



**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 3
March 2026**

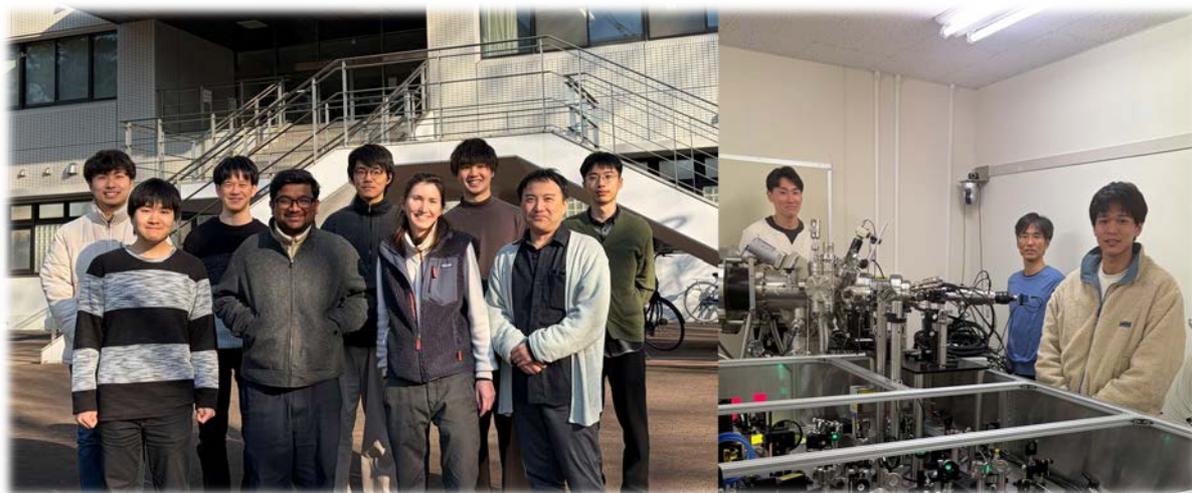
- 研究紹介 No. 1

平田修造グループ (A02-3 代表)

電気通信大学大学院情報理工学研究科基盤理工学専攻有機光機能材料研究室

福本恵紀グループ (A02-3 分担)

高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所



平田グループ, 准教授: 平田修造, 助教: 林希久也 (連携研究者), 博士研究員: 1 名, D3: 1 名, M2: 3 名, M1: 1 名, B4: 3 名, 福本グループ, 特任准教授: 福本恵紀, M2: 1 名 (筑波大学連携) (R7 年度 2 月時点)

研究のねらい

当研究室では 3 重項状態を経由した光・電子物性が最大化される有機 π 分子や材料の創生に挑戦しています. 光定量計測と量子化学計算を高速協働させることで, 物性値が最大化されることが期待される分子構造を推定しながら有機 π 分子を生み出しています. さらに 3 重項状態が欠陥の影響を受けないような適切なホスト分子環境場に合成した有機 π 分子を組み込むことで, 秀逸な物性を示す有機光機能材料へとつなげています.

