

構造有機化学研究室

研究内容： π 共役系分子・フラーレン・機能性有機材料・太陽電池・ペロブスカイト
所在地：宇治市五ヶ庄

電話 FAX

スタッフ：教授 村田 靖次郎 化学研究所 M-352C (0774) 38-3172 (0774) 38-3178
e-mail: yasujiro@scl.kyoto-u.ac.jp
准教授 若宮 淳志 化学研究所 M-351C (0774) 38-3173 (0774) 38-3178
e-mail: wakamiya@scl.kyoto-u.ac.jp

Home Page : <http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/~kouzou/index.html>

研究概要：化学の醍醐味のひとつは、分子レベルでの「ものづくり」が可能であることである。原子や分子を自在に組立て、新しい物性の期待される物質の構造を設計し合成する。その新物質の構造を精密に測定し、果たして予想された性質が現れるか、あらゆる分析・解析手段で調べ上げる。その結果に理論的解釈を加えて論文発表し、また新しい分子の設計にフィードバックする。この研究サイクルによって、これまでに無い、真に新しい物性をもつ物質を創製する。これが私達の行なっている「構造有機化学」である。対象となる物質は有機化学の根幹となる炭化水素を中心に種々のヘテロ原子を加え、特に π 電子が共役した新しい構造をもつ分子である。 π 電子は、 σ 電子と比較してその電子が自在に動き回る性質を有し、さらに他分子と相互作用する結果多様な機能をもっており、極めて興味深い。学術的に「おもしろい分子」を合成し望みの物性を発現させる、という基礎研究が、有機化学の発展と新しい機能性分子誕生の礎となることを目指している。

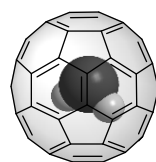
最近の論文発表：

- (1) “Near-Infrared Emissive Donor-Acceptor-Type Molecules Containing Thiazole-Fused Benzothiadiazole as an Electron-Acceptor Moiety”, Satou, M.; Nakamura, T.; Aramaki, Y.; Okazaki, S.; Murata, M.; Wakamiya, A.; Murata, Y. *Chem. Lett.* **2016**, 45, 892-894. (cover picture)
- (2) “Influence of Quasipolar Structures of Partially Oxygen-Bridged Triphenylamine Dimers on the Properties in the Bulk Films”, Nishimura, H.; Fukushima, T.; Wakamiya, A.; Murata, Y.; Kaji, H. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, 89, 726-732. (selected paper)
- (3) “Efficient Synthesis of One- and Two-Dimensional Multimetallic Gold-Bis(dithiolene) Complexes”, Murata, M.; Kaji, S.; Nishimura, H.; Wakamiya, A.; Murata, Y. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 3228-3232.
- (4) “Synthesis and Properties of Endohedral Aza[60]fullerenes: $H_2O@C_{59}N$ and $H_2@C_{59}N$ as Their Dimers and Monomers”, Hashikawa, Y.; Michihisa, M.; Wakamiya, A.; Murata, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 4096-4104.
- (5) “Synthesis of a Distinct Water Dimer inside Fullerene C_{70} ”, Zhang, R.; Murata, M.; Aharen, T.; Wakamiya, A.; Shimoaka, T.; Hasegawa, T.; Murata, Y. *Nat. Chem.* **2016**, 8, 435-441.
- (6) “Hole-Transporting Materials with a Two-Dimensionally Expanded π -System Around an Azulene Core for Efficient Perovskite Solar Cells”, Nishimura, H.; Ishida, N.; Shimazaki, A.; Wakamiya, A.; Saeki, A.; Scott, L. T.; Murata, Y. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 15656-15659.

