



CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol.07

高密度共役を視る

竹延 大志 (名古屋大)

熊井 玲児 (高エネルギー加速器研究機構)

福井 識人 (名古屋大)



竹延博士

熊井博士

福井博士

——今回はA03班のみなさんにお話を伺います。関修平さん(京都大)は領域全体のリーダーとしてすでに登場いただいていますので、その他のお三方をお願いします。まずA03班の代表である竹延さんに、この班のミッションについて伺います。

竹延 我々のミッションは、一言でいえば「高密度共役を視る(観測する)」です。A01班・A02班が合成した様々な分子から「高密度共役」を見つけ出します。加えて、A01班・A02班が合成した様々な分子から材料の目利きを行い、特に有望な材料をA04班に委ねるのも大きな役割です。化学サイドと物理サイドの架け橋的な位置付けともいえます。

——最初に「高密度共役」というコンセプトを聞いて、どのように感じましたでしょうか？

竹延 物質を「高密度」化する発想は、ある意味でスタンダードで、物理の世界では当たり前のように圧力を駆使します。ただ、「高密度」の先に「新しい共役」があるという発想は全くありませんでしたので、衝撃を受けました。まさに、物理と化学を知り尽くした関さんだからこそ産み出せるコンセプトだと思いました。

熊井 水素結合や電荷移動錯体を用いた誘電体での分極発現機構に関連して分子間の電子分布には興味があったのですが、分子間を高密度にして、電子の共役状態を実現させるというコンセプトを聞いたときは、新しい概念で非常に面白いと思いました。

福井 シンプルでかつ斬新なコンセプトだと思います。私はかねてより世界でナンバーワンを目指す研究に憧れがありました。また、このようなトップを目指す研究が、単なる科学者の興

味に留まらず、様々な形で私たちの生活を豊かにしたことは言うまでもないでしょう。本領域が目指す“最短の面間距離”や“ π 共役分子の最密充填”は、まさに現代の科学者にうってつけの明確な到達目標だと感じています。

——みなさんの専門領域について教えてください。

竹延 私が得意とするのは、物質の電荷を様々な手法で増減させる「ドーピング」という方法でして、これを柱にします。この「ドーピング」を駆使しながら限界まで物質に電荷を詰め込み、素子構造を用いた機能化や各種圧力導入技術と融合させて「高密度」な状態を作りつつ、物性評価手法を駆使して「共役を視る(測定する)」ことに挑戦したいと思っています。

熊井 放射光などの量子ビームを用いた計測が主な手法になります。特に回折や散乱を使って分子や結晶の構造や電子状態を見ること、またそこから物性発現機構を解明するようなことを考えています。

福井 私の専門は構造有機化学です。A03班では「化学的知見にもとづく物質選定」という大仰な役割を仰せつかっていますが、「丁稚奉公」と勝手に言い換えています。まだ研究者としての一步を踏み出したばかりですので、フットワーク軽くA03班の先生と共同研究を実施し、そこで得た知見を他班の先生方に共有できればと思います。

——進行中、あるいは共同研究の予定はありますか？

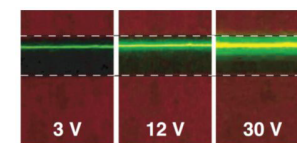
竹延 先ほど言いました通り、A01班・A02班が合成した様々な分子に極限まで電荷を詰め込みつつ、圧力を加えるのが基本線です。それ以外ですと、A01班の皆さんから発光性の材料

を供給していただき、「ドーピング」技術と組み合わせて新しい発光素子を作りたいです。A02班の皆さんの材料には、熱電効果が面白いかもしれません。また、A04班の皆さんが目指す機能化にも、私が得意とする技術を提供したいです。

