

公益財団法人 立松財団 御中  
様式 2021A1,A2,B

2025 年 10 月 30 日

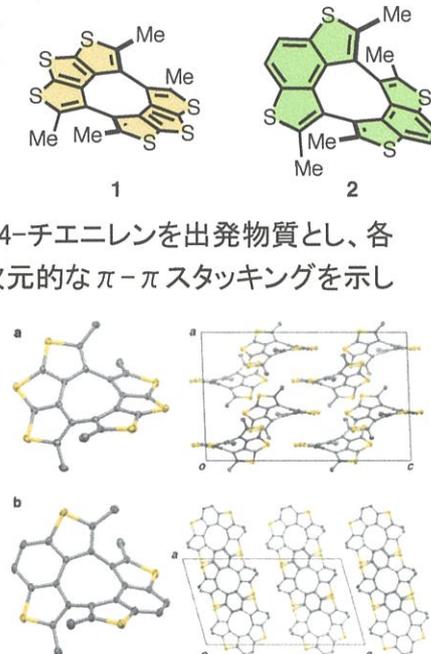
所属:自然科学研究機構分子科学研究所

氏名: 瀬川 泰知



## 2024 年度 助成 研究終了報告書

※ゴシック文字で記入下さい。

研究テーマ	計算化学スクリーニングを併用した3次元電荷輸送材料の効率的探索と開発
研究の結果	<p>本研究はねじれ非平面構造をもつ<math>\pi</math>共役分子の計算化学スクリーニングと合成化学の併用による効率的探索を目的として研究を行っている。本研究期間(2024.10~2025.03)においては、ジチエノチオフェンダイマー(右上図 化合物 1)およびベンゾジチオフェンダイマー(右上図 化合物 2)を設計し、合成とX線結晶構造解析を行った。合成は既報のシクロ[4]3,4-チエニレンを出発物質とし、各4段階で合成した。X線結晶構造解析より、化合物 1 は 3 次元的な<math>\pi</math>-<math>\pi</math>スタッキングを示し(右下図 a,b)、一方で化合物 2 は<math>\pi</math>-<math>\pi</math>スタッキングによって2次元シート構造を形成していた(右下図 c,d)。これらは平面分子のスタッキングとは異なるものであり、基板との配向性に寄らない結晶性半導体分子として有用であると期待される。計算科学により単結晶中のホール輸送能を計算したところ、化合物 1 については 3 次元の全ての方向について、化合物 2 についても 2 次元シート方向に高いホール輸送能が発現することが示唆された。</p> 
研究発表 (実績)	<p>「ひずみ乗り越える3次元<math>\pi</math>共役構造の合成戦略」 瀬川 泰知 光機能物理化学セミナー 立命館大学びわこくさつキャンパス 2024 年 5 月 16 日(招待講演)</p> <p>Synthesis of fully fused tetrapyrzainoporphyrazine polymers bearing three-dimensional structures controlled by steric repulsion Kosuke Watanabe, Teruki Toya, Yuto Toyota, Yoichi Kobayashi, Junichi Usuba, Yuh Hijikata, Ryotaro Matsuda, Katsuyuki Nishimura, Haruki Sugiyama, Yasutomo Segawa* Chem. Commun. 2025, 61, 2822–2825.</p> <p>Diverse tetracyanodihydrodipyrzainopyrazine clathrate crystals assembled from weak intermolecular interactions Kosuke Watanabe, Haruki Sugiyama, Yasutomo Segawa* CrystEngComm 2025, 27, 3552–3559.</p> <p>Synthesis, structure, and properties of twisted <math>\pi</math>-conjugated molecules featuring three-dimensional <math>\pi</math>-<math>\pi</math> interactions in solid states Mai Nagase, Ryu Yoshida, Sachiko Nakano, Takashi Hirose, Yasutomo Segawa* Chem. Commun. 2025, 61, 11187–11190.</p>

提出期限: 研究期間終了後、すみやかに助成金の「必要経費使途明細書」「領収書」と合わせて提出下さい。  
年度をまたぐ場合は毎年3月末日までに、途中経過をご記入の上、報告願います。