



**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 1
November 2025**

– 代表挨拶

学術変革領域 A「 π 分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学」（略称： π 分子複雑性）は、2025 年 4 月に発足して以来、早くも半年が経過いたしました。この間、8 月 4 日に名古屋にて開催した第一回領域会議・キックオフシンポジウムをはじめとして、オンライン公募説明会、さらには名古屋および筑波での融合マッチングワークショップを 2 回実施するなど、順調なスタートダッシュを切ることができました。

特筆すべきは、名古屋での領域会議に続いて行われたリトリート合宿です。A01 班から A04 班にわたる全 13 計画班のメンバーが一堂に会し、親睦を深めつつ、one-on-one 形式による総当たりディスカッションを通じて、申請時の研究計画を超えて「この集団だからこそ成し得る新たな科学とは何か」を真摯に議論しました。改めて、各班を牽引する研究者一人ひとりが、それぞれの分野で最先端を切り拓く卓越した専門家であることを実感するとともに、領域としての一体感と創造的熱量が一層高まったことを嬉しく感じています。

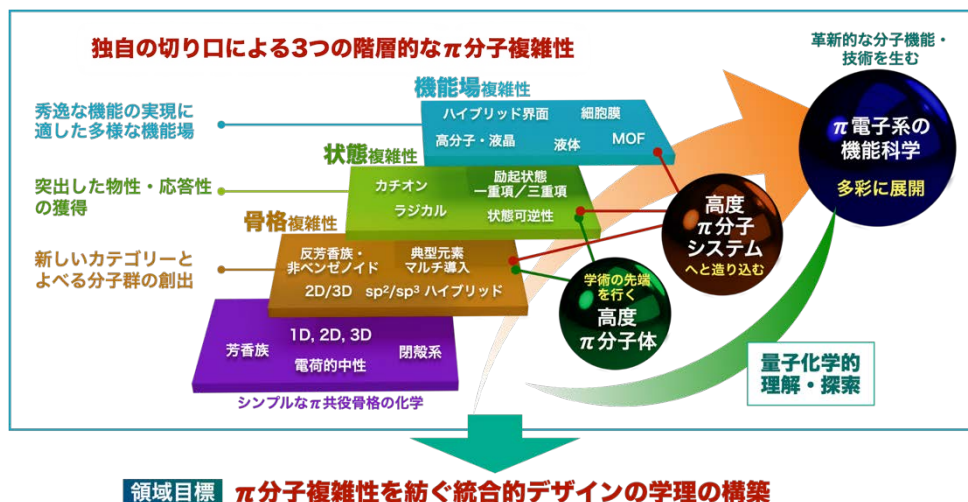
来年度からは、公募班の新たなメンバーが加わることで、さらに多様で盤石な研究体制が整い、より一層の展開が期待されます。本ニュースレターでは、世界に誇る本領域の π 電子系研究集団による挑戦と成果を、タイムリーにお届けしてまいります。今後の発展に、ぜひご注目ください。

令和 7 年 10 月吉日

領域代表 山口茂弘

– 領域概要

光・電子機能を担う洗練された π 電子系分子の創出は、分子機能科学の核心課題です。本領域では、機能発現の鍵を握る要素を「 π 分子複雑性 (π -molecular complexity)」と捉え、骨格複雑性、状態複雑性、機能場複雑性という階層的な要素の相乗的追究により、秀逸な分子システムとして構築することで、多彩な機能科学へと展開することを目指しています。



- 研究紹介 No. 1

山口茂弘グループ（領域代表・A02-4）

名古屋大学大学院理学研究科理学専攻機能有機化学研究室・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：山口茂弘，准教授：村井征史，特任准教授：谷洋介，講師：大城宗一郎，特任助教：森達哉，坂井美佳，博士研究員：1名，D3：2名，D2：5名，D1：1名，M2：6名（3名岐阜大委託中），M1：6名，B4：6名，外国人留学生3名（R7年度10月時点）

