



**π-MOLECULAR
COMPLEXITY**

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 2
January 2026

- 研究紹介 No. 1

若宮淳志グループ (A03 班長・A03-1)

京都大学 化学研究所 複合基盤化学研究系 分子集合解析研究領域
(京都大学 大学院 理学研究科 化学専攻 協力講座)



教授：若宮淳志，講師：Richard Murdey，助教：中村智也，助教：チョン ミンアン，特任助教：Chen Chien-Yu，博士研究員：1 名，特定研究員：1 名，研究員：3 名，技術補佐員：2 名，D3:1 名，D2：4 名，D1:1 名，M2:4 名，M1：2 名，外国人共同研究者：2 名（R7 年度 12 月時点）

研究のねらい

当研究室では、「構造有機化学」の視点から、独自の分子設計と物質合成を武器に、次世代を担う革新的な機能性材料の開拓に挑んでいます。

分子の設計から本質の解明まで

単に新しい物質を作るだけではありません。特異な分子構造や元素の特性を巧みに操り、モデル化合物群を設計・合成します。

特に、 π 電子系化合物や金属ハライドペロブスカイト半導体に焦点を当て、分子がどのように集まり（凝集構造）、それがどのように電子や光の性質に影響を与えるのか、その本質を分光法などを用いて解明しています。これこそが、真に優れた材料を生み出すための「指導原理」を見出すためのプロセスです。

当研究室の 3 つの大きな強み

1. 「一貫通貫」の研究スタイル
分子の設計・合成から、物性評価、さらには実際のデバイス作製と評価までを、一つの研究

室で完結して行えるのが最大の特徴です。自分の手で作った分子がデバイスとして動く瞬間を体験できます。

2. 社会実装への強力な実績

これまでの研究成果を礎に、スタートアップ企業「(株)エネコートテクノロジーズ」を設立しました。研究室での基礎研究が、次世代太陽電池（ペロブスカイト太陽電池）の実用化という形で直接社会に繋がっています。

3. Needs Inspired Fundamental Science

私たちはこの標語を掲げ、応用の観点から材料や分子に求められる「基礎科学」を深く追求しています。出口（社会のニーズ）を見据えているからこそ、本質的かつ価値のある科学が生まれると信じています。

これまでの研究成果

最近、ペロブスカイト太陽電池は、溶液の塗布で作製できる軽量・フレキシブルな次世代型太陽電池として注目を集めています。この太陽電池は、ペロブスカイト半導体層で光電変換して生成するフリーキャリア（正孔と電子）を選択的に電極に取り出すために、p 型と n 型の半導体層で挟んだ構造となっています。我々は、構造有機化学の強みを活かして、これらの界面材料の開発にも取り組んできました。最近の成果としては、正孔を効率的に回収できる、単分子正孔回収層材料として、Triazatruxene 骨格の三つの窒素上にアルキルリン酸基を ITO 表面へのアンカー基として導入した、多脚型 π 共役分子を設計・開発しました。そのモデル化合物として合成した PATAT 系化合物群は、実際に正孔単分子回収層として機能し、25%を超える光電変換効率と高い耐久性を実現しました[1]-[3]。

また、ペロブスカイト層の上下表面を各電荷（キャリア）の取り出しに有利に働く双極子を持つ分子で構造修飾することで、得られる開放電圧を最大化できることを実証しました（ダイポール戦略）。これにより、Sn を含むペロブスカイト太陽電池（バンドギャップが 1.25 eV）でも最大で 0.91 V の開放電圧（バンドギャップからの電圧ロスが 0.34 V）、23.6% の光電変換効率を実現しました[4]-[5]。さらに、この界面構造修飾技術を展開し、オールペロブスカイトタンデム型太陽電池では、29.7% の世界最高効率を実現しています[6]。

本領域で何を目指すか

π 電子系分子は、応用に用いられる様々な「場」において初めて機能を発揮します。本研究では、特に有機エレクトロニクスの高性能化に求められる「機能場」として、有機無機複合界面に焦点をあて、 π 電子系分子の電子・構造・配向配列制御を指向した π 分子群の設計・開発を展開します。本研究領域内で様々な研究者と協働を進めることで、応用に求められる階層的な構造－物性要素を相乗的に紡ぎあわせた高度 π 分子システムを創製します。これらを用いたデバイス作製・特性評価を系統的に展開することで、ニーズインスパイアドな視点からの「 π 分子複雑性を紡ぐ統合的デザイン」の学理を構築することを目指します。

[1] M. A. Truong, A. Wakamiya, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145, 7528. [2] M. A. Truong, A. Wakamiya, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202412939. [3] M. A. Truong, A. Wakamiya, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 2797. [4] S. Hu, A. Wakamiya, et al. *Energy Environ. Sci.* **2022**, 15, 2096. [5] S. Hu, H. J. Snaith, A. Wakamiya, et al. *Adv. Mater.* **2023**, 35, 2208320. [6] S. Hu, A. Wakamiya, H. J. Snaith, et al. *Nature* **2025**, 639, 93.

