



CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol.22

変革というミッション

岸 亮平 (大阪大)
吉尾 正史 (物質・材料研究機構)



岸 博士



吉尾 博士

—この領域に参画前の印象はどうだったでしょうか？

岸 Zoomでの公募説明会で非常に印象に残っているのが、計画班の各研究では、分野の原点となるような論文にさかのぼり、そこから現在に至るまで常識となっていることを打破し変革する、という形の目標を掲げられていたことでした。どのような学術の変革を目指すのか、という部分が特にしっかり意識された研究領域だなと感じました。

吉尾 本領域は、共役に関する物理的な側面を熟知した学者をリーダーとして、その根本原理から追求を重ねて、変革を推進する新概念の研究プロジェクトだと知りました。次の100年に繋がる共役概念の構築を通して、持続可能な材料・エネルギーの開発に向けて驚くべきブレイクスルーが起こるだろうと大きな期待を持ちました。

—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？

岸 「X-conjugation」という言葉には非常に考えさせられました。相互作用する連結系の構成要素が原子でなく様々な形状や電子状態を持つ分子種であるならば、原子軌道ベースの軌道角運動量に基づくこれまでの共役概念の変革(X-conjugation)も必要であるというお話を伺い、結合や共役についてこれまで以上に真剣に考えることが重要だと感じました。

吉尾 導電性高分子や共役分子は、有機エレクトロニクス材料として現代社会を支えてきました。分子間空隙の極限的な縮小による「高密度共役」の実現によって、驚くべき性質を見出すことができれば、産業界にも波及して、私達の生活が一変する

かもしれないと感じました。水分子が固体状態で複数の籠構造をとるように、電子共役分子においても原子同士の結合や分子間相互作用をデザインすることで、密度・構造変化に起因する新たな電子・光機能が生まれるだろうと感じました。

—すでに領域内の先生方とは交流を持ちましたでしょうか？

岸 ストラスブール大学で行われた本領域共催のジョイント会議に参加しました。参加されていた領域メンバーとは、研究だけでなく色々なことをざっくばらんにお話でき、心理的にも「高密度」な交流が持てたと感じました。やはり直接お話しする機会はとても大事だと感じるとともに、COVID-19の影響は非常に大きなものだったと改めて認識しました。

吉尾 Web会議が主体でしたが、今年は合宿形式の領域会議に参加し、メンバーの皆様と直接お話しする中で親睦を深めることができました。領域メンバーは最先端研究を走る頭脳集団で、領域会議では物理・化学の難しい専門用語が多数飛び交っていて、圧倒されます。でも、知らないことをきちんと学び直す機会を持てたことに、とても感謝しています。

—ご自身の主要な研究分野を教えてください。

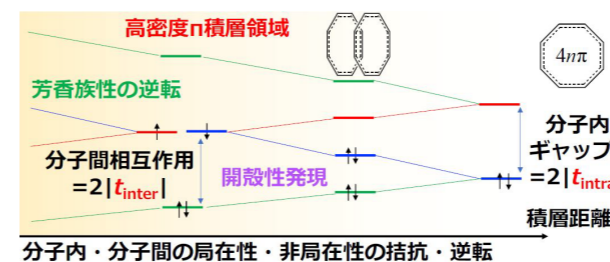
岸 専門分野は量子化学の理論に基づく物性化学で、開殻系分子種の構造-物性相関(主として光・電場・磁場応答物性)についての理論研究を行っています。私が得意とするのは、一重項でありながら不対電子的な性質を示すジラジカル・ジラジカロイド系の構造-物性相関に関する理論解析と物質設計です。

吉尾 専門は構造有機化学で、イオンや電子を流す液晶や高分子の合成とアクチュエータや光電変換素子、分離膜の開発

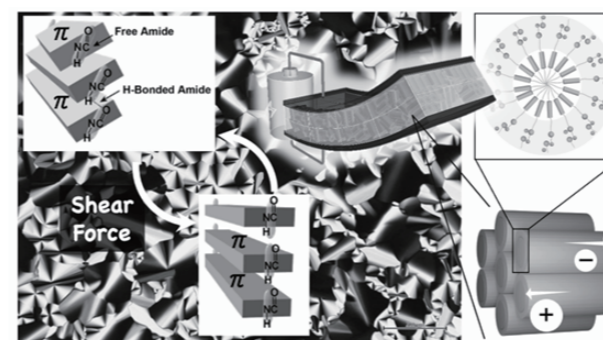
に関する実験研究を行っています。分子自己組織化プロセスを利用して分子を集め、自在に並べて、動的な機能を引き出すことに興味をもっています。

