

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名: ソフト π マテリアルの創製と機能発現

2. 研究代表者: 山口 茂弘(名古屋大学トランスフォーメティブ生命分子研究所 教授)

3. 中間評価結果

次世代エレクトロニクスの基盤となる光物性、電子物性において真に優れた π 共役分子を創製することを目指している。そのため、1) まったく新しい骨格をいかに創りだすか、2) その骨格を固体状態でいかに配向させ特異な物性を発現させるかに、取り組んでいる。前者については、B、S、Pなどの典型元素を用いることによるアプローチを、後者については分子配向を意識した分子設計をすすめている。

ホウ素置換ジベンゾボレピンに光を照射すると、 4π 電子環状反応が進行し、ボラタアリル 5 員環を生成するフォトクロミック反応が起こることを見出している。これは、長年追い求められてきた bora-Nazarov 反応の発見であり、カルボカチオン中間体の反応性を、等電子性のホウ素に置き換えても実現できることを示した結果である。2 つの柔軟なアルキル鎖で環化したターチオフェンが、アルキル鎖同志が対称/非対称または偶数/奇数であるかによってパッキング構造を変え、相転移挙動、ゲル化能、固体蛍光などの物性を顕著に変化させることを見出している。

2 次元に π 共役を拡張した含ホウ素多環式縮合 π 電子系の開発に成功している。平面固定化により、安定な含ホウ素 π 電子系の得られることを示し、この 2 次元ホウ素ドーピンググラフェンモデル化合物が、特異な固体構造、光物性、電気化学特性をもつことを明らかにしている。イオウを含むチオフェンが縮環した構成単位が連結したピ(チエノチオフェン)誘導体が、分子間のスタッキングによって顕著に長波長シフトした発光を示し、代表的な有機半導体であるペンタセン薄膜を凌駕する高い電荷移動度をもつことを明らかにしている。このように、多様な典型元素を含む構造体を合成し、それらの物性と分子構造、集積体構造との相関の解明をすすめている。

基底状態の構造にとどまらず、励起状態での構造をも制御する、また、集積体の集合状態の違いを積極的に光物性、電子物性へ反映させる手法を開発する、など新しい分子設計手法を開拓することを目指しており、今後の発展が期待される。

典型元素を含んだ新しい分子骨格の開発、基底状態にとどまらず励起状態までも含めた分子構造の設計、集積体構造と光物性、電子物性との相関の解明を、実験によるだけでなく、理論化学の支援を受けすすめている姿勢は高く評価される。新しい分子材料分野が確立されることを期待したい。