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 7

November 2026

– 研究紹介 No. 13

島尻拓哉グループ（公募班・A02-6）

東京大学大学院　理学系研究科　化学専攻　機能無機化学研究室



教授：楊井伸浩，准教授：田代 省平，助教：島尻 拓哉，大井 未来，特任助教：西村 亘生，宇治 雅記，博士研究員：2 名，D3：2 名，D2：4 名，D1：2 名，M2：1 名，M1：9 名，B4：4 名，外国人留学生 2 名（R8 年度 10 月時点）

研究のねらい

有機化学の発展を支えてきた主役は，「原子」と「電子」といえると思います．有機化学者は，電子の動きを巧みに操ることで原子間において化学結合を形成・切断し，多種多様な分子を生み出してきました．さらに，電子が占める分子軌道のエネルギーを精密に制御することで，優れた機能をもつ有機材料を開発してきました．しかし，原子には電子だけでなく，これまで十分に活用されてこなかったもう一つの自由度があります．それが「核スピン」です．核スピンは，核磁気共鳴（NMR）分光法を通じて分子の構造や動きを解き明かすために広く利用されてきました．一方，その特性を積極的に操り，新たな分子機能を生み出すための設計要素としては，いまだ大きな可能性が残されています．

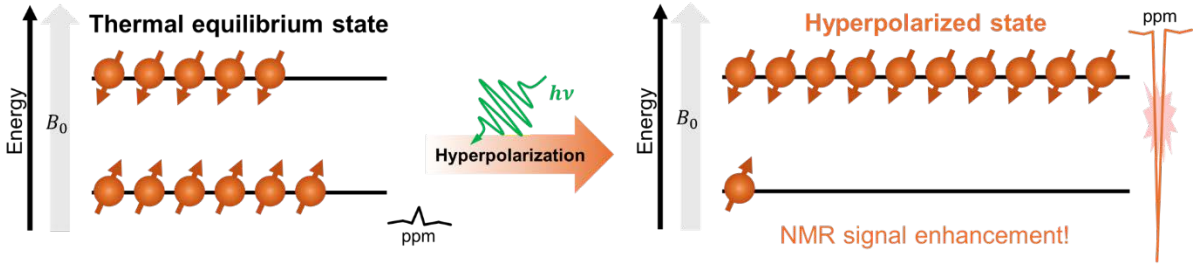
私たちは，核スピンを単なる「観測する対象」から「機能を生み出す主役」へと変革します．核スピンを有機化学の新たな設計原理として位置付け，電子と核スピンの双方を巧みに制御することで，従来の有機化学の常識を超える，unusual な有機機能性材料の創製を目指して研究を進めています．

超核偏極で MRI を高感度化

NMR は分子の構造・反応・動態を非破壊で解析できる計測法であり，その原理を応用した磁気共鳴イメージング（MRI）は，医療診断から生命科学・材料科学に至る幅広い分野で活用されています．一方，NMR や MRI の検出感度を左右する核スピン偏極率は，一般的な MRI 磁場下では室温熱平衡状態においてわずか約 0.0001%にとどまり，その低さが検出感度を制限する根本的な要因となっています．この限界を打破する技術として，核スピン偏極率を飛躍的に高める「超核偏極」が近年大きな注目を集めています．超核偏極は，従来は観測

が困難であった微量分子の検出や，その空間分布・化学状態の可視化を可能にする革新的な技術として期待されています．しかし，代表的な超核偏極法では，極低温やマイクロ波照射，特殊な試料調製などが必要となり，利用環境や応用範囲に制約があります．

私たちは，この課題を「化学の力」で突破しようとしています．分子の構造と電子の動きを巧みに設計することで，室温・溶液中という穏やかな環境で核スピンを強力に偏極させる，そんな超核偏極技術の実現に挑んでいます [1)].



