

フラーレンの部分構造を繰り返し単位とする一次元共役ポリマーの合成と物性

(京大院工¹・京大 WPI-iCeMS²) ○中村 伊吹¹・高木 周¹・深澤 愛子²

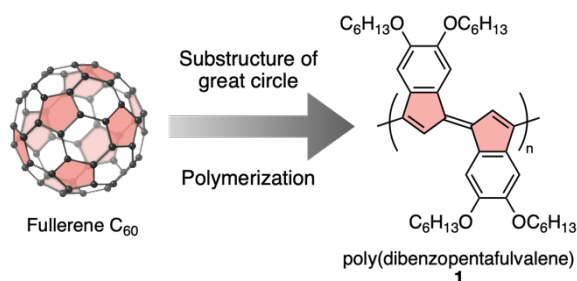
Synthesis and properties of one-dimensional conjugated polymers bearing a fullerene fragment as the repeating unit (¹*Graduate School of Engineering, Kyoto University*, ²*WPI-iCeMS, Kyoto University*) ○Ibuki Nakamura,¹ Shu I. Takagi,¹ Aiko Fukazawa²

One-dimensional (1D) conjugated polymers with pentafulvalene as the repeating unit feature a backbone that corresponds to an extended 1D fragment of fullerenes. These polymers have been theoretically predicted to exhibit high electron affinity and an exceptionally narrow band gap.¹ In addition to their potential applications in organic optoelectronic materials, they are compelling target compounds from a fundamental scientific perspective, as they challenge the limits of 1D π -conjugated systems. We recently established a synthetic method for conjugated oligomers with dibenzopentafulvalene as the repeating unit.² Based on these insights, we pursued the synthesis of a high polymer, poly(dibenzopentafulvalene) (**1**). Polymer **1** was successfully synthesized via polycondensation using a dibromopentafulvalene intermediate bearing long-chain alkoxy groups. UV/Vis/NIR spectroscopy revealed that **1** exhibits a markedly narrow optical bandgap of 1.31 eV. These results provide the fundamental insights into the potential applications of conjugated polymers based on the fullerene substructure.

Keywords : Pentafulvalene; π -Conjugated Polymer; Narrow Bandgap; Cross-Conjugation; Near-Infrared Absorption

ペンタフルバレンを繰り返し単位とする共役ポリマーは、フラーレンの一次元部分構造を展開した構造を主鎖にもつ。このポリ(ペンタフルバレン)は高い電子受容性や極めて狭いバンドギャップを有することが理論的に予測されており¹、有機光・電子機能性材料への応用の可能性が期待される。また、一次元 π 共役系の限界への挑戦という基礎科学の観点からも魅力的な標的化合物であるが、未だにその合成は報告されていない。一方、我々はごく最近、ジベンゾペンタフルバレンを構成単位とする共役オリゴマーの合成法の確立に成功した²。この知見を基に、本研究ではさらに高分子量のポリ(ジベンゾペンタフルバレン)**1**の合成に取り組んだ。

側鎖に長鎖アルコキシ基をもつジブロモペンタフルバレンを鍵中間体とする重縮合により、**1**の合成に成功した。薄膜の紫外可視近赤外吸収分光により、**1**は1.31 eVと極めて狭い光学バンドギャップをもつことがわかった。この結果は、フラーレンの部分構造を基盤とする共役ポリマーの有機電子材料への応用の可能性を拓く基盤的な知見といえる。



[1] S. Y. Hong, K. W. Lee, *Chem Mater.* **2000**, 12, 155. [2] (a) A. Fukazawa *et al.*, *Nat Commun.* **2023**, 14, 2741. (b) S. I. Takagi, A. Fukazawa *et al.*, The 104th CSJ Annual Meeting, E1122-3am-09 (2024).