

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) フラーレン類やカーボンナノチューブの芳香族性は未だよく理解されておらず、理論家の間でも議論の対象となっている。実験的には、NMRの遮蔽効果が環電流の合計としての情報を与える。 C_{60} の場合、HeやXe原子、水素や水分子を中心に置いた内包フルラーレンが知られており、それらのNMRが溶液中で測定されている。例えば、 $H_2@C_{60}$ の 1H NMRでは、 -1.44 ppmにシングレットが観測されているが、これは溶液中の水素分子と比較して 5.98 ppmも高磁場シフトしている。 $[n]$ シクロパラフェニレン(CPP)はナノフープと呼ばれ、アームチェア型カーボンナノチューブの最小モデルであり、 C_{60} には $[5]$ CPPの構造が含まれている。CPPの環中心における遮蔽効果は、CPPの芳香族性を判断するよい指標となりうる。フルラーレンと異なり、CPP環内に原子や小さな分子をとどめておくことは困難である。そのため、環中心近くに共有結合によってつながれたグループをもつ誘導体を設計する必要がある。この目的のために、 $[8]$ CPPの誘導体である3種のテトラシクロ(2,7-カルバゾール)合成した。一つの化合物は、隣り合ったアンチ型カルバゾールの間に5,5-ジメチルノナンが架橋されており、共有結合によりつながれたメタンブローブとして利用することができる。環中心近くに固定されたメチル基は、ローカル環電流によって強く遮蔽されており、 1H NMRで -2.70 ppmにシングレットを示した。次にDFTのNMR計算によって得られたnucleus-independent chemical shift (NICS)値を用い、ローカル環電流とナノフープ全体を巡るグローバル環電流をそれぞれ可視化した。ローカル環電流によりナノフープ環内は完全にジアトロピックとなり、パラトロピック領域は環外のみ存在する。また、 $[5]$ CPPから $[7]$ CPPではパラトロピックのグローバル環電流が生じ、 $[8]$ CPP以上ではほとんど発生しないことが分かった(論文投稿中)

B-1) 学術論文

F. ANGER, H. GLOWATZKI, A. FRANCO-CAÑELLAS, C. BÜRKER, A. GERLACH, R. SCHOLZ, Y. SAKAMOTO, T. SUZUKI, N. KOCH and F. SCHREIBER, "Interface Dipole and Growth Mode of Partially and Fully Fluorinated Rubrene on Au(111) and Ag(111)," *J. Phys. Chem. C* **119**, 6769–6776 (2015).

B-10) 競争的資金

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。