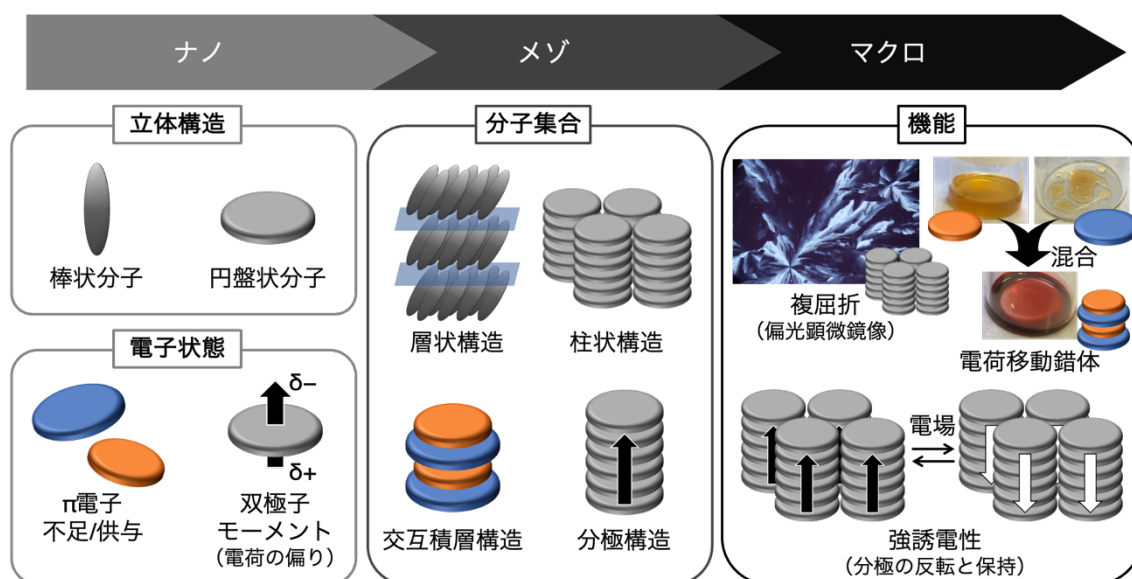


研究紹介(秋山担当)

ナノ-メゾ-マクロをつなぐ現象の解明

分子レベルで設計した化学構造がどのように分子集合体を形成し、さらにその集合体がいかにマクロな機能物性へと発展するかを理解し制御することは、現代材料化学における重要課題の一つです。特に、有機分子材料では、単一分子の立体構造、電子状態、双極子モーメント、キラリティ、および水素結合などのナノスケールの情報が、分子集合体としてのメゾスケールの秩序構造を経由して、光学特性、強誘電性、イオン・電子伝導などのマクロ物性として現れます。このような階層構造形成と物性発現の関係を化学的に解明し、自在に設計することは、新たな機能材料創出の基盤となります。

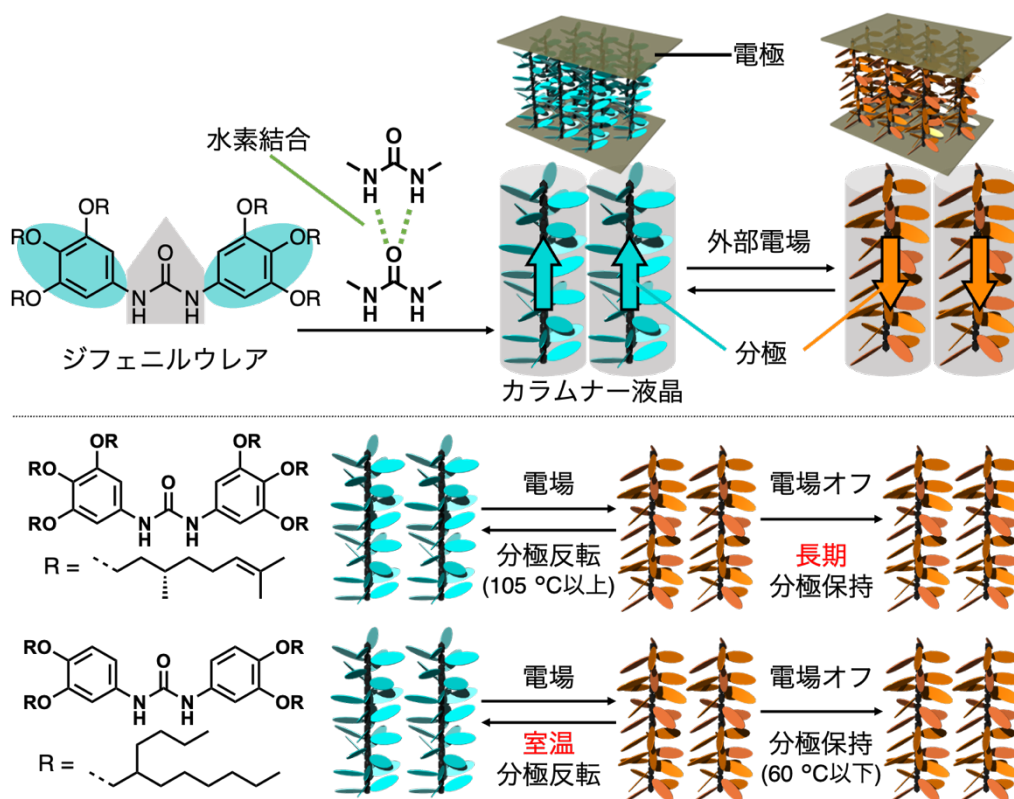
我々は、このナノ-メゾ-マクロ階層を横断する化学現象の創出と理解を目的とし、分子設計・有機合成から、分子集合体において発現する強誘電性や光電子機能などの物性評価に至るまでを研究しています。学生の皆さんは、有機合成、構造解析、および分光・電気物性測定などを通じて、幅広い技術を習得するとともに、新しい現象を自ら発見する醍醐味を体験してもらいたいと考えています。