核スピンにアクセスするための元素戦略と特異な化学結合

核スピンが分子の性質や化学反応に及ぼす影響は極めて小さく，通常の条件下ではその働きを直接観測したり，自在に操ることは容易ではありません．一方で，特定の化学反応の過渡的な状態における量子力学的な振る舞いを介して，核スピンにアクセスすることができます．私たちは，この現象に着目し，核スピンが関与する化学反応の精密な制御と，その特性を最大限に引き出す独自の元素・分子設計戦略を融合させることで，これまで十分に利用されてこなかった核スピンの潜在能力を引き出します．さらに，私たちがこれまで培ってきた特異な化学結合に関する知見を活かし [2-4)]，化学結合そのものを「量子現象を引き出す新たな設計基盤」として捉えることで，独自のアプローチによる「人工原子」の創製にも挑戦しています．こうした研究を通じて，核スピンに秘められた可能性を解き放ち，従来の有機化学の枠組みを超える革新的な分子機能の開拓を進めています．

本領域で何を目指すか

本領域では，光励起に伴って刻々と変化する分子の電子状態やスピン状態に着目し，緻密な分子設計による状態複雑性の制御を通じて，独自の超核偏極技術を確立します．さらに，核スピン偏極を生み出す反応機構の解明と精密制御を進め，多様な化学反応を超核偏極に活用できる新たな技術基盤を構築します．これにより，従来の分子材料の枠組みを超えた量子機能性分子システムを創出します．また，核スピンが生体透過性の高いラジオ波で操作・検出できるという特長を活かし，核スピンを量子ビットとする高感度量子センシングや磁気共鳴イメージングへの展開を図ります．究極的には，化学反応によって量子状態を自在に操り，生体深部の分子情報を非侵襲的に読み出す，新たな分子量子技術の創出を目指します．

[1] T. Tada, T. Shimajiri, K. Nishimura, N. Matsumoto, N. Yanai, *J. Chem. Phys.*, **2025**, *162*, 104302. [2] Y. Ishigaki, T. Shimajiri, T. Takeda, R. Katoono, T. Suzuki, *Chem* **2018**, *4*, 795. [3] T. Shimajiri, T. Suzuki, Y. Ishigaki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 22252. [4] T. Shimajiri, S. Kawaguchi, T. Suzuki, Y. Ishigaki, *Nature* **2024**, *634*, 347.

– 研究紹介 No. 14

野上純太郎グループ（公募班・A01-6）

東京科学大学 物質理工学院 応用化学系 田中健・前田研究室



助教：野上純太郎, 本領域課題の担当学生：M2:2 名，B4:1 名（科学大　田中健・前田研究室）

研究のねらい

芳香環をつなぎ，曲げ，ねじることで，平面状の分子にはない形と機能をもつナノカーボンをつくることができます．我々は，芳香環そのものを組み立てる［2+2+2］付加環化反応を基盤に，環状やベルト状のπ共役分子やヘリセンの不斉合成に取り組んでいます．特に，分子内の架橋構造と不斉触媒反応を組み合わせ，骨格のねじれ方向まで制御することを重視しています．

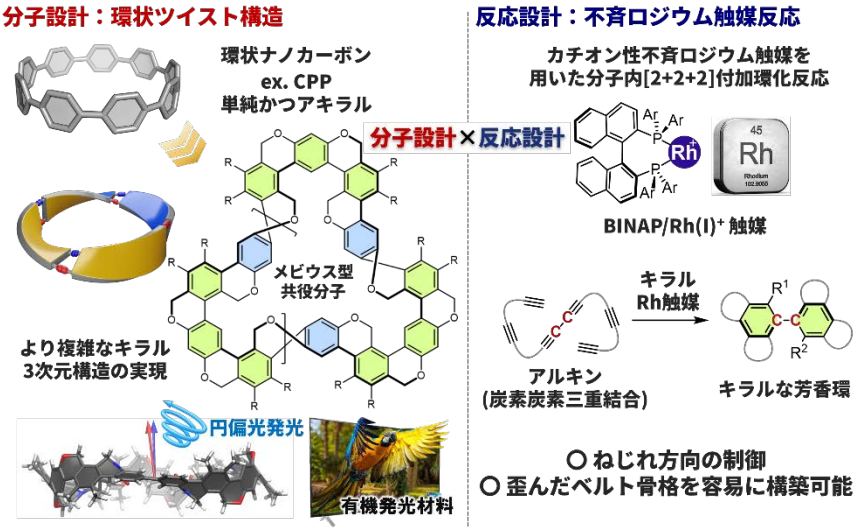
本領域では，「未踏ツイストナノカーボンの合成と革新的キラル発光機能の開拓」を課題として，高度にねじれたメビウス型ベルト共役分子を中心に研究を進めています．不斉触媒反応を鍵とした複雑な形状・トポロジー・キラリティの構築法を探求するだけでなく，その形が電子状態や光学特性に及ぼす影響を理解し，円偏光発光などへ結びつけることを目指しています．反応・合成・物性まで一気通貫したπ複雑性の探求をねらいます．