研究のねらい

光・電子機能の根源を担う π 電子系分子の潜在力は計り知れず，ゆえに洗練された機能性 π 電子系を追い求める化学は，分子を基盤とする機能科学の中核的テーマの一つといえます．近年，ベンゼン環や芳香族骨格，電荷的に中性な骨格といったオーソドックスな π 骨格にとどまらず，従来にない構造的特性や電子的個性をもつ新奇な π 分子骨格を創り出す化学の重要性が高まっています．その一方で，こうした unusual な分子骨格の創出を，いかに社会的課題の解決へとつなげていくかという点は，この領域が直面する大きな挑戦でもあります．我々は，本領域が掲げる「 π 分子複雑性の相乗的追究」の考えのもと，統合的なアプローチにより，多彩な機能性分子の創製研究を進めています．

新しい π 骨格の創製

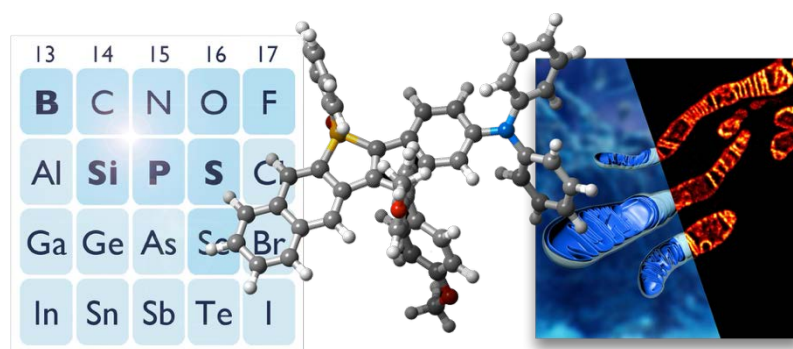
特徴的な π 骨格を生み出すために，ベンゼンではない，非ベンゼノイド，反芳香族骨格，カチオンをキーワードに新骨格のデザインと合成を進めています．最近では，反芳香族骨格を用いた近赤外発光分子¹⁾や，J会合体を形成するジアズレニルメチルカチオン²⁾などの合成を達成してきました．

典型元素 π 電子系の化学

我々の骨格複雑性追究のもう一つのアプローチが、典型元素の π 骨格への導入です。B, Si, P, S, Se といった典型元素の導入により、「この元素だからこそできる」といえる優れた機能性分子の創出に挑んでいます。最近では、立体保護の役割を超えた機能性アリール基を導入したホウ素 π 電子系の機能創出に力を入れています³⁾。ホウ素の Lewis 酸性に由来した励起状態での光解離挙動を活用することで、励起状態で2つの発光状態を生み出すことができ、二重蛍光性をもたせられます。この状態複雑性を制御することにより、温度や媒体の極性、粘度に応答した物性変化の付与に取り組んでいます⁴⁾。

π 電子系の生物学的応用

π 電子系の蛍光に焦点を当てた場合、最適な機能場の一つとなるのが蛍光イメージングです。この機能場複雑性の追究に求められる物性として、超耐光性、近赤外蛍光の2つに焦点を当て、これらの特性に秀でた有機蛍光色素の開発を進めてきました。それを実際に使える形にまで造り込むことで、超解像イメージングや、蛍光寿命イメージングに基づくオルガネラの機能解析などを可能にする分子技術の確立を進めています。最近では、近赤外蛍光色素を用いた超解像 5D イメージング⁵⁾や、ミトコンドリア⁶⁾や脂肪滴⁷⁾の組成解析を可能にする蛍光プローブの開発に成功しています。



