

京都大学教育研究振興財団助成事業  
成 果 報 告 書

2022 年 4 月 5 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

職 名 特定助教

氏 名 安井 孝介

助 成 の 種 類	令和 3 年度 ・ 研究活動推進助成			
申請時の科研費 研究 課 題 名	非ベンゼン系共役分子の合成を指向した二重ラジカル環化反応の開発			
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	(この研究成果を発表した学会・文献等) 学会:日本化学会 第102春季年会(2022) 文献:近日中に報告予定.			
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	
		産業廃棄物処理費	33,880	
		研究用消耗品	816,259	
日本化学会 年会費		9,600		
備品費	140,261			
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。) 今回、私は研究推進にあたり、貴財団助成をいただくことができましたこと、心より感謝申し上げます。 本助成のおかげで研究を進めることができ、学会発表、ならびに 2022 年度の若手研究採択に至りました。 重ね重ねありがとうございました。			

## 成果の概要／安井孝介

### 研究内容

電子受容性  $\pi$  共役系を高密度で集積できれば、既存の有機材料を凌駕する電子輸送性の実現が期待される。本研究では新たな電子受容性  $\pi$  共役系の基本骨格の創出を目指し、(E)-2,2'-ジアザペンタフルバレンを設計、合成した。この分子は高い電子受容性をもつフルバレンのアルケン部位をイミンで置換した構造をもつため、平面性の高い構造と優れた電子受容性を兼ね備えた基本骨格であると期待される。

### 研究成果

(E)-2,2'-ジアザペンタフルバレンの合成については四置換オレフィンとイミンをいかに構築するかがその合成の成否を握る。これに対して、N-ヘテロ環状カルベン<sup>1</sup>の二量化を用い、四置換オレフィンを構築し、続く変換反応によりイミンを構築できることを見出した。これにより、入手容易な塩化ベンゾイル誘導体から 7 段階で合成できることがわかった。X 線結晶構造解析により分子骨格の高い平面性を明らかにした。また、電気化学測定において、両末端に 4-トリメチルシリルフェニル基をもつ誘導体の還元電位は対応するジベンゾペンタフルバレンの類縁体と比較して顕著に高電位シフトがみられ (1:  $E_{1/2} = -1.49$  V, 2:  $E_{1/2} = -1.24$  V vs Fc/Fc<sup>+</sup>)、窒素の導入により期待通り電子受容性を向上できることがわかった。さらに、ジベンゾペンタフルバレンの類縁体はほぼ蛍光を示さないのに対し、(E)-2,2'-ジアザペンタフルバレン誘導体は強い黄色蛍光を示した。

### 今後の見通し

本研究で確立した合成手法に基づいて従来法では合成が困難であったペンタフルバレンの誘導体を網羅的に合成可能となること、ひいては既存の有機材料を凌駕する電子輸送性を実現できると期待する。