



CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol.17

改めて、高密度共役とは？

齊藤尚平(京都大学)
久木一朗(大阪大学)



齊藤博士



久木博士

——今回も、新たに公募班としてこの領域に参画されたお二人に伺います。参画前、この領域をどのようにご覧になっていましたでしょうか。

齊藤 「X-conjugationって何のことだろう？」というのが第一印象でした。後日、領域代表である関先生が執筆されたエキサイティングな領域紹介文を読んだことで、壮大なビジョンを共有できたような気がしています。

久木 X-conjugationというキーワードに代表される今までになかった共役の概念を見つけ出すと本領域に対して、まがりなりにも π 共役系の分子を対象に日々研究を行っている身としては、是非とも関わりたいと思ったのが第一印象です。

——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？

齊藤 2D, 3Dに無限に広がる高密度共役系は無機物質との対比においても重要である一方、たとえば古くから知られているようなシクロファン型の「局所的高密度」をどのように展開して活かすのか、みんなで頭を捻ることになるのかなと感じました。

久木 電子やホールやその他「何か」を、どのように高密度集積させ共役させたいのか？目指すコンセプトと現状の化学をどうつなげていけばいいのか？私にはとても難解な問であり、それゆえにとてもワクワクしました。

——すでに領域内の先生方とは交流を持たれましたでしょうか？感想などありましたらお願いいたします。

齊藤 約半数のメンバーは、すでにお互いの仕事をよく知り合った方々ですので、何度も同じような話をするのは気恥ずか

しいです。なので、できるだけ新しいことに挑戦している姿をアピールできたらと存じます。物理に近い分野の同世代の先生方とは、交流を深める絶好のチャンスだと捉えています。

久木 これまでの領域(例えば π 造形科学)で一緒にさせていただいた先生方も多くいらっしゃるの、是非積極的に研究の相談をして共同研究へと展開できるように頑張りたいと思います。そういう意味では、オンラインミーティングは効率的ですが、やはり直接お会いして対面でお話ができる機会が、今後増えればいいなあと思います。

——ご自身の主要な研究分野を教えてください。

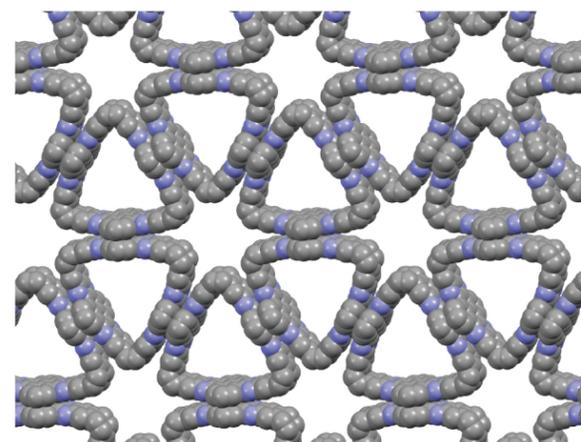
齊藤 私のベースになっているのは、光化学、構造有機化学の研究です。これら分野で培った知識と経験に基づき独自の機能性 π 共役分子をつくり、それを高分子、液晶、超分子などの化学へ展開し、「新しい材料」や「新しい技術」と呼べるようなものの創出を目指しています。 π 共役の先にX共役があるのかどうか、考えながら本研究を進めたいと考えております。

久木 私の研究分野は、超分子化学、分子集積化学、結晶工学です。現在は、水素結合の可逆性と指向性を利用して、 π 共役分子を用いた多孔質構造体(Hydrogen-bonded Organic Framework: HOF)の構築を行っています。HOFは構造規則性が極めて高く、しばしば単結晶として得られるため、X線構造解析によってその構造は一目瞭然と決定できます。ただし、水素結合は共有結合や配位結合よりも一桁以上結合力が弱いので、多孔質構造を設計通り構築するためには、さまざまな戦略を用いなければなりません。さらに現在は、 π 共役系構造の

