

CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol.02

空隙の中の電子 関 修平 (京都大学)

学術の変革って何だろう

「高密度共役の科学」という研究者集団のなかで、また一つ新しい研究に取り組んでみることにした。研究する人生の中で、何か新しい着想からただ前に進むのではなく、少しジャンプしてみる機会は、そういえばそんなに無いのかもしれない。幸せなケースで50年、いや40年科学研究に携われるとしても、おそらくジャンプできるのは3回か4回、1度もジャンプの無い研究人生を選んだ人の方が多いのではないかしら。

今回、「学術変革領域研究」という名前に惹かれた部分も実はかなりある。世でよく言われる、「イノベーション」という言葉にすっかり飽きてしまった私は、研究する者の性として何か言葉を探していて、「変革」がすっと腑に落ちてしまった。そして私にとって幸せだったのは、この領域の研究の計画を考えていくうえで、とても大事な相談相手に恵まれていたことだ。そのことを、ようやくスタートラインに立てるようになってつくづく思う。「何を変革するのか」、こうして言葉にしてみると、やらなければならないことがとてもすっとわかる気がする。「何をイノベーションするのか」と書いても、なんだかあいまいな気がするでしょう？

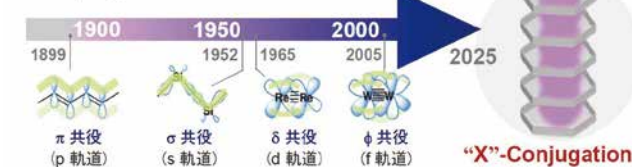
何を変革するのか

変革する対象として選ぶ先はすぐに見つかった。あんまり長くもない私の研究人生の中で、AとBのどちらを選びなさいな、と問われたら、なるべく長く残るものを選ぶ、というのが最近の私の行動原理だからだ。化学と物理の世界で、有機物質を対象にして最も古くから信じられているものは何か。答えは高等学校の教科書をみればすぐに見つかる。August Kekuléか

Friedrich Thieleか、ともかくも有機化学のページを開けば真っ先に出てくるBenzeneとその電子しかないだろう。 π (電子)共役という言葉は、すでに120年の歴史を持っているが、いまだその考えは揺らいでいない。ならば、こいつを「変革」してみたい(我ながら大きく出たものだ)。

一方で、私が化学の世界に足を踏み入れたのは、Siを中心にした σ 共役の世界だった。誰もが習うs, p, d, f軌道電子をもとにして、それぞれ σ ・ π ・ δ ・ ϕ 共役が成立していることを「変革」の端緒にしてしまおうと考えた。そもそもどうしてs, p, d, f軌道なのかしらと考えていて、原子吸光・発光のスペクトルの形状から、それぞれstrong (またはsharp)・principal・diffuseの頭文字であることには思い至ったが、残るひとつは何だったか。これがfundamentalであることを、原典とともに教えてくれたのは、最も最初にこの研究計画を立案した岸田英夫さん(名古屋大学・応用物理学専攻・教授)だった。

Conjugationの始まりから現在



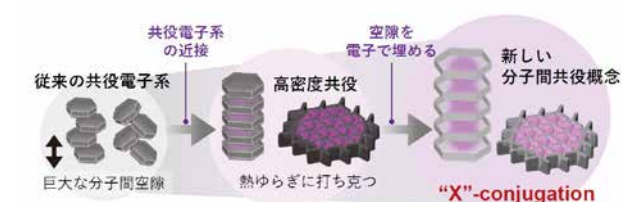
さあ、 π 共役は当然ながら化学結合の軸と共に成立している。それは100年以上前に定義された、一つの電子を複数原子核ポテンシャルが共有することによるエネルギー利得(単に非局在と言えればそれで済むのだけれど...)であって、これはもはや揺るがないだろう。では、この定義の上に成立する共役が、そ

もそも多体問題の解であるのにも関わらず、一つの原子が孤立しているときの電子の軌道角運動量の分類によって定義されるだけでいいのかな? 多分、考えてみれば高校生か、場合によっては中学生だって思いつく、そんな単純な疑問からこの研究の着想は生まれた。

