



CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol. 36

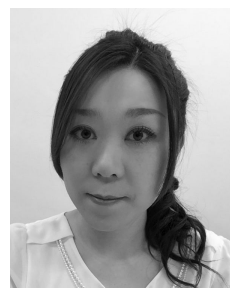
集合体の力を引き出す

井口 弘章 (名古屋大学)

帯刀 陽子 (東京農工大学)



井口 博士



帯刀 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ます。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？

井口 3.0 Åを切るような非常に短い分子積層構造を構築することで、化学結合のない分子間にも共役の概念を持ち込むというのはとても斬新に感じました。分子性結晶に高圧を印加する研究は過去にもありましたが、化学者の英知を結集した分子設計によって、圧力印加を上回る近接積層を実現できれば、新しいサイエンスが開拓されるものとワクワクしています。

帯刀 分子間を近づけて、新しい機能を発現させるということなのかと感じました。ちょうど分子間を近づけて集合化した場合に発現する物性が変化する点に着目した研究を展開し始めていたため、色々なアドバイスや刺激を受けられるのではないかと思います。本領域に興味を持ちました。

—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？

井口 まだ対面でお話しできていない先生も多いのですが、領域会議後の若手の懇親の席は非常に盛り上がりまして、若いアクティブな研究者がたくさん集まっていることを実感しました。近いうちに若手会合宿にも参加する予定ですので、さらに交流を深めて新しい共同研究に繋げていきたいと思っています。

帯刀 A02班の芥川先生は、私が学生時代の時からご指導いただいている先生で、現在共同研究を進めています。また、お昼にzoom meetingで研究紹介を行っておりまして、担当日に研究紹介を行い、その後様々なアドバイスやご意見をいただ

き、早速、測定に取り組んでいます。今後はSlackを用いて困難な点・よく理解できない点などについて質問させていただき、研究を進めていきたいと考えています。

—ご自身の主要な研究分野を教えてください。

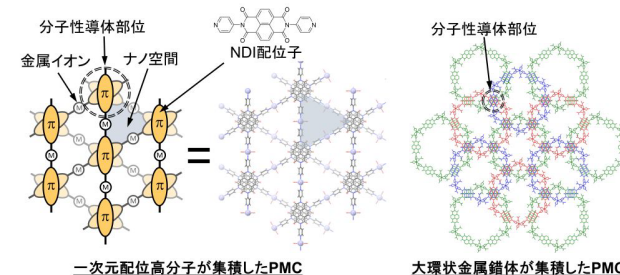
井口 専門は錯体化学と固体物性化学です。学生の頃から一次元鎖状金属錯体の合成と電子物性に関する研究に長く取り組んできましたが、より分子の多様性を利用していきたいと考えて、最近では π 共役骨格に注目しています。 π 積層構造を内包した多孔性錯体の合成を基盤として、超分子化学や電気化学、物性物理学といった分野との融合を目指していきたいと考えています。

帯刀 私の研究分野は分子集合体の化学、超分子化学であり、モノマー・ポリマー両材料を用いています。電荷移動錯体を用いて分子集合体を作成し、ナノ構造由来の物性を評価しています。

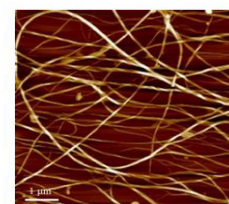
—最近の研究のトピックスを教えてください。

井口 電気を流す分子性結晶として知られる分子性導体と、多孔性配位ネットワークを融合させた、多孔性分子導体 (Porous Molecular Conductor; PMC) という新しい物質群の開発を行っています。具体的には、ナフタレンジイミドのような広い π 共役コアを有する有機配位子に対して、錯形成反応と同時に還元反応を起こすことで、 π ラジカルの不對電子間相互作用による π 積層構造の形成を促進し、多孔性配位ネットワーク中に π 共役コアの無限積層構造を構築しています。これまでの研究で、

多孔性配位ネットワークとして一次元配位高分子や大環状金属錯体(メタラマクロサイクル)を用いたPMCを報告しています。



帯刀 現在は、キラル部分を分子内に有する超分子材料を利用して、 π 共役分子からなる低次元分子集合体を作成しています。このような集合体の物性は光特性が多く報告されていますが、ナノ構造体由来の電磁物性は殆ど報告がなされておられません。そのため、低次元分子集合体の電磁特性評価に関する研究、特に、ヘリカル構造と電磁特性の相関解明について研究を進めています。



螺旋集合体のAFM像

—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？

井口 多孔性配位ネットワークが堅牢な三次元の金属-有機構造体(MOF)となっているPMCでは、構成要素である金属イオンやハライドイオンの大きさによって π 共役コアの分子積層距離を制御可能です。したがって、より小さいイオンを用いることで、 π ラジカルの不對電子間相互作用と配位結合相互作用を協働させ、分子積層距離を極限まで短くすることが期待されます。また、ナノ空間はドーパントの格納部位として利用できますので、化学ドーピングによって分子性導体部位の電子密度を変化させ、高密度共役状態を精密に制御することも目指して

いきたいと考えています。

帯刀 本領域では、キラル部位を有する電荷移動錯体からなる低次元螺旋集合体のピッチを変化させることによる高密度共役の実現をミッションと考えています。伸縮性を示す分子性螺旋構造を作成し、その伸縮度由来の電磁物性を解明することで、分子集合体自身が必要な電力を発電可能とするナノシステムが実現できるのではないかと期待しています。

—その他に共同研究の予定などはありますか？

井口 今まではナフタレンジイミドコアを用いたPMCの開発を行ってきましたが、領域で扱われている多様な π 共役コアはPMCの構成要素としても大変魅力的です。この機会に多くの共同研究者の方にPMCの構築技術を利用いただき、高密度共役の実現を目指していきたいと考えております。

帯刀 現在作成している螺旋集合体が生じる電磁特性などのナノ物性について、実測定だけではなく理論計算まで出来たら良いなと思っています。また、ナノ構造体由来の物性を評価する際に測定が困難なケースもあることから、物性測定技術についてもアドバイスをいただけるような共同研究・研究交流ができれば幸いです。

—この領域で、個人的に目指すところは？

井口 高密度共役の実現に向かって多様な分野の研究者が議論し交流する中で、今後に繋がる斬新なアイデアや新たな研究の方向性が生まれることを期待しています。また、私のこれまでの研究では構造有機化学者との接点は少なかったため、先述したPMCの構築技術を活かしてwin-winな共同研究を積極的に進めていくつもりです。さらに、PMCは導電性MOFの一種と捉えることができますが、その分子設計の多様性や高い結晶性は既存の導電性MOFにはない特長であり、共同研究の過程で選択的分子センサーや電極触媒としての応用可能性も追究していきたいと考えています。

帯刀 共同研究を是非お願いしたいと思っています。研究を進める上で生じる困難な点について、色々な先生方に相談・アドバイスをいただけたら、私が予想する結果以上の成果に繋がります。今後の研究の幅も広がるのではないかと考えています。