



学術変革領域 A
 π 分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学

NEWS LETTER

Volume 6
September 2026

– 研究紹介 No.11

山岸洋グループ（公募班・A03-5）

筑波大学 数理物質系物質工学域・エネルギー物質科学研究センター（TREMS）・ホ
ウ化水素研究センター 准教授，筑波大学高等研究院 自発研フェロー



准教授：山岸洋，D3:1 名，M2:2 名，M1:2 名，B4:3 名，B3:1 名

研究のねらい

古来，生命と物質は明確に切り分けられて考えられてきましたが，科学の発展によりその理解は大きく変わりました．分子細胞生物学や有機化学分野の精力的な研究によって生命や物質の謎が徐々に明らかにされるとともに，「生命的なもの」と「物質的なもの」の境界が徐々に融合しつつあります．

山岸研究室では，そんな物質と生命の中間に位置する材料・デバイスの開拓を目指しています．特に有機化学に加えて光物理学と分子生物学を利用することで，「柔らかい光デバイス」と「バイオプローブ」という2つのデバイス群の開発に取り組んでいます．さらに最近では，「生命を模倣した化学反応システム」という新たなテーマにも取り組んでいます．

柔らかい有機レーザーデバイスの開発

従来，電気デバイスでは高性能な無機材料が中心でしたが，近年は有機薄膜太陽電池，有機 EL，プリンタブルエレクトロニクスなど，有機材料を用いたデバイスが急速に発展しています．その背景には，分子設計技術の進化によって柔軟性，軽量性，加工性，生体親和性といった有機材料ならではの機能を引き出せることがあります．これにより，曲げられるデバイスや，身体に貼付・埋め込み可能なデバイスも実現されています．また，この間に優れた電子特性や耐久性を実現するための分子設計技術も大きく進化し，無機材料と方を並べるまでに特性も進化してきました．

私たちは、この考え方を光デバイスへ展開しています。レーザー光源、光ファイバー、光回路など、これまでは主に無機材料から作製されてきたデバイスを有機材料から作成することを目指しています。その鍵となるのが、有機材料の微細加工技術です。一般的なレジスト材料は微細

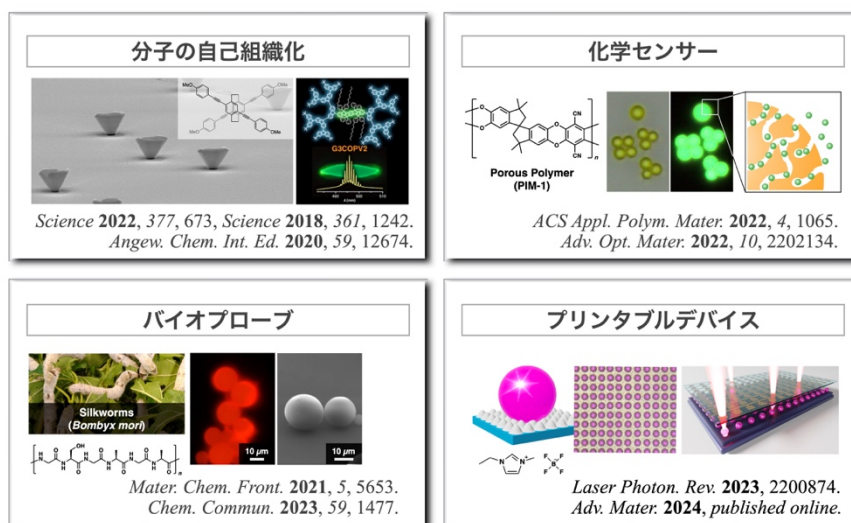
加工に適する一方、利用できる材料や機能が限られます。そこで私たちは、多様な有機材料を光デバイスへ加工する溶液プロセスを開発してきました¹⁻³。特に、溶液中でゆっくりと分子を凝集させて球状粒子を形成することで、光共振やレーザー発振といった機能を持つ素子を合成できることを明らかにしています。

