

CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol. 34

新たな視点から

山下 誠(名古屋大)

村井 征史(名古屋大)



山下 博士

村井 博士

——本領域には、公募班として新たなメンバーが加わりました。今回はその中から、山下さんと村井さんにお話を伺います。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。

山下 π 造形の後継領域ということで多くの面白い研究が展開されていると同時に、新たな領域として踏み出す際に物理寄りの研究者が多く参加しているなという印象です。

村井 共役を合言葉に、物性計測、理論解釈、合成など様々な分野の専門家が集まることで、インパクトのある研究が高いレベルで遂行されており、是非、自分もそこに加わりたいと考えていました。「高密度」や「X-conjugation」という含みをもたせた表現も、物理および化学分野の様々な研究者がそれぞれ独自に解釈し、展開できる非常に絶妙な表現だと感じていました。

——「高密度共役」というコンセプトの印象は？

山下 高密度共役という言葉に当てはまる分子群の実際の電子密度を見てみると、決して高い密度になっているわけではないだろうと感じました。形式的にオクテット則を超えた電子数を持つと定義される超原子価化合物の中心元素周りの電子密度を計算すると、実際にはオクテット則を超えることが無いということを出しました。

村井 有機合成の観点では、分子内での共役の概念を三次元に拡張するため、分子を極限まで近づけて配置し、その間が高密度に電子で満たされた状態を作り出すことが、高密度共役の実現につながるのではないかと考えています。凝集状態における物性制御をキーワードとした研究をちょうど展開し始めていた

こともあり、同じベクトル上で、しかし異質な研究を展開できるものと信じ、公募に応募しました。

——すでに領域メンバーとは交流を持たれましたでしょうか？

山下 物理的に近い距離の忍久保さん・福井さんのところで吸収・発光関連の測定をさせてもらっていますが、他の方とはまだご一緒できておりません。福原さんの高圧測定にはとても興味を持っています。

村井 関さんとは、硫黄架橋ジアズレノメチルカチオンの電荷移動特性に関する共同研究を2022年から継続中です。他にも、本年5月に行われた東北での領域会議の際、数人の方に打診し、領域内での共同研究を新たに開始しています。この領域が発足しなければ交流できなかったであろう共同研究を、ワクワクしながらまさに楽しんでいるところです。

——ご自身の主要な研究分野を教えてください。

山下 13族元素を中心とした有機典型元素化学・有機金属化学と遷移金属錯体を用いる均一系触媒開発です。主には世に存在しない新しい結合の探索、これに基づく新しい構造や反応を生み出すこと、工業化学を志向した触媒反応開発を行っています。

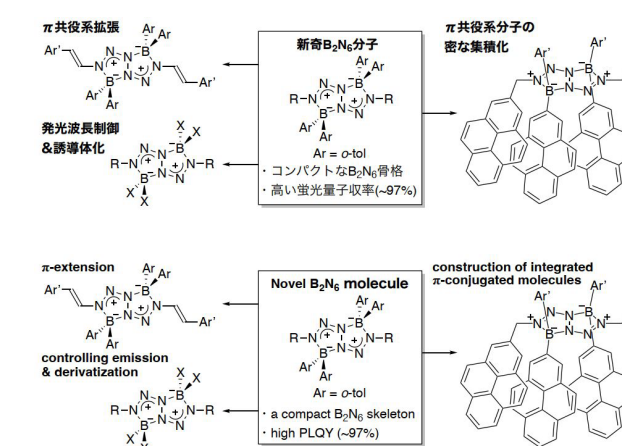
村井 5~7族の遷移金属を用いた炭化水素の新「奇」な変換反応、そして炭化水素であるアズレンを基軸とした、新「奇」な非ベンゼン系(反)芳香族分子の開発を行っています。今回の高密度共役に関連するのは後者の研究です。共通項となる(遷移or典型)元素化学の基盤の上で、これら有機金属化学と構造

有機化学分野の研究を、バランスや融合を無理には意識せず、興味の赴くままに遂行しています。

——最近の研究のトピックス及び今後のミッションは？

山下 ホウ素間に単結合を持つジボラン分子をアジド化合物と反応させると、従来存在しなかった複素環である二環式 B_2N_6 分子が得られ、その溶液の発光スペクトルにおいて非常に高い蛍光量子収率を示すことを見いだしました。本領域でも、この骨格の研究をミッションとして考えています。この B_2N_6 分子の官能基変換を行うことで、この二環式分子の周辺に π 共役骨格を高密度に並べてその物性を明らかにすること、 B_2N_6 骨格を持つ10 π または12 π 系の平面分子へと誘導して、その物性を同じ原子数から構成されるペンタレンと比較することなどです。

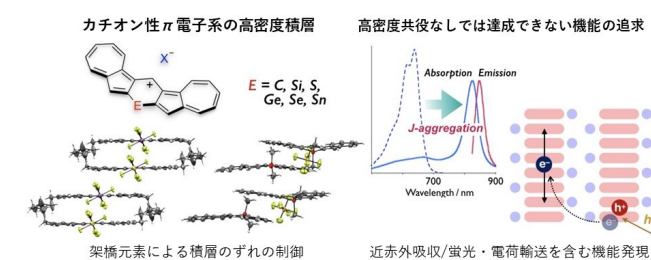
村井 電荷を帯びた縮環 π 共役分子を独自に設計・合成し、



高密度共役の効果が発現し得る凝集状態において、それらの特異な発光性や電荷輸送特性、生理活性を制御することを目指し、研究を行っています。最近、J会合体の形成(*J. Am. Chem. Soc.* **144**, 20385 (2022))や、反芳香族性とポリメチン型共鳴の効果を併せもつ共役系分子による近赤外蛍光の発現(*Angew. Chem. Int. Ed.* **62**, e202302714 (2023))などを報告しています。本領域における研究でも、高密度共役の発現に繋がる自己組織化能を有する素性の良い π 電子系を、どんどん作り出していきたいと思っています。真に有用であることを示すためには、合成し、物性を評価するだけに留まらず、魅力的な機能ま

でを自ら明らかにすることが重要となります。領域内での共同研究もうまく活用し、特異な π 電子系化合物であつと驚くような高密度共役の形を示すことができないか、日々、考えています。

——その他に共同研究の予定やアイディアはありますか？



か？

山下 B_2N_6 骨格を持つ10 π 系の分子は開殻構造になる可能性があると考えているので、そのスピン状態の解明や開殻分子としての性質の解明に関して、他の先生方のお力を借りることができれば良いと考えています。

村井 分子としては私も開殻系の骨格、機能としては超電導性や薬理活性に特に興味を持っています。また、新たな展開として、高圧や強磁場といった極限環境の利用も既に進めており、今後、さらに注力していきたいと考えています。

——この領域で、個人的に目指すところはどのような方向でしょうか。

山下 化学の内容としては非炭素系の π 共役分子の物性の解明と炭素系との比較というところを目指しています。これまでに物性解明を目指した共同研究をあまり行っていないので、そのような研究形態に慣れてゆきたいです。

村井 意外性のある荷電new π -skeletonを作り出し、それらをイオン種の特性を活かして意外な形で用いていきたいと思っています。負の数でも二つ掛け合わせれば正になるから大丈夫というぐらいのポジティブな気持ちで、量子化学の観点からの理論的な解釈も含め、高密度共役の自分達の形を示していければと考えています。

——新たな展開を楽しみにしています。ありがとうございます。