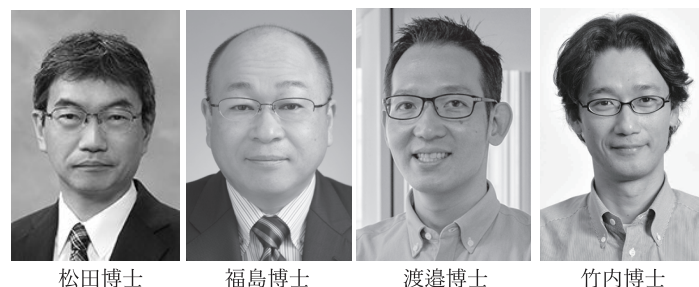


CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol.08

集積化から機能へ

松田 建児(京都大)
福島 孝典(東京工業大)
渡邊 峻一郎(東京大)
竹内 正之(物質・材料研究機構)



—今回はA04-1班のみなさんにお話を伺います。まず代表である松田さんに、この班のミッションについて伺います。

松田 我々は、「分子を集積させて機能を引き出すこと」を目指しています。より具体的にいえば、空隙を最小化した高密度共役状態を高密度集積化により達成し、励起子・電荷・スピン・フォノンの状態を次元性も含めて制御し、物理量変換(光⇄電荷⇄スピン⇄熱)の実現を目指すのがA04班のミッションです。この実現のため、有機材料化学の福島さん、デバイス物理の渡邊さん、超分子化学の竹内さんと、それぞれの分野で活躍するメンバーが集まっています。

—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？

松田 分子という概念を、超越しようと考えているのだろうと思いました。究極的には、結晶内に分子同士が密に詰まった3次元空間の中を、電子が自由に動き回るような姿を想像しています。金属結晶のようですが、そこに有機化合物ならではの設計自由度が加わるというのが重要だと思います。もちろん実現は難しく、クラシカルな考え方をしているにはできません。構造有機化学、物理有機化学、物性物理学の協力が要と思います。

「高密度共役」という言葉を通して、いろいろなものが統一的に見られるようになってきたと思います。これも高密度共役の考えで説明できるな、というものがあちこちで見えてきました。

福島 機能団間の相互作用を最大化することは、磁性や熱伝導、その他新しい機能や現象の発現につながると考えています。前身である「 π 造形科学」で生まれた化合物が、機能を追求

する段階に入っていますので、高密度共役はこれにマッチする、連続性のあるコンセプトと思っています。

渡邊 分子性固体のフレキシブル・プリンタブルという既存概念を超えて、分子集合体の結合という概念に着目したカッティングエッジな研究課題だと感じています。文科省が目指す新学術の発展という理念に相応しい研究課題だと思っています。

竹内 分子デザイン、分子周りのデザイン、空間のデザインというのはなじみがありますが、空隙のデザインというのは新鮮で驚きました。それも分子間電子共役(=高密度共役)のためです。分担者としてもこの領域の進む方向性に貢献したいと思っています。

—領域に貢献するために考えている手法、アイデアは？

松田 STMを用いて分子を直接観測しながら固液界面での2次元単層分子配列の集積化プロセスを検討する手法が、2次元大面積稠密集積化に役立つのではと思っています。

福島 配向や配列を制御しつつ、いかに分子を近接させるかを考えています。たとえば以前開発したオリゴo-フェニレン類は、極めて高密度に電子が詰め込まれた構造ですので、これを活かしてみたいと思っています。

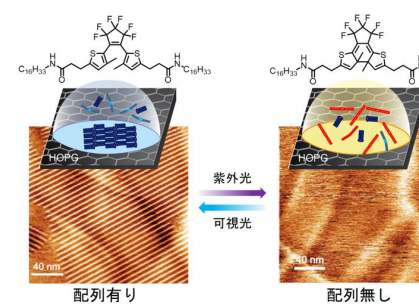
渡邊 電荷の高密度化の極限に、どのような物性が発現するか興味があります。特に、電荷を一杯詰め込む=ドーピング手法に関して様々なオリジナル手法を持っています。また、極低温までの電子輸送の計測・スペクトロスコーピー等を通じて、物性計測の観点から領域に貢献できるかと考えております。

