

様式 F-7-1

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実施状況報告書（研究実施状況報告書）（令和元年度）

| 所属研究機関名称 | | 奈良先端科学技術大学院大学 | 機関番号 | 14603 |
|----------|----|---------------|------|-------|
| 研究代表者 | 部局 | 先端科学技術研究科 | | |
| | 職 | 助教 | | |
| | 氏名 | 山田 美穂子 | | |

1. 研究種目名 若手研究

2. 課題番号 19K15649

3. 研究課題名 湾曲状芳香族化合物の歪み構造による光物性と光反応制御

4. 補助事業期間 令和元年度～令和2年度

5. 研究実績の概要

フォトクロミック反応など光異性化反応においては、順反応と逆反応は相補的な関係にあるため、独立した制御は困難である。本研究では、歪みの調節が可能なモチーフに湾曲状芳香族構造、フォトクロミック反応系モチーフとしてヘキサトリエン構造を有する化合物の合成を行っている。また、これらを用いて、分子の静的・動的な歪み構造に注目してポテンシャルエネルギー曲線をスイッチさせ、光物性・反応性に与える効果を系統的に評価・検討することで、光反応における順反応と逆反応の独立な制御を目指している。

湾曲状芳香族分子コラニュレンとターアリーレン型ヘキサトリエンの組み合わせにより湾曲状歪み構造を有する新規有機フォトクロミック分子を設計・合成した。1,2,7,8-テトラブロモコラニュレンを5-アリール-2-メチルチオフェンボロン酸ビナコールエスチルと鈴木・宮浦カップリングすることで、2つのターアリーレンユニットを有する化合物が得られたことをMALDI-MSにより確認した。この化合物を溶液中で紫外光照射したところ、UV-visスペクトル及び¹H NMRスペクトルが変化し、さらに可視光下に放置すると、これらのスペクトルは紫外光照射前の状態に戻ることを観測した。この結果から、この化合物がフォトクロミック反応を示すことを明らかにした。

また、光物性と光反応性を検討するモチーフとして、湾曲状芳香族コラニュレン骨格を有する新規有機化合物を合成し、NMR、UV-visなどの各種分光分析により光物性を検討した。さらに、得られた新規化合物を配位子として金属イオンと反応させ、錯体形成挙動を追跡すると共に光物性について検討した。

6. キーワード

湾曲状芳香族化合物 光化学 光物性 フォトクロミズム 異性化

7. 現在までの進捗状況

区分 (2) おおむね順調に進展している。

理由

湾曲状芳香族化合物の歪み構造による光物性と光反応性について検討するモチーフとして、湾曲状コラニュレン骨格を有する新規有機化合物を複数設計・合成することに成功した。これらの化合物うちターアリーレン骨格を有する化合物についてフォトクロミック反応挙動が観測されており、研究は順調に進展していると考えている。

8. 今後の研究の推進方策

初年度に得られた湾曲状芳香族骨格を有する新規化合物の光物性及び光反応性に関する詳細な検討を行う。また、必要に応じて化学構造修飾により化合物の構造・物性の最適化を行う。さらに、平面状芳香族骨格を有する化合物との比較を行い、歪み構造が光物性及び光反応性に及ぼす影響を明らかにする。

9. 次年度使用が生じた理由と使用計画

新型コロナウィルスの影響により、年度末の学会の中止等予想外の変更があったため。延期した成果発表については来年度行う。

10. 研究発表（令和元年度の研究成果）

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名

Mihoko Yamada, Kei Ohkubo, Mitsuhiro Shionoya, Shunichi Fukuzumi

2. 発表標題

Photoinduced Electron Transfer in a Charge-Transfer Complex Formed between Corannulene and Lithium Ion-Encapsulated [60]Fullerene

3. 学会等名

The 8th International Conference of The Indonesian Chemical Society 2019 (招待講演) (国際学会)

4. 発表年

2019年

1. 発表者名

北勇真、山田美穂子、河合壯

2. 発表標題

メチルピリジルコラニュレンの合成とイリジウムとの錯体形成挙動

3. 学会等名

第69回錯体化学会討論会

4. 発表年

2019年

1. 発表者名
澤崎智哉、山田美穂子、河合壯

2. 発表標題
コラニュレンを有する湾曲状ターアリーレン誘導体の合成とフォトクロミズム

3. 学会等名
日本化学会第100春季年会

4. 発表年
2020年

1. 発表者名
田野 遼祐、Yan Bing Tan、山田 美穂子、河合 壯

2. 発表標題
曲面状コラニュレン骨格を有する新規 -ジケトン配位子の合成 と Eu(III)錯体形成

3. 学会等名
日本化学会第100春季年会

4. 発表年
2020年

〔図書〕 計0件

1 1. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

計0件（うち出願0件／うち取得0件）

1 2. 科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

1 3. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

1 4. 備考