

CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol.21

高密度共役の科学 ～変革の段階へ～

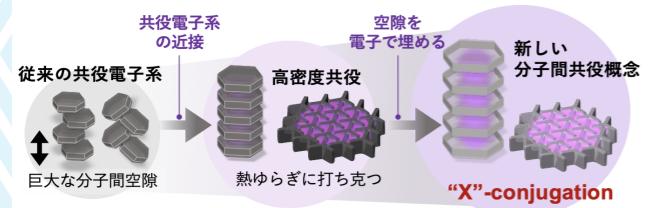
関 修平（京都大学）



関 博士

新しい電子共役系の再定義への挑戦に向けた研究も、おおよそ道半ばのところまでやってきました。これまでに生み出された物質も多く、共役概念の変革のための材料は、ある程度そろいつつあります。学術変革領域研究の推進において、研究計画そのものの立案に深くコミットしたメンバーたちのアイデアが、次々と現出していくさまを見ているのはとても楽しいものです。

空隙を電子で埋める = 新しい電子共役: “X”-Conjugation



さて、学術変革領域研究のような、学術の根本にかかわるような研究の立案では、ある程度長い時間(でも集中して考えるのはそんなに長い時間ではない気もしますが……)をかけて、いろいろな角度から着想をまとめていくのが常です。ここに公募型の研究提案が加わっていくというシステムは、科学研究の原点でもある、「この手があったか!」という現実を、その場で何度も体験できるというのが一番の醍醐味なのかもしれません。本領域もちょうど発足以来2年を過ぎ、後半の「この手があったか!」を追体験する時期がやってきました。そんな見方から、前半の研究をおさらいしつつ、ひょっとしたらこんなところに見落

としていた「高密度」の種があったかもしれないな、という妄想をつらつらと書いてみようと思います。

本稿が出るころには、もう後半の公募研究のアイデアがおおよそ出そろっているのかもしれません。ちょうど現代化学の高密度共役にかかるる記事には、これまでの計画班の研究の取り組みに加え、公募研究それぞれの着眼点が出そろっています。すでにVol. 20にもなるニュースレターの、特に公募研究の諸氏による後半を改めて読み返してみると、共役電子系の間の空間の設計に、当初、強くは想定していなかった構造がいくらかみられることがあります。学生の頃にあこがれた、Poincaré予想のような“多様体・空間をどうデザインするか”についてのそれぞれの提示解のよう、なかなか面白いですね。

この領域の原点は、「炭素間の結合の短さ」「多重結合の形成によるさらなる短縮」「それに伴う電子準位密度の稠密化」でしたから、否応なく“面”を構成する電子共役系の間の空間を第一に想定していました。たとえば私自身が展開している電子共役系の配置・距離と電子物性の相関(図1)でも、その重要な構造因子は“面”と“面”的距離です。 π 電子と大くりにされる電子共役の形を、面でとらえるのはいわば必然ともいえます。一方で、完全な平面にせよ、近年学会を形成するほど盛んに研究される電子共役系の曲面にせよ、動的に(あるいは熱的に)動く有限な面が互いに近接したその間に、一様で無限な電子の空間・面が形成されるわけはありません。であれば、絵に描いたような時間的・空間的に平均的な構造から、その揺らぎを含めた構造の変調を検討する時期に来ているのでしょうか。