芳香環をつくってベルトをねじる

研究の核となるのは，複雑なキラルπ骨格を構築する分子設計と反応設計です．環状分子にねじれを導入するには，骨格変形に伴う分子ひずみの増大を克服し，多数の立体配座の中から目的の構造を選択的に構築する必要があります．これまで我々は，直線形と馬蹄形の芳香環ユニットを組み合わせた前駆体に，ロジウム触媒による不斉［2+2+2］付加環化反応を適用し，多重ツイスト芳香族ベルトの立体選択的合成を達成しました[1]．単結晶 X 線構造解析によって，表裏の区別をもたない三重ねじれのメビウス型構造や，巨大なアーチ型構造を明らかにしています．

現在は，この合成戦略を，環全体にπ共役が広がる新しいメビウス型骨格へと発展させています．鍵となるのは，分子内に架橋部位を設け，反応するアルキンの配置と骨格の変形を精密に誘導する分子設計です．この架橋戦略により，大きな湾曲とねじれをもつツイストシクロファンや，それをさらに連結拡大することによって高度にねじれたメビウス型共役分子の構築を目指しています．

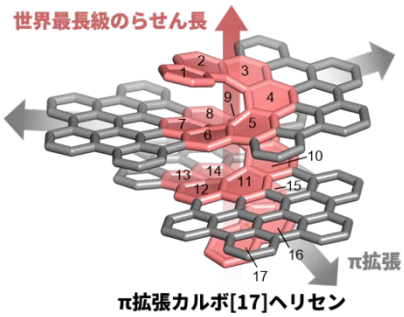
環状ツイスト構造からキラル光機能へ

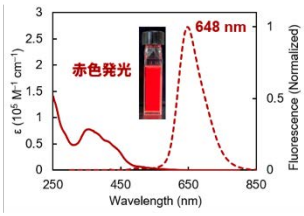


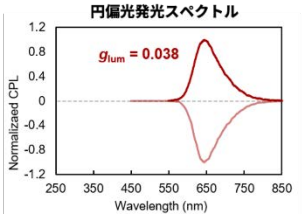
さらに私たちは,構造的特長を活かしたキラル光機能への展開を目指しています．CPL の円偏光選択性を高めるには，電気遷移双極子モーメントと磁気遷移双極子モーメントの方向や大きさの釣合いが重要です．我々は，三重ねじれによる高い対称性，大きな環状 π 共役系，架橋による構造固定化を組み合わせた分子設計を提案しています．円筒軸に沿って高い対称性をもつメビウス型骨格を設計することで，従来の有機分子を大きく上回る CPL 特性の発現を目指しています．予備的な計算予測を分子設計の手掛かりとしつつ，実際の構造揺らぎや励起状態も調べ，発光機能との関係を検証していきます．

ヘリセンの立体制御と π 共役系の拡張

芳香環構築法は，らせん状の π 共役骨格の合成にも有効です．複数のヘリセンを含む分子では，それぞれの巻き方向によって多くの立体異性体が生じます．我々は，不斉［2+2+2］付加環化反応で導入したらせんの向きを，続く酸化的環化反応の立体制御に利用し，最大 8 個のヘリセン構造をもつ多重ヘリカルナノグラフェンを立体選択的に合成しました[2]．π 共役系の拡張により発光波長も変化し，近赤外領域にまで及ぶ発光と CPL を示す分子が得られています．さらに，四重の［2+2+2］付加環化反応を逐次制御し，酸化的環化反応と組み合わせることで，π 拡張カルボ［17］ヘリセンの不斉合成に成功しました[3]．17 個のベンゼン環が連なる長いらせん骨格を構築し，最大 0.038 の発光非対称性因子 g_{lum} を示す分子を得ています．芳香環をつくる順序と立体化学を制御することで，複雑ならせん構造を設計し，その構造をキラル光機能へとつなげています．