さらに、この基盤技術を応用し、常温で液体の有機材料から微小レーザー光源を作製することに成功しました。この有機レーザー光源はインクジェットプリンターで簡便かつ大面積に作製でき、電圧を印加することで画素ごとにレーザー発振を ON/OFF できます⁴。また、タンパク質や抗体を用いた光素子も開発しています。これらは高い生体親和性と分子選択性を備え、鋭い発光スペクトルを利用することで、定量計測や多項目検出への応用が期待されます。いずれも、従来の硬いデバイスでは実現しにくい特性です。有機材料の豊かな機能性を生かし、新しい光デバイスの創出を目指しています。

本領域で何をを目指すか

学術変革領域(A)「 π 分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学」では、これまで培ってきた有機材料の微細化技術を基盤に、フルカラーで微細な光励起型有機レーザーの開発に挑みます。さらに、それらを高密度に集積した「有機レーザーディスプレイ」の創製を目指します。その実現には、レーザー色素の色調制御と光耐久性の向上、マトリックスとして用いる液体材料の電場応答性の向上が不可欠です。有機化学と光工学を融合してこれらの課題を解決するとともに、レーザーを支持する基板の表面科学を深化させ、電気制御技術の高度化にも取り組みます。

- [1] K. Li, H. Yamagishi, O. Oki, T. Kondo, Y. Yamamoto, *J. Am. Chem. Soc.* **2026**, *148*, 13674–13681.
 [2] O. Oki, H. Yamagishi, Y. Morisaki, R. Inoue, K. Ogawa, N. Miki, Y. Norikane, H. Sato, Y. Yamamoto, *Science* **2022**, *377*, 673–678. [3] K. Iwai, H. Yamagishi, C. Herzberger, Y. Sato, H. Tsuji, K. Albrecht, K. Yamamoto, F. Sasaki, H. Sato, A. Asaithambi, A. Lorke, Y. Yamamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 12674–12679. [4] M. Kato, J. Miyagawa, S. Noguchi, N. Takada, S. Baba, S. Someya, A.K. Singh, J.-S. Huang, Y. Yamamoto, H. Yamagishi, *Adv. Mater.* **2025**, *37*, 2413793.



– 研究紹介 No.12

松岡和グループ（公募班・A04-2）

北海道大学 化学反応創成研究拠点 前田理研究室 特任准教授



特任准教授：松岡和，D2:1 名，D1:1 名，M2:1 名，M1:1 名，B4:1 名（北大 前田理研究室）

研究のねらい

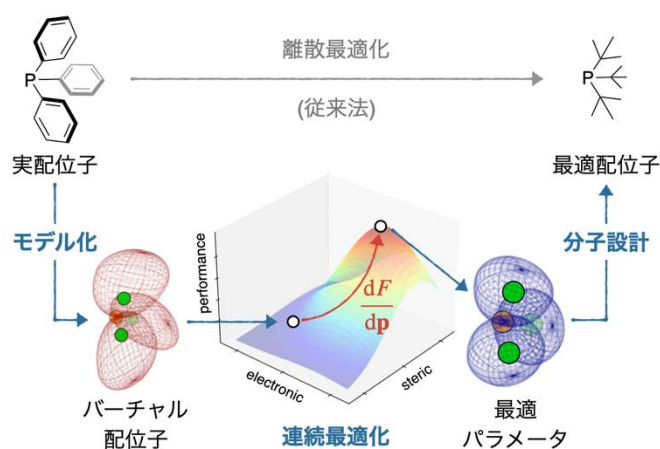
量子化学計算は、分子の性質や化学反応を理解し、予測するための強力な手段です。私たちのグループでは、「この分子はどのような性質をもつか」「この反応はどのように進むか」という従来の量子化学計算の枠組みにとどまらず、「望む性質をもつ分子は何か」「望む化学反応を実現するにはどのような触媒が必要か」という逆向きの問いに答えるための計算手法の開発に取り組んでいます。膨大なケミカルスペースをしらみ潰しに調べるのではなく、目的とする性質や反応性から必要な分子を直接導き出すことで、化学における分子・反応設計の新しい方法論を確立することを目指しています。

