

多孔性金属錯体を用いたポリアルキルチオフェンの頭尾結合の識別と分離

(東大院工¹・東大院新領域²) ○高島 優¹・澤山 拓²・細野暢彦¹・植村卓史¹
 Recognition and Separation of Head-to-Tail Polyalkylthiophenes by Metal–Organic Frameworks (¹*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*, ²*Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo*) ○Yu Takashima,¹ Taku Sawayama,² Nobuhiko Hosono,¹ Takashi Uemura¹

Poly(3-hexylthiophene) (P3HT) is a widely studied semiconductive polymer in the field of organic electronics. The electron conductivity of P3HT is known to be significantly influenced by the regioregularity (RR) of the main chain, making regioselective polymerization techniques crucial for achieving high-performance P3HT. However, conventional polymerization approaches face challenges related to catalyst design and technical complexity.^{1,2} In this study, we developed a structure recognition and separation technique using nano-sized pores of metal-organic frameworks (MOFs) to give a new approach to obtain regioregular P3HT. We discovered that certain MOFs recognized regio-isomers of P3HT oligomers (dimer and tetramer) upon adsorption into the nanopores. Based on this finding, we successfully developed a column chromatography method using the MOFs as the stationary phase. This approach allows for RR-based separation of P3HT, enabling the extraction of highly regioregular P3HT from crude materials with lower RR.

Poly(3-hexylthiophene) (P3HT)は、有機エレクトロニクス分野において広く研究が行われている代表的な有機半導体高分子である。P3HTの導電性を向上させるためには高い頭尾結合割合（Regioregularity, RR）の実現が不可欠であるが、従来の合成方法では触媒設計や技術的煩雑さといった課題が残されていた^{1,2}。そこで本研究では、高いRRのP3HTを得る全く新しいアプローチとして、多孔性金属錯体（MOF）が持つナノサイズの細孔を利用した精密な構造認識技術を開発した（Figure 1）。

数種のMOFを用いたオリゴチオフェン（二量体および四量体）の分離実験により、適切な細孔径の選択により結合位置異性を識別可能であることを発見した。また、MOFの細孔内にP3HTを直接導入する実験を試みたところ、RRが高いP3HTが選択的に吸着されることを見出した。さらに、同MOFを充填剤とした分取用カラムを作成し液体クロマトグラフィーを用いて分離することで、P3HTの粗重合生成物からRRが高いP3HTを選択的に抽出することに成功した。

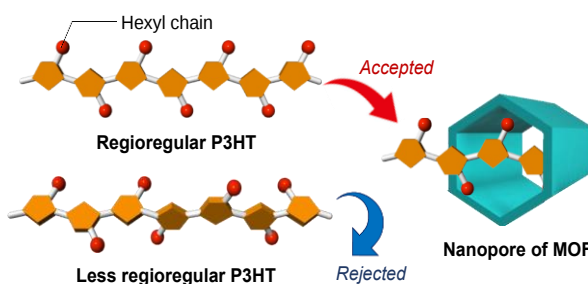


Figure 1. Schematic diagram of the regioselective adsorption of P3HT in the nanopores MOFs.

- 1) Y. Kim, et al., *Nat. Mater.* **2006**, 5, 197-203.
- 2) P. Kohn, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 4790-4805.