

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) リレン化合物のフッ素化とオプトエレクトロニクスへの応用
- b) DFT 計算による反応メカニズムの解明

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 芳香族化合物の完全フッ素化は、水素をフッ素に変換するシンプルな手法で、p 型半導体を n 型半導体に変換できる。これにより、分子量は大きく増加するが、融点、昇華温度、安定性などはあまり変化しない。また、ペンタセン ($C_{22}H_{14}$) とフッ素化ペンタセン ($C_{22}F_{14}$) のように、分子のサイズや対称性もよく似ている。このため、比較研究が容易で、高精度な光電子分光などを通じて、固体物性の深い理解に寄与している。本研究では、新たなターゲットとして、リレン化合物の完全フッ素化を目指している。有機結晶中でのシングレットフィッション (SF, 一重項分裂) の有望な構造として、ターリレン、クォーターリレン、およびペンタリレンが理論研究者によって提案されている。また、2006年に次世代の太陽電池として、このSFを利用すると効率が飛躍的に向上するという提案がなされた。最近では、ターリレン誘導体の微結晶薄膜で200%近いトリプレット量子収率が報告されている。本研究では、リレン化合物 (nR : $n = 2, 3, 4, \dots$) を完全にフッ素化した PF_nR ($n = 2, 3, 4, \dots$) を合成し、SFの研究に供したい。DFT 計算によると、平面の nR と異なり、 PF_nR はナフタレン環が25度ねじれている。このため、 PF_nR の溶解性は向上するものと考えられ、難溶性の nR より取り扱いやすいことが期待される。フッ素化ターリレン (PF_3R , $C_{30}F_{16}$) のLUMOの値は、 C_{60} のそれとほぼ同じであり、十分に電子注入が可能である。これらを n 型半導体として、有機太陽電池の検討を行う。今年度は、榎山グループとの共同研究で、ナフタレンモノマーの選択的フッ素化に成功した。現在、これらを原料にペリレンやDIPの完全フッ素化に取り組んでいる。
- b) 最近、榎山グループはアルジミンの特異な [1,3]- 転位反応を発見し、これが極めて高い不斉転写で進行することを見出した。この前例のない転位反応メカニズムを解明するために、SMD/M06-2X-D3/6-311+G(d,p) レベルでのDFT 計算を行った。本来、[1,3]- 転位反応は禁制であるので、二つの多段階ルートを提案した。求電子置換反応のルートは、最もシンプルな転位メカニズムであるが、立体選択性はほぼないことがわかった。一方、協奏的な [3,3] シグマトロピー転位を経るルートでは、不斉転写や反応性をよく説明できることが分かった (論文投稿中)。

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科, 「構造物性科学」, 2018年12月4日-7日.

C) 研究活動の課題と展望

榎山准教授とのフッ素化リレン化合物の共同研究が順調に進んでいる。榎山グループのメンバーが積極的に取り組んでくれたおかげで、大変困難なナフタレンの選択的フッ素化に関する多くの知見が得られた。来年度の機器センターへの異動後は、これらの有機 n 型半導体を分子・物質合成プラットフォームを通じて、大学や企業の研究者に提供していきたい。また、榎山グループが発見した特異な転位反応のメカニズムを、DFT 計算によって解明することができ、論文投稿まで漕ぎ着けた。今後も、これまでの有機化学の知識と経験を生かして、所内外の分子科学研究者をサポートしていきたい。