- 研究紹介 No. 2

柳井毅グループ (A04 班長・A04-1)

名古屋大学大学院理学研究科理学専攻量子化学研究室・名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所 (ITbM)・名古屋大学学際統合物質研究機構 (IRCCS)



教授：柳井毅，特任准教授：藤本和宏，助教：稲井直人，連携 G30 教授：PHUNG Quan， D2：3 名， D1：2 名， M2：7 名， M1：5 名， B4：6 名， 外国人留学生 1 名 (R7 年度 12 月時点)

研究のねらい

本研究室では，量子化学計算をはじめとする先端的な計算化学手法を基盤に，高度 π 分子体や分子性材料が示す多様な機能のメカニズムを解明し，その本質的理解を与えることを目指しています．計算機性能の向上と，DFT 計算に代表される理論手法の発展を背景に，量子化学計算は分光実験と並んで物質研究に不可欠な手段となっています．本研究室では，理論・計算を専門とする立場から，より高い解像度で有用な情報を引き出す π 電子系シミュレーションを実施し，実験で観測される現象の背後にある分子機構を物理化学的観点から明らかにしています．あわせて，解析精度と適用範囲を拓げるための方法論や計算スキームの高度化・開拓にも取り組んでいます．特に，光励起，電子移動，スピン変換などの量子的な過程では，分子構造の揺らぎや電子状態の変化が複雑に絡み合うため，精緻な理解が重要になります．本研究室では，分光特性，反応速度，発光効率などの物理量を計算から評価し，機能発現を支配する要因を抽出することを目指しています．さらに近年は，計算で得られるデータと機械学習などのデータ科学を融合し，広い探索空間から有望分子を効率よく見いだす枠組みの構築も進め，in silico ベースの物質探索・開発へ展開していきます．

高精度電子状態計算・励起状態ダイナミクス計算・ π 骨格構造ジェネレータ

本研究室では，分子の励起状態を精緻に描写する電子状態理論ならびに励起状態ダイナミクス理論の開発とその応用に取り組んできました．励起状態に適した密度汎関数理論 CAM-B3LYP 汎関数の開発や，量子多体アルゴリズム密度行列繰り込み群法の理論的深化を通じ，

電子構造を定量的にシミュレーションする基盤を整備してきました。近年は光化学へと研究をさらに推し進め、蛍光量子収率の励起状態解析、熱活性化遅延蛍光における逆項間交差の機構解明、ならびに *in silico* スクリーニングに基づく色素探索を達成しています。計算化学とデジタル手法により分子候補を設計・選別し、A02 班・山口の典型元素化学に立脚した合成技術と連携することで、ホウ素置換 NIR 発光色素の創製に到達しました。さらに、P=O ドープ π 分子に対しては、高精度励起状態計算を礎に遷移過程のダイナミクスへ踏み込み、無輻射過程抑制の分子機構を定量的に解明しました。これらは、骨格複雑性に基づく探索基盤と、状態複雑性を扱う理論解析の原型を与える成果です。

本領域で何をを目指すか

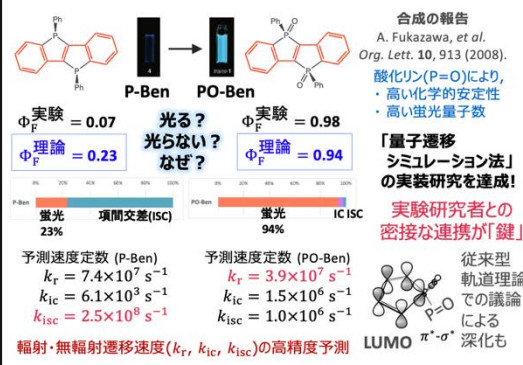
π 分子は、吸収・発光などの光機能に加え、電導性、磁性、酸化還元特性など多様な電子機能を示す分子基盤です。しかし、芳香環の連結様式や元素置換、骨格歪み、多量体化・高分子化により電子構造は大きく変化し、機能は階層的に多様化します。私たちはこの「 π 分子の複雑性」を積極的に活用し、どの構造要素・電子状態がどの機能を生み出すのかを理論的に見通すことを目指します。そのために、基底状態に加えて励起状態、ラジカル、三重項、酸化還元状態など複数の電子状態を量子化学計算で統一的に扱い、反応性・物性の起源を定量的に解析します。とくに光機能分子を重要な柱として、励起状態構造、状態間遷移、無輻射失活、エネルギー／電子移動ダイナミクスまで踏み込んだ機構解明を行い、設計指針の提示を目指します。さらに、集合体・界面・周辺分子との相互作用といった実材料中の「機能場」も視野に入れ、実験研究と連携しながら高機能分子・システムの創出に貢献したいと思います。