本領域で何を目指すか

今後は，メビウス型 π 共役分子の静的構造と動的構造の切替えや，メビウス型構造を活かしたキラル光機能の発現や制御に挑戦します．さらに，分子の凹凸が生む集積構造や，酸化還元に伴う芳香族性の変化も探究していきます．領域内の合成・分光・理論の研究者との連携により，骨格複雑性から分子運動，分子集積，キラル発光へとつながる機能科学を開拓したいと考えています．

[1] J. Nogami *et al.*, *Nat. Synth.*, **2023**, *2*, 888–897. DOI: 10.1038/s44160-023-00318-2. [2] R. Shimizu *et al.*, *Nat. Synth.*, **2026**. ASAP, DOI: 10.1038/s44160-026-01155-9. [3] F. Morita *et al.*, *Nat. Synth.*, **2026**. ASAP, DOI: 10.1038/s44160-026-01193-3.

– 研究トピックス

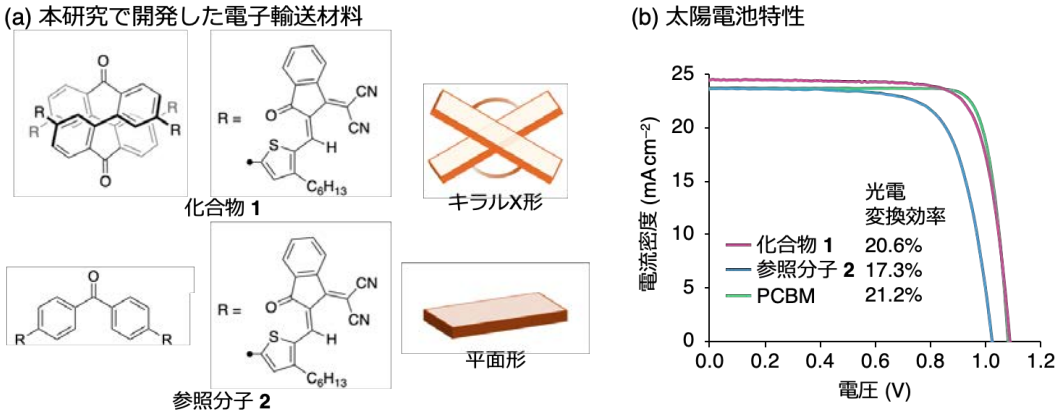
キラル X 形電子輸送材料の開発とペロブスカイト太陽電池への応用

A03-1　若宮淳志
京都大学化学研究所

ペロブスカイト太陽電池の高効率化には，光吸収層で生じた電子と正孔を効率よく電極へ取り出す輸送材料が重要です．電子輸送材料として広く用いられるフラーレン誘導体は，球形構造に由来する優れた電子輸送性を示しますが，合成コストや構造の多様化に課題があります．このため，電子受容性，電子輸送性，溶液からの薄膜形成性を兼ね備えた非フラーレン系材料の開発が求められています．

本研究では，名古屋大学の福井識人准教授らとの共同研究により，８の字型のπ共役分子 CBBC の骨格周辺に電子受容性の官能基を導入した化合物 **1** を設計し，薄膜特性と太陽電池性能を評価しました[1]．化合物 **1** は，２つの直線状の部分構造がねじれながら立体交差する「キラル X 形」の構造をもちます（図 a）．加熱したテトラクロロエタンに溶解させ，スピンコートによって平滑なアモルファス薄膜を作製できました．その電子移動度は，直線状の部分構造に相当する参照分子 **2** を用いた薄膜の約 2 倍でした．さらに，化合物 **1** を電子輸送層に用いたペロブスカイト太陽電池では，参照分子 **2** の 17.3%を上回る光電変換効率 20.6%を達成しました．これは，比較に用いたフラーレン誘導体 PCBM の 21.2%に匹敵する値です（図 b）．

