

富士フィルム・機能性材料化学賞

岡山大学異分野基礎科学研究所 教授 西原 康師氏

Yasushi Nishihara

(業績)「クロスカップリングを用いる π 共役系有機分子の効率的合成と電子デバイスへの応用」

Efficient Synthesis of π -Conjugated Organic Molecules Utilizing Cross-Coupling

Reactions and Their Application to Electronic Devices



π 共役有機分子は、医薬品や電子デバイスなどの機能性材料として利用可能である。例えば、4 置換オレフィンである (Z)-タモキシフェンは生理活性物質として、また、置換ペンタセンは有機半導体などに適用可能であるため、目的とする π 共役系有機分子の効率的かつ選択的な合成法の開発が求められている。

西原氏は、クロスカップリング反応を利用し、様々な置換基を有する多置換オレフィンやフェナセン型分子などの π 共役系有機分子の効率的かつ位置および立体選択的な合成法を開発した。さらに、合成した有機分子の有機電界効果トランジスタ (OFET)、有機薄膜太陽電池素子 (OPV) などの有機電子デバイスとしての特性評価も併せておこなった。以下、代表的な業績を述べる。

1. 多置換オレフィンの位置および立体選択的合成法の開拓

アルキル基で置換されたオレフィンには、古典的な合成法ではハロゲン化アルキルの E2 反応によって合成できることが知られているが、用いる塩基や反応条件によって様々な異性体の混合物を与える。西原氏は、低原子価ジルコニウム錯体とアルキル置換アルキニルホウ素反応剤を用いて四つの異なるアルキル基を望みの位置に導入したオレフィンを合成することに成功した。さらに、アルキニルホウ素およびケイ素化合物に対して、遷移金属触媒によるジメタル化とそれに続くクロスカップリング反応をおこない、化学選択的に様々なアリール基を導入する手法を開発した。特に、二つのピナコールボリル基 (B_{pin}) を様々な位置に導入した四置換オレフィンに対して鈴木-宮浦カップリングを施すことにより、異なるアリール基を逐次的にオレフィン骨格に導入することで四つのアリール基が全て異なる四置換オレフィンを合成することにも成功した。

2. 新規フェナセン型分子の合成と有機電界効果トランジスタ特性の評価

西原氏は、クロスカップリング反応を利用した様々なフェナセン型分子の合成に着手し、(Z)-アルケニル

ボロン酸ピナコールエステルと 1,4-ジクロロ-2,3-ジヨードベンゼンの鈴木-宮浦カップリングとそれに続くパラジウム触媒による直截的な炭素-水素結合の活性化を伴うダブル環化反応により様々な置換基を有するピセン誘導体を合成した。さらに、フェナセン骨格の末端にチオフェン環を有するフェナントロ [1,2-*b*:8,7-*b'*]ジチオフェン (PDT) を短工程かつ大量に合成する手法を確立した。さらに、計算科学により OFET に適切な分子を設計し、PDT の硫黄原子の位置を変えた構造異性体であるフェナントロ [2,1-*b*:7,8-*b'*]ジチオフェン (PDT-2) とそのドデシル誘導体 (C_{12} -PDT-2) を合成し、FET 素子へと応用した結果、最大移動度 $5.6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ という極めて高い値を達成した。PDT は、現在化成品メーカーから販売され、実用的な OFET への展開が進みつつある。

3. フェナセン型分子を含む π 共役系ポリマーの合成と有機薄膜太陽電池への応用

西原氏は、独自に開発した PDT を弱いドナーユニットとして用い、様々なアクセプターユニットと組み合わせた π 共役系ポリマーを合成し、OPV の活性層として応用することに成功した。例えば、アクセプターユニットとして、イソインジゴ (IID) を用いることにより、最高で 6.1% の光電変換効率を達成した。さらに、ベンゾチアジアゾール (BT) にフルオロ基を導入したコア分子をアクセプターユニットとして導入したポリマーと低バンドギャップ n 型半導体である IT-4F と組み合わせた非フラーレン型 OPV は、最大で 9.0% の変換効率を示した。

以上、西原康師氏は、計算科学による分子設計、クロスカップリングを利用した効率的かつ選択的な π 共役系有機分子の合成、それらの特性評価により、有機半導体材料の合成技術を発展させてきた。同氏の研究業績は、有機合成化学と材料科学に基礎をおき、開発した機能性材料が与える社会的インパクトは極めて大きいことから、有機合成化学協会富士フィルム・機能性材料化学賞に値すると認め、ここに選定した次第である。