本領域で何をを目指すか

本領域において我々は、励起状態での二状態間の精密な制御に取り組み、高度な環境応答性を備えた発光性分子システムの創出と、その蛍光イメージング応用を展開します。典型元素の導入などにより優れた発光特性を示す分子骨格を基盤に、構造的柔軟性を巧みに取り入れた分子設計を行うことで、わずかな媒体環境の変化にも鋭敏に応答する動的分子機能を実現します。究極的には、これまで観測が困難であった生物学的現象の微細な変化を可視化・解析可能とする革新的蛍光プローブへと昇華させることを目指します。

[1] M. Murai, T. Enoki, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62, e202311445. [2] M. Murai, M. Abe, S. Ogi, S. Yamaguchi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2022**, 144, 20385. [3] H. Narita, H. Min, N. Kubo, I. Hattori, T. Yasuda, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202405412. [4] M. Kawashiro, T. Mori, M. Ito, N. Ando, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2023**, 62, e202303725. [5] Q. Wu, M. Taki, Y. Tanaka, M. Keshewani, Q. M. Phung, S. Enoki, Y. Okada, F. Tama, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202400711. [6] J. Wang, M. Taki, Y. Ohba, M. Arita, S. Yamaguchi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 63, e202404328. [7] J. Wang, K. Kajiwara, M. Keshewani, F. Tama, Y. Ohsaki, S. Yamaguchi, M. Taki, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, in press.

- 研究紹介 No.2

笹森貴裕グループ (A01 班長・A01-4)

筑波大学 数理物質系化学域・エネルギー物質科学研究センター (TREMS) 有機元素化学研究室



教授：笹森貴裕，准教授：菅又功，助教：正田浩一朗，D2:2名、D1:4名、M2:5名、M1:7名、B4:6名

研究のねらい

研究室は、2020年10月に発足した筑波大学「有機元素化学研究室」です。当研究室では、全元素有機化学を推進しており、様々な元素特性に基づいて、分子構造・電子状態と分子物性・反応性との相関を明確化し、有機典型元素化学の基本概念を確立することを目標にしています。高周期典型元素の特異な結合様式・電子状態を有する斬新な化合物を創製し、それらの性質を詳細に調べた上で、新たな光・電子物性の開拓、典型元素触媒機能の開拓を目指して研究を推進していますが、中でも特に、高周期典型元素から成る斬新な π 電子系に着目した機能開拓に挑戦しています。

高周期元素を環状 π 共役骨格に組み込んだ、高周期元素芳香族化合物の構築

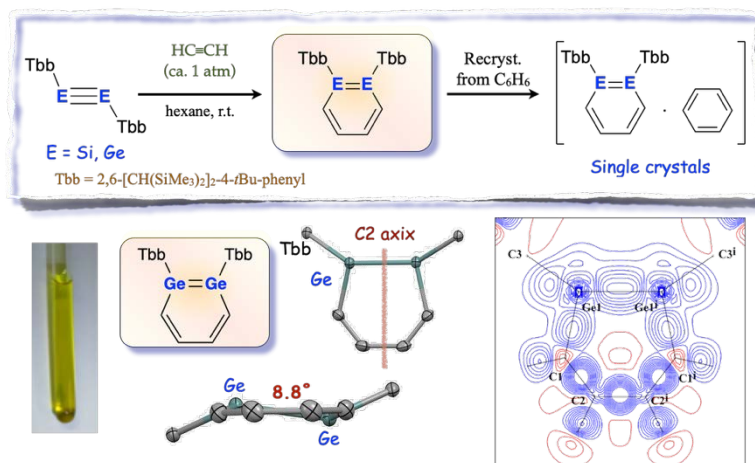
有機化学において化学結合の理解は極めて重要であり、特に π 結合は σ 結合と比較して、 π 電子の高い自由度から分子物性や光化学などの様々な研究分野で重要な役割を担っていま