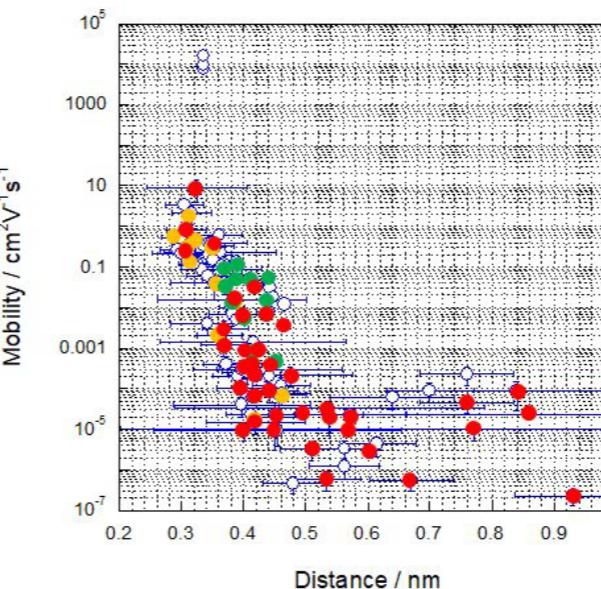


図1 電子共役系を構成する分子の面の最近接距離と計測される電子移動度の相関: 色分けされた点は、それぞれ主たる分子間相互作用による分類

統計力学が示すように、揺らぎはそもそも系の自由度それぞれに存在するですから、自由度をどのように縛るのか、縛っていられる時間はどのくらいなのか、対していろいろな解があつても構わない:至極自明なことです。

高密度共役の概念の創出にあたっては、研究開始時に0.3 nmという一つの明確な空間パラメータを示しました。これは例えば前述の図を見てみれば明らかで、さまざまな相互作用によって縛られた分子性物質の凝縮相(結晶相といつても構わないでしょう)の中での一つの物性指標が、あたかもX軸のこの値で収斂していくように見えることからも、「ここには何かあるな」という気がするでしょう?

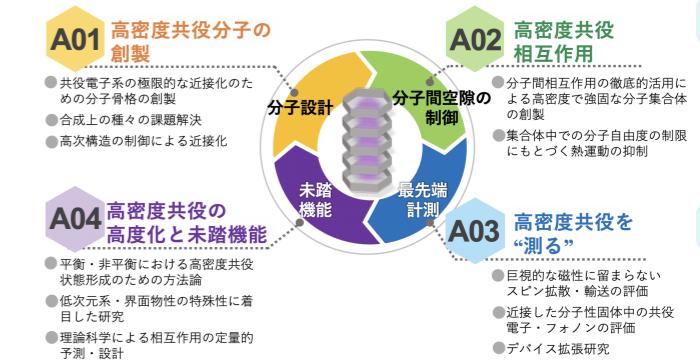
研究後半には、この明快な目標値に加えて、いよいよ概念創出の段階に進むにあたり、(必ずしも領域全体のコンセンサスではないけれど)わたし自身が目標に設定していることとして、100 nsという値が浮かびます。高密度共役状態が実際に定義できる・存在することの証左としては、このくらいの時間、確実に存在することを示せればよいのかなと思います。では、なぜこの時間なのか?これについては、また機会があれば書いてみましょう。

さて、本稿が現代化学誌上に出るころには、すでに学術変革研

究「高密度共役の科学」に関する後半の研究課題の募集は終わるころだと思います。

(https://www.mext.go.jp/a_menu/shinkou/hojyo/boshu/1394559_00009.htm)

公募研究への期待



新しい電子共役概念を、確かに存在するものとして示すために、化学・物理分野の構造と物性に関する実験的なデータに裏打ちされていることは、もちろん最も重要です。そしてこれに合わせて「美しく簡潔な式」でこれを示します、と随所で説明をしました。美しい××、というのは多分に主観的・個人的なものなので、こんな表現を使うことは私自身はあまり好きではないだけれど、敢えて用いたという側面があります(そもそも科学研究費のような基礎研究を支えているのは、可能な限り客観性の高い事実に支えられた、研究者の主観そのものかもしれません)。

ここでの「美しさ」という言葉は、その後に重ねた「簡潔」とほぼ同義のように私は捉えています。そもそも“共役”をターゲットにした段階で、電子共役系の表現は、数学的な表現と密接に絡むように考えていました。近年では、データを網羅的に扱うような計算科学が継続的に高度化し、世の注目を受けています。しかし我々の研究の後半においては、これと異なる方向性、たとえば「そのエッセンスが“単式で”表現できるような、眞の意味での理論研究」の参画があればうれしいな、と思います。Poincaré予想を証明したとされる、arXivに掲載されたGrigori Y. Perelmanの長大な議論を読んだ際(中身は1 mmも理解できなかったのですが)、突如Ricci Flow理論展開の中にエントロピーに関するBoltzmann方程式が現れるのを発見して、こういうのを“降りてきた”って言うのだろうな、となんとなく思いました。このように、「数学者にとってはとても美しく感じられるのかもしれないが」というのではなく、それこそBoltzmann方程式のように、誰にとっても(か?)明快な“美しさ”を、共に追求できればと望んでいます。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>