

鈴木 敏 泰 (准教授) (1998年1月1日着任)

A-1) 専門領域：有機合成化学

A-2) 研究課題：

- a) 曲面グラフェン分子の開発 (芳香族ベルト・サドル)
- b) 電界効果トランジスタのための有機半導体の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) グラフェンや曲面グラフェンは、そのユニークな構造と物性のため、化学と物理の両分野で重点的に研究されてきた。 C_{60} に代表されるフラレン類は、球状で正のガウス曲率をもつ。カーボンナノチューブは円柱状であるが、ガウス曲率はグラフェンと同じゼロのままである。グラフェンに曲面を導入することは、その次元性や電子的性質に大きな影響を与える。グラフェン自身は2次元のゼロギャップ半導体であり、p型とn型の ambipolar な性質をもつ。 C_{60} は0次元のn型半導体であり、カーボンナノチューブは1次元のp型半導体あるいは金属である。それでは、グラフェンに負のガウス曲率を導入した場合、その構造や物性がどのように変化するのが興味深い。

1991年、Mackay と Terrones は、負のガウス曲率をもつ仮想的な3次元グラフェンを提案した。これは、6員環と8員環の組み合わせにより構成され、periodic minimal surface のひとつである Schwarz's P-surface に似た構造をもつ。この繰り返し単位であるテトラベンゾ [8] サークュレン (TB8C) は、新規な曲面グラフェン分子として興味深い構造をもっている。これは、鞍型の極端に平面性を失った未知のベンゼノイド化合物であり、芳香族サドルと呼ぶべきものである。我々は、TB8C および8個のメチル基を導入した誘導体 (OM-TB8C) を、環状オクタフェニレンの分子内 Scholl 反応によって合成した。TB8C の単結晶 X線構造解析は、[7] サークュレンよりもさらに深い鞍状の構造を示した。結晶中でのコンフォメーションは S_4 対称であり、DFT 計算による D_{2d} 対称からねじれた構造をしている。理論計算では、波状のねじれ運動 (擬回転) によって、非平面の遷移状態 (S_4 対称) を経由した tub-to-tub 反転が、室温で容易に起こることを示唆している ($7.3 \text{ kcal mol}^{-1}$)。溶液中での基底状態のコンフォメーション (D_{2d} 対称) は、結晶中のそれとは異なっているが、これは crystal-packing force と低エネルギーの擬回転によるものである。OM-TB8C は優れた電子供与体であり、有機トランジスタにおいて p 型半導体として機能する (ホール移動度: $10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)。

B-1) 学術論文

Y. SAKAMOTO and T. SUZUKI, "Tetrabenzo[8]circulene: Aromatic Saddles from Negatively Curved Graphene," *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 14074–14077 (2013).

E. KAYAHARA, T. IWAMOTO, H. TAKAYA, T. SUZUKI, M. FUJITSUKA, T. MAJIMA, N. YASUDA, N. MATSUYAMA, S. SEKI and S. YAMAGO, "Synthesis and Physical Properties of a Ball-Like Three-Dimensional π -Conjugated Molecule," *Nat. Commun.* **4**, 2694 (2013).

E. KAYAHARA, T. IWAMOTO, T. SUZUKI and S. YAMAGO, "Selective Synthesis of [6]-, [8]-, and [10] Cycloparaphenylenes," *Chem. Lett.* **42**, 621–623 (2013).

F. ANGER, R. SCHOLZ, E. ADAMSKI, K. BROCH, A. GERLACH, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI and F. SCHREIBER, "Optical Properties of Fully and Partially Fluorinated Rubrene in Films and Solution," *Appl. Phys. Lett.* **102**, 013308 (5 pages) (2013).

S. KERA, S. HOSOUMI, K. SATO, H. FUKAGAWA, S. NAGAMATSU, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, H. HUANG, W. CHEN, A. T. S. WEE, V. COROPCEANU and N. UENO, "Experimental Reorganization Energies of Pentacene and Perfluoropentacene: Effects of Perfluorination," *J. Phys. Chem. C* **117**, 22428–22437 (2013).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(B)(一般)「有機トランジスタのためのn型半導体の開発」鈴木敏泰(2002年–2003年).

科研費若手研究(B)「フッ素化ペンタセン類の合成と有機薄膜素子への応用」阪元洋一(2003年–2004年).

科研費若手研究(B)「チューブ状多環芳香族炭化水素の合成」阪元洋一(2006年–2007年).

C) 研究活動の課題と展望

京大化研・山子教授を代表者とするCREST「超分子化学的アプローチによる環状 共役分子の創製とその機能」に共同研究者として参加している(2016年3月まで)有機ELや有機トランジスタの材料開発における経験を生かしていきたい。これまで、有機デバイスに使われている 共役分子は直鎖型のものである。これが環化することによって、どのような固体構造を取るのか興味深い。アモルファスになるのか、結晶になるのか、それとも分子構造により自由に制御できるのか、その点を見極めていきたい。我々はこの数年、短いカーボンナノチューブである芳香族ベルトの有機合成に取り組んでいる。これは、今回のCRESTのテーマとも合致するので、今後ともその完成を目指していきたいと思う。