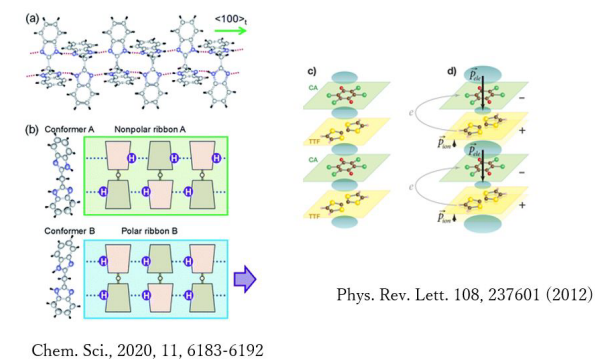
熊井 精密構造解析で高密度な電子状態を観測すること、また、圧力などの外場を利用して高密度状態を作り出すことなどを考えており、これから進めていきたいと思っています。領域内の研究者の方が作り出すものを、興味深く見させてもらっています。福井 熊井さん、忍久保さんとの共同で、反芳香族分子であるノルコロールの π 平面間に非局在化する電子を実験的に可視化することを狙っています。

——最近の研究のトピックを教えてください。

竹延 一つには、導電性高分子に限界まで電荷を詰め込みつつ、物質中での電荷や熱の振る舞いを調べています。高分子と言えば絶縁体の代表選手ですが、限界まで電荷を詰め込んだ結果、金属となることを確認できました(*Sci. Adv.*, 2020, 6, eaay8065-1-8, *Commun. Phys.*, 2021, 4, 8-1-9)。今は、様々な方法で圧力を加えています。もう一つは、プラスの電荷(正孔)とマイナスの電荷(電子)を同時に詰め込んで、LEDに用いられるpn接合を作り、発光素子を作製しています。特に、圧力を駆使すると円偏光発光を室温で実現できることがわかりました(*Adv. Matter.* in press)。



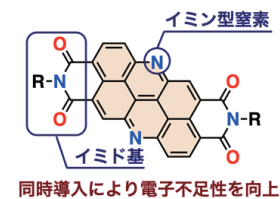
熊井 計測が主なので、有機物の物質系以外の研究にもいろいろと携わっておりますが分子性の誘電体関連の研究(*Chem. Sci.*, 2020, 11, 6183-6192; *RSC Adv.*, 2019, 9, 39662-39673)は以前から継続して行っています。また、この領域で関連しそうな計測技術として、圧力や電場などの外場下での構造解析や回折



実験なども行っています(*J. Phys. Soc. Jpn.* 89, 044710 (2020); *Phys. Rev. Lett.* 108, 237601 (2012); *Phys. Rev. B* 99, 125133 (2019))。

福井 私は「既存の分子に対する骨格内部の変換」という視点に基づき新しい π 共役分子を作っています。この戦略のもと、最近ではペリレンビスイミドに元素を挿入した分子をいくつか報告しました(*J. Am. Chem. Soc.*, 2019, 141, 19807; *J. Am. Chem. Soc.*, 2020, 142, 11663; *Asian J. Org. Chem.* 2021, 10, 541; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, in press (DOI: 10.1002/anie.202104882))。

その過程で、アクリジノアクリジンビスイミドという新規n型有機半導体分子を創出しました(*Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, in press)。この分子は、アンタアントレンというPAHに対して、イミン型窒素とイミド基を2つずつ導入したものに相当します。今後はこの「イミンとイミドの同時導入」という視点に基づき、徹底的に電子不足性を低下させることで交換反発を低減させた π 共役分子を創出し、高密度共役の科学に貢献できればと思っています。



——この領域で、個人的に目指すところは？

竹延 個人的に目指すところはいつも変わらず、みんなが「あっ」と驚く新しい概念や機能です。高密度化させた分子には、きっと新しい概念や機能がたくさん埋まっていると思いますので、それらを掘り起こすのがとても楽しみです。

熊井 学生のころに有機合成をやっていたのですが、その後専門が少し離れてしまったこともあり、物質開発の話聞くのは新鮮で楽しいです。先端的な計測技術と物質開発、物性開拓の間をつなぐような交流を進めるよい機会だと思っています。その結果として新奇な物性の発現や新しい概念を生み出すことに繋がればよいかな、と思います。

福井 私は独自の設計で新しい分子を作ることを研究主題としています。ここでは分子の設計や合成が中心であり、物性については出たところ勝負であるのが実情です。高密度共役には様々なフィールドの先生方がいらっしゃいますので、常にこれらの方々と共同研究を模索しながら、独自分子の真の価値を明らかにしたいと思っています。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>