光励起状態定量計測と振動を加味した量子化学計算の高速協働

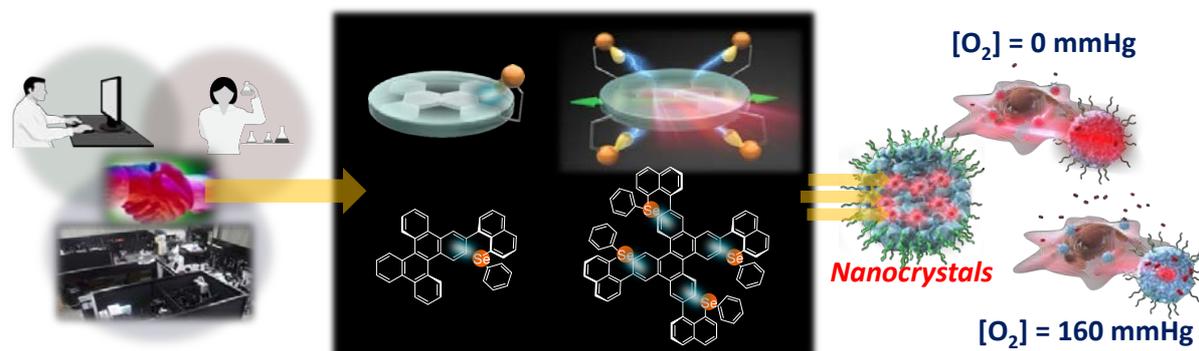
最近では特に, 有機りん光や有機 3 重項光増感分子において秀逸な物性を示す有機 π 分子や材料の創生に挑戦しています^[1]. 私達は光定量計測を駆使してさまざまな有機 π 分子の 3 重項状態からの輻射速度と非輻射速度を定量化してきました. 通常の固定配座の量子化学計算では, 計測により決定した 3 重項状態からの輻射速度と非輻射速度を推定することが困難でしたが, 振動による配座変位を加味した量子化学計算を行うと, 多くの分子の 3 重項状態からの輻射速度と非輻射速度の推定精度が飛躍的に向上することを見出しました^{[2][4]}. その結果, 高次 1 重項状態や高次 3 重項状態の電子構造を制御することが, 有機りん光を増強させるために重要であることを報告してきました.

有機りん光に特有の分子設計

上記の光計測値と量子化学計算値の相関性から、 π 縮環構造への面外方向からの一部の典型元素によるスルースペース相互作用が、選択的にりん光輻射速度を増強させることを報告してきました^[5]。さらに最近では、面外からのスルースペース相互作用を増加させると、 π 縮環構造の面内の大きな遷移双極子がより有効的に活用されることで、有機りん光が更に増強していく効果を見出しています。このような特徴は、蛍光や遅延蛍光を増強させる π 分子の設計とは異なるため、有機りん光に特有の分子設計指針になる可能性があります。

酸素濃度が関係する生体イメージングへの応用

有機りん光の長寿命発光は、励起光停止直後に2次元光検出器で計測することができるため、自家蛍光に依存しない発光イメージングが可能となります。私達は有機りん光を用いた1ナノ粒子からのアフターグロー発光の検出を報告しています^[6]。より小さいナノ粒子からのアフターグロー発光の計測を視野に、励起光が強い時に生じる有機りん光の輝度飽和を抑制する科学に関しても、フェムト秒光電子分光を用いて研究しています^[7]。最近では、有機りん光を示すバルク結晶をナノ粒子化すると、りん光寿命が酸素濃度とともに大きく変化することを見出しており、高速酸素濃度マッピングへの応用の検討を開始しています^[8]。



本領域で何を目指すか

本領域では、高次励起状態において選択的に典型元素間のスループンドやスルースペース相互作用が形成される有機 π 分子を開発し、その分子のコンフォメーションを含む状態複雑性を適切なホスト下で制御することで、長波長域の有機りん光収率を未到達領域まで向上させることを実現します。また、この有機りん光分子を含むナノ結晶粒子を構築し、生体場で高速且つ高精度な酸素濃度マッピングを可能とするナノプローブの開拓を目指します。

[1] I. Bhattacharjee, S. Hirata, *Adv. Mater.* **2020**, *32*, 2001348. [2] I. Bhattacharjee, K. Hayashi, S. Hirata, *JACS Au* **2021**, *1*, 945. [3] B. Sk, R. Tsuru, K. Hayashi, S. Hirata, *Adv. Funct. Mater.* **2023**, *11*, 2211604. [4] B. Sk, S. Hirata, *Adv. Sci.* **2024**, *11*, 2308897. [5] R. K. Mulimani, S. Ueda, R. Miyashita, R. Tsuru, K. Hayashi, R. Shimura, B. Sk, S. Matsuda, S. Hirata, *Adv. Mater.* **2025**, *37*, 2502611. [6] E. H. Badriyah, K. Hayashi, B. Sk, R. Takano, T. Ishida, S. Hirata, *Adv. Sci.* **2023**, *10*, 2304374. [7] K. Hayashi, K. Fukumoto, S. Hirata, *ACS Materials Lett.* **2023**, *5*, 1649. [8] R. Shimura, K. Hayashi, S. Ueda, R. Tsuru, S. Hirata, *ACS Materials Lett.* **2025**, *7*, 2049.