—最近の研究のトピックスを教えてください。

岸 反芳香族分子からなる高密度積層系の電子構造と物性の関係解明を、本領域での研究課題としています。反芳香族分子の高密度積層系では強い相互作用の結果、分子内と分子間の電子の非局在性が拮抗したり、逆転したりする状況が生じ、新たな物性発現につながるのではと考えています。また、環状共役系の芳香族性を量子化学的に評価する方法として、外部磁場に対する電子応答の計算があります。この磁場応答には軌道対称性や角運動量が深く関係していますので、これを「X-conjugation」のコンセプトのもとで捉えれば、分子内と分子間の電子の非局在性を扱う理論が構築できるのではと考えています。



吉尾 平面π電子共役骨格を基本とした、複数の準安定なπ積層構造を有する液晶構造の構築に成功しています。ずり応力を印加すると、π積層構造が変化して相転移し、電荷輸送性や発光色が変わるため、応力センサーとしての応用が期待されます。本領域では、光重合性を示す含ホウ素共役液晶による半導体高分子エラストマーの創成を課題としています。また、三次元的にイオンが流れるカラムナー液晶を用いた伸縮性ポリマー膜の設計により、1 Vの低電圧で素早く応答する革新的なアクチュエータの開発に成功しました(*ACS App. Mater. Interfaces*, 2022, 14, 43701-43710)。メタバースの普及や遠隔治療を後押しする未



来のソフト触覚デバイスを開発することを目標としています。

—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？

岸 結合や共役という化学の重要概念には、その定義や定量化の方法にある種の曖昧さが含まれていると思います。この曖昧さは、多様な物質、多様な現象を包括する共通概念の形成とともに、化学が学問として発展するために必要だったのだらうと思います。その一方で、研究領域が少し異なると、結合の強さ、共役の広がり、といった良く使う言葉の認識にズレが生じます。本領域では、ターゲットとする物質の種類やサイズ、現象のタイムスケール、研究アプローチなど本当に様々です。これらを統一的に議論できるような、結合や共役の概念構築及び変革への貢献は、本領域に応募したときに私自身に課したミッションの1つです。

吉尾 本領域では、π電子共役系液晶ポリマーに物理的な力を加えることによる、非平衡状態としての高密度共役の実現をミッションと考えています。伸縮性を示す、力学的にタフな半導体ポリマーを開発し、その延伸度を変えることで分子間空隙を極限的に縮小できれば、破格の移動度が実現できるかもしれないと期待に胸を膨らませています。この実現において、ポリマーを延伸しながら電気的特性を計測するテクニカルな手法を確立することもミッションであり、延伸治具の作製に加え、様々な電極を用いて動的な電気計測に挑戦しています。

—この領域で、個人的に目指すところは？

岸 私は量子化学を基礎とする微視的視点の分子構造論を専門としていますが、現在の所属である化学工学分野からの影響も強く受けていると思います。化学工学で私が好きな部分は、サイズや特性の異なる装置や反応器の複雑な現象の情報を抽象化・一般化し、それらの設計や制御に有用なパラメータ、支配因子を抽出する、俯瞰的視点に立った考え方です。量子化学に基づく電子構造理論を基礎として、原子種や構造の異なる分子系、分子数や集合形態の異なる集合系に潜む共通性や現象の支配因子を抽出できれば、結合や共役の本質に迫るとともに、物質設計や物性制御の指針構築も可能であると考えています。このようなアプローチを通じて、本領域や私自身のミッションである結合や共役概念のSomething Newを提案できればと思います。

吉尾 現代社会を支える科学技術の基本が、エレクトロニクスにあることは皆が認めるどころであり、共役分子はコピー機の感光体、有機電界発光素子(EL)として普及しています。私としては、共役密度が可逆的にスイッチする電子・光機能性ポリマーを開発し、新しい有機メカトロニクス科学の学理を築いて、将来的にビジネスにもつなげることができればと思っています。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>