

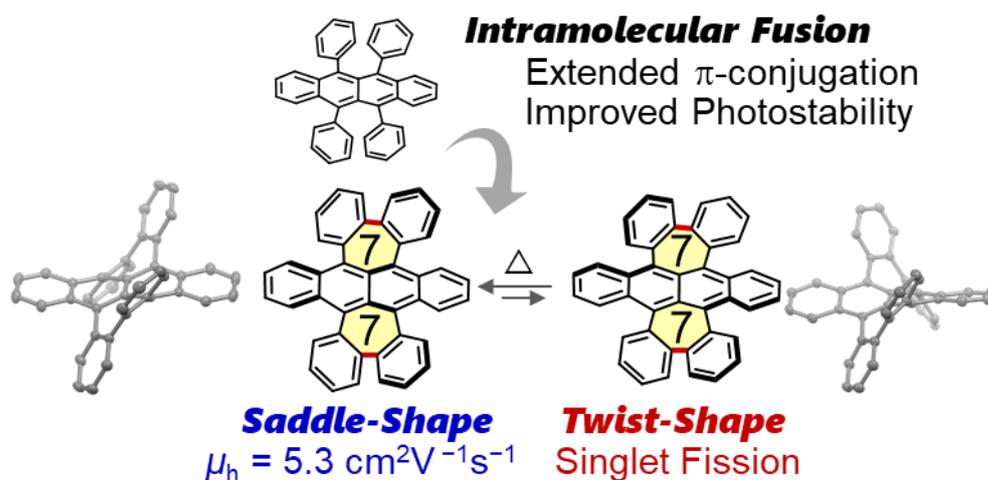
# 分子を「曲げる」ことで有機半導体の光耐久性を向上

—光に強く高性能な次世代材料の開発に成功—

## 概要

合成・生物化学専攻の久田雅人博士後期課程学生、清水大貴助教、松田建児教授は、理化学研究所・Kirill Bulgarevich 博士、瀧宮和男チームリーダー、分子工学専攻・筒井祐介助教、関 修平教授、九州大学・宮田潔志准教授と共同で、優れた半導体特性を持つことで知られる有機分子ルブレンの構造を改良し、骨格内に七員環を組み込んだ新しい有機半導体材料（縮環ルブレン：FR）の開発に成功しました。従来のルブレンは、炭素と水素のみから構成される有機半導体として最高クラスの性能を持つ一方で、光や酸素に弱く劣化しやすいという実用上の大きな課題がありました。本研究では、分子の骨格を繋ぎ合わせ（縮環）、さらに七員環を導入して分子を湾曲させることで、ルブレンの優れた性能を維持したまま、光に対する安定性を飛躍的に高めることに成功しました。また、ミクロな分子の曲がり方の違いによって光学的・電気的性質が変化することを明らかにし、次世代デバイスに向けた新たな材料設計指針を提示しました。

本研究は 2026 年 2 月 18 日、米国化学会の旗艦誌『*Journal of the American Chemical Society*』148 巻 6 号に掲載されました。



本研究の概要図：ルブレン（上）を縮環させた構造を有する FR 分子（下）が 2つの配座異性体（左右）として存在することを示している（作成：久田 雅人）

## 1. 背景

有機半導体は、軽くて柔らかく、印刷技術による安価な製造が可能であることから、次世代のフレキシブルディスプレイや太陽電池の鍵として期待されています。その中でもルブレンという分子は、電気の担い手である電荷の移動しやすさ（移動度）が炭化水素分子の中でトップクラスの値を示すことから、長年研究されてきました。しかし、ルブレンは空気中で光に当たると、酸素と反応して容易に酸化・分解してしまうという致命的な弱点があり、これが実用化を阻む一因となっていました。ルブレンは炭素原子が六角形に並んだ構造から構成されています。このように手が3本の炭素原子が六角形に並んだ構造はベンゼンやグラフェンといった炭素系化合物によく見られる骨格であり、平面状の物質を形成する特徴があります。一方、六角形を基礎とした炭素骨格の中に七角形（七員環）のような非六員環構造を組み込むと、分子は平面から鞍（くら）型やねじれ型へと湾曲します。このような曲がった構造を持つ芳香族化合物は、その曲がり具合（曲率）に応じて特異な性質を示すことが知られていますが、高性能なルブレン骨格にこれを適用し、その安定性や機能の変化を詳細に解明した例はありませんでした。そこで、我々はこれまで複数の七員環構造を導入した分子を合成・調査してきた経験をもとに、縮環ルブレン **FR** 分子をターゲットとして研究を開始しました。

## 2. 研究手法・成果

これまで有機合成化学の分野で七員環構造の構築に広く用いられてきた酸化的な合成手法をルブレンに適用しても、目的の **FR** 分子が得られないことはすでに報告されていました。そこで、還元的な条件（山本カップリング反応）を利用してルブレンに七員環構造を導入する独自の合成経路を開発し、**FR** 分子を得ることができました。X線を用いた構造解析により、この新分子 **FR** には「鞍（くら）型」と「ねじれ型」という曲がり方の異なる2つの状態が存在することを明らかにしました（図1）。この2つの構造を持った分子は分離することができ、熱によって互いに入れ替わる性質を明らかにしました。

