

剛直なようで柔らかい立体 π 共役骨格の高分子化

京都大学 大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 助教 加藤 研一

剛直性や電子物性に優れる π 共役化合物は一般に、平面的な構成単位として広く利用されている。種類自体は限定されるものの、構造の定まった立体形状をとる π 共役骨格も知られており、 π 平面の強い積層を阻害することで集合状態を大きく変更できる。既存の立体 π 共役骨格としてはトリプチセンやスピロビフルオレンがあり、高分子に組み込んだ際には、溶解性の改善や空孔の付与などが達成されている。

研究者らは、研究例の少ない立体 π 共役骨格である π 縮環型プロペランに着目し、分子の科学を有用な物質・材料に繋ぐべく研究を進めている。 π 縮環型プロペラン(図 1 中央, 分子 1,2)は決まった立体構造を有しながらも、ねじれ運動を含む適度な柔軟性と非晶性固体を与える傾向を示すことが最近明らかになりつつある。トリプチセン等は、 π 積層は阻害しつつも、一般に剛直で秩序だった分子集積を与える(図 1 左)。 π 縮環型プロペランのねじれと非晶性は、既存の立体骨格とは対照的であり、非晶性を必要とする材料にとって最適な構成単位と期待される。

本研究では、 π 縮環型プロペランを線状高分子へと展開することで、柔軟な置換基への依存度を下げつつも可溶性 π 共役高分子や、フィルム形成挙動と立体骨格がつくる分子空間による気体吸着特性の両立など、優れた特性を示す材料の創出を目指す。

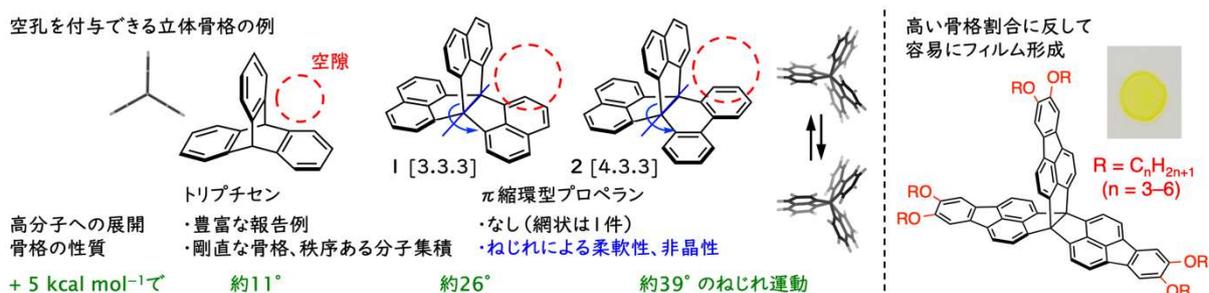


図 1. π 縮環型プロペラン骨格の特徴と非晶性フィルムを与える分子系列。

【実用化が期待される分野】

空孔を規定できる立体性、溶液プロセスを可能にする溶解性、高い非晶性・混合性を併せ持った高分子は、分離膜材料への貢献が期待されている。柔軟な周辺置換基の削減は、基質の気体・蒸気に対する空孔構造の安定性などの観点で望ましい。

既存の立体 π 共役骨格を誘導化した非晶性分子は、ホール輸送材料や発光層のホスト材料としても用いられることから、デバイスを含む広い分野への波及を期待している。