

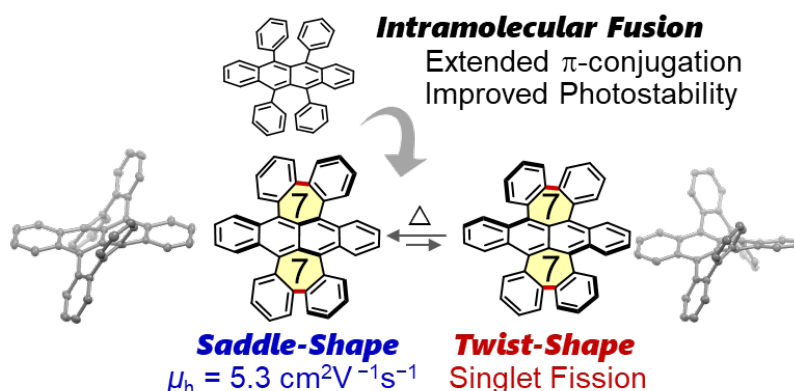
光・電気・磁気機能性有機分子の分子軌道計算

Theoretical calculation of photo-, electro-, and magneto-functional organic systems

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

有機(炭化水素系)半導体材料の中でルブレンは最高クラスの移動度を示すが、光酸化に対する極めて低い安定性が実用上の大きな障壁となっていた。本年度の研究では、ルブレン骨格のフェニル基を分子内で縮環した七員環構造を有する縮環ルブレン(**FR**)を設計し、この課題の克服を試みた。実際に **FR** 分子を合成したところ、導入した七員環の影響により室温で安定な2つの配座異性体をとることを明らかにし、それぞれのサドル型とねじれ型に大きく湾曲した構造をX線結晶構造解析により明らかにした。これら2つの配座異性体の光・電気的特性を詳細に評価した。その結果、**FR** は従来のルブレンと比較して大きく向上した光安定性を示すことを見出した。さらに、サドル体を用いた OFET デバイスにおいて $5.33 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ の高い正孔移動度を達成し、一方でねじれ体においては極めて高速(7.2 ps)な一重項分裂が進行することを突き止めた。化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した量子化学計算により、2つの立体異性体の相対的な安定性や、相互変換に関わる障壁を精密に解析したほか、分子の曲がり方がフロンティア軌道の空間分布や励起状態のエネルギーレベルに与える影響を明らかにした。以上の成果は、分子の曲率を制御することで、安定性や光・電子機能の制御が可能であることを実証するものであり、次世代の高性能有機半導体デバイスに向けた新たな分子設計指針を提示した。



発表論文(謝辞あり)

1. Y. Fujimoto, D. Shimizu, K. Matsuda, *J. Phys. Chem. Lett.* **2025**, *16*, 11242.
2. T. Shinozuka, D. Shimizu, K. Matsuda, *Chem. Eur. J.* **2025**, *31*, e202501019.
3. D. Shimizu, K. Matsuda, *Org. Lett.* **2025**, *27*, 9517.
4. M. Hisada, K. Bulgarevich, Y. Tsutsui, K. Miyata, D. Shimizu, S. Seki, K. Takimiya, K. Matsuda, *J. Am. Chem. Soc.* **2026**, *148*, 6716.