



# CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol. 41

## 探求を続けること

### 久保 孝史 (大阪大)



久保 博士

—前回の、領域代表の関さんからのパトタッチということで、今回はA02班班長の久保さんにお話を伺います。本領域の期間もあと1年を切りましたが、ここまでを振り返ってみていかがですか？

**久保** 高密度共役状態を目指す上で、A01班は単分子の近接化、そして我々A02班は集合体における高密度状態の維持と固定化を目標としてきました。このうち、単分子での近接化はある程度見通しがついてきましたが、集合体に関してはやはり難しいです。固定化についてこれといった手法は見つかっておらず、あと1年の課題ということになります。

—やはり分子集合体全体を高密度に詰め込むというのは、単分子同士を近づけるのとは違う難しさがあるのでしょうか。

**久保** ラジカル間の相互作用、静電相互作用、ハロゲン結合、そして最も基本的かつ普遍的なファンデルワールス相互作用などを組み合わせ、高密度共役状態を固定化するというミッションに取り組んできました。しかしそれらを組み合わせていろいろ分子に盛り込んでみても、なかなか思い通りに効果が発揮されないのが現状です。

—それでも有力そうなアプローチはあるのでしょうか？

**久保** 面間距離を縮めるために、不對電子間相互作用が非常に有効であることははっきりしてきました。忍久保さんが研究しているノルコロールは反芳香族化合物ですが、ラジカル的な性質を併せ持っています。このためノルコロールの二量体では、面間距離が3オングストロームを切っています。これを見ても、

不對電子間相互作用が高密度共役の実現に極めて有効なのは確定的だと思います。

—そうした意味では収穫もあったと。

**久保** はい、理想的な結果は出ていませんが、一步一步前に進んではいます。高密度共役状態の集合体になって、自由度の高まった電子の広がりができれば、間違いなく新しい現象が現れてくると考えています。もう少し時間はかかるかもしれませんが、何とでも実現したいと思っています。

—ここまでの領域での活動で、よかったと思うことはどのあたりでしょうか？

**久保** A03班・A04班は物理学中心のメンバーが集まっていますが、彼らの物理学側からの視点がとても役に立ったと感じています。有機化学者と物理学者はそれぞれ違うモデルで電子の振る舞いを捉えていて、異なる理解の仕方をしています。我々にしてみれば、今まで考えたことなかった電子の挙動の見方が提供されることになるわけです。これらが新しい着想につながった、あるいはこれからつながるケースが多く出てくると思います。

—たとえばどのようなものが？

**久保** 最近A04班の橋本さんから、「altermagnet」(交替磁性)という概念について聞かせてもらいました。強磁性とも反磁性とも異なる新たなタイプの磁性で、2022年に発見され、現在ホットな分野になっているようです。上向きのスピンと下向きのスピンを独立して取り出すことができる物質で、全く新しいデバイスに結

びつく可能性があります。これをどう有機化合物で実現するかなどはまだ見えてきていませんが。もしかしたら、局所的に生じた交替磁性の状態が、触媒反応などにも影響を及ぼしているのかもしれないと思っています。こうした新しい概念を取り入れて触媒設計ができれば、非常に面白いでしょうね。

—それは確かに面白いですね。逆に、物理の先生方も得るものがあつたということでしょうか。

**久保** 新しい物質が出てくると、新しい物理学が発生するということがありますし、新しい物理を通して既存の物質を見ることで、潜んでいたものが新しく見えてくるということもあります。物理の方は新しい物質を待っていると思いますし、我々物質を作る側も、新しい物理から新たな設計指針が得られるということでもあります。

—久保さん個人としては、たとえばどのような研究がありましたでしょうか。

**久保** A02班のミッションに関連するものとしては、ピラジカルの一次元積層体に関する研究があります(*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, **60**, 21319)。ピラジカル性の高い化合物では、単に分子間に $\sigma$ 結合を形成してしまうのですが、ピラジカル性の低い化合物では異なる振る舞いを示します。高温では2つの電子が分子内で結合していますが、低温では面間距離が縮み、分子間で結合を生成しようとしています。いわば結合とピラジカルが共存している状態を観察することができました。

ここでは高密度共役の実現には至っていませんが、それを指す中で面白いものを見つけることができました。そうした意味でも、高密度共役という指針が非常によかったといえそうです。

—ゴールの設定が重要ということですね。

**久保** 高密度共役という言葉は解釈の余地が残っていて、それぞれの関心に合わせて研究を進め、新しい現象を引き出していくことができます。共役という、普遍的でありつつも掘り下げる余地の大きい言葉を選んだのがよかったのでしょう。

—若手育成などについてはいかがでしょうか？

**久保** 若手が素晴らしく頑張っている印象を受けています。共同研究も盛んに行われ、若手がそれを引っ張ってくれました。こ

の領域の存在が、極めてよい刺激になったのではと思います。

—この領域で多くの方にお話を伺ってきて、素晴らしい若手がたくさんいると私も感じます。日本の科学界の未来は暗い、ノーベル賞もこれからは出なくなるといった声がよく聞かれますが、決してそんなこともないのではと。

**久保** 少なくとも $\pi$ 電子系の化学については独創的な研究も多く出ており、日本は全く世界でもまだまだ先を走っていると感じます。遅れを取っているとは、全く思いません。

—理論物理と有機化学という、日本の強みが統合された領域でもあります。

**久保** 両者の強みが重なり合い、新しい視点を生み出す、こうした領域は非常に大切と感じます。また人を育てるには、あまり大規模になって分野同士の重なりが少なくなるのも良くありません。現在は適正な規模で、とてもうまく領域が運営されていると思います。

—ということで、次の領域のコンセプトなども考え始めるころでしょうか。前回、関さんは「anti」がキーワードの一つとして、反物質のお話などでもしておられたので驚きました。

**久保** さすが関さん、反物質まで来るかと私も思いましたが(笑)、しかし反物質も化学で取り扱えるようになるかもしれません。エネルギー的に非常に接近した二つの状態が干渉し、エンタングルメント(もつれ)した一つの状態になる。これがどういう性質を示すか、どういうモデルで扱っていくか、面白いのではと思っています。

—すると「エンタングルメント」というのが次の領域のキーワード候補になってくるでしょうか。

**久保** いずれにせよ、本領域でも次の領域でも、真摯に未知の探求をしていくことは間違いなく必要です。わかったつもり、説明できたつもりになっているけれど、今までのモデルや理論で説明しきれないことを追求していくことを続けなければいけませんし、そこに新しいことが必ず眠っているはずですから。それを追いかけて続ける限り、日本の科学が世界に遅れを取ることは決してないと思いますし、そのためにもこうした領域が必要だと思います。