本成果は，分子の立体構造を活かした電子輸送材料の設計指針を示すものです．今後，CBBC 骨格の化学修飾によって電子受容性や溶解性，分子配列を調整することで，ペロブスカイト太陽電池に適した材料開発につながると期待されます．また，単一の鏡像異性体からなる薄膜ではスピン選択的な電子輸送も確認され，スピントロニクスへの応用の可能性が示されました．



[1] Y. Sakamoto, K. Otsuka, K. Ishihara, S. Li, A. Shimazaki, M. Haramatsu, J. Hirano, J. Nogami, H. Shinokubo, H. Uratani, H. Kaji, F. Ishiwari, A. Saeki, T. Nakamura, A. Wakamiya, N. Fukui, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, *65*, e9296585.

– 受賞・イベント紹介

[受賞] (＊未掲載分)

- 菊池 モト（北海道大学, D3, A02 石垣グループ）
  TCI ポスター賞（学生ポスター賞）
  "シクロファン型ジカチオンの構築：テザー長に依存したレドックス特性"
  第 36 回基礎有機化学討論会 (The 36 th symposium on physical organic chemistry), 金沢（日本）, 2026 年 9 月 12 日. 2026 年 A02 班

- 藤井 峻丸（北海道大学, M2, A02 石垣グループ）
  TCI ポスター賞（学生ポスター賞）
  "平面トロピルラジカルの単離と構造解明"
  第 36 回基礎有機化学討論会 (The 36 th symposium on physical organic chemistry), 金沢（日本）, 2026 年 9 月 12 日. 2026 年 A02 班

- 上田 朔也（電気通信大学, D1, A02 平田グループ）
  若手口頭発表賞/Organic & Biomolecular Chemistry Oral Presentation Award
  "固体分散膜中でのπ発色団とカルコゲン置換基の歪み構造を明らかにするりん光解析/Structural Origins of Dual and Efficient Red Phosphorescence in Host-Guest Crystalline Film"
  第 36 回基礎有機化学討論会 (The 36 th symposium on physical organic chemistry), 金沢（日本）, 2026 年 9 月 12 日. 2026 年 A02 班

- 河合 勇也（東京科学大学, D3, A01 野上グループ）
  若手口頭発表賞/Organic & Biomolecular Chemistry Oral Presentation Award
  "立体化学リレーによる多層型ヘリセノファンのエナンチオ選択的合成"
  第 36 回基礎有機化学討論会 (The 36 th symposium on physical organic chemistry), 金沢（日本）, 2026 年 9 月 12 日. 2026 年 A01 班

- 小田智大（大阪大学, D3, A01 小西グループ）
  優秀学生発表賞（ポスター）
  "1,8-アズレンジカルボン酸イミド類の合成と性質/Synthesis and Properties of 1,8-Azulenedicarboxylic Imides"
  第 36 回基礎有機化学討論会 (The 36 th symposium on physical organic chemistry), 金沢（日本）, 2026 年 9 月 12 日. 2026 年 A01 班

- 小西彬仁（大阪大学, A01 小西グループ）
  2026 年度（第 22 回）野副記念奨励賞
  "双安定性を示す新奇な非交互炭化水素の創製と性質に関する研究/Study on the

Synthesis and Properties of Novel Non-alternant Hydrocarbons Exhibiting Bistability"
基礎有機化学会, 2026 年 9 月 11 日. 2026 年 A01 班

- 平野純一朗 （名古屋大学, D2, A02 忍久保グループ）
  Best Poster Awards
  "Skeletal Transformation to Chiral Nanocarbon Molecules"
  The 21st International Symposium on Novel Aromatic Compounds (ISNA-21), Beijing（China）, 2026 年 8 月 13 日. 2026 年 A02 班

- 中村洲斗（北海道大学, M2, A02 石垣グループ）
  ポスター講師賞
  "高歪み含窒素ヘリカル π 分子のレドックス応答"
  第 57 回構造有機化学若手の会 夏の学校, 愛知（日本）, 2026 年 7 月 31 日. 2026 年 A02 班

