



研究領域名 高密度共役の科学
電子共役概念の変革と電子物性をつなぐ

京都大学・大学院工学研究科・教授

せき しゅうへい
関 修平

領域番号： 20A204 研究者番号：30273709

【本研究領域の目的】

本研究領域『高密度共役の科学：電子共役概念の変革と電子物性をつなぐ』は、有機化学に基づく分子性物質の設計・分子間空隙の制御・凝縮相における熱ゆらぎ抑制により、新しい分子間電子共役（＝高密度共役）を達成する。同時に、最先端の機能物性科学的評価手法により、得られた高密度共役物質の優れた電子伝導やスピン輸送、特異な電子相関や局在状態に関わる未踏機能の実現を通じて、美しい式・論理を介した“X”-conjugation の学理の確立と普遍化を目指す。

【本研究領域の内容】

新しい分子間電子共役（＝高密度共役）の示す破格に優れた物性と未踏機能について探求し、既存の枠組みを超越する電子共役概念（＝“X”-conjugation）を、次の三つのアプローチによって確立する。

(I) σ ・ π 共役を超越する新しい電子共役の達成

p 軌道を対象とした最初の共役の提案に端を発し、長らく共役の概念は π 結合を中心に発展してきた。さらに、1950 年代に議論され始めた σ 電子の非局在安定化（ σ 共役）、 δ 結合の存在と非局在安定化の可能性、 φ 結合の理論予測など、分子軌道論を基にした新たな共役概念の扉が開かれてきた。しかし、これらの電子共役概念の拡張は、いずれも重元素の高次原子軌道による共役を追求するものであった。これに対し、本研究領域では、“共役”の根本である“電子非局在化によるエネルギー利得”に立ち戻り、炭素を中心とする分子性物質における新たな電子共役の拡張をもって共役概念の変革を目指す。具体的には、有機化学を駆使した分子性物質の周期配列構造中で、1) 分子間空隙の可能な限りの縮小による高密度化、2) 熱ゆらぎを超越する相互作用の導入、3) “空間を電子で埋める”という基本戦略に基づく分子間空隙への電子状態の創り込みにより、既存の共役を超越した高密度共役を創出する。

(II) 破格に優れた物性・未踏機能への挑戦

分子性物質の電気伝導度が示すダイナミックレンジは破格に大きい。これは電荷の輸送特性に当たる電子移動度・有効質量がそもそも広域に変調することに加え、電荷担体及び電子状態の密度が物質に応じて大きく変化し、これらの積によって電気伝導度（＝電子物性）が与えられるからである。実際、幾つかの有機伝導体中において電子・分子の空間充填を制御することで、超伝導体から絶縁体までを同じ物質だけで具現化できることは、他の多くの共役分子性物質の可能性を如実に代弁している。超伝導体から絶縁体まで、あるいは質量ゼロの状態から強い局在を示す巨大有効質量までに至る“破格”のダイナミック

レンジを包括して制御できる可能性を持つことこそが、分子性物質による電子共役構造の本質である。本研究領域では、電子共役構造の本質的な制御と、最先端の機能物性科学的評価手法による各種物性の解明により、未踏機能である軽い電子の極限及び重い電子の極限に挑戦する。

(III) 高密度共役から“X”-conjugation へ
高密度共役が実現された状態において、空隙の中の電子の共役を表す波動関数は、それを取り巻く空間の対称性を反映した“シンプルで美しい式・論理”で表現されるに違いない。このように明確に表現される既存の枠組みを超える分子間共役の概念を“X”-conjugation として提唱し、世界に発信する。

【期待される成果と意義】

分子空隙の可能な限りの縮小による高密度化と、「高密度共役」の概念の下、本「高密度共役の科学」領域では、次の二つの極限に挑戦する。

軽い電子の極限への挑戦：共役分子固体中の $500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ に達する電子移動度を、高密度化により更に向上させ、「有機化学に基づく高密度共役」と「最先端の機能物性科学的評価手法」の融合によって、既存の無機・酸化物材料を凌駕する優れた電子伝導やスピン輸送性における潜在性を明示する。

重い電子の極限：電子密度の自在制御は、電子間相互作用の精密制御にも直結する。特に、電子同士が互いに強く相互作用する場合に着目し、多体効果により重い電子の極限である電荷・スピンの局在化を分子性物質において実現する。さらに、分子性物質中の超構造の創出により、スピンフラストレーション・電荷フラストレーション・(反)強磁性・(反)強誘電性など重い電子の極限として発現する特異な電子相関と局在状態による物性を具現化する。

最終的に、既存の枠組みを超越する電子共役概念：“X”-conjugation を打ち立て、「軽量性・柔軟性・易加工性」に偏った現状の有機電子材料の設計指針を変革しつつ、分子性物質の示す光電子機能における“破格のダイナミックレンジ”を示す。

【キーワード】

“X”-conjugation：本研究領域の目指す、従来の概念を超越した分子間に広がる新しい電子共役概念

【領域設定期間と研究経費】

令和2年度－6年度 1,168,000 千円

【ホームページ等】

<https://x-con.jp>

X-conjugation-admin@t.kyoto-u.ac.jp