

| | | |
|------------|---|--------------------|
| 研究代表者 | 名古屋大学・トランスフォーマティブ生命分子研究所・教授 | |
| | 山口茂弘 (やまぐち しげひろ) | 研究者番号：60260618 |
| 研究課題 情報 | 課題番号：25A202 | 研究期間：2025年度～2029年度 |
| | キーワード： n 電子系分子、分子複雑性、光・電子物性、分子機能、量子化学計算 | |

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

● 研究の全体像

現代社会の持続的発展に向けて、新たな物質を自在に創出できる化学の役割は、これまで以上に重要性を増している。とりわけ、分子が生み出す光・電子機能の追求は、省エネルギー型発光デバイスやフレキシブル太陽電池の開発をはじめ、エネルギー・環境問題の解決や産業技術の革新につながり、さらには蛍光イメージング技術の進展を通じて生物学・医薬分野の進歩にも貢献する。分子性の光・電子機能の根源となるのは、不飽和結合が連結された n 共役骨格をもつ分子であり、洗練された n 電子系分子を創り出す化学は、分子機能科学の中核的課題といえる。そして、新奇な n 骨格の構築においては、我が国の研究者層は厚く、国際的にも高い競争力を誇ってきた。しかし、学術的に興味深い n 骨格が必ずしもエポックメイキングな材料へと直結するわけではなく、このギャップをいかに埋め、社会課題の解決に資する分子機能や技術へと昇華させるかが、本分野の重要な課題となっている。

この課題を解く鍵として、molecular complexity に着目する。この言葉は、分子の構造の精緻さや多様性を表す言葉であり、官能基の種類や結合様式、対称性、立体構造といった要素が、その豊かさを形作っている。しかし、分子の光機能や電子機能に目を向けるとき、鍵となる複雑性の本質は大きく異なる。本領域では、これを新たに「 n -molecular complexity (n 分子複雑性)」と捉え、独自の階層的アプローチをもとに相乗的に追究することにより (図1)、新たな分子機能の開拓と技術の進化に挑戦する。

すなわち、新たなカテゴリともよべる分子群を生み出す骨格複雑性と、突出した物性・応答性をもたらす状態複雑性とを掛け合わせることで、学術の先端を切り拓く高度 n 分子体を創出する。さらに、それらの機能を最大限に引き出す最適な機能場複雑性を含めて統合的に造り込むことで、高度 n 分子システムとして昇華させ、革新的な分子機能や技術を生む多彩な機能科学へと展開する。そして、この物質創製に量子化学的理解と探索手法を融合させることで、「 n 分子複雑性を紡ぐ統合的デザインの学理」の構築を目指す。



領域目標 π 分子複雑性を紡ぐ統合的デザインの学理の構築

図1 階層的な n 分子複雑性の要素とその追求により変革するサイエンス

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

● 本領域の研究戦略

本領域では、① n 分子複雑性の相乗的追究による、学術として先端をいく高度 n 分子体の創出 (学術先端性) と、② n 分子複雑性が生み出す分子機能・技術の実現による化学を超えたサイエンス・社会への貢献 (異分野・社会への貢献性) の2つにより、当該分野の研究対象ならびに研究手法に変革をもたらす。このために、以下のA01-A04の4つの研究項目を組織し、11の分野にまたがる異分野融合により挑む (図2)。各研究項目の取り組みを以下に示す。

A01 骨格複雑性の追究：反芳香族や非ベンゼノイド骨格の活用、新たな結合様式や高周期元素による不飽和結合の導入、さらには2次元/3次元構造のハイブリッド化といった多様なアプローチを通して、従来にないカテゴリの n 骨格を創出する。

A02 状態複雑性の制御：電荷やスピンを有する n 分子、励起状態の精緻なマネジメント、分子の柔軟性を活用した複数の状態間の可逆性の制御等のアプローチにより、秀逸な物性や応答性の発現・制御を目指す。

A03 機能場複雑性を含めた高度 n 分子システムの創製：デバイス環境や生体環境に加え、複数の材料・相が接する界面や、特異な状態など、機能が求められる環境下における分子の特性や挙動を理解し、最適化することで、新たな分子機能や革新的技術の創出を目指す。

A04 量子化学的理解と探索：励起状態や多様な機能場における分子システムとしての振る舞いを、高精度量子化学計算によって理解し、さらに量子化学的手法を用いた化学空間の探索を組み合わせること、高度 n 分子システムの創製に関する知見の体系化を図る。

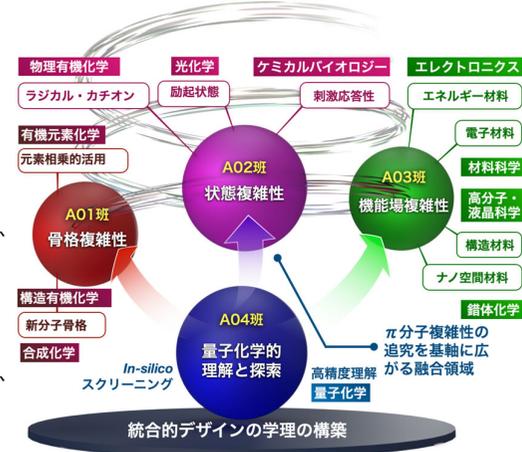


図2 本領域の分野融合の戦略

● 本領域で何をもちたすのか

新奇な n 骨格の創製化学は、これまで多くの化学者を魅了し、世界的に広く展開されてきた。これらは単に学術的に興味深いだけでなく、一つの卓越した機能性分子の登場により、既存の分子技術に新たな局面をもたらす、また、未踏の機能科学を切り拓く原動力にもなり得る。その鍵となるのは、ニース・インスパイアドな視点から、基礎学術研究としての課題を的確に捉え、それを解く分子構造をいかに導き出すかという点にある。実際、我々はこれまで、従来の技術では捉えることができなかった細胞内現象を可視化する蛍光プローブや、世界最高水準の効率

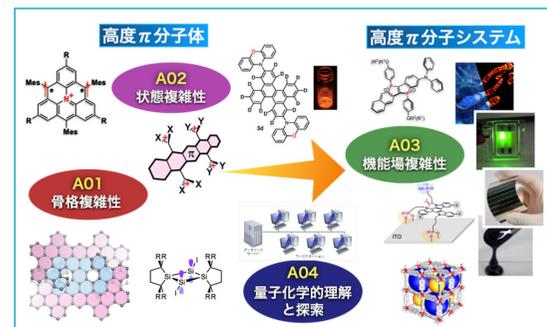


図3 本領域で挑む高度 n 分子システムの創製

を誇る薄膜太陽電池を実現する分子システムの構築に成功し、 n 分子のもつ潜在的可能性を実証してきた (図3)。本領域では、こうした次代を切り拓く革新的分子の創出と、それを支える分子デザインの学理の確立に向け、総力を挙げて取り組む。特に、A01、A02と、A03との連携が重要となる。また、世界のトップ研究者を含めた国際連携ネットワークの中で本研究を推進し、グローバルに可視性の高い研究展開を図るとともに、世界で活躍できる人材育成につなげる。