(1) ジフェニルウレア分子を基盤とした強誘電性分子集合体

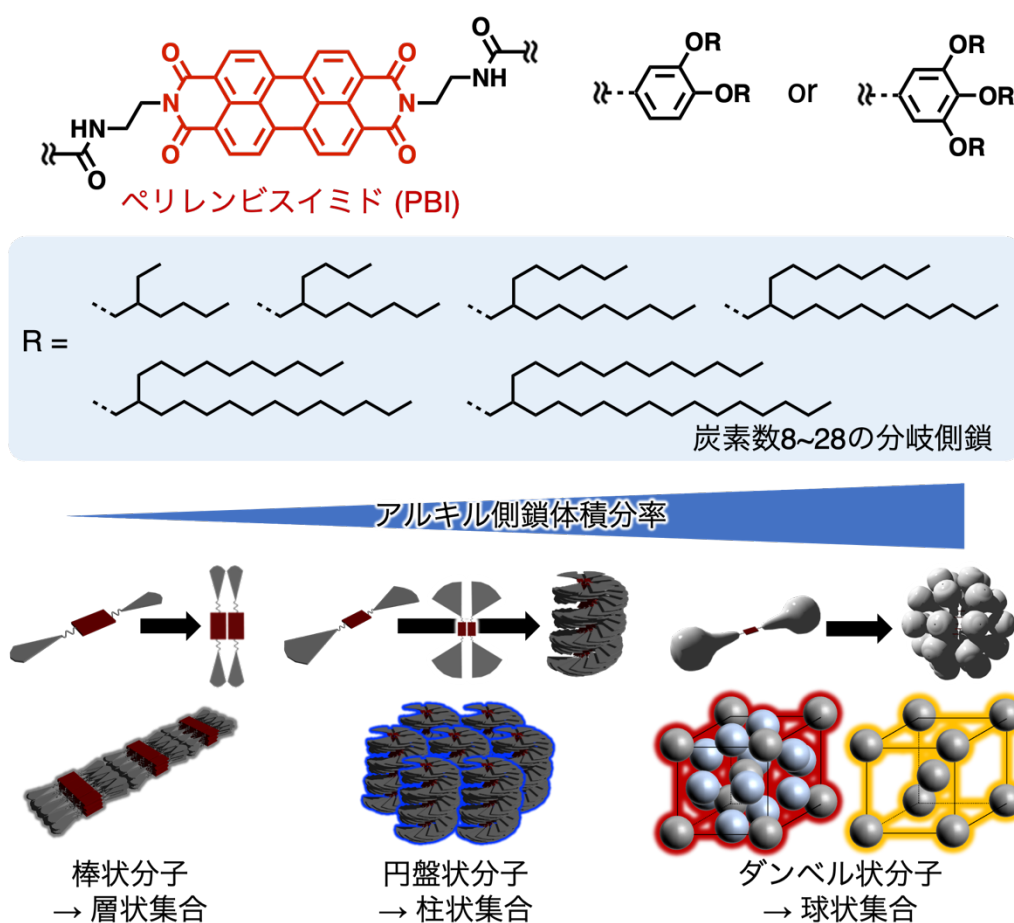
ジフェニルウレア分子は、分子中央部に位置するウレア基の水素結合ネットワークにより、カラムナー液晶などの一次元分子集合体を構築します。この一次元構造において、ウレア基が一方向に整列することで分極構造の形成が可能となります。我々は、この特異な集合形態を活かし、外部電場印加により、分極構造を反転・保持できる強誘電体の開発に取り組んでいます。分極構造の反転性および保持性を制御するため、分子設計の段階で、側鎖の体積や形状を精密に調整し、分子間相互作用を制御することで、分子運動性や電場応答性を変調できると仮説を立てています。これまでに、上記のコンセプトのもと、長期分極維持可能な強誘電体や室温・低電場で駆動する強誘電体の創製に成功しています。現在は、分子構造と強誘電物性の相関をより詳細に明らかにするとともに、これら材料の応用も進めています。

Chem. Lett. 2020; *Adv. Electron. Mater.* 2020; *Mater. Lett.* 2023; *ACS Appl. Electron. Mater.* 2024; *J. Phys. Chem. B* 2024; *CrystEngComm* 2025



(2) 側鎖工学による集合構造・電子機能物性の制御

ナフタレンビスイミド (NBI) やペリレンビスイミド (PBI) などの π 共役系を持つ有機半導体分子を対象に、強い π - π 相互作用と側鎖構造の立体障害を競合させることで、集合状態を変調することに成功しています。一般に、 π 共役分子は層状や柱状の π スタック構造を形成し、電子輸送や光吸収に優れた材料として知られています。本研究では、高立体障害側鎖の導入により分子充填様式を変調し、溶解性に優れた柱状や球状の自己集合体を構築することで、分子集合体の構造と光電子機能の相関を解明することを目指しています。



(3) 金(I)錯体を用いた分子集合体の電子状態制御

金(I)錯体は、 d^{10} 電子配置を持ち、隣接する金原子との特異な相互作用を形成することが知られています。この金原子間相互作用に加え、対称性や立体障害を制御した配位子を導入することで、一般的な有機分子を超える大きな双極子モーメントを達成することが可能です。分子集合構造の制御により、双極子モーメントの応答と金属原子間相互作用を協奏的に機能させることで、新たな強誘電体の創出を目指しています。