

平成18年度顕在化ステージ 事後評価報告書

シーズ顕在化プロデューサー所属機関名：株式会社カネカ
研究リーダー所属機関名：大阪大学
課題名：非平面 共役分子スマネンを基盤とする新規炭素材料の開発

1. 顕在化ステージの目的

C₆₀の部分構造を有するボウル状分子は共役炭素化学においてフラレン、カーボンナノチューブに続く第三の鍵物質と考えられている。我々はボウル型 共役系分子スマネンの合成に初めて成功し、誘導化が容易であること、結晶状態でスマネンが同一方向に配向し筒状に集積化することを見出した。この知見は、スマネン誘導体が電子材料として高い潜在性を有することを強く示唆している。また、ボウル構造に由来する若干の 共役系の電荷の偏りが、優れた導電性をもたらすと予想されている。本研究では、スマネンをシーズ物質として、有機半導体材料における産業的利用価値を顕在化させることを目指す。さらに、その実践的合成にも取り組む。

2. 成果の概要

大学の研究成果

ボウル型 共役系分子スマネンを基盤とする炭素材料開発を目指した。スマネンのベンジル位で 共役系が拡張された ボウル化合物を合成する簡便な方法を開発した。トリスターチエニリデン誘導体において HOMO-LUMOバンドギャップが非常に小さくなっていることを見出した。また、スマネンの針状結晶について非接触法である時間分解吸収マイクロ波伝導度測定によって移動度を測定したところ、1.0 cm²/V・Siに近い高いキャリア移動度が見られた。さらに、キャリア移動度に異方性があることも明らかになった。以上のように、スマネンが有機半導体材料として高いポテンシャルを有することを顕在化した。

企業の研究成果

ボウル型 共役系分子スマネンを基盤とする炭素材料開発を目指し、分子軌道計算を駆使したモデリングによる化合物群探索を行った。その結果、ベンジル位で 共役系が拡張した化合物群において顕著に HOMO-LUMOバンドギャップが小さくなり、有機半導体材料として適しているの見積もられた。さらに詳細なスクリーニングにより、トリスターチエニリデン誘導体においてバンドギャップが非常に小さくなると予測した。実際、この分子の合成により予測されたような小さなバンドギャップであることを見出した。以上のように、分子設計に基づき ボウル型有機半導体材料の開発が可能であることを示した。

3. 総合所見

非常に挑戦的な目標に対し、期待された成果は得られていないが、スマネンの誘導体化により、有機半導体としてのポテンシャルを確認する目標は達成した。スマネン合成法の確立に手間取ったため、工業的展開の可能性確認が遅れたが、今後の展開次第ではイノベーションの創出も期待できる。