す。有機 π 電子系の構成元素としてはC, N, Oなど第2周期元素に限られており, Si, P, Sなど第3周期以降の典型元素(高周期典型元素)の π 電子系は「未知の可能性の宝庫」と期待されつつも, 非常に反応性が高く通常の条件では合成が困難でした。そのため, 高周期元素間 π 結合は, その存在の実証と基礎研究が主でした。1981年の立体保護を用いた初めての安定な高周期元素間 π 結合化合物の合成例以降「適切な立体保護基・適切な合成法を見出せば高周期元素間 π 結合化合物が合成できる」という認識が定着した今, 我々のグループでは, 高周期元素間 π 電子系の新たな機能探索を目指し研究を行っています。

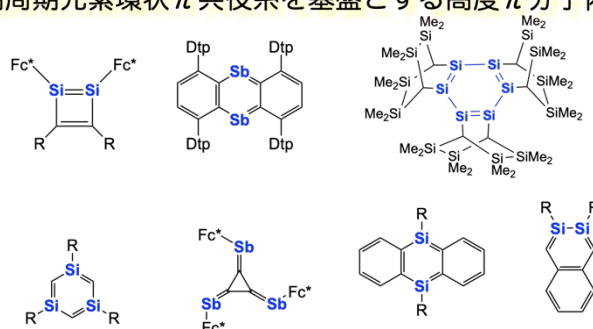
特に, Power (米) や関口 (日) らのグループが報告したアセチレンの高周期元素類縁体, すなわち, 高周期 14 族元素間三重結合化合物 ($\text{RSi}\equiv\text{SiR}$, $\text{RGe}\equiv\text{GeR}$, $\text{RSn}\equiv\text{SnR}$, $\text{RPb}\equiv\text{PbR}$)¹⁾ に着目して研究を進め, 2018年に我々の合成したゲルマニウム間三重結合化合物が, アルキンの環化三量化反応の触媒として機能することを見出しました²⁾。この反応の鍵中間体となるのが, ベンゼンの構成炭素原子の2つを炭素からゲルマニウムに置き換えた「1,2-ジゲルマベンゼン」です。1,2-ジシラベンゼン, 1,2-ジゲルマベンゼンを合成・単離し³⁾ (*Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6507.), その電子状態を詳細に解明した結果⁴⁾, これらの Si_2C_4 および Ge_2C_4 の6 π 電子環状共役系は非平面構造をもち, ケイ素やゲルマニウム π 結合周辺の π 電子密度が極端に低下した弱い芳香族性を示すことが, この特異な反応性の要因であることを突き止めました。

本領域で何を目指すか

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, 高周期元素を含む斬新な環状 π 共役系の骨格複雑性を追究し, 高周期元素の芳香族性・反芳香族性の概念を再構築しながら, これらの特性を活かした機能科学を展開したいと思っています。



高周期元素環状 π 共役系を基盤とする高度 π 分子体の創製



[1] For recent reviews on the synthesis of stable dimetallynes, see: (a) J.-D. Guo, T. Sasamori, *Chem. Asian J.*, **2018**, *13*, 3800. (b) F. Hanusch, L. Groll, S. Inoue, *Chem. Sci.*, **2021**, *12*, 2001. [2] T. Sugahara, J.-D. Guo, T. Sasamori, S. Nagase, N. Tokitoh, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 3499. [3] T. Sasamori, *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 6507. [4] T. Sugahara, D. Hashizume, N. Tokitoh, H. Matsui, R. Kishi, M. Nakano, T. Sasamori, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2022**, *24*, 22557.

