

物質探索空間の拡大による未来材料の創製
2021 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

福井 識人

名古屋大学 大学院工学研究科
講師

π 共役分子の内部を探索空間とする未来材料の創製

研究成果の概要

本研究では有機分子が多元素複合系であるという視点に立ち返り、“分子骨格内部の変換”という分子設計戦略の一般化と、それに基づく革新材料の創製をもって物質探索空間の拡大を目指している。具体的には π 共役分子という分子群に着目し、その骨格内部を物質探索空間と定めた。そして、1)骨格内部への選択的な分子変換法の確立と、2)構造多様性の拡張、を2本柱として研究を推進することで、従来の周辺修飾法とは本質的に異なる機能創発指針を確立し、革新的な機能性材料の創出を狙いとしている。

本年度では、昨年度に見出したナノグラフェンの骨格内部の酸化的開裂による8の字型 π 共役分子の効率的合成法の発展と、この合成法を活かした機能性材料の創製を目指し、検討を行なった。前者に関しては、基質適用範囲を調査することで、新規機能性材料の創出に適した合成中間体や既存の合成技術では創出が困難であった高度に歪んだ新規 π 共役分子の創出を達成した。さらには、生成物である8の字分子が、高効率な円偏光リン光を示すとともに、高温下においてもキラリティーが安定であるという、優れた機能を示すことを明らかにした。これらの成果は将来的な材料探索を実施する上で重要な基盤を与える。なお、この成果は既にプレプリント誌である ChemRxiv に公開されており、今後、専門家による査読を経て、学術誌に掲載される予定である。次に後者に関しては、二重らせんに囲まれた空孔を有する新規金属有機構造体や、優れた円偏光発光と熱活性化遅延蛍光を両立する新規有機発光ダイオード材料の創出に成功した。新規有機発光ダイオード材料に関しては既に特許出願を終えている。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Inner-Bond Cleavage in Nanographenes: A Constructive Destruction Strategy for Facile Access to Molecules with Multiple Figure-Eight Structures”, Yuki Sakamoto, Junichiro Hirano, Emiko Nishimoto, Daisuke Owase, Ren Takayanagi, Keita Tajima, Takuya Omine, Fumitaka Ishiwari, Akinori Saeki, Jinseok Kim, Juwon Oh, Dongho Kim, Tomoyuki Ikai, Eiji Yashima, Hiroshi Shinokubo, and Norihito Fukui*, *ChemRxiv* (preprint) **2023**. (DOI: 10.26434/chemrxiv-2023-fl1djk)
- 2) “Dinaphthooxepine Bisimide Undergoes Oxygen Extrusion Reaction upon Electron Injection at Room Temperature”, Mai Odajima, Norihito Fukui,* and Hiroshi Shinokubo*, *Org. Lett.* **2023**, *25*, 282–287.
- 3) “Diazazethrene Bisimide: A Strongly Electron-Accepting π -System Synthesized via the Incorporation of both Imide Substituents and Imine-type Nitrogen Atoms into Zethrene”, Keita Tajima, Kyohei Matsuo, Hiroko Yamada,* Norihito Fukui,* and Hiroshi Shinokubo*, *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 635–642.