

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

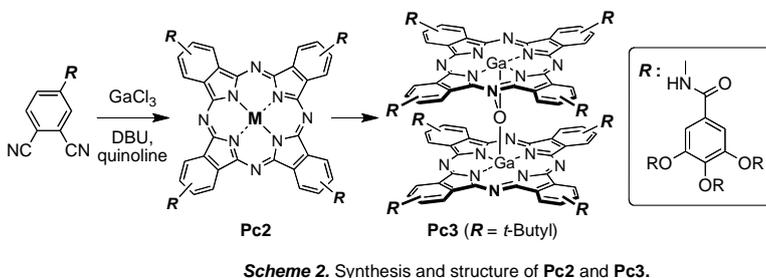
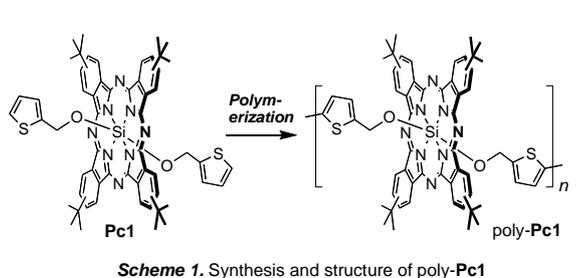
研究テーマ (和文) AB	モレキュラーバンドエンジニアリングに基づく新規光機能性有機半導体の創成				
研究テーマ (欧文) AZ	Development of Optically Functional Organic Semiconductors Based on Molecular Band Engineering				
研究氏代表名者	カナ字 CC	姓) オノウチ	名) ヒサナリ	研究期間 B	2007 ~ 2008 年
	漢字 CB	尾之内	久成	報告年度 YR	2009 年
	ローマ字 CZ	Onouchi	Hisanari	研究機関名	奈良先端科学技術大学院大学
研究代表者 CD 所属機関・職名	奈良先端科学技術大学院大学・物質創成科学研究科・助教				

概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)

【緒言および研究内容】

代表的なπ共役系有機環状化合物であるフタロシアニン(Pc)は、典型的な有機色素であり、配位する中心金属または側鎖基の構造によって様々な機能を発現することができる。その特徴的な光化学・電気化学・錯体化学・磁性化学的性質に着目し、新たな機能の発現を目的として様々な構造を有する Pc 誘導体が合成されてきた。また、S<sub>1</sub> (Q-帯: バンドギャップ=小) 発光性の Pc は、遷移モーメントをその面内に有し、その配向薄膜の (非線形) 光学特性について幅広く研究されている。そこで本研究では、Pc アキシャル位を利用した共役オリゴマー (バンドギャップ=大) とのカップリング合成により、互いの遷移モーメントが直交した分子群を合成し、それらを自在に配向制御することにより、外部刺激 (ゲート作用など) 応答性の新規光機能性材料の開発を目的とした。本研究課題では、以下に示す二つのアプローチを検討し、合成に成功している。

- (1) Pc を主鎖骨格に周期的に有する可溶性ポリマーの合成およびその配向制御 (Scheme 1)
- (2) 水素結合性アミド基を有する液晶性 Pc 分子の合成およびその配向制御 (Scheme 2)



これまでも、Pc を含むポリマーは合成されているが、分子量や溶解性が低いものが多く、製膜性の良いポリマーの例は数少ない。また、Pc をメソゲンとする液晶分子に関する研究も数多くされているが、本研究のダンベル型分子では、リンカー部位を様々なものを用いることができるため、それぞれの光学特性が比較検討可能である。

【今後の課題】

更なる合成および重合について検討を行い、得られる化合物の分散状態および配向バルク状態での光学特性を調べる。

キーワード FA	phthalocyanine	phthalocyanine polymer	hydrogen bonding	self-assembly
----------	----------------	------------------------	------------------	---------------

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA					
研究機関番号 AC					シート番号					

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要 EZ

Phthalocyanines (Pc) exhibit various interesting functional properties, which depend on not only the chemical structures and center metal of Pc but also the alignments of Pcs in the bulk state, and they have been extensively studied with much interest because of their applications in various functional materials. Among of the properties of Pc, we focused on the non-linear optical properties of non-aggregated Pc and the conductivity of a columnar arrangement of  $\pi$ - $\pi$  stacked Pc in this work. Herein, we design and synthesize novel Pc polymers containing Pc structures in the main chain through their axial positions (poly-**Pc1**) and Pc derivatives bearing an amide pendant with long alkyl chains at four peripheral positions (**Pc2**). Poly-**Pc1** was soluble in organic solvents and  $M_w$  of the obtained poly-**Pc1** was about 3000. The amide bonds of **Pc2** produced intermolecular hydrogen bonds in apolar solvents, such as chloroform and toluene, leading to  $\pi$ - $\pi$  stacked, self-assembled structures. Further synthesis and polymerization were now in progress, and the detail (non-linear) optical properties of the obtained Pc derivatives will be investigated in near future.