

群馬大学大学院理工学府

# 分子科学部門 有機構造化学研究室 (中村研究室)

URL : <http://nakamurablab.chem-bio.st.gunma-u.ac.jp/>

■研究テーマ

- カルバゾールやチオフェン等を基盤とする光機能性物質の創製
- 縮合多環構造を基盤とする特異なπ共役系の開発

■キーワード

有機構造化学、機能物質科学、光物性、π共役系

■産業界の相談に対応できる技術分野

有機合成、有機構造解析、有機化合物の分子設計

■主な設備

リサイクル分取HPLC、紫外可視分光光度計、分光蛍光光度計、電気化学的測定システム



中村洋介 教授



山本浩司 助教

連絡先 分子科学部門 中村洋介 TEL 0277-30-1310 FAX 0277-30-1314 e-mail nakamura@gunma-u.ac.jp  
分子科学部門 山本浩司 TEL 0277-30-1311 FAX 0277-30-1311 e-mail yamakou@gunma-u.ac.jp

研究概要

ヘテロ環を基盤とする有機π共役系化合物の合成、構造、物性

我々の研究室では、「有機π共役系化合物」の研究を行っています。π電子が共役することにより、様々な物性をもたらします。我々は有機π共役系化合物の中でも、カルバゾールやチオフェン等の既存のヘテロ環や新たに開拓したヘテロ環・縮合多環芳香環を基盤とする新たな有機化合物を合成し、その構造と光物理的特性や電気化学特性等の物性の関係を明らかにしています。我々が合成した化合物は日常生活ですぐに役に立つわけではありませんが、このような



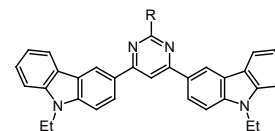
研究室のバーベキューで

構造と物性に関する基礎的な研究が、将来役に立つ物質の開拓につながるものと考えています。

様々なヘテロ環・芳香環を組み合わせたリ、さらに適切な官能基を導入したりすることにより、新たな物性を示す化合物の創製が可能となります。ここでは、最近の研究例から2つ紹介します。

カルバゾール-ピリミジン連結系化合物

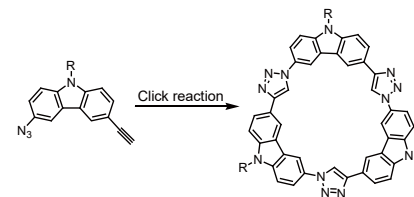
電子豊富なカルバゾールと電子不足なピリミジンを直接または適当なスペーサーを介して連結し、さらにピリミジン環に種々の置換基を導入した化合物を系統的に合成し、その諸物性を明らかにしました。その結果、合成した一連の化合物は、溶媒の極性によって蛍光の色が変化する、いわゆる蛍光溶バトクロミズムを示すことが分かりました。しかも溶媒によって色が変わる程度はスペーサーや置換基に依存しました。また、これらの化合物は、酸の添加により色や蛍光の色が大きく変化し、塩基を添加すると元の色に戻るといふ、酸・塩基応答特性も示しました。これらの特性は、電子豊富なヘテロ環と電子不足なヘテロ環を適切に組み合わせていることによります。



カルバゾール-ピリミジン連結系化合物の種々の溶媒中での蛍光

カルバゾール-トリアゾール大環状化合物

アジドとアルキンからトリアゾールが形成される反応は、代表的なクリック反応として知られています。我々は、この反応を、アジドとアルキンを有するカルバゾール誘導体に用いることにより、3つのカルバゾールとトリアゾールが交互に連結した大環状化合物の合成に成功しました。この化合物は、中央の大きな空孔を利用してヨウ化物イオン(I<sup>-</sup>)のような大きなアニオンと強く錯形成したり、広いπ共役平面に基づき溶液中で自己会合したりすることが分かりました。これらの性質は、カルバゾール上の置換基を変えたり、カルバゾールをフルオレンに変えたり、またトリアゾールを陽イオン化してトリアゾリウムにすることにより大きく変化します。特に、トリアゾリウムにした場合は、その正電荷により、アニオンとの錯形成能が著しく向上することが示されました。



クリック反応によるカルバゾール-トリアゾール大環状化合物の合成

紹介した例以外にも、我々の研究室では、様々な有機π共役系化合物の合成に取り組んでいます。芳香族性・反芳香族性といった有機化学の非常に基礎的な性質に関するものから、材料への応用に比較的近いものまで幅広く扱っています。



リサイクル分取HPLC：化合物の分離に必要不可欠

特徴と強み

分子設計、合成、構造解析から物性評価まで

我々の研究室では、標的とする有機π共役系化合物の理論計算等に基づいた分子設計、合理的な合成経路による実際の合成、および合成した化合物の構造解析・物性測定を一貫して行っており、幅広い技術・知識を習得しています。特に、合成した化合物をきちんと単離・精製し、構造解析することには気を配っています。

今後の展開

新たな骨格の開拓、個々の分子から集合体へ

新たな化合物の分子設計にあたり、既存の芳香環・ヘテロ環の組み合わせだけでは、新規な物性の発現には限界があり、新たな骨格の開拓がさらに必要と考えられます。その意味で、有機π共役系化合物には無限の可能性があると云えます。

また、今後、化合物を材料に応用するためには、個々の分子だけでなく、集合体としての構造・物性を解明し、制御することがより必要となります。すなわち、分子間での相互作用もふまえた分子設計が重要となります。