、日本化学会第101春季年会(オンライン) Ishida, K.; Higashino, T.; Wada, Y.; Kaji, H.; Saeki, A.; Imahori, H. <i>Chempluschem</i> 2021 , <i>86</i> , 130-136.			
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	
		消耗品費	985,000	
		諸会費	15,000	
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。) この度は本助成によりご支援していただき、ありがとうございました。貴財団からのご支援のおかげで当該研究を継続でき、原著論文投稿・掲載へとつなげることができました。科研費が不採択となったときにも研究の遂行を継続できるようにご助力いただける本助成は、大変貴重な事業であり、今後も継続していただければ幸いです。			

成果の概要／東野智洋

π 共役分子は、その π 電子系に由来する光吸収・発光特性や磁性、刺激に応答して色が変化する各種クロミズムなど、多様な性質を発現しうるため、新規 π 共役分子の開発が精力的に進められている。近年では π 電子系に硫黄 (S) やリン (P) といった典型元素を導入することにより、典型元素同士の相互作用や構造の柔軟性、電荷の分極などの構造的・電子的特徴を活用し、多様な π 共役機能性分子が実現されてきた。例えば硫黄原子を含むチオフェンを活用した分子が高い正孔輸送能と安定性を両立させた p 型有機半導体として有望視されているだけでなく、リン原子を含むホスホールを活用した分子は高い電子受容性や発光性を有するため、電子輸送材料や発光材料として期待されている。

このような背景のもと、我々は 2019 年に硫黄原子とリン原子の両方を導入したチオフェン縮環ベンゾジホスホール (BDP) 分子 (図 1) の合成を報告し、硫



黄原子とリン原子の両方の特徴を兼ね備えた、機能性材料として有望な分子であることを明らかにした^[1]。そこで、BDP 分子の中央のベンゼン環を異なる芳香環に置き換えることで、硫黄原子とリン原子の特徴を兼ね備えた、様々な機能性分子を実現できると考え、本研究ではナフタレンに置き換えたチオフェン縮環ナフトジホスホール (NDP) 分子に着目した。NDP 分子では、ホスホール骨格の導入位置および向きにより、3 つの異性体が考えられる (図 2)。ホスホール骨格の導入位置・向きを精密にデザインすることによって π 共役分子としての性質を制御することが可能であるため、これらの異性体を選択的に合成する手法を確立し、 π 共役分子の物性制御を実現することを目指した。

実際に 3 つの異性体を合成し、その光物性について評価した結果、NDP1 では項間交差が促進されて励起三重項が生じてい

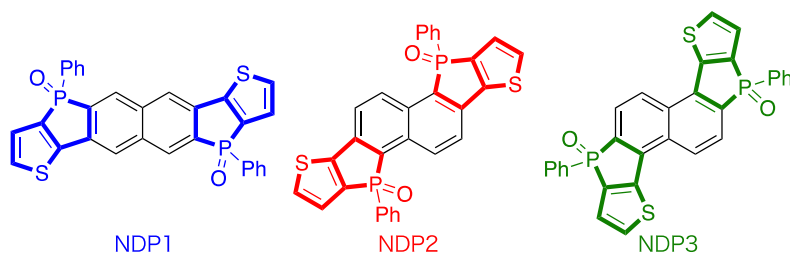


図2. チオフェン縮環ナフトジホスホール分子

る一方、NDP2、NDP3 では比較的強い蛍光を示し、励起三重項は生じていないことがわかった。また、固体状態では NDP2 が電荷輸送に適しているとされるヘリンボーン構造を形成する一方、NDP3 は籠状の空間を形成することも明らかにした。さらに、ヘリンボーン構造に由来して、NDP2 が最も高い電荷輸送特性を示すことも見出した。これらの結果から、ホスホール骨格の導入位置・向きを精密にデザインした分子を合成することにより、光物性や固体中における分子配列、電荷輸送特性といった物性の制御を実現した。

1) Higashino, T.; Ishida, K.; Sakurai, T.; Seki, S.; Konishi, T.; Kamada, K.; Imahori, H. *Chem. Eur. J.* **2019**, *25*, 6425–6438.