－ 研究トピックス (1)

アルキル π 液体の均質混合によるバルク π 機能の精密制御

A03-3 中西尚志

国立研究開発法人物質・材料研究機構ナノアーキテククス材料研究センター

高度 π 分子体の機能制御場として、我々は常温、無溶媒液体の活用を掲げた研究に取り組んでいる。 π 共役分子骨格に嵩高く、柔軟な分岐アルキル鎖を導入した π 共役分子は、分岐アルキル鎖の高いエントロピーにより常温液体となる。また、隣り合う π 共役分子コア同士は導入した分岐アルキル側鎖により隔てられる状況となり、バルク液体でありながら、 π 共役分子コア由来の光電子機能を発揮できる特徴がある。このアルキル π 液体を用いて、溶媒なしの状態では通常困難とされる異なる π 共役分子同士の均質混合と、光機能の精密制御に成功した¹⁾ので紹介する。

今回新規合成したアルキル π 液体は、benzothiadiazoledithiophene (**TBT**), benzothiadiazole (**B**), thiophene (**T**)を有し、それぞれ紫外光下で赤色、緑色、青色に発光する。電子ドナー性の **T** に電子アクセプター性の **B** または **TBT** を混合、さらには **B** (電子ドナーとしての役割) に **TBT** を混合し、混合液体の均質性の評価および発光色の制御性に関して検討した。3 種のアルキル π 液体のガラス転移温度が -55°C 付近で大差なく、通常ポリマー混合の評価に有用な DSC を使った評価が行えない。そのためレオロジーのマスターカーブを描き、温度時間換算則に沿う混合液体を均質な状態と判断した。また、ドナーとアクセプター間の FRET を効率よく起こさせることで、意図する発光色を均質に調整できる方法を確認した。

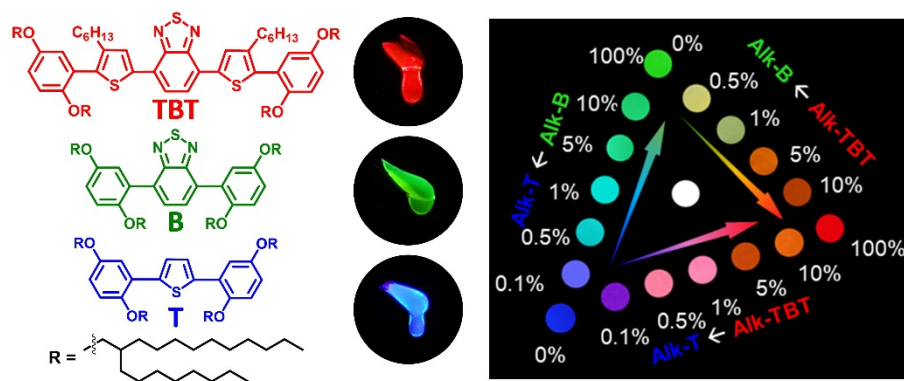


図 1. 赤、緑、青に発光するアルキル π 液体とその均質混合による精密発光色制御

[1] Z. Guo, C. Pan, A. Shinohara, T. Nakanishi, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **26**, 2515007 (2025). (Editor's Choice)

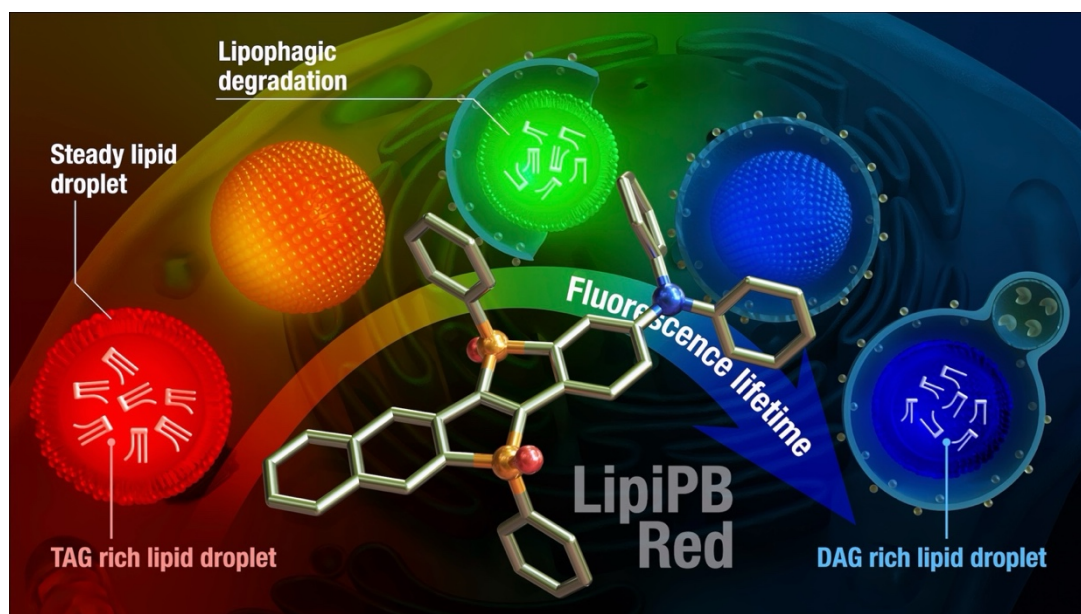
－ 研究トピックス (2)

