


【基盤研究(S)】

高周期元素環状π共役系分子群の創出と電子状態解明に基づく機能性分子デザインの革新

	研究代表者	筑波大学・数理物質系・教授 笹森 貴裕(ささもり たかひろ)	研究者番号:70362390
	研究課題情報	課題番号:26K21752 キーワード:高周期典型元素、環状π共役系、元素活用、元素科学	研究期間:2026年度~2030年度

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

本研究は、炭素を中心とする従来の機能性分子化学において重要な「環状n共役」の概念に革新をもたらす。これまで有機化学においてはあまり注目されていなかった、ケイ素やリンといった高周期元素のn共役系に着目し、合成・測定・理論という多角的なアプローチで、**高周期元素が環状n共役系を形成する斬新な分子群**を創出し、革新的な機能性分子創出の学術基盤構築を目指す。

現代の物質社会が持続的に発展するためには、エネルギー問題や環境問題の解決、技術革新に貢献する秀逸な光・電子機能物質の創製が不可欠である。分子性の光・電子機能材料において、その機能の根幹を成すのはn結合であり、特にベンゼンを基本骨格とするフラーレンやグラフェンのような環状n共役系が実現する柔軟な電子移動や電子励起が鍵となる。炭素基盤化学といえる従来の第二周期元素を中心とした分子化学の概念を超える、革新的な新物質創製に繋がる有望な道として、高周期元素を含む環状n共役系が、従来の炭素化学の常識では予測不可能な、全く新しい電子状態をとりうることに着目し、高周期元素環状n共役系分子群の創出を目指す。ケイ素やリンなどの高周期元素が創る柔軟なn電子系を鍵として、機能性物質研究のブルーオーシャンである高周期元素環状n共役系分子群の化学を開拓する。

