

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： π 共役系高分子の高効率合成のための高性能直接的アリール化触媒の開発

2. 研究代表者： 小澤 文幸（京都大学化学研究所 教授）

3. 事後評価結果

○評点:

A+ 期待を超える十分な成果が得られている

○総合評価コメント:

本研究課題では、次世代有機エレクトロニクスの構成に必要な π 共役系高分子を簡便かつ精密に合成するための重合法（直接的アリール化重合：DArP）を目指し、炭素-水素結合活性化を素反応とする脱ハロゲン化水素型クロスカップリング反応（直接的アリール化反応）の高性能な触媒の開発を実施した。

その結果、準安定なキレート特性を示す配位子P(2-MeOC₆H₄)₃ (L1)を発見し、これまで直接的アリール化反応に不向きであったトルエンやTHFなどのポリマー良溶媒中で高活性を示す特異なPd触媒を開発することが出来た。この触媒を用いて、有機電子デバイスの構成材料として有用なドナー・アクセプター型交互共重合体（DAポリマー）を高精度に合成することができた。また、L1にTMEDAを組み合わせた混合配位子触媒を開発し、炭素-水素結合活性化を素反応とするDArPに内在する本質的な欠点であったポリマー不溶解の問題を劇的に改善した。一方、P(2-Me₂NC₆H₄)₃ (L2)を配位子として、99%以上の頭尾規則性を有するポリ(3-ヘキシル)チオフェン（P3HT）も合成することができた。

以上の成果は、詳細な反応機構解析に基づいた π 共役系分子の高分子化に有効な触媒系が開発されたものとして、期待を超える十分な成果が得られていると評価できる。本研究課題から得られた触媒やDArP反応は、有機金属モノマーを必要とせず、反応操作が簡単ながら重合精度が極めて高く基質適用範囲も広いことから、今後有機エレクトロニクス材料の合成ツールとして幅広く利用されていくものと期待される。