特異な電子的性質とを組み合わせた複合機能性HOFの開発を鋭意行っています。

——最近の研究のトピックスを教えてください。

齊藤 これまでは、剛直な芳香環から成る構造に柔軟な部分を組み込んだ、FLAP(Flexible Aromatic Photofunctional systems)と呼ぶハイブリッド π 共役分子を中心に研究してきました。本領域では「高密度共役」を意識して、1) 特有の多重 π スタック構造を物理架橋にもつ超分子-高分子ハイブリッド材料の開発、2) 二次元シート構造をもつ多方向 π スタック材料の開発、3) MD計算やデータサイエンスを活用した新しい機能性 π スタック材料の探索に挑戦します。



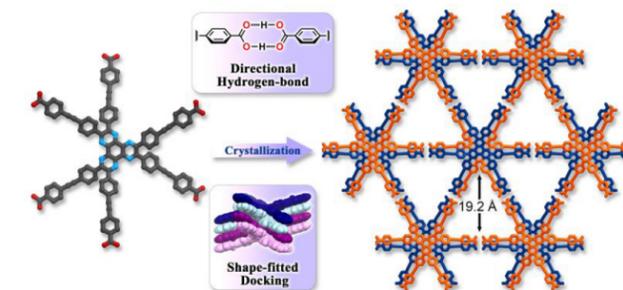
——データサイエンスの活用というのはどのように？

齊藤 AlphaFold2に代表されるように、分子構造からパッキング構造を自動生成する計算科学的アプローチの予測精度が急速に高まりつつあります。今後は有機合成化学者がMD計算を日常的に併用して、実験結果と突き合わせながらデータを蓄積する時代がくると考えています。また一方で、ひとまずパッキング構造がどうなるかを考慮せずに、分子構造と材料物性を1:1に対応させたデータライブラリを基盤として、「分子構造→材料物性」の順問題(つまり物性予測)だけでなく、「材料物性→分子構造」の逆問題(つまり機能材料の探索)を解けないのか、多くの研究者が挑戦を始めています。私も、プログラミングが得意な学生と一緒に、データ科学的な有機材料研究を始めました。

——久木さんはいかがですか？

久木 2つの孤立電子対をもつピラジン環を縮環させた π 共役分子を基盤にした集積化学を展開しています。最近、ピラジノピラジンやヘキサアザトリフェニレンのカルボン酸誘導体を用いた多孔性分子結晶の構築と外部刺激応答性について報告して

います。今後は、孤立電子対を圧縮集積した構造が構築できれば、新しい共役が見つかるのではないかと期待しています。



——本領域でのミッションはどのようなものをお考えでしょうか？

齊藤 「ある物質系を従来の量子化学計算で解釈できてしまった時点で、既成のs, p, d, f軌道の概念の外にあるとされる「X-conjugation」ではなくなってしまうのでは？」と気になっています。もしかしら、現在の計算手法では解釈できない物質系を見つけられたら、それがチャンスなのかもしれないと考えています。

久木 π 共役分子の化学は、これまでも日本の研究者が世界をリードしてきたと思っています。そのような先人が脈々と創り上げてきた本分野において、また新たな歴史的マイルストーンを立てるのが本領域であり、その中で、私のもっている分子集積に関する知見とノウハウによって分子の集合構造を自在に制御し、X-conjugationを見つけるのが私のミッションだと考えています。

——その他に共同研究のアイデアなどはありますか？

齊藤 いま作ろうとしている新しい2D材料ができれば、固体物理の若手の先生に教えてもらいながら、バンド構造の計算や実測定までできれば良いなと思っています。

久木 領域の先生方はみなさん、合成するのが難しい独創的な分子を矢継ぎ早に生み出しておられます。共同研究で、そのような分子骨格を用いた分子集積化学ができれば、きっと面白い高密度共役が見つかるのではと、漠然とながら思っています。

——この領域で、個人的に目指すところは？

齊藤 分子構造だけでなく、材料という観点で誰が見ても新しく、多くの物理学者が参入したいと思えるようなものを出したいと考えています。

久木 私の目指すところは、共同研究です。いろいろな先生方の話を聞いてその研究に触れ、私の研究と相乗することによって新たな共同研究が始められないか、いつも考えています。私一人のアイデアや化学の知識はとてもちっぽけなものです。このような領域に参加させていただくことで、少しでも領域に貢献するとともに、自分の化学の領域も広げられたらと思っています。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>