

酸化還元活性な有機分子ユニットをもちいた 三次元集積体の精密構築

代表研究者 張本 尚

自然科学研究機構 分子科学研究所 錯体物性研究部門 助教

研究要旨

π 共役分子は、交互につながった単結合と多重結合から構成され、非局在化した電子（ π 電子）を有する。 π 電子は、光吸収・発光特性、電導性、磁性など、 π 共役分子が発現する様々な物性を司る。そのため、 π 共役分子はその分子構造に対応する多彩な性質をもち、近年注目を集めている有機エレクトロニクス分野で基盤となる物質である。近年、有機合成化学の発展に伴い、設計に基づいて精密合成可能な分子の種類は増加している。通常、測定の簡便性から、新たに合成された π 共役分子がもつ電子的性質は、溶液中で孤立分散した状態として調査される場合がほとんどである。一方、 π 共役分子は孤立分散した状態だけではその機能を十分に発揮できず、半導体などの機能性物質として我々が分子を取り扱うには、分子が高度に集積した状態を創り出す必要がある。以上の観点から、分子の集積化及び配列制御に関する研究が盛んに進められ、例えば π 共役分子では、1 次元や 2 次元積層など、 π 共役高分子では、非晶質や半結晶状態など、多様な集積様式が見出され、制御されてきた。一方、 π 共役分子の 3 次元集積は、優れた導電性や光電子物性の発現に有効であると予測されるものの、3 次元集積を実現する方法論及び集積により発現する機能は未解明である。これは、「集積様式が分子構造のわずかな違いによって左右されるため、分子構造から結晶状態を予測して精密に 3 次元集積体をデザインすることが困難である」という潜在的な問題に由来している。以上の背景のもと、我々は、分子間の電荷移動相互作用に着目し、 π 共役分子の 3 次元集積化を目指した。本研究では、電子供与性分子の最高被占軌道と電子受容性分子の最低空軌道による分子軌道間の相互作用 [= 電荷移動 (CT) 相互作用] に注目し、酸化還元活性な有機分子ユニットを取り入れた新規 π 共役分子をデザインした。本研究では、独自に設計した標的分子の前駆体及びその多量化反応の検討を実施した。予想外のことに、多量化反応では、標的分子よりも構成要素が少ない多量体が得られ、ゲスト分子との興味深い相互作用を示したため、その物性について調査した。