

令和2年度「学術変革領域研究（A）」新規採択研究領域  
に係る研究概要・審査結果の所見

領域番号	20A204	領域略称名	高密度共役
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		
領域代表者名 (所属等)	関 修平 (京都大学・工学研究科・教授)		

(応募領域の研究概要)

ダイヤモンドは、シリコンを凌駕する電子移動度を示すなど、優れた電子材料である。これは炭素間 $\sigma$ 結合の短さに由来しつつ、さらに短い炭素間 $\pi$ 結合の本質的な卓越性をも明示する。材料としての極限的性質を目指すならば、共役分子性物質の選択は必然であって、分子間空隙の極限的な縮小による「高密度共役」の実現こそが、破格の物性向上の鍵である。「高密度共役の科学」では、①共役電子の最近接を実現する分子骨格の創製、②巧みな分子間相互作用による共役分子の高密度構造の達成、③熱ゆらぎの克服による電子・スピンの極限的非局在/局在化の検証と機能開拓、によって従来の分子性物質設計の概念変革を導く。有機化学・機能物質化学・物性物理学間の **Translational Research** により、分子間共役の概念の昇華：新たな共役概念である"**X**"-conjugation の提案をもって、従来の電子共役： $\pi$  共役の科学をも変革する。

(審査結果の所見)

本研究領域は従来の分子物質系科学を再考して電子共役概念の変革を行うものであり、新たな学問分野の創出に向けての重要な発展が期待できる。高いレベルの研究者によって最先端のバランス良い体制もできており、学術変革に相応しい提案である。無機物に勝る有機物を作るというゴール感も優れている。さらに、諸分野への波及力もあり、優れた領域研究を形成できると評価する。計測をエンジンとした分子展開研究はこれまでは単独研究では成功しにくい問題点があったが、領域形成の工夫が見られる提案である。

一方、高密度共役をどうやって達成するかについては不明瞭な部分があり、隙間を埋める具体的な戦略がいくつか必要である。