[1] M. Hagai, K. J. Fujimoto, T. Yanai, *J. Chem. Theory Comput.* **2025**, 21(22), 11604–11619. [2] M. Hayashi, M. Saitow, K. Uemura, T. Yanai, *J. Chem. Phys.*, **2025**, 163, 234114. [3] A. Usami, H. Kono, V. Austen, Q. Phung, H. Shudo, T. Kato, H. Yamada, A. Yagi, K. Amaike, K. J. Fujimoto, T. Yanai, K. Itami, *Science*, **2025**, 388, 1055–1061. [4] M. Hagai, N. Inai, T. Yasuda, K. J. Fujimoto, T. Yanai, *Sci. Adv.*, **2024**, 10, eadk3219. [5] K. J. Fujimoto, T. Seki, T. Minoda, T. Yanai, *J. Am. Chem. Soc.*, **2024**, 146(6), 3984–3991. [6] I. Hattori, M. Hagai, M. Ito, M. Sakai, H. Narita, K. J. Fujimoto, T. Yanai, S. Yamaguchi, *Angew. Chem.Int. Ed.*, **2024**, 63, e202403829. [7] N. Inai, S. Yamaguchi, T. Yanai, *ACS Phys. Chem. Au*, **2023**, 3(6), 540–552. [8] T. Iino, T. Shiozaki, and T. Yanai, *J. Chem. Phys.*, **2023**, 158, 054107.

① 無輻射失活(光らない)過程の制御の分子科学研究

“計算化学”と“合成実験化学”の「協働」による
量子遷移速度定数シミュレーション解析システム開発

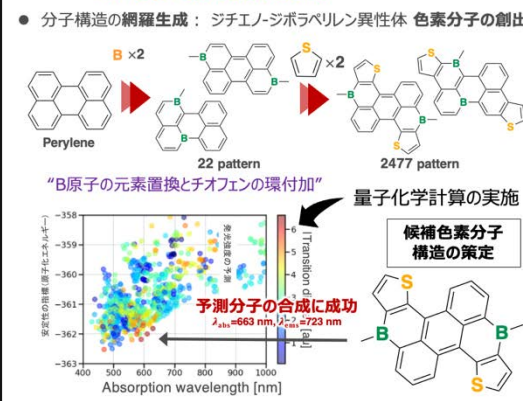
柳井(A04-1)× 山口(A02-4) ACS Phys Chem Au 2024



② In SilicoスクリーニングによるNIR発光分子の開発

“計算化学”と“合成実験化学”の「協働」による分子開発

柳井(A04-1)× 山口(A02-4) ACIE 2024



－ 研究トピックス

シクロファン型 π 分子の還元反応を“加圧”により制御

A02-2 石垣侑祐

北海道大学大学院理学研究院

静水圧は身近な刺激の一つであり、例えば水中に潜るとその深さに応じて一定の圧力を受けます。水中、特に深海に生息する生物は陸上に住む私たちとは比較にならないほど高い圧力に晒されており、そのような環境下で生じる現象に興味をもたれます。生体内においても圧力変化で様々な現象が生じている一方、分子レベルでは解明されていないことも依然としてあります。そのような圧力応答性材料を新しく構築し、分子レベルでそのメカニズムを解明できれば、設計通りの機能創出に繋がられるだけでなく多彩な展開が可能と期待されます。

今回、そのような圧力応答性材料として、カチオンユニットを環状に連結したシクロファン型ジカチオンに着目しました。通常、正電荷同士は互いに反発するため積層させることは困難ですが、シクロファン型分子内にカチオンユニットを組み込むことで積層構造の形成が可能になります。この積層構造が鍵となり、段階的な還元反応が進行すること¹⁾に加え、含水溶媒中で加圧することで、一電子還元が進行することを発見しました。溶液中に存在するわずかな水分子がジカチオン近傍にたかことが重要であり、より親水性の高い対イオンが存在する場合は還元反応が進行しないことも明らかにしました²⁾。このような圧力応答型レドックス反応は極めて珍しく、未解明のまま残されている圧力応答メカニズムの実証や新たな環境応答性材料の開発に繋がることが期待されます。