—進行中、あるいは共同研究の予定はありますか？

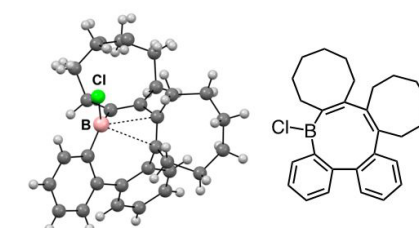
福島 竹延さん、渡邊さんとは薄膜の物性、無機材料との複合化の研究、須田さんとキラリティ誘起スピン選択性の研究、松田さんとはスピンの高密度集積化など、いろいろなテーマが動いています。

渡邊 現在、A04班内でいくつかの共同研究を進めています。福島さんとは高密度分子集合体の研究を、橋本さんとともに分子性固体の物性計測を進めています。今後、A01,A02班から様々な工夫を凝らした高密度分子性固体が出揃ってくるのではないかと期待しています。これらの材料をターゲットに、分子集合体の構築そして先進的な物性計測を実施したいと思っています。—最近の研究のトピックを教えてください。

松田 固液界面で、フォトクロミック分子が協同的に組織化した上、高感度な光応答性を示すのをSTMで観察することに成功しました。また、下限臨界溶液温度を示すジアリールエテンによる光誘起巨視的形態変化の観察にも成功しています。こうした知見は、高密度共役の推進に役立つものと考えています。



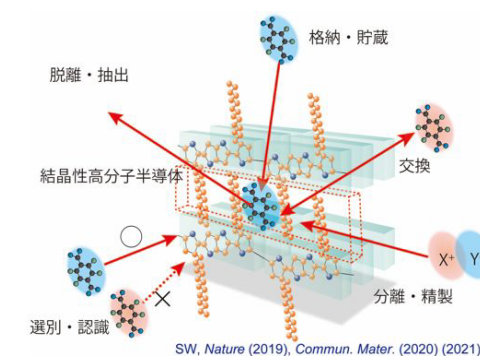
福島 ホウ素と不飽和結合の分子内相互作用について、最近報告しました。また、ボラフルオレンを用いた芳香環形成反応も、高密度共役研究に寄与するものと考えています。



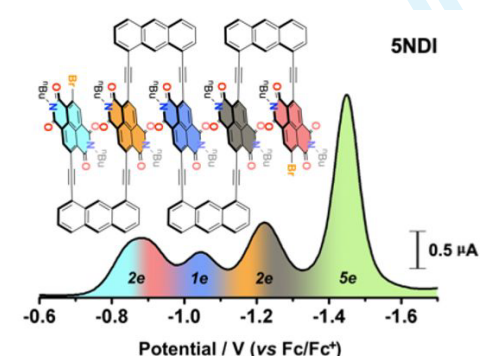
X-ray observation of a B-olefin proximal interaction
Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 14630.

渡邊 最近、高分子半導体の結晶の中の「隙間」を利用した材料科学を展開しています。nmサイズの隙間に自由自在にイオンや分子を出し入れできるようになり、高分子半導体の電子の量を精密に制御することができるようになりました。今後、領域のコンセプトの一つである、電子を高密度に詰め込むことを極めたいと

思っています。



竹内 複数のナフタレンジイミド(NDI)を分子内に集積することが可能なモチーフを最近報告しました(*J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 3238.).五量体においては1,8-ジエチニルアントラセンユニットで架橋しているNDIがanti型に集積していることがX線結晶構造解析より解っており、4電子酸化、10電子還元が可能で



—この領域で、個人的に目指すところは？

松田 新しい分子の新しい集合形態で新しい機能が見つければよいと思っています。

福島 π 造形では分子の新しい集合化現象を追っていましたが、この領域では機能の側面をより掘り下げてみたいと思っています。

渡邊 新学術を進展させるという観点で、分子性固体の電子伝導や物性が従来の固体物理の標準モデルでどこまで説明できるか?また標準モデルから外れる分子性固体の特異性は何か?ということ突き詰めたと思っています。

竹内 これまで参加させて頂いた特定領域、新学術領域の経験から、人的交流が大きく研究を後押ししてくれることが多いと感じています。オンラインの領域会議も大変刺激的で勉強になりますが、実際にお目にかかって話を伺うのが今からとても楽しみです。