触媒を逆設計するバーチャル配位子

研究の核となるのが、独自に開発してきた「バーチャル配位子法」です¹⁻⁵。この手法では、量子化学計算において実在する配位子をそのまま用いる代わりに、その電子的・立体的性質を近似した仮想的な配位子モデルを用います。これにより、具体的な分子構造と、それがもつ電子効果や立体効果などの性質を切り離して扱うことができます。

実在する配位子の分子構造は離散的であるため、その中から触媒性能を最大にする構造を直接求めることは容易ではありません。一方、バーチャル配位子の電子効果や立体効果など

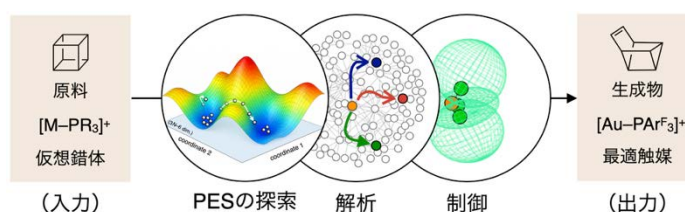
の性質は連続的に変化させることができます。そこで、バーチャル配位子の性質を少しずつ変化させながら触媒性能を計算することで、関数の極大値を探すように、最適な触媒がもつべき特徴を求めることができます¹。最後に、その特徴を実現する実在配位子を探索・設計することで、「この化学反応を効率よく進めるには、どのような触媒が必要か」という逆向きの問題を解くことができます²。



化学反応そのものを設計する

私たちは、触媒の最適化だけでなく、新たな化学反応そのものを計算から設計することにも取り組んでいます。その基盤となるのが、分子の構造とエネルギーの関係を表す「ポテンシャルエネルギー曲面 (PES)」です。化学反応は、反応物から生成物に向けて、遷移状態を介して PES 上の極小点間を移動する過程として捉えることができます。したがって、量子化学計算によって PES を網羅的に探索することで、既知の反応だけでなく、これまで見過ごされてきた新反応を見つけ出すことができます。

さらに、得られた PES を解析することで、新反応を実現するために「どの反応経路を促進し、どの反応経路を抑制すればよいか」を明らかにし、これを実現する触媒をバーチャル配位子法によって逆設計する計算手法を開発しています⁵。すなわち、PES を探索・解析し、触媒によって制御することで、新反応とそれを実現する触媒を同時に計算から導き出します。最近では、50 年以上研究されてきたキューバンの異性化反応を対象としてこの手法を適用し、これまで見逃されてきた複数の異性化反応と、それを実現する触媒を予測・実証することに成功しました。



本領域で何を指すか

本領域では、これまで開発してきた逆設計手法を π 電子系分子の励起状態へと拡張します。励起状態の PES を解析し、そのダイナミクスを分子構造によって制御することで、望む光機能をもつ π 電子系分子を量子化学計算から逆設計する手法の確立を目指します。

[1] W. Matsuoka, T. Oki, R. Yamada, T. Yokoyama, S. Suda, C. M. Saunders, B. B. Skjelstad, Y. Harabuchi, N. Fey, S. Iwata, S. Maeda, *ACS Catal.* **2024**, *14*, 16297. [2] W. Matsuoka, K. Hirose, R. Yamada, T. Oki, S. Iwata, S. Maeda, *J. Chem. Inf. Model.* **2025**, *65*, 6913. [3] K. Tanaka, III, R. Y. S. Debbarma, W. Kanna, H. Hayashi, W. Matsuoka, S. Maeda, T. Mita, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 39640. [4] K. Hirose, S. Maeda, W. Matsuoka, *J. Comput. Chem.* **2025**, *46*, e70285. [5] W. Matsuoka, T. Oki, K. Tanaka, III, R. Yamada, R. Staub, A. Varnek, T. Mita, Y. Harabuchi, S. Iwata, S. Maeda, *ChemRxiv*, **2026**. DOI: 10.26434/chemrxiv.15003539/v1.