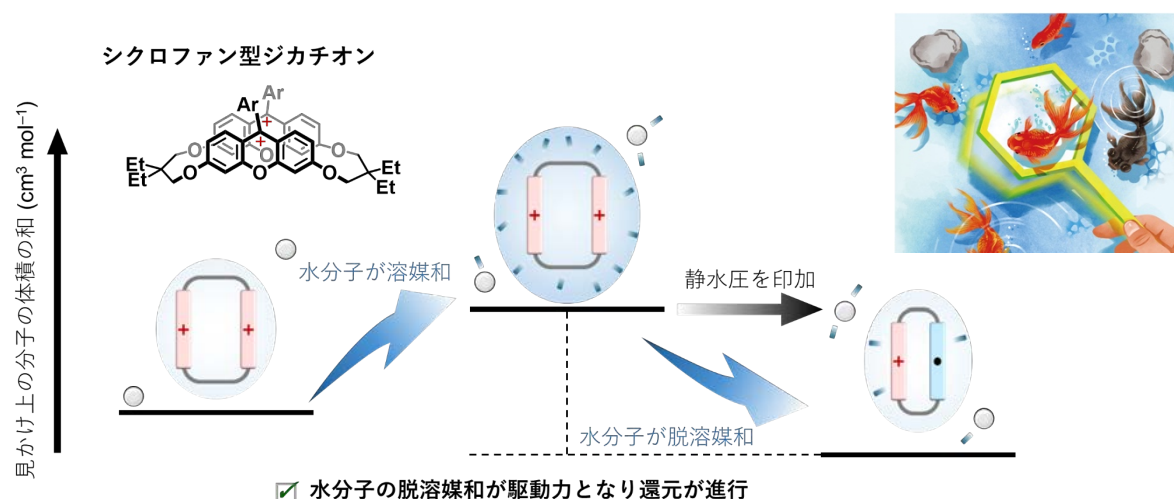


図 1. シクロファン型ジカチオンにおける圧力応答型レドックス反応に関するイメージ図

[1] M. Kikuchi, T. Tadokoro, T. Tachibana, S. Suzuki, T. Suzuki, Y. Ishigaki, *Chem. Eur. J.*, **2024**, *30*, e202401683. [2] M. Kikuchi, T. Kuwabara, G. Fukuhara, T. Suzuki, Y. Ishigaki, *Mater. Chem. Front.*, **2025**, *9*, 2863–2870.

– 受賞・イベント紹介

[受賞]

(1)

Soki Kawaguchi (Hokkaido University, M1, A02 Ishigaki Group)

Student Research Competition "Winner (Organic)"

"First Isolated Example of the Molecule Possessing a Carbon•Carbon Two-Center One-Electron σ -Bond"

Pacificchem 2025, Hawaii, USA, December 15, 2025.

(2)

佐野嘉治 (名古屋大学, M2, A02 山口グループ)

Chemistry Letters Young Researcher Award (優秀ポスター賞)

"Synthesis and Properties of Boron-Containing Chichibabin's Hydrocarbons"

第 52 回有機典型元素化学討論会, 筑波 (日本), 2025 年 12 月 6 日.

(3)

宮下凌羽 (電気通信大学, M1, A02 平田グループ)

HPC 賞

"ダブルセレンと発色団のサンドイッチ型スルースペース相互作用を活用した有機りん光の増強"

第 52 回有機典型元素化学討論会, 筑波 (日本), 2025 年 12 月 6 日.

(4)

Ryusei Hamano (University of Tsukuba, M2, A01 Sasamori Group)

YIA Poster Award

"Insertion Reaction of a Silylene into a Selenium-Carbon Bond"

The Joint Meeting of the 8th Japanese Selenium Research Society and the 13th International Symposium on Selenium in Biology and Medicine (Se2025), Tohoku University, Miyagi, Japan, November 2, 2025.

[イベント紹介]

2025 年 10 月 4 日に筑波大学を会場としハイブリッド形式で、『学術変革領域（A）「 π 分子複雑性」第 2 回融合マッチングワークショップ』を開催しました。

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，階層的な π 分子複雑性の追究を通して，秀逸な π 分子システムを創出し，多彩な機能科学の展開を目指しています．その取り組みとして，テーマに沿ったワークショップを開催しています．

第 2 回となる今回のワークショップは，笹森（A01），中西（A03），吉尾（A03）が実行委員として企画しました。本領域からは，清水（A02），岩本（A01），長谷川（A04）が講演し，融合研究に向けたディスカッションを行い交流を深めました。

開催日時： 2025 年 10 月 4 日（土） 13:00–20:00

話題テーマ： 実験化学と理論化学のインタープレイによる機能追究

開催方法： 対面+online（ハイブリッド形式）

開催場所： 筑波大学総合研究 B 棟 110・112

