

## 複素環新規合成法を創製し、 有機n型半導体材料の 開発に挑む

新規の化合物をつくるには、反応そのものも新しく創製しなければならない——。倉橋拓也さんはそうした考え方に基づいて、従来の有機合成化学にはない新しい複素環合成法を開発した。そしてその合成法により優れた有機n型半導体材料の開発に挑んでいる。さらには将来の分子デバイス開発も視野に入れながら、次々と新しい領域を切り開きつつある。

京都大学大学院  
工学研究科材料化学専攻 准教授

### 倉橋拓也

〔くらはし・たくや〕1975年、京都府出身。京都大学工学部工業化学科卒。京都大学大学院工学研究科材料化学専攻博士後期課程認定退学。工学博士。日本学術振興会特別研究員、独グッティンゲン大学フンボルト財団博士研究員、京都大学大学院理学研究科大須賀研究室博士研究員を経て2007年、京都大学大学院工学研究科松原研究室助教。2012年より現職。2014年「文部科学大臣表彰若手科学者賞受賞」。最近、船舶1級免許を取得。「いつか、家族を乗せたクルーザーを操縦して釣りに行きたい」と言う。

〔第32回松籟科学技術振興財団研究助成受賞〕

## イレブンナインの純度を

——そもそもなぜ新しい合成法を開発しようと思ったのですか。

世の中にまだないものを有機合成によってつくりたいというのがスタートです。その場合、既存の合成法ではなく、新しい反応でつくりたいと、本当に新しいものはできないのではないかと考えたからです。

——具体的なケースでもう少し詳しく教えてください。

有機薄膜太陽電池の材料を開発しています。これまで有機薄膜太陽電池として開発されてきた複素環高分子半導体材料の多くは、p型半導体特性を示すものでした。優れた特性を示すn型半導体材料の開発例はあまりありません。これまで見つかったn型半導体の高分子はいろいろ欠点があったからです。特に大きかったのが不純物の問題でした。

——その不純物とは、どういうものなのでしょう。

無機塩が主です。そうした不純物

が多く入っていると、半導体としての性能が落ちるだけではなく、合成した後に不純物を単離精製する工程が必要になりますから、コストもかかります。したがっていかに純度の高いものをつくるかは、コストの面でも重要になるわけです。

——どれくらいの純度が望ましいのですか。

できればシリコンのイレブンナイン、つまり99.99999999%くらいまで高純度化する必要があります。市販されているような有機試薬の純度99.9%程度では、有機薄膜太陽電池に応用する際には問題があります。

——不純物のないものをつくりたいとき、まず何から手をつけるのですか。

窒素や酸素、硫黄などの元素を有する環状化合物を複素環といいます。化合物の機能や特性を決定づける大きな役割を担っているもので、医薬品や農薬、機能性材料などに使われています。不純物をなくすには、従来の方法では不可能だった形式によ

る複素環合成法を開発すればいいのではないかというのが基本的な考え方です。そこでまず農薬に着目し、農薬をつくる方法を考えている途中で、不純物ができない方法を見出したのです。

## 不純物をゴミとして出す

——どういう方法ですか。

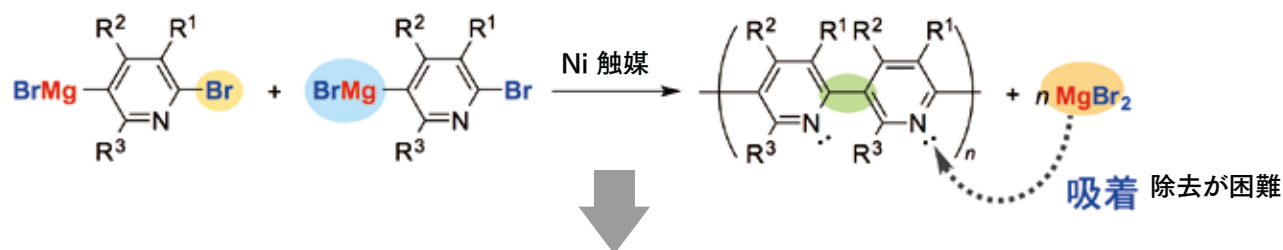
まず二酸化炭素が入っている、つくるのが比較的簡単な複素環をつくりたい。反応性の高い複素環です。その分子の一部を置換すると、不純物が二酸化炭素になります。二酸化炭素は反応性が低いので触媒の邪魔をしたり、できた高分子に吸着されたりすることなく飛んでいってしまいます。反応性の低い不活性な二酸化炭素をゴミとして出してしまおうというところがポイントです。