- Nutnicha Boonmong（九州大学, D1, A02 佐々木グループ）
  Chemical Physics Reviews Poster Award
  "Engineering of Triplet Kinetics through Steric Modulation for Efficient Photon Upconversion"
  The 5th International Symposium on Singlet Fission and Photon Fusion, 東京（日本）, 2026 年 7 月 10 日. 2026 年 A02 班

- 庄山隼斗（九州大学, D21, A02 佐々木グループ）
  Chemical Physics Reviews Poster Award
  "Sterically Protected π-Electron Systems: A Viable Solution for Efficient Solid-State Photon Upconversion"
  The 5th International Symposium on Singlet Fission and Photon Fusion, 東京（日本）, 2026 年 7 月 10 日. 2026 年 A02 班

- 宮下 凌羽（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
  "スルースペース相互作用を誘起する置換基の構造固定化による赤色有機りん光の増強"
  第 47 回光化学若手の会, 東京（日本）, 2026 年 6 月 20 日. 2026 年 A02 班

- 多田利輝（東京大学, M2, A02 島尻グループ）
  優秀ポスター賞/Poster award
  "効率的な電子移動が拓く光駆動超核偏極の最高記録への挑戦 / Pursuing the largest polarization in photo-CIDNP by efficient electron transfer"
  第 50 回有機電子移動化学討論会, 福岡（日本）, 2026 年 6 月 20 日. 2026 年 A02 班

- 若宮淳志（京都大学, A03 若宮グループ）
  第８回三重テレビ大賞
  2026 年 6 月 12 日. 2026 年 A03 班

- 田中颯人（京都大学, M1, A03 若宮グループ）
  第 27 回（2026 年春季）応用物理学会 JSAP Poster Award
  "含窒素芳香族カチオンを用いた 2 次元ペロブスカイトの結晶構造と物性"
  第 73 回応用物理学会春季学術講演会（JSAP EXPO Spring 2025）, 東京（日本）,
  2026 年 5 月 18 日. 2026 年 A03 班

- チョンミンアン（京都大学, 助教, A03 若宮グループ）
  日本化学会第 106 春季年会（2026 年）「第 40 回若い世代の特別講演会」講演証
  "高性能ペロブスカイト太陽電池を志向した多脚型正孔回収単分子膜材料の開発"
  日本化学会第 106 春期年会, 東京（日本）, 2026 年 3 月 19 日. 2026 年 A03 班

- 中村智也（京都大学, 助教, A03 若宮グループ）
  日本化学会第 106 春季年会（2026 年）「第 40 回若い世代の特別講演会」講演証
  "材料化学的アプローチによるスズペロブスカイト太陽電池の高性能化"
  日本化学会第 106 春期年会, 東京（日本）, 2026 年 3 月 19 日. 2026 年 A03 班

- チョンミンアン（京都大学, 助教, A03 若宮グループ）
  第 44 回 有機合成化学奨励賞
  "高性能ペロブスカイト太陽電池を志向した多脚型電荷回収単分子膜材料の設計と合成"
  2026 年 2 月 17 日. 2026 年 A03 班

- 坂本知優（京都大学, D1, A03 若宮グループ）
  Asia-Pacific International Conference on Perovskite, Organic Photovoltaics and Optoelectronics(IPEROP26), EES Solar Poster Prize
  "Cationic Dithienophosphinine for Electron Collection Monolayers in Perovskite Solar Cells"
  IPEROP26, 愛知（日本）, 2026 年 1 月 15 日.

[イベント]

第一回 π 分子複雑性 若手合宿 開催

2026 年 9 月 25 日(金)，26 日(土)の 2 日間，東京都の高尾山にある施設『タカオネ』にて第一回若手合宿を開催しました．



本合宿は，総括班の若手人材育成担当である A02 班 平田 G と A01 班 八木 G が主体となり計画・実施しました．総勢 40 名超えの合宿となりましたが，タカオネの施設をふんだんに使わせていただき，緊張感のある研究発表・活発な議論・和気藹々とした交流を行うことができました．

合宿の目的は「π 分子複雑性の追究を実際に行なっている若手研究者を集結させ，交流を通じて研究を加速させるとともに，互いに刺激し高め合うコミュニティを築くこと」だと平田・八木は認識していました．その旗のもと，どのような合宿形式であれば目的を達成できるかを考えつつ，他の若手会にはない独自色を出すことも考えました．