新しい電子の共役

空間を介した(化学結合を介さなくてもよい)電子の“共有”によるエネルギー利得・物質そのものの安定化、を改めて私たちの手できちんと示したい、そんな根源的な欲求がこの学術変革研究領域の発端を成している。我々はそれを、ひとまず“X”-conjugationと呼ぶことにした。“X”の中には何が入るのか、はたまた全く別の定義をせねばならぬのか、そんな問いに対する答えを、5年間で出してみたいと思う。これまで進歩してきた共役系の考え方をジャンプアップさせる——というよりは、発展軸の向きを少しばかり変えてみたい、というイメージだ。

空隙を電子で埋める = 新しい電子共役: “X”-Conjugation



物理と化学、とりわけ化学の世界では、実際に新しい電子共役によって成立する物質を手にするうえで、van der Waalsの示した極限以下に分子を近づけること(具体的には0.3 nmというラインを考えている)、電子配置図で新しい電子状態(軌道)・使っていなかった状態にできる限り電子を詰め込むことは、どちらもおそらく物理化学・有機化学の教科書の最初の章で議論されていることへの挑戦なのだと思う。

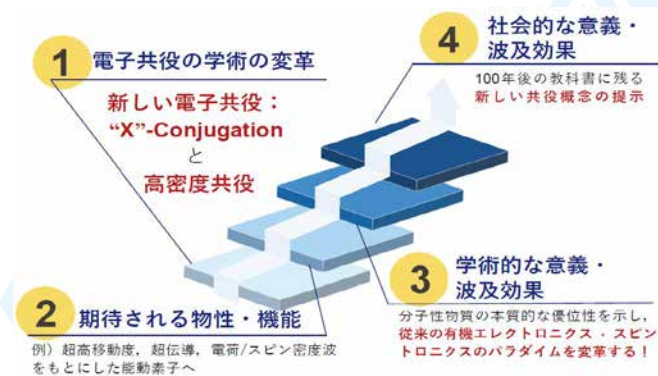
「新しい共役」とは、どんな元素に基づくものになるのだろうか。電子にまつわるあらゆる物性——スピン、質量、磁性などなど——を引き出しうる元素はやはり炭素だろう、というのが我々の主張だ。炭素と炭素の結合は他のさまざまな元素の化学結合に比べ圧倒的に短く、高密度に電子を詰め込むには、最も適している。有機材料について語られる時、しばしば柔らかさ、成形しやすさがその特性として挙げられる。だが、それは決して分子性材料の本質ではない。実現しうる物性の、破格のダイナミックレンジ

こそが、その本質だと考える。

少し先の未来に向けて

COVID-19によって、新しい着想に進む議論の機会は決定的に少なくなっている。しかも、「高密度共役の科学」の研究はまだ始まろうとしている段階だ。でありながら、着実に少しずつアイデアは生まれてきている。こうしているうち、また少しこの研究者集団から生まれるものへの“欲”が出てきた。どうせなら、教科書の最初の章を書き換えるだけの新しい概念を生み出したい、100年後の教科書にも残っているように。

「高密度共役」のタイトルから想像されるのは、共役電子系をどのように実際の世界に、人間社会に役立てるのか、という点への志向かもしれない。そういった側面も持っていて、それを否定するものでももちろん無い。けれど、身の回りを見渡してみても、電子材料や磁性材料・光学材料、またそれらを用いている装置の中で、20年、いや10年前からであれ変わらず用いられているものがいったいどれだけあるだろうか?(そう考えればSiはすごいなあと思う反面、挑む価値のある物質なのだろうとつくづく思う。)



“知恵”を創る場所で活動する以上、自分の生み出した“知恵”を、その波及効果の大小にかかわらず、数行の文章・概念としてでもいいから、できる限り長く残してみたい、そしてそれが今回の“X”-conjugationに込めた意味でもある。世の趨勢からはいささか逆行する向きなのかもしれないけれど、こんな理念で共に研究をしたいと思ってくれる、最近では珍しい諸氏の参加を期待したい。

“X”-conjugationの世界から、物理化学・物性物理を担うものとして、何を期待し、何を想像・創造しようとしているのかについては、当然、今回の“化学”の側面からとは異なる考え方を持っている。機会があればまたそれも思うままに書いてみたい。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>