



CONDENSED CONJUGATION

NEWS Vol. 37

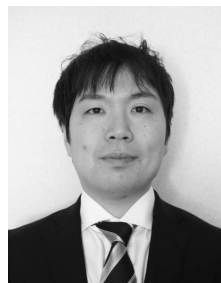
交流から生まれるもの

加藤 研一（京都大）

上田 顕（熊本大）



加藤 博士



上田 博士

——参画前、本領域をどのようにご覧になっていたでしょうか。

加藤 研究に関する興味・関心の近い方が数多く参画なさっている一方で、固体物理や理論のように普段参加する学会では接点の少ない研究者も多く、学び取れることが多い魅力的な領域と考えていました。

上田 以前「 π 造形科学」に参画させていただいた際には、研究そのものだけでなく、人脈や研究に対する視野が大きく広がるという貴重な経験ができました。また、「高密度共役」の考え方は、現在の私の研究分野により近いこともあり、ぜひ入れていただきたいとずっと思っていました。

——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？

加藤 固体中で π 電子共役を「途切れることなく繋げる」ことがどこまで達成できるかという点は、自身も以前から有機材料科学における大きな目標と捉えていました。その一方、面間距離を短縮していった際に（相転移のように）全く新しい物性が拓けるという発想は、新鮮で強く興味を惹かれましたし、未だにどんな変革を起こせるのか十分に理解できている気がしない概念だと感じます。

上田 本領域の研究概要やこれまでなされた研究を拝見すると、究極の π 共役分子をデザインするといったことよりも、 π 共役分子間の電子的相互作用の深化・究極化を目指しているのかなと感じました。分子内の電子共役を分子間に、さらに物質全体に広げていき、その中で新たな物性や機能、そして概念を

求めていくといったことかと思っています。

——すでに領域内の先生方とは交流を持たれましたでしょうか？感想などありましたらお願いいたします。

加藤 出身研究室や現在の所属研究室のご縁で参画前から知り合いの方も多いのですが、参画の前後から須田さんのグループや松田さんの研究室との間で測定協力の機会ができるなど交流が活発化しています。対面での領域会議や若手会合宿などでも、これまで触れられなかった自作測定装置を見学したり、固体物理の発表を聴講したりといった貴重な経験ができて嬉しく感じています。

上田 π 造形のときから存じ上げている方も半分くらいおられましたので、最初に参加した領域会議では「おかえり」と言っていただけました（笑）。幅広い分野のトップレベルの人材が集まっていますので、話しているだけでも大きな刺激をいただいています。

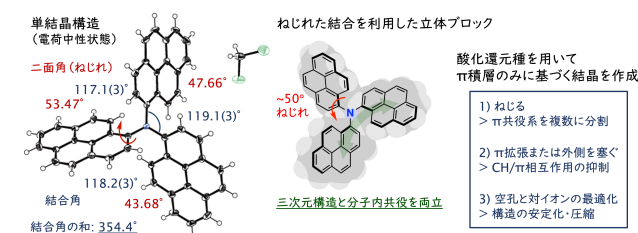
——ご自身の主要な研究分野を教えてください。

加藤 新規 π 共役系の設計と合成、基礎物性の評価を中心に研究を行っています。最近は特に一枚の π 共役系として新規なものではなく、複数 π 共役系の分子間相互作用に基づく集積構造や空間を介した分子内の相互作用に関心を持っています。少数の sp^3 炭素を組み込んで分子の立体構造を規定する分子群が主な研究対象で、本研究領域とは逆に低密度または柔らかい有機固体の開発や固体内部空間の利用などが多いかと思っています。

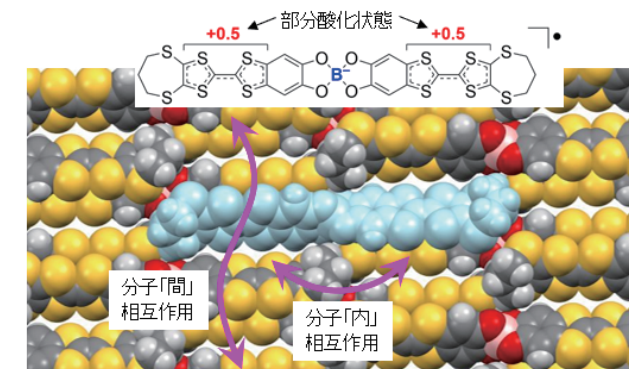
上田 有機物性化学、有機固体化学が現在のメインの研究分野になります。独自に設計・合成した有機分子を独自のアイデアで集積化・結晶化させることで、これまでにない電子構造、電気・磁気特性、機能性を有する分子性固体の開発を目指しています。

——最近の研究のトピックスを教えてください。

加藤 sp^3 炭素を組み込む代わりに sp^2 混成の元素周りの単結合をねらった角度でねじることで立体ブロックとして扱える分子群の開発に取り組んでいます。一例として、3つの1-ピレニル基を窒素中心に結合させた分子は、窒素平面が少し三角錐型にひずみつつピレン環が同じ方向に揃って44-53° ねじれた結晶構造をとることが分かりました。合成における立体障害、溶解性の調整、CH/ π 相互作用との競合などに上手く対処しながら系統的に合成と構造決定を進めています。



上田 中性(0価)と+1価の間の中途半端な酸化状態である「部分酸化状態」は、超伝導やさらにはディラック電子系、量子スピン液体などの特異な現象・物性を生み出す源として長年注目されています。この状態は通常、2種以上の化合物を組み合わせた電荷移動錯体（例えばBEDT-TTF塩）によって実現され



ますが、我々は単一の中性分子で+0.5価の部分酸化状態を有する化合物を初めて創り出すことに成功しました (*J. Am. Chem. Soc.* 2022, **144**, 21980)。アニオン部分を分子内に組み込んだ双性イオン性の部分酸化型中性ラジカル結晶であり、従来の電荷移動錯体とは異なり対アニオン層をもたず、部分酸化骨格同士が高次元・高密度に近接し相互作用できるところがポイントです。

——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？

加藤 分子内の強い共役を損なわないという条件を満たしつつも、途切れることなく π 積層構造を結晶全体へと立体的に繋げられる分子系を見出すことだと考えています。とりわけ、一次元 π 積層構造や有機半導体の開発で見られるレンガを積み上げた二次元構造のような異方的なものでなく、分子設計から出発して等方的な三次元構造を組み上げられればと思っています。

上田 分子内/分子間相互作用の連動による共役電子系の高次元化・高密度化を目指していきたいと考えています。具体的には、先ほどの化合物の置換基や中心元素を変えることで、分子内・分子間で π 電子が連動する様々な三次元集積構造・電子構造を創出し、従来のBEDT-TTF塩とは一味違った物性・現象・機能を探していきたいと思っています。

——その他に、共同研究の予定やアイディアはありますか？

加藤 π 積層構造を立体的に繋げた結晶ができた際には、電気伝導性や磁性が期待できますので領域内での共同研究をぜひ進めたいと考えています。所属研究室の強みとして、空隙をもった固体の評価やキラル化合物の光学分割・分析がありますので、そのような性質の見える分子に不意に会った有機化学系の方がいらっしゃればご協力できるかと思います。

上田 前回の π 造形の際には、橋本顕一郎さん(A04)、熊井玲児さん(A03)など様々な方と共同研究をさせていただく中で、新たな発見・展開を見いだすことができ、トップジャーナルにも論文を載せることができました。今回もそうしたことが目指せればと思い、物質開発・物性探索の両面で様々な共同研究を検討・模索しております。

もっと詳しく→ <https://x-con.jp/>