海外研究体験記

A01 班 筑波大学 笹森研究室

浅川 哲平（博士後期課程 D1）

期間：2025 年 09 月 28 日～2026 年 02 月 28 日（154 日間）

滞在先：ドレスデン工科大学（Prof. Jan J. Weigand）（ドイツ）

研究背景

有機化学は、炭素・窒素・酸素といった第二周期元素を中心に発展し、 π 共役、反応性、立体化学などはすでに体系化されています。一方で、Si, P, S などの第三周期以降の典型元素を含む化合物は、第二周期元素と比較して電子構造や結合様式が本質的に異なり、魅力的な新たな性質を持つことが期待されています。しかし、その結合の特徴に起因する高い反応性や、合成経路が確立されていないことを理由として、依然として十分に開拓されていません。

存在すらしないと考えられてきた高周期元素間の多重結合ですが、近年では研究が盛んに行われ、さまざまな分子が合成・単離されています。P=Si 結合に関しては、1984 年に単離¹⁾が報告されてから活発に研究展開されており、 π 共役の拡張を指向した分子の単離²⁾も行われてきました(図 1)。芳香族部位と P=Si 結合が共平面に存在するこれらの分子は、 π 共役の拡張が起ることによって吸収波長の変化や弱い蛍光が観測されるなど、既報の分子とは明らかに異なる性質が発現しています。

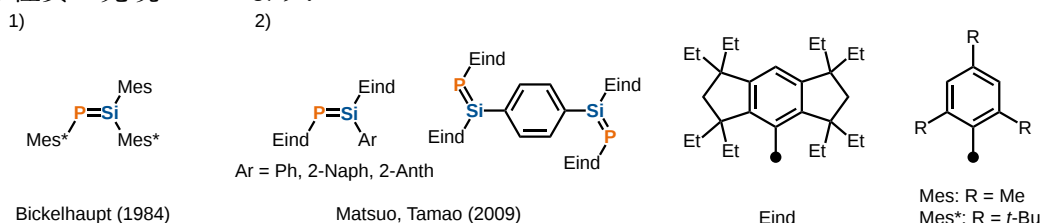


図1

そのため、剛直な環骨格に P=Si 結合を組み込んだ分子の性質には興味を持たれますが、これまでにそのような例はなく、合成経路の確立も重要な課題です。

そこで本研究では、フェナントレン骨格に高周期元素間多重結合(P=Si)を組み込んだ新しい π 電子系化合物である 9,10-ホスファシラフェナントレンの合成研究に取り組みました(図 2)。立体保護によって、極めて高い反応性を有する本分子を安定な分子として単離することを目指します。フェナントレン骨格の光・電子的な性質や反応性に過度な影響を与えないよう、フェナントレン骨格上には置換基を導入せず、ケイ素原子上にかさ高い置換基を導入する設計としています。

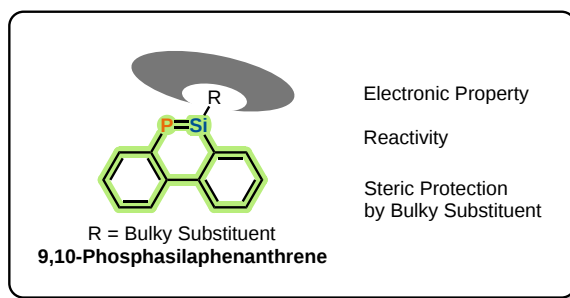
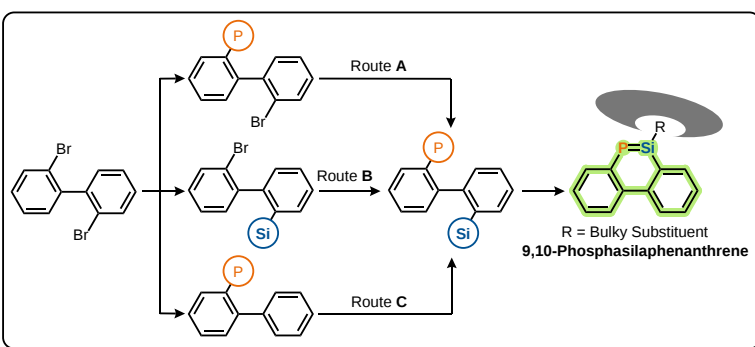