- 研究紹介 No. 2

八木亜樹子グループ (A01-2 代表)

名古屋大学大学院理学研究科理学専攻 有機化学研究室



教授：八木亜樹子，准教授：伊藤英人，林裕樹，助教：4月着任予定，博士研究員：1名，D3：2名，D2：2名，D1：2名，M2：7名，M1：3名，B4：3名，補佐員：3名（R7年度3月時点）

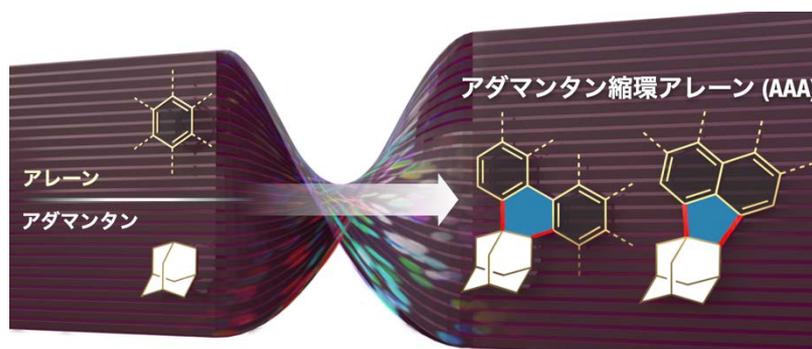
研究のねらい

当研究室では『独自の分子をデザインし，従来の分子の価値を超えるモノを創る』を研究理念に，合成方法論開発，分子・物質合成，機能開拓の三本柱で研究を遂行しています．新たな合成方法論の開拓により合成できる物質の幅が大きく広がり，材料科学や生命科学の進展に繋がると期待されます．精密なモノづくりを得意とする有機合成化学を基盤に，革新的な合成方法論を打ち出すべく日々研究を行っています．現代社会，未来にとってどんな分子・物質が必要かを見極め，その構造を設計し実際に合成する研究にも力を入れています．得られた独自分子のもつ機能を広く開拓し，異分野研究や産業の発展にも関わるよう研究をデザインしています．合成化学を基軸に今後様々な研究を展開していく所存です．

sp³炭素骨格の縮環による新奇機能性分子群の創製

現在の当研究室の研究の大きなプロジェクトの一つは sp³炭素骨格の縮環を用いた新奇分子群の創製です．機能性分子として広く研究が行われている π 共役分子の主骨格は，主に sp²混成炭素原子とヘテロ原子で構成されています．一方で，新たな機能性物質の創製や破格の機能性の創出のためには，sp²混成炭素を主とする骨格に限らない π 分子の開発が必要です．当研究室では sp³混成炭素を高度に π 分子主骨格に組み込む，『縮環』による分子設計により新たな π 分子の創製に取り組んできました．その一つはメチレン架橋環状 π 分子の合成であり，シクロパラフェニレン(CPP)を sp³混成炭素原子による5員環縮環により修飾した構造をもつ分子(MCPP)の合成と性質解明・機能開拓を行ってきました^{[1]-[3]}．ナノベルトと呼ばれる分子群の中でも，合成簡便性や直径サイズの多様性，応用性に優れていることか

ら機能性材料としての展開が特に期待される分子であると言えます。もう一つの研究として、ダイヤモンドの部分構造であり剛直な sp^3 ケージ構造をもつアダマンタン骨格を π 分子に縮環させた分子(AAA)の開発も行ってきました^[4]。独自で見出したアダマンタン縮環法を基盤に、50種類を超える AAA を合成することができます。有機溶媒への高い溶解性やカルボカチオン種の安定性などの特性がわかっており、現在それらを活かした機能開拓を進めています。AAA の水素化で得られる sp^3 リッチ(π)分子は、他の手法では構築困難な複雑骨格をもつことから新たな研究領域を拓く可能性を秘めています。