細胞内の脂質代謝を可視化する蛍光プローブを開発

A02-4 山口茂弘・多喜正泰

名古屋大学トランスフォーマティブ生命分子研究所

脂質代謝異常は、がん、糖尿病、肥満、動脈硬化など多様な疾患と密接に関連しています。脂質を蓄積する脂肪滴は、脂質代謝の中核を担う細胞内小器官（オルガネラ）であり、その動態を明らかにすることは疾患の理解に不可欠です。蛍光イメージングは脂肪滴動態の解析において強力な手法であり、脂肪滴を染色する蛍光プローブはこれまでも多く開発されてきました。しかし、これらは主として脂肪滴の大きさや挙動を可視化するにとどまり、脂肪滴内部における脂質の代謝状態をリアルタイムに捉えることは困難でした。今回、開発したプローブは、脂肪滴の主要構成脂質であるトリグリセリド（TAG）と、TAG が加水分解されて生成するジグリセリド（DAG）の割合に応じて蛍光寿命が変化する特性を示します。肝臓がん細胞内の脂肪滴を標識し、蛍光寿命イメージング顕微鏡（FILM）で観察したところ、蛍光寿命に不均一性が認められ、脂肪滴ごとに加水分解の進行度が異なることを明らかにしました。さらに本技術を活用することで、脂肪滴選択的オートファジー（リポファジー）に先行して脂肪滴分解リパーゼによる脂肪分解（リポリシス）が起こることを解明しました。



[1] J. Wang, K. Kajiwara, M. Keshewani, F. Tama, Y. Ohsaki, S. Yamaguchi, M. Taki, *J. Am. Chem. Soc.*, **2025**, 147, in press. (Highlighted in inside cover).

－ 受賞・イベント紹介

[受賞]

(1)

石垣侑祐 (A02 班・北海道大学) が『2025 年度 (第 21 回) 野副記念奨励賞』を受賞しました。

受賞課題：特異な共有結合をもつ高歪分子に関する研究

2025 年 9 月 9 日～11 日に名古屋大学東山キャンパスで開催された第 35 回基礎有機化学討論会 (主催：基礎有機化学会) において授賞式が執り行われ受賞講演を行いました。

本賞は構造有機化学・反応有機化学など基礎有機化学分野において顕著な研究業績をあげた若手研究者に贈呈されるものです。

(2)

Sibo Ma (Nagoya University, M2, A02 Yamaguchi Group)

Best Poster Award

"Unsymmetric Thieno-phospha-rhodamines for Near-infrared Stimuli-responsive Organelle Imaging"

The 5th Asian Conference on Chemosensors and Imaging Probes (Asian-ChIP 2025), Shenzhen,

China, October 19, 2025.