図2

合成検討

2,2'-ジブロモビフェニルをから、最終的に還元によって二重結合を形成する方法を検討しました(図3)。Route A では、アミン保護(-P(NEt₂)₂), スルフィド化, さらにアミン保護 (-P(=S)(NEt₂)₂) したリン原子を2位に有する分子について、2'位のアニオン化によるケ



イ素原子の導入を検討しましたが、分子内環化が優先して進行し、ホスホールを与える結果となりました。一方、トリメチルシリル基で保護 (-P(SiMe₃)₂)した分子では期待した結果ではありませんでしたが、ホスホールの生成は確認されず、リン原子上の保護基としてトリメチルシリル基が有効であることがわかりました。ケイ素原子を先に導入する Route Bにおいても、前駆体化合物は得られませんでした。これらの結果から、アリールアニオンを経由する元素導入が困難であることを踏まえ、ロジウム触媒を用いた C-H シリル化³⁾(Route C)を検討しました。アミン保護(-P(NEt₂)₂), アルコキシ保護(-P(OEt)₂), フェノキシ保護(-P(4-tBu-phenoxy)₂)したリン原子を有する分子で反応を行いました。結果として、いずれの場合も反応が進行しないか、複雑な混合物を与える結果となりました。本留学において、9,10-ホスファシラフェナントレンの合成を目指し、一連の検討を行いました。目的物の合成には至らなかったものの、ビフェニル骨格へのリン、ケイ素導入に関するπ複雑性理解についての有用な知見を得ることができました。

ドレスデン滞在

現地での研究生生活は、慣れないことが多く始めは戸惑いましたが、研究室の学生に暖かく受け入れていただき、不自由なく研究を進めることができました。また、Jan J. Weigand 先生が創設に関わったブルワリーでの食事は素晴らしかったです。町中が色めき立つクリスマスマーケット、朝から晩までロケット花火が鳴り止まない年越しなど、刺激的なイベントが多い期間に滞在でき、研究生生活・日常生活共に充実した時間を過ごすことができました。



本留学を支えてくださった全ての方々に感謝いたします。特に、学術変革研究領域 (A) π 複雑性のご支援と、Erasmus+による奨学金制度には、ドイツでの学びに集中できる環境を与えていただき、感謝申し上げます。そして、ドレスデン工科大学での研究留学の機会を与えてくださった筑波大学教授・笹森先生、ドレスデン工科大学教授・Jan J. Weigand 先生、本当にありがとうございました。この貴重な経験を今後の研究活動に活かしていきたいと考えています。

[1] C. N. Smit, F. M. Lock, F. Bickelhaupt, *Tetrahedron Lett.* **1984**, 25, 3011–3014. [2] B. Li, T. Matsuo, D. Hashizume, H. Fueno, K. Tanaka, K. Tamao, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, 131, 13222–13223. [3] D. Wang, Y. Zhao, C. Yuan, J. Wen, Y. Zhao, Z. Shi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 12529–12533.

－ 受賞・イベント紹介

[受賞]

(1)

川口聡貴（北海道大学, M2, A02 石垣グループ）

BCSJ ポスター賞

"特異な C-C 共有結合の形成と性質調査"

第 58 回有機金属若手の会夏の学校, 大津（日本）, 2026 年 7 月 8 日.

(2)

杉山聡一郎（北海道大学, D2, A02 石垣グループ）

Best Poster 賞

"キノジメタンユニットの環状集積化：安定多価カチオンの創出とレドックス応答"

第 38 回札幌シンポジウム, 札幌（日本）, 2026 年 7 月 4 日.

(3)

GUO Zhenfeng（物質・材料研究機構/北海道大学, D3, A03 中西グループ）

IGP 2025 論文賞

"Merging π -molecular functions achieved through homogeneous liquid-liquid blending of solvent-free alkyl- π liquids"

地球規模課題解決型生命科学研究者養成プログラム（IGP）, 2026 年 3 月 3 日.