難溶性炭素骨格の構築と応用

ナノグラフェンやカーボンナノチューブなどの炭素物質は魅力ある機能性材料です。当研究室では分子合成技術を基盤に、それら炭素物質を精密に合成する化学を探究してきました。その上で大きな課題となるのが、標的や中間体となる分子の溶媒への難溶性です。効率的な合成が妨げられることはもちろん、性質評価も困難となります。難溶性物質合成の根本的解決を行うべく当研究室では、デンドリマーという巨大樹状高分子を用いた合成方法論を開発しました^[5]。嵩高いデンドリマーの中心部に連結させる様式で分子合成を行うことで、無置換ポリチオフェンなどの分子間相互作用のしやすい骨格であっても、凝集させることなく合成・性質評価を実施することを実現しました。さらに、デンドリマーと難溶性骨格を特定の反応により切り離すことのできるリンカー（エステル基）で繋ぐことにより、タンパク質やシリカゲルといった異種物質に難溶性分子骨格を移植することができることもわかりました。開発した技術および分子を駆使して、異分野との融合研究を実施しています。

本領域で何を目指すか

本領域では、 π 分子の科学、さらにはそれを基盤とした機能性物質の創出が非線形の発展曲線を描くために必須な合成化学を展開します。具体的には、 sp^3 骨格と sp^2 骨格が高度にハイブリッド化された新奇炭素骨格をもつ π 分子体の創出を行うことで π 分子の骨格複雑性の追究を行います。合成した π 分子体に対し状態複雑性の視点を組み合わせた物性評価、機能発現に関する検討により、さらに特異な物性を有する高度 π 分子体へと進化させることを目指します。

[1] H. Kono, Y. Li, R. Zanasi, G. Monaco, F. F. Summa, L. T. Scott, A. Yagi, K. Itami, *JACS*. **2023**, *145*, 8939–8946. [2] K. Günther, H. Kono, H. Shudo, R. Isoda, M. Nakamura, A. Yagi, K. Amaike, K. Itami, *ACIE* **2024**, e202414645. [3] N. Kai, H. Kono, T. Stünkel, D. Imoto, R. Zanasi, G. Monaco, F. F. Summa, L. T. Scott, A. Yagi, K. Itami, *Chem. Sci.* **2025**, *16*, 9195–9204. [4] T. Yoshihara, H. Shudo, A. Yagi, K. Itami, *JACS* **2023**, *145*, 11754–11763. [5] S. Fujiki, K. Amaike, A. Yagi, K. Itami, *Nature Commun.* **2022**, *13*, 5358.