——その方法だと、イレブンナインの純度のものができるのですか。

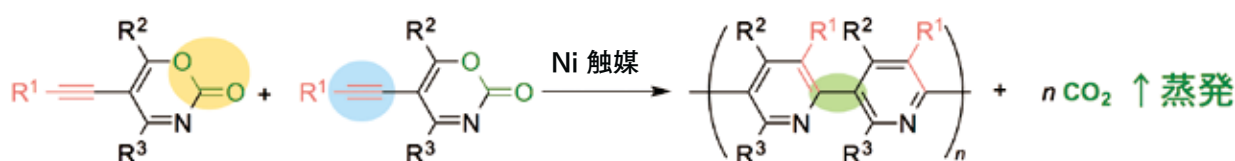
それに近いものはできます。正直言うと、まだそこまで測定したことがありません。普通の元素分析程度

### 高純度高分子生成法について

#### 従来法(クロスカップリング反応)によるポリピリジン合成



#### 脱炭酸環化付加反応によるポリピリジン合成



基盤技術 “分子の一部を置換する新形式の反応”

n型有機半導体複素環高分子



では、そこまでの精度を保証できないんです。他の反応と比べたら純度が高くできていることは間違いありません。効率的に反応していますし、反応自体もきれいです。イレブンナインにして半導体として使えるかどうかということになると、僕たちだけでは難しいので、企業と組むことも考えています。

—ここまでで一番ご苦労されたのは  
どういう点ですか。

反応効率がよすぎて、できた化合物が溶けにくい分析のしようがないところですね。側鎖の置換基をつけて溶解度を高めることで対応しましたが、6~7種類は試したでしょうか。学生は大変だったと思います。

—ひとつの種類を試して結果が出る  
までどれくらいの時間がかかるので  
しょうか。

1ヵ月くらいでしょうか。方向性が決まれば方針を立てやすく、いいところに収束していけるのですが、最初はどちらの方に向いていけばいいのかわからなかったんで時間も手

間もかかりました。

## 単分子エレクトロニクス への挑戦

—方向が分からないときはどうする  
のですか。

そこは、経験と勘でしょうか(笑)。あとはいかに学生を奮い立たせるかですね。「これはいいかもしれないからやってみたら」と言って気分を乗せるようにします(笑)。溶解度は科学計算で予測するのが難しく、初めはやってみないと分からないところがあります。

—今はどういう段階なのでしょう  
か。

どうやってデバイスを組んでいくかというところで、一緒にしてもらえる企業を探しているところです。僕たちはn型をつくっているわけですが、p型と組み合わせたときどうかというのが一番大事です。でもそこは高度な分析装置などが必要なので、僕たちだけでは力不足です。ただ、京都大学の吉田キャンパスにナノテクノロジーハブ拠点ができ、最新鋭の評価装置などがあるので、そ

こを活用するののひとつの手かなと最近は思っています。

—他にはどのようなテーマの研究を  
されているのですか。

単分子ソレノイドコイルの研究もしています。今までお話しした研究から派生してきたテーマで、まだ実現されていないインダクタンス特性を有する単分子エレクトロニクス材料の創製に挑戦しているところです。

—新しい反応を開発した結果、それ  
ができるようになったということ  
ですか。

そうですね、自分たちの知識と経験を活かして誰もできなかったものをつくりたいと思っています。

—オリジナリティが大事ということ  
ですか。

新しいことをしようとする、重箱の隅をつつくようなことになりがちな面もあります。でも、もっと大きな、重要なことを見過ごされてきたのではないかと。誰かが見過ごしてきたものをちゃんと拾って明らかにしないといけないとも思います。

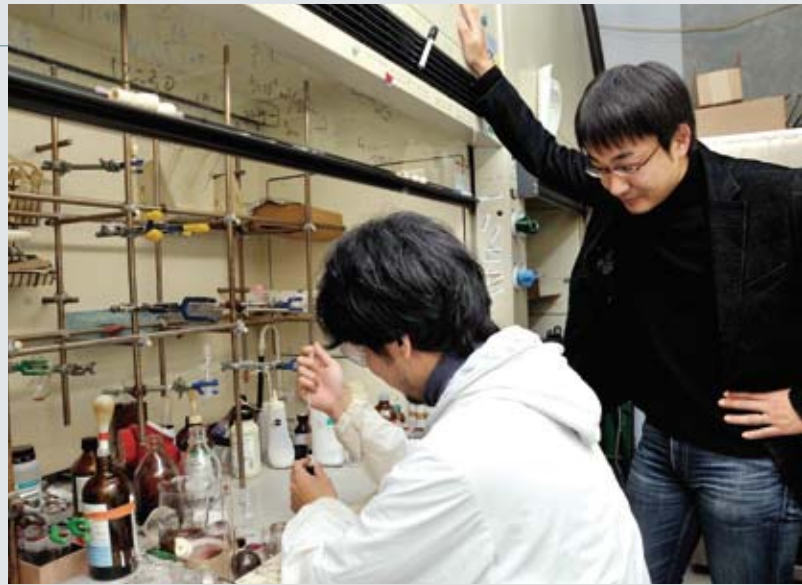
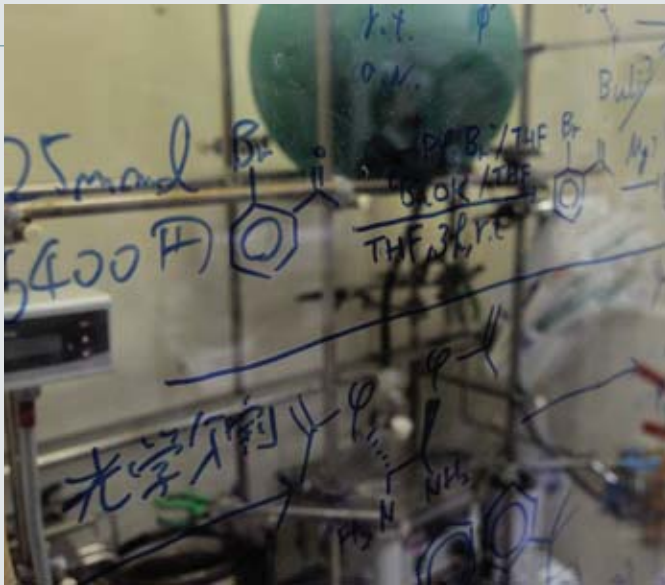
## 研究の範囲を広げたい