平田 G・八木 G で会議を重ねた結果，「学生メンバーには口頭発表を，若手教員にポスター発表をしてもらう」という形式を取ることにしました．両 G とも，学生メンバーはポスター発表の機会こそあれ口頭発表の機会は多くないと感じていました．せっかく独自で形式を決められる若手合宿なのであれば口頭発表の機会を設けたいという，学生発の意見を採用しました．

実際に，参加した 32 名の学生全てに 10~12 分の口頭発表，3~5 分の質疑応答を行なってもらいました．会場の都合上，１日目は２会場に分けざるを得ませんでしたが２日目は１会場で実施し，学生メンバーはなかなか緊張感のある発表経験ができたのではないかと思います．参加している学生・PD・教員から鋭い質疑も飛び，白熱した議論が行われていました．多くの発表者にとって良い経験になったことを願います．

運営の平田 G・八木 G および若手教員により発表審査も行い，優れた発表・質疑応答を行ったと評価された 5 名に優秀講演賞を授与しました．賞品はπ分子複雑性

ロゴの入ったタンブラーとトートバッグです．おめでとうございます！

受賞者：黒田美咲さん (A02 清水 G・M2)，川口聡貴さん (A02 石垣 G・M2)，村上公一さん (A03 櫛田 G・D1)，川中紀人さん (A04 柳井 G・M1)，上田朔也さん (A02 平田 G・D1)



1 日目の口頭発表の後には BBQ も行い親交を深めました．交流がしやすくてよかったと学生から好評価でしたので，次回も BBQ を実施できたらと思っています．



BBQ で懇親したのち，坂井美佳さん (A02 山口 G・助教)，井本大貴さん (A01 八木 G・助教)，野上純太郎さん (A01・助教)，島尻拓哉さん (A02・助教)の 4 名の若手教員にポスター発表を行なってもらいました．現在の研究内容のみならず，学生時代からこれまでの経験や研究哲学なども織り交ぜたオリジナルのポスターを創って発表していただきました．２時間ほどの時間，常に学生 10 名ずつくらいに囲まれてポスター発表するという，若手教員にとっては異様な経験をしてもらったかと思います．しかし参加者からは大変好評で，なかなか聴けない話を聴かせてもらった・普段から凄いと思っている教員陣も学生時代は苦労していたことを知れて励まされたなどの感想をもらいました．





２日目の口頭発表の終盤では，薄葉純一さん (A03 松田 G・助教)および櫛田創さん (A03・助教)に講演をしていただきました．これまでのキャリアや海外での研究経験，現在の研究内容に至る経緯など，深く面白いお話を聴かせていただきました．こういう話はポスターも良いけどや

っぱ講演も良いな！！と思わせてくれるご講演でした．海外を意識し始める学生さんが増えると良いなと思っています．



本合宿は今年度４月ごろより準備を開始しました．π 分子複雑性に所属するグループの学生メンバーを対象に募集をかけたところ，50 名を超える希望者が募ってくれました．大変ありがたかったのですが，口頭発表のプログラムの都合により，研究代表者の協力のもと 32 名に絞らせていただきました．今回合宿に参加できなかった方々，申し訳ありませんでした．次回，2 年後に名古屋近郊で八木 G の運営のもと開催予定です．そちらにぜひご参加ください．

本合宿に参加してくださったみなさま，領域関係者のみなさま，ご協力いただきまして誠にありがとうございました．そして何より，無事に全日程を終えることができましたのは平田 G メンバーの円滑な運営の賜物です．心より感謝申し上げます．本合宿がπ分子複雑性の追究が紡ぐ機能科学の発展に貢献することを信じ，開催報告を閉じさせていただきます．ありがとうございました．



最後に：平田さんの発案で，π 分子複雑性のポーズを創って集合写真を撮ろうということになりました．開会時に部屋メンバーをチームとしてポーズを考えておいてもらえるようお願いし，閉会時に披露されたπ分子複雑性ポーズのうち 2 つを全員で選んで，各々がポーズしました．写真から，どのようなポーズかご想像ください．

文筆：八木 亜樹子