(3)

安藤慶太 (名古屋大学, D1, A02 山口グループ)

若手口頭発表賞 Chemical Science Award

"リンを中心とする 7 員環スピロ骨格における特異な軌道相互作用"

第 35 回基礎有機化学討論会 (The 35 th symposium on physical organic chemistry), 名古屋 (日本), 2025 年 9 月 11 日.

(4)

川口聡貴 (北海道大学, M1, A02 石垣グループ)

学生ポスター賞 BCSJ Award

"“Seesaw Principle”の提案と実証：極度に伸長した Csp3-Csp3 単結合の伸縮メカニズムの解明"

第 35 回基礎有機化学討論会 (The 35 th symposium on physical organic chemistry), 名古屋 (日本), 2025 年 9 月 11 日.

(5)

志村理玖 (電気通信大学, M2, A02 平田グループ)

優秀学生発表賞 (ポスター)

"Long-Lived Phosphorescence Analysis Visualizes Ultraslow Oxygen Diffusion Capability in Individual Nanocrystals"

2025 年光化学討論会, 東京 (日本), 2025 年 9 月 6 日.

(6)

Rajashekhar K. Mulimani (電気通信大学, D2, A02 平田グループ)

優秀学生発表賞 (口頭)

"Selective Through-Bond Interactions in the Lower Occupied Orbitals for Efficient Organic Phosphorescence to Enable High-Resolution Red Afterglow"

2025 年光化学討論会, 東京 (日本), 2025 年 9 月 6 日.

(7)

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

The Student Poster Award

"Exploring a Unique Carbon–Carbon Covalent Bond in Strained Organic Molecules"

The 2nd International Symposium on Molecular Materials for Future (ISMMF–2), Sendai (Japan), September 05, 2025.

(8)

菊池モト (北海道大学, D2, A02 石垣グループ)

Best Poster 賞

"静水圧印加により駆動するシクロファン型ジカチオンの還元反応"

第 37 回万有札幌シンポジウム, 札幌 (日本), 2025 年 7 月 5 日.

(9)

Rajashekhar K. Mulimani (The University of Electro-Communications, D2, A02 平田グループ)

Poster Award

"Through bond interactions specific to lower occupied orbitals for enabling efficient long-wavelength organic phosphorescence"

第 49 回有機電子移動化学討論会, 東京 (日本), 2025 年 6 月 28 日.

(10)

Manami Hayashi (Nagoya University, D1, A04 Yanai Group)

Poster Award

"Development and application of an accurate excited state theory for large-scale complex systems: PNO-QD-NEVPT2 Method"

Current Trends in Electronic-Structure Theory (CTEST-2025), Carlsberg Academy, Copenhagen (Denmark), June 20, 2025.

(11)

志村理玖 (電気通信大学, M2, A02 平田グループ)

最優秀口頭発表賞 (Chemical Science Presentation Award)

"固体微粒子からの長寿命室温りん光の酸素応答性と酸素拡散過程の考察"

第 46 回光化学若手の会, 札幌 (日本), 2025 年 6 月 15 日.

(12)

Miku Naruse (Nagoya University, D3, A02 Yamaguchi Group)

RSC Materials Horizons Poster Award

"Thermodynamic and kinetic insights into the hydrogen-bond-based supramolecular polymerization in low-polarity biological media"

The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC2025), Kyoto (Japan), May 30, 2025.

(13)

Daiki Imoto (Nagoya University, D2, A01 Yagi Group)

ISMSC 2025 Poster Award

"Assembly of fluorocycloparaphenylenes and aromatic nanobelts" (P2A-89)

The 19th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry (ISMSC2025), Kyoto (Japan), May 30, 2025.

[イベント紹介]

2025年8月4日(月), 5日(火)の2日間に第一回領域会議(キックオフシンポジウム)ならびに第一回リトリート合宿を名古屋にて開催しました。

総括班チームの研究発表に加え, 所属学生・ポスドクのポスター発表・懇親会もあり大変充実した2日間になりました。第二回は来年度5月に開催予定です。