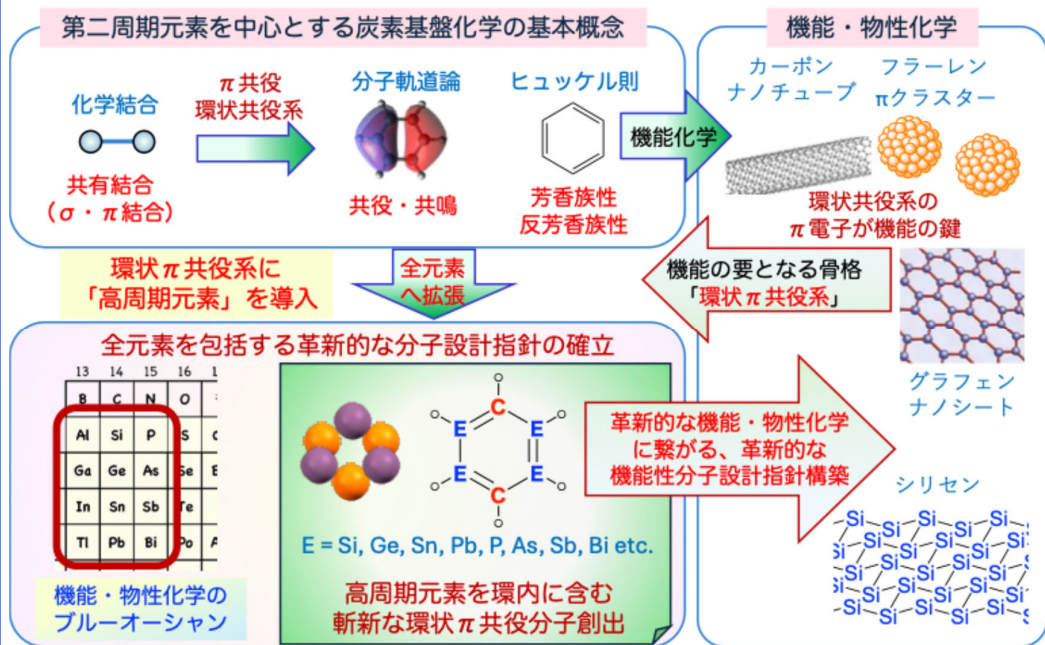


図1 研究全体のイメージ図:物質機能の鍵といえる「環状π共役系」とその学術基盤を支える分子化学

●機能・物性のブルーオーシャン:高周期元素環状π共役系に着目した新物質創製

機能性を指向した新物質創製化学研究において重要なのは、偶発的な発見を期待して網羅的に新物質を探索するのではなく、盤石な学術基盤に基づいた合理的な分子設計指針を確立し、それに基づいて迅速に物質創製を遂行することである。昨今、多彩な元素特性に着目し、国内外の多くの化学者が精力的に全元素を包括する化学への展開を目指し研究を進めている。特に我が国では、希少元素を豊富に存在する元素で代替する、あるいは希少元素を再活用することを旨とする「元素戦略・元素循環」が国家的な重要課題として掲げられ、全元素を視野に入れた物質創製化学が推進されている。このような背景のもと、多くの研究者が多角的な視点から、多彩な高周期元素のn結合を持つ化合物を数多く創出し、特異な構造や性質を見出してきた。本研究課題では、n共役、共鳴、環状n共役、芳香族性といった、物質機能・物性と深く関わるn結合の電子状態について、高周期元素までを統一的に理解するための体系的な学術基盤の確立を目指す。世界をリードする我が国の元素化学の潮流の中で、「機能性物質研究のブルーオーシャンである高周期元素環状n共役系分子群の化学」に正面から挑む研究課題であり、卓越した物質創製能力、測定・理論解析能力を結集し、炭素基盤化学を超える革新的な学術基盤を構築する。

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

革新的な機能の創出のために、従来の炭素基盤化学の概念を根本から見直し、新しい学術基盤の構築が不可欠となる。本研究は、特異な機能・物性発現に大きな期待が寄せられながらも、合成の困難さ故にこれまで機能・物性化学の研究対象とは見なされてこなかった、例えばベンゼンの炭素原子を全てケイ素に置き換えた「ヘキサシラベンゼン」のような未踏分子である、「高周期元素環状n共役系化合物」に焦点を当てる。代表者・笹森がこれまでに蓄積してきた、ケイ素間n結合、リン同士のn結合など高周期元素含有n結合に関する深い知見と卓越した合成技術を駆使して、斬新な高周期元素環状n共役分子群を創出する。分担者・橋爪の最先端測定技術と、分担者・岡澤の高精度理論計算を融合した電子状態解析を実践し、電子密度分布に基づく光・電子物性機能の鍵要素を抽出する。蓄積した知見を体系化し、機能・物性化学に向けた、周期表上の全元素を包括する環状n共役系の普遍的な理解を提供する革新的な学術基盤を構築する。新物質創製における対象元素の範囲を飛躍的に拡大させ、秀逸な機能・物性を創出する斬新な分子設計指針を確立する。

特に優れた光・電子機能が期待できる基本骨格として芳香族化合物などの環状n共役系として、図2の①~③に示す多彩な環状n共役系にカテゴライズされるような、炭素基盤化学の常識では説明できない機能・物性発現が期待できる、夢の分子群として、複数の高周期元素をn共役系に組み込んだ「高周期元素環状n共役分子」を安定な化合物として合成・単離する。これらの分子特性・物性と、分子構造・電子密度分布、電子状態との相関を明確化する。

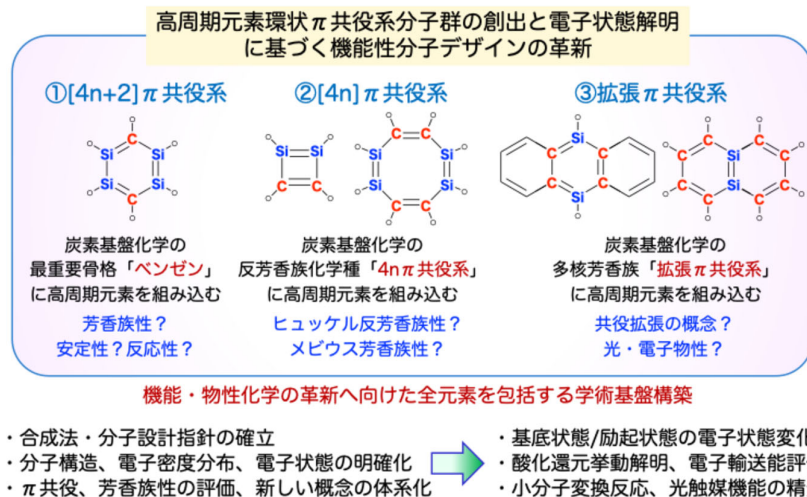


図2 研究対象とする高周期元素環状π共役系と研究遂行方針

スライド 2

AO の
作成者, 2026-03-09T05:42:42.627