



CONDENSED CONJUGATION NEWS Vol. 50

高密度共役のその先の さらにまた先に

関 修平(京都大)



関 博士

この連載による学術変革領域研究(A)“高密度共役の科学”の紹介もついに最終回。最終回の原稿を書くにあたって、前回、私自身が書いた原稿(2024年5月号)を見直してみました。“Anti”をキーワードに、Anti-Wallachの法則と、Anti-Matterの一つであるPositronの例を少し書いてみたのでした。もし可能でしたら、その拙稿をご照覧いただければ幸いです。

(Wallach則: Chiralな物質の充填密度が、RacemicあるいはAchiralな類縁体のそれに比べて低下するという法則)

さて、私自身がどちらかというとAntiというか、非常識な人間ですから、電子の状態密度を物質中で高めていくには、重元素を用いる一般的な手段だけでなく、ひょっとしたら軽元素主体の分子性物質でも可能なのではないか、という考え方で研究を進めてきました。化合物・酸化物半導体などは良い例なのではないか、というちょっと大上段な考え方から進めてきた研究ですが、“どこまで電子共役系を持った分子同士を近づければよいか”という明確な指針は十分に指摘できたのではないかと考えています。“0.3 nm”という大きいようで小さい値は、間違いなく達成できると考えています。

さて、物事に表と裏があるように、“詰め込む”ことによって生まれる“隙間”もあります。物質の中でこれを合わせ

て考えたのが、先に示した“Anti-Wallach”だったのですが、私自身は高密度共役を考えていくうえで、この隙間が鍵なのだ、という一つの解答に行き当たりました。研究とは面白いものです。

ぼくはデルフィでもハムレットでもありませんが、どうしてこういう解答に至ったのかを改めて内省してみると、ぼくの場合はやはり実験データからなのでした。高密度共役領域の研究を続けてきて、私自身が発表した論文の中で、共役分子の空間配置と、そのうえでの電子の輸送特性・有効質量の相関関係について発表してきたものが、今年の時点で約250報ありました。最近、これらの論文にまとめたデータ約900点を整理し、改めて眺めていて、その中にあるちょっと変わった物質群に気づいた、というのが大きな動機でしょう。この流れを少しでもわかりやすく書いた文章が、本誌の競合誌“月刊化学”に掲載されている(“Wallach則に逆らう分子間力から見たキラルな共役分子の可能性”月刊化学, 2025, 80, 39)ので、ここで改めて詳細に述べるのは気が引けます。ただ、データという一つの指標(というか図中の点)が、明確に何かを語ってくる経験についてちょっと書いてみたいと思ったのです。

データを得る過程は、言うまでもなく“測る”ことに端を発します。そういえば“Measure”の類義語を辞典で調べ

ると、驚くほどたくさんの単語に行き当たりますし、“はかる”という言葉にも、たくさん当てはまる漢字があります。そのうち、“測”という字は、“水”と“鼎”(土器)、そして“刀”から成っているようで、化学でいえばビーカーかピペットのような器に水を入れてはかる、そんな測定を昔の人は意図していたのかもしれませんが。“みる”という行為も測定の一つでしょうし、こちらまたたくさんの漢字表現があります。とても広義にとらえれば、人間の行動の多くは“はかる”ことに端を発しているのかもしれませんが。

さて、高密度共役状態を測りまくった結果、上のような私の新しい興味の対象が生まれたわけですが、ここでまた新しい疑問が生まれます。“データがなにを語るのか”の論理的な推定については、おそらく近い将来、人間そのものの役割が終わってしまう時代が来るでしょう。ましてやデータそのもので勝負している世界、たとえば、“ある材料の性能をここまで上げたい”とか、“この使い道に最も適した物質はなにか? ”、などといった明確な課題に向かう研究に、人間の介在が必要ない世界が、僕にはたやすく想像できてしまいます。人工知能にぼく自身は今のところ負ける気はしませんが、20年後はどうか。そんな風に考えていると、そもそも人工知能に与えるべきデータとそれを得る過程に喜びを求める、そんな方針が研究の行きつく先の一つではないかと思うのです。

有機化学美術館を運営しておられる本企画のEditorである佐藤さん、どう思いますか? 分子の形の美しさを感じる素養が僕自身にはあまりなく、むしろオシロスコープの波形や電子顕微鏡のダイヤルに美を感じるという極めて異質なセンスしか持ち合わせていませんが、たとえば分子の形を描くとき、NMRやX線といったさまざまな解析技術を通じてそれを“み”て書き出す。ひょっとしたら思った

通りのNMRのピークが現出した瞬間に、美しさや喜びを感じたのではないですか?

そんな風に考えていると、私なりの新しい高密度共役のその先の“先”が、共役だけでなく化学でもなく、科学の形として少しだけ見えてきた気がします。今も残る古の学問が数学、音楽と天文学だけであるように、数学はともかくとても嗜好性の高い行為のみが学問として残るのではないかしら、そんな風に考えるのです。

【広報担当佐藤より】

ご指名いただきましたので、このシリーズの編集を担当してまいりました佐藤よりひとこと。以前、どのような分子に美を感じるか、化学者の方々に聞いて回ったことがあります。思ったことは、化学者は単に「模様としてきれい」というだけでなく、その分子の秘める機能や可能性を感じ取り、それを「美しい」と表現しているのではということでした。フラーレンやフェロセン、DNAは単に形状だけが美しいのではなく、その背後に広大な未開拓の沃野が広がっていると感じさせたからこそ、ああも化学者を惹きつけたのではと思います。この高密度共役の領域でも、多くの可能性を秘めた「美しい分子」を見せていただくことができました。広報担当として、冥利に尽きます。

また、トップランナーから若手まで、優れた研究者がひとつの領域に集まり、高密度に連携が行われると、かくも素晴らしい相互作用が生まれるものかという思いにもなりました。「人材の高密度共役」も、大きな成功を収めたものと感じます。いろいろな面で厳しい状況に置かれている日本の科学界ですが、素晴らしい成果が生まれ、優れた若手が飛躍できる場所があるというのは、大きな希望です。50回の連載を通じて、そのことが読者のみなさまに伝わったのであれば、何より嬉しく思います。