



CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol. 35

割り切れない魅力

小西 彬仁 (大阪大学)

村田 剛志 (愛知工業大学)



小西 博士



村田 博士

—今回も、新たに本領域に参画されたお二人にお話を伺いたいと思います。お二人ともA01班(高密度共役分子)所属ですね。まず、「高密度共役」というコンセプトを最初に聞いた時の印象はいかがだったでしょうか？

小西 この言葉の意味がきちんとわかっているかはまだわかりませんが、交換反発やクーロン反発などの力に打ち勝ち、分子を上手に並べてぎゅっと詰め込んだ時に何が生まれるかということかと思っています。面白いチャレンジですが、それを自分の分子でどう実現するか、なかなか難しい課題です。

村田 π 共役分子同士を近づけて相互作用を強くする、外からの圧力などで共役を高密度化するという発想は以前からありましたが、物性や機能発現のための「手段」に類することという印象でした。それを「高密度共役」という形でピックアップし、一領域化するというのはなかなか出てこないアイデアで、新しいサイエンスが発生する興味深い場になるなと感じました。やはり、偉い人は目の付け所が違うなあ。

—ご自身の主要な研究分野を教えてください。

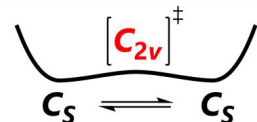
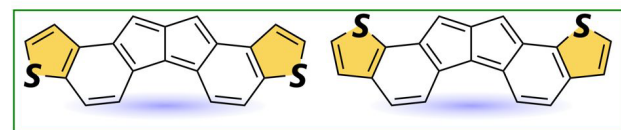
小西 現在は、特殊な π 共役系を持つ炭化水素の合成及びその物性を中心に研究を進めております。特に5員環・7員環を中心に、できるだけ小さい共役系で特殊な性質が出るような化合物を目指しています。奇数員環は共役系として不安定な性質があり、それだけに設計次第で面白い性質が引き出せます。文字通り「割り切れない」のが魅力ですね。

村田 有機合成をベースとして、新規な開殻有機分子の設計・

合成をしています。特に電気伝導性などの固体・凝集状態での物性発現、それを使った各種蓄電デバイスなどの応用展開を視野に入れた研究も行っています。研究の基盤としているのはトリオキソリアンギュレン(TOT)という中性ラジカル分子で、昇華精製可能なほど安定です。分子間の距離が0.3nm以下と極めて近い系を実現しており、安定化のための立体保護基なども必要としないのが強みです。

—最近の研究のトピックスを教えてください。

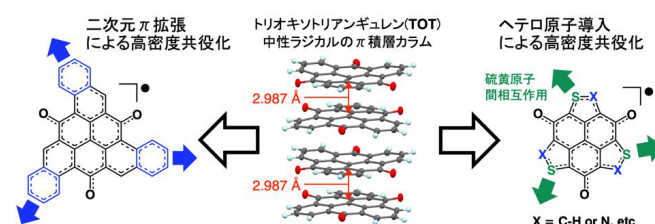
小西 5員環が2つつながったペンタレン骨格は、 8π 電子系であるため、単独では反芳香族性を示します。この骨格を含んだ化合物(下図)が、温度や周辺分子などの条件によって、電子が局在化した構造を行き来し、反芳香族性が変化することを、定量的に示すことができました(*J. Am. Chem. Soc.* 2023, **145**, 20595)。



Taming Pseudo Jahn-Teller Effect

村田 前述したTOTの π 共役系を大きくしてより強く凝集させた

り、分子骨格周辺に軌道重なりを作れるようなものにして、三次元的に凝集させる物質の開拓を行っています。他には、TOT中性ラジカルを連結、あるいはキラルな空間に配列させて、その強い分子間相互作用による磁氣的・光学的機能を発現させるものの開拓を行っています。



—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？

小西 求められるのはやはり新しい物性の提案だと思います。自分の立場からは、変な分子、こだわった分子を生み出して、こういうものはどうですかと提案していきたい。まだまだ開拓すべきところは多いですので、分子のライブラリーを拡張することを目指していきたいと思っています。

村田 本領域での私のミッションは、TOT中性ラジカルが元来もっている高共役密度な凝集状態を有機合成化学的な手法によりさらに高密度化することと、高次にネットワーク化することだと考えています。さらにその超高共役密度な物質系において、革新的な物性・機能を開拓することが目標です。

—領域内の先生方とは交流を持たれましたでしょうか？

小西 もともと知り合いの方が多く、楽しく参加させていただいています。先ほどトピックスとして挙げた研究も、A02班の久木さん、前期A04班の岸さんと共同で行ったものです。こうした共同研究が、よりやりやすい形でできることは楽しみです。

村田 私も出身研究室の関係者や面識のある人が多く、馴染みやすいです。一方、物理学系の先生方は知らない人もかなりいますので、積極的に交流を図りたいと思っています。

—その他にも、共同研究の予定やアイデアはありますか？

小西 前述した共同研究は、今後も継続していく予定です。そ

の他、A03班の先生方の特殊な測定方法は非常に魅力的ですので、そこに何をどう評価していただくか。もう少しお互いのことをよく知らなければいけないですね。

村田 私が実現を目指す物質は有機中性ラジカルが高度に凝集した物質系であり、高い電気伝導性や非常に強い磁氣的相互作用を示すことが期待されます。こういった物質が、圧力などの影響によりどんな変化を示すか興味があり、物理系の研究者と共同研究ができればと考えています。

もう一つの私の研究ライフワークは、有機物を活物質とするリチウムイオン電池の開発です。本領域の有機化学系のみならずが合成した物質を電池の活物質として試験する、といった共同研究も展開したいと考えています。電池と高密度共役は一見あまり関係なさそうですが、電池の活物質の性能には、受け渡しする電子数の重量あるいは体積あたりの密度が大きく関わってきます。ですので、高密度共役の有機分子が活躍できる場はかなりあると考えています。

—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。

小西 せっかく多様な背景を持った方がたくさんいる領域に入れていただきましたので、まずは知り合いを増やし、新しい概念、測定法を学びたいです。そして得た知識を、自分の分子設計にフィードバックし、考え方をアップデートする機会にしたいですね。

村田 我々が合成している「縮合多環型有機中性ラジカル」を広く知ってもらい、できればいろいろな人に「触って」みて欲しいと思います。これまでは安定化の難しさなどの問題があったのですが、TOTなど誰でも扱えるものが、世界的にも出てくるようになりました。そうすると、従来の共役系では実現できなかった機能を探索できるようになると思っています。ここで高密度共役領域の物性物理学および実用デバイスを扱っている研究者との協働ができれば、領域を飛び越えるような新しい研究展開を創出できると考えています。

—ユニークな骨格の活躍を期待しております。本日はどうもありがとうございました。

もっと詳しく → <https://x-con.jp/>