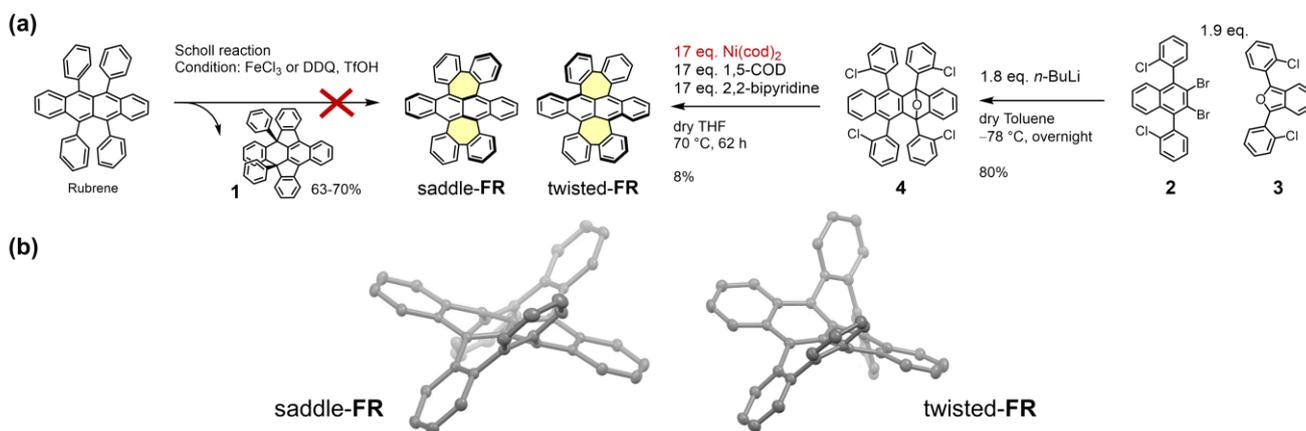


図1. (a)FR分子の合成と(b)2つの構造

**FR** 分子の光照射に対する安定性を評価したところ、従来のルブレンが3.3時間で半分まで分解してしまう条件下において、**FR** 分子の半減期は約5日間（鞍型）から約3週間以上（ねじれ型）と、安定に存在することが確認されました。また、観測された分子の曲がり方による安定性の違いの由来を量子化学計算を用いて評価しました。さらに、鞍型 **FR** 分子を用いた単結晶トランジスタにおいて、ルブレンに匹敵する高い電荷移動度 (5.33 cm<sup>2</sup> /Vs) を達成しました。またねじれ型 **FR** 分子の薄膜では、1つの光子から2つの励起子（電気