－ 研究トピックス

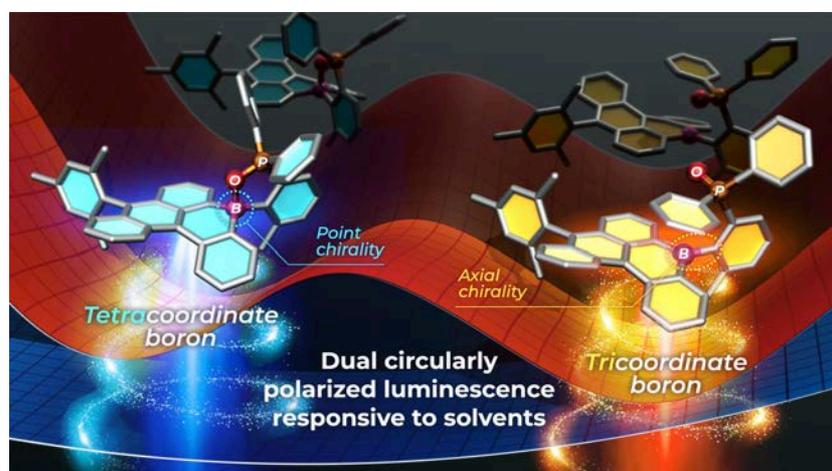
二重の円偏光発光を示すキラルホウ素分子を開発

A02-4 山口 茂弘

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所

円偏光発光 (circularly polarized luminescence, CPL) は、3D ディスプレイ、量子暗号通信、センシング技術、生体イメージングなど多くの先端分野で重要性が高まっています。特に、単一の有機分子から二つの異なる波長の CPL を得る「二重 CPL (dual CPL)」は、従来の材料では実現が難しく、新しい分子設計指針の確立が求められていました。さらに、深赤色領域に及ぶ長波長 CPL を有機分子で高効率に実現することは、構造的・電子的制約から困難であり、強い発光とキラリティの安定性を同時に満たす分子の開発が課題でした。一方、三配位ホウ素を含む π 共役分子はホウ素の高い電子受容性に基づく優れた発光特性を示すことから、次世代の光機能分子として注目されています。しかし、ホウ素を中心とするキラル発光材料の開発例は限られており、光励起に応答してキラリティそのものを制御する分子設計はほとんど未開拓でした。

本研究では、ホウ素の電子的特性と分子内配位結合の可逆的な結合／解離挙動を統合的に活用することで、励起状態でキラリティが切り替わる新しいキラルホウ素分子の創出を目指しました。具体的には、ホウ素を含む非対称な PAH 骨格に、分子内でホウ素へ可逆的に配位可能なホスフィンオキド部位を導入することで、中心不斉を有するキラルホウ素 π 共役分子を合成しました。特筆すべきは、励起状態においてこの配位結合が解離し、炭素－ホウ素結合に沿った軸不斉をもつ三配位ホウ素 π 骨格が生成する点です。すなわち、中心不斉と軸不斉という二種類のキラリティが光励起により切り替わることで、二重 CPL が実現されました。三配位ホウ素 π 共役分子の優れた発光特性を反映し、得られた化合物は高い発光量子収率を伴う CPL や、深赤色領域に及ぶ長波長 CPL を示しました。さらに、本系の二重 CPL 挙動は、溶媒との水素結合に応答して大きく変化することも明らかとなりました。



- － [1] T. Mori, Y. Sano, T. Ikai, Y. Kawasaki, K. Tomooka, T. Sasamori, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2026**, 65, e22746 (Highlighted in outside front cover).

- 受賞・イベント紹介

[受賞] ※未掲載分の報告

(1)

山口智大 (名古屋大学, M2, A03 松田グループ)

BCSJ 賞

"エラグ酸を架橋配位子とした導電性配位高分子の構造変化特性と電子物性"

第 56 回中部化学関係学協会支部連合秋季大会, 岐阜 (日本), 2025 年 12 月 17 日.

(2)

梅村凌我 (名古屋大学, M2, A03 松田グループ)

優秀ポスター賞

"ビスエチニルアントラセン部位を有するナノポーラス金属錯体による酸素の化学吸着"

第 38 回日本吸着学会研究発表会, 大分 (日本), 2025 年 11 月 12 日.

(3)

Qu Liyuan (Nagoya University, Designated Assistant Professor, A03 Matsuda Group)

Best Poster Award

"Tuning Electrical Conductivity in One-Dimensional Porous Molecular Conductors"

EuroMOF2025-Young Scientist Symposium, Heraklion, Crete-Greece, September 21, 2025.

(4)

福地咲樹 (名古屋大学, M2, A03 松田グループ)

学生講演賞

"Fabrication and Characterization of Thin Films Created by Crystal Secondary Growth of Kagomé-type Cu(II)-MOF"

錯体化学会第 75 回討論会, 長崎 (日本), 2025 年 9 月 16 日.

[イベント紹介]

2026年1月14日に名古屋大学 野依記念物質科学研究館を会場とし、学際統合物質科学研究機構 (IRCCS) との共催で『学術変革領域 (A) 「 π 分子複雑性」 第3回融合マッチングワークショップ (第6回 IRCCS フォーラム産学共創ワークショップ) 』を開催しました。第3回となる今回のワークショップでは本領域から、平田 (A02) , 柳井 (A04) が講演を行いました。

開催日時: 2026年1月14日 (水) 14:00-16:55
話題テーマ: 分子複雑性が導く反応性・光物性創発の化学：理論と実験の展開
開催方法: 対面+online (ハイブリッド形式)
開催場所: 名古屋大学 野依記念物質科学研究館 2階講演室