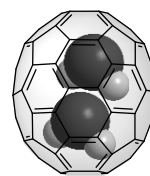
最近の主な研究テーマ：

小分子を内包したフラーレンの有機合成

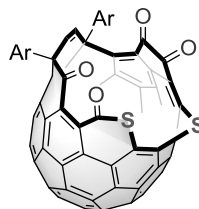
中空のフラーレン骨格内部に原子やイオンが閉じ込められた「内包フラーレン」は空のフラーレンには無い特徴的な性質が期待されるものの、これまでの物理的な合成法には大きな制約があった。私達は、フラーレンに開口部を設け、そこから小分子を内部に挿入し、その後開口部を修復することによって、全く新しい内包フラーレンの合成法を開拓している。これらの分子では、内側からの物性制御が期待され、また外界から隔離された内包分子の性質を解明する格好のモデルとなっている。



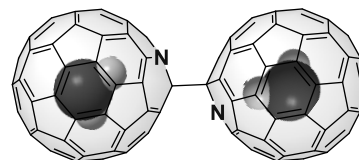
H₂O内包C₆₀



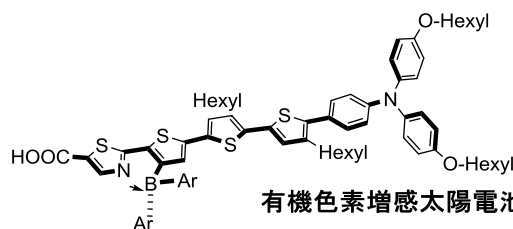
H₂O二量体を内包したC₇₀



開口C₆₀誘導体



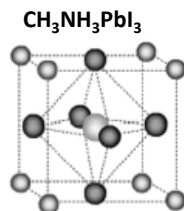
H₂O内包C₅₉Nの二量体



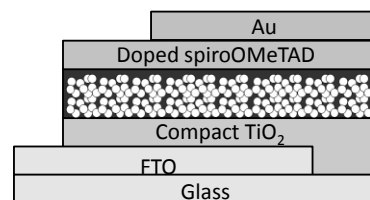
有機色素増感太陽電池材料

機能性π共役化合物の合成と有機太陽電池デバイスへの応用

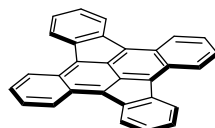
π軌道の広がりエネルギー準位の精密制御にこだわったπ電子系材料の分子設計というアプローチにより、有機電子デバイスに有用な材料の開発を行っている。DFT計算を駆使して分子設計を行い、一連の誘導体を合成し、かつデバイス作製と評価までを一貫して行うことにより、真に優れた機能性分子の開発を行っている。また、酸化チタン・有機無機ペロブスカイト結晶膜・ホール輸送薄膜から成るハイブリッド型太陽電池の開発に取り組んでいる。



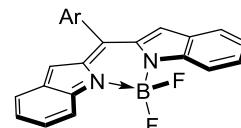
CH₃NH₃PbI₃



ペロブスカイト系薄膜太陽電池



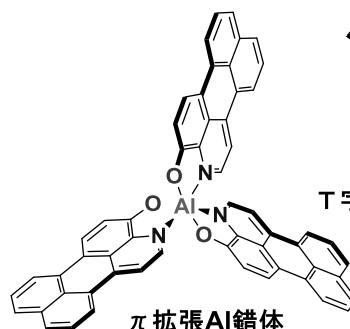
拡張ピラシレン誘導体



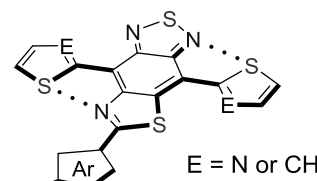
拡張BODIPY誘導体

新規π共役骨格の構築と固体物性の制御

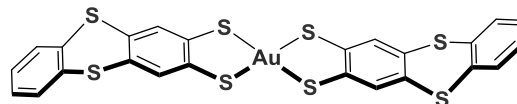
固体状態での分子配列を制御することを目指した新しいドナー性の骨格を開発し、有機ELデバイス等への利用へと展開している。また、新しい縮合芳香環を構築する合成反応の開発、得られた分子の芳香族性の検証、ならびに分子構造と固体状態での発光特性との相関を明らかにする研究を進めている。



π拡張Al錯体



T字型構造をもつ電子受容体



導電性をもつ金錯体

平成28年度：博士研究員3名、研究員6名、博士課程7名、修士課程3名、学部生3名