

平成 19 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: 縮合多環構造を有する平面巨大 π 電子系有機分子を基盤とした機能性材料の開発

1. 顕在化ステージの目的

フェナレニル分子を二つ分子骨格に組み込んだビスフェナレニルや、ピラミッド型に π 電子拡張し酸素原子を導入したトリオキソトリアンギュレンは、縮合多環構造を有する 32π および 25π 電子系有機分子である。我々の独創的な発想と高度な合成手法によって見出されたこれらの分子は、空気中でも安定に取り扱うことが可能であり、多段階の両性レドックス性や結晶状態における高い積層性を有している。本研究では、これらの分子系をシーズ候補物質とし、有機半導体や二次電池活物質としての産業的利用価値を顕在化させる。また、それらの誘導体の実践的有機合成にも取り組み、効率的な合成手法を見出す。

2. 成果の概要 ※研究実施者の完了報告書より抜粋

○大学の研究成果

フェナレニル系中性ラジカル π 電子系を大きく拡張させた誘導体の設計・合成に関する研究を行った。その結果、HOMO-LUMO ギャップが 1 eV 程度の閉殻系フェナレニルや SOMO-LUMO ギャップが 0.2 eV 程度のトリオキソトリアンギュレン (TOT) 中性ラジカルの効果的な合成手法を開発した。また、各種の置換基を結合・導入した TOT 類の量子化学計算を行い、SOMO (半占軌道) のエネルギーレベルや SOMO-LUMO ギャップをそれぞれ 1.7 eV、0.3 eV 程度も置換基を選択するだけで変化させることが可能であることを明らかにし、トリイソプロピル置換体やトリメキシノ導入体の合成を完了した。

○企業の研究成果

代表的 π 共役中性ラジカルである TOT の n 型針状結晶体を用いて測定したところ、 $0.1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ の高いモビリティを有するトランジスタ特性が確認できたことは、今後の有機半導体の応用分野の展開に影響を与える結果である。

蓄電デバイスへの応用に関しては、試料の取扱量の制限もあって二次電池の信頼性の確認ができるまでには至らなかったが、取り扱った TOT (t-ブチル置換体) は、CV 測定の結果から 4 段階の酸化還元波が観測されており、高容量の蓄電デバイスの実現が期待できる。

TOT 誘導体については、今回の検討でその結晶構造に対する知見も得られており、さらなる合成の高効率化を達成すべきである。

3. 総合所見

当初の目標に対して一定の成果が得られた。挑戦的な顕在化目標に対し、成果の一部として、幾つかの巨大 π 電子系有機分子を新たに合成した。本材料は将来電子材料として何らかの形で開花する可能性があり、物性評価をしっかりと実施して、何が問題なのかを明確にしたうえで、次のステップに進んでほしい。