の元) を生み出す一重項励起子分裂と呼ばれる現象が、極めて高速 (7.2 ピコ秒) に進行することを発見しました (図 2)。

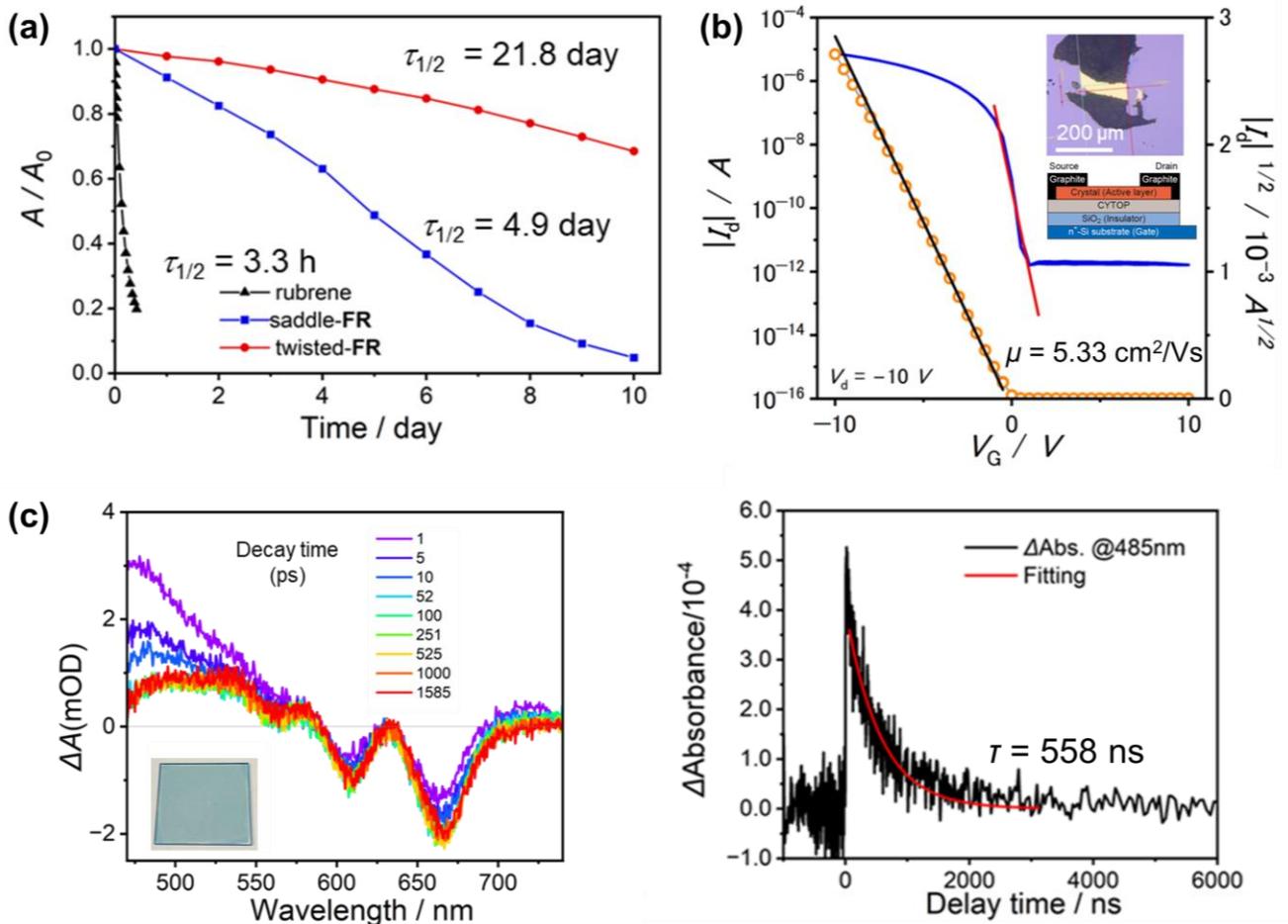


図 2. (a) FR 分子とルブレンの光耐久性の比較、(b) 鞍型 FR 分子の FET デバイス特性、(c) ねじれ型 FR 分子の過渡吸収スペクトルと生じた励起三重項種の減衰

### 3. 波及効果、今後の予定

本研究は、高性能だが不安定だった有機材料の骨格に七員環を導入し形状を制御することで、安定性と高い性能を両立できることを実証しました。分子の曲がり具合を調整することで、半導体としての性能や光への応答性を自在に操れる可能性を示しました。今回合成された構造は、理論的に存在が予測されている未知の 3 次元炭素材料シュワルツァイトの部分構造にも相当します。この成果は、未来のナノ炭素材料の実現に向けた重要な一歩となります。

### 4. 研究プロジェクトについて

本研究は以下の支援を受けて行われました。

- ・ 日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤研究(B) 23K26641
- ・ 文部科学省 学術変革領域研究(A)「高密度共役の科学」 20H05866, 20H05868
- ・ JST 創発的研究支援事業 (FOREST) JPMJFR2427
- ・ JST 戦略的創造研究推進事業 (さきがけ) JPMJPR21Q5

## <用語解説>

**有機半導体**：炭素を主成分とする有機化合物でありながら、シリコンなどの無機半導体のように電気を流す性質を持つ材料。軽量で柔軟性があり、プリンターに使われているインクジェット技術を用いて塗布・印刷することで安価に電子デバイスを作製できるため、次世代のディスプレイや太陽電池の材料として注目されています。

**ルブレン**：代表的な有機半導体分子の一つ。炭化水素分子の中でも極めて高い電荷移動度（電気の運びやすさ）を示すため、長年研究されてきました。しかし、光と酸素によって分解されやすい性質が実用化の課題となっていました。

**電荷移動度**：半導体中における、電荷（電気の運び手）の移動しやすさを示す指標。この値が高いほど、電子デバイスとしての動作速度が速く、高性能であることを意味します。

**一重項励起子分裂**：1つの光子を吸収して生成した一重項励起子から、2つの三重項励起子が生成される現象。太陽電池に応用すると、理論上、1つの光から2倍の電流を取り出せるようになるため、エネルギー変換効率を飛躍的に高める次世代技術として期待されています。

**シュワルツァイト**：数学的に定義された「負の曲率」を持つ周期的な最小曲面（シュワルツ面）に沿って、炭素原子が配列した未知の3次元炭素材料。グラフェン（平面）、カーボンナノチューブ（筒状）、フラーレン（球状）に続く、新たなナノ炭素材料として理論的に予測されています。

## <論文タイトルと著者>

タイトル：“Fused Rubrene Derivatives with Embedded Seven-membered Rings: Curvature-dependent Photophysical and Semiconductor Properties”

（七員環を埋め込んだ縮環ルブレン誘導体：その曲率に依存した光物理特性および半導体特性）

著者：Masato Hisada, Kirill Bulgarevich, Yusuke Tsutsui, Kiyoshi Miyata, Daiki Shimizu,\* Shu Seki, Kazuo Takimiya, and Kenji Matsuda\*

掲載誌：Journal of the American Chemical Society, 2026, 148, 6716–6726.

DOI：10.1021/jacs.5c22771