—その研究がうまくいくと、将来、  
どんな成果物が実現するのでしょうか。

分子デバイスが実現するのはまだだいぶ先のことではと思うが、たとえば人間が飲み込めるようなコンピュータができるかもしれません。コンピュータを搭載した薬とか、自分で考えて作用するような薬とか…。あくまでもたとえばの話ですよ。ひとつの分子でトランジスタとして使うとか、それを使ってコンピュータをつくるとなったら、まだ半世紀くらいはかかるのではないのでしょうか。1分子を取ってきてその物性を測る



反応合成物の単離精製には、フラッシュ自動精製システムを活用して実験の効率化を向上させる



だけでも非常に難しいことです。合成反応で使うときは $6.23 \times 10$ の23乗の分子を一気に扱うのに対し、単分子でコンピュータをつくるとなるとそれを1個1個つかんでつなげていかなければいけないわけです。今の技術では相当難しいことです。ただ、そのための準備はしておかなければいけないと思います。

夢物語のようなものですが、小さくするということが大事です。そのためには分子デバイスが必要だと思いますし、それを実現するためにはおそらく計測技術の発達も必要です。今、僕たちが有機化学の研究をできるのも、計測技術に支えられているからです。

最近、兵庫県にある大型放射光施設の「SPring-8」に行って、いろいろな分析手法を身につけようかなと考えています。手法を学ぶことは研究の範囲を広げるうえでも大事なことですから。

——研究の範囲を広げたいと考えているのですか。

広げたいですね。自分が何をしたいのか、知りたいのです。研究者としての人生で、私はこれを研究したといえるだけのものを見つけないのです。

## 専門分野にとらわれない感性が大事

——これがしたいというものがまだ見つかっていないのですか。

模索しているところです。今になって物理も面白いと思うようになってきましたし、有機合成と生物を組み合わせたようなバイオケミストリーもあり、生物学も選択肢のひとつに入れておこうと思っています。

——専門を掘り進めていくのと、広げていくのと、どちらがいいと思いますか。

僕はこれまではずっとひとつのテーマに絞って研究するのがいいと思っていました。でも、研究室の松原誠二郎先生がいろいろなことに興味を持たれる方で、その影響もあり最近は何でもやってみようという気持ちが強くなってきています。松原先生は美術品とか陶器などにも興味をお持ちです。専門分野にとらわれない感性が大事なのだと思い、僕も時間があれば美術館に行ったりしています。どんなことでもすべて学ぶことには意味があるとこの頃、つくづく思うようになりました。高校生のときに古文などももっと勉強しておけばよかったなと今頃思っています。

本当にやりたいことを見つけるためにも、いろいろなことをした方がいいのかなと…。今40歳ですけど、あと10年くらいはいろいろやってみて、その次の10年でそれを仕上げると感じかなと思っています。

——いろいろやってみたいということであれば、他の分野の先生やほかの大学の先生との交流も多いのでしょうか。

「SPring-8」では、他の研究室の方と一緒に機能性触媒による二酸化炭素の資源化というテーマで研究しています。ヘモグロビンの補酵素であるポルフィリンを触媒に使うのですが、それがどう働いているのか調べるためには「SPring-8」の設備が必要なのです。

自分たちだけでは取り組めないとこは、どんどん研究協力者を増やしていこうと思っています。

——本当にいろいろな研究をされていますが、混乱することはありませんか。

今のところは大丈夫です。てんてこ舞いしているところはありますが(笑)。とにかく既存の高分子構造を有する材料だけでなく、新たな高分子構造を持つ材料の創製にこれからも挑戦していくつもりです。