

研究プロジェクト名


# 有機 $\pi$ 電子系材料の新機能発現



## New Functional Organic $\pi$ -Electron Materials

大学院理学研究科・教授

**山口 茂弘**  
Shigehiro Yamaguchi



**やまぐち しげひろ プロフィール**

1991年 京都大学工学部 卒業  
 1993年 京都大学大学院工学研究科修士課程 修了  
 1993年 京都大学大学院工学研究科博士課程 中退  
 1997年 工学博士(京都大学)

**研究経歴**

1993年 京都大学化学研究所 助手  
 2000年 マサチューセッツ工科大学客員 研究員  
 2001年 科学技術振興機構PRESTO研究員兼任  
 2003年 名古屋大学大学院理学研究科 助教授  
 2004年 科学技術振興機構SORST研究員兼任  
 2005年～ 名古屋大学大学院理学研究科 教授

**研究分野**

有機化学、機能材料化学

1. 機能性 $\pi$ 電子系材料の設計と合成
2. 機能性ホウ素化合物の創製
3. 高効率環化反応の開発

**受賞歴、レクチャーシップなど**

1997年 有機合成化学協会研究企画賞  
 1999年 ケイ素化学協会奨励賞  
 2001年 日本化学会進歩賞  
 2005年 文部科学大臣表彰若手科学者賞

共役骨格との特異な軌道相互作用、典型元素が多様な価数や配位数をとりうるという特性、あるいは典型元素特有の構造特性、といった点を分子デザインに組み込み、個々の元素の“個性”を巧く引き出すことにより、従来の炭素を中心とした有機化学では実現できない $\pi$ 電子系分子の創出が可能になると期待できます。我々はこれまでこのアプローチによる分子デザインと、その合成のために必要な素反応開発により、含ケイ素 $\pi$ 電子系材料やホウ素を含む材料をはじめとする数々の新しい $\pi$ 電子系材料を開発してきました。例えば、ケイ素を含む5員環構造をもつシロール $\pi$ 電子系材料は、ケイ素の電子効果を反映して世界トップクラスの高い電子輸送能をもち、有機ELディスプレイに実用化されています。また、最近合成に成功したケイ素架橋ラダー型オリゴ(p-フェニレンビニレン)は、強固な平面 $\pi$ 共役骨格をもち、固体状態でも強い蛍光を示す優れた発光性材料として期待されています。

本研究プロジェクトでは、この設計重視型の物質創製に加え、どのような物性の発現を目指すのかという点に焦点をあてた物性追求型の物質創製をすすめます。有機 $\pi$ 電子系材料に求められる基本特性としては、大まかに発光特性と電荷(ホールあるいは電子)輸送性の2つが挙げられます。本研究では、これらの基本特性のなかでも特に達成困難な特性、例えば、固体状態での高効率発光やアモルファス状態での高い電子輸送性、バランスのとれたバイポーラー性電荷輸送、といった特性をピックアップし、これらの物性発現を可能にする究極の分子群の創製を目指します。

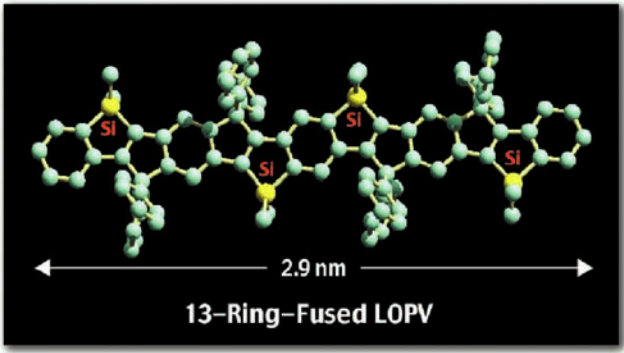
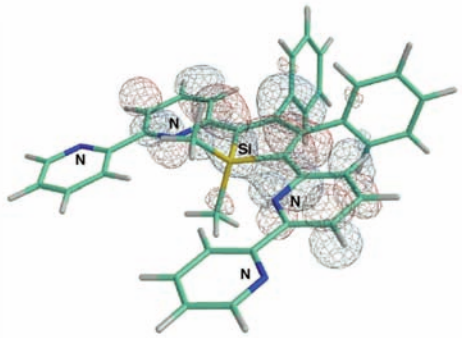
有機化学の醍醐味は、やはり、分子レベルで“ものづくり”ができることです。世の中に存在しない分子を自分でデザインし、合成する。そのオリジナル分子を中心にサイエンスが発展していく。本プロジェクトを通してそういった鍵となる分子の一つでも創り出せればと思っています。

有機エレクトロニクス、あるいは“プラスチック”エレクトロニクスとよばれる分野が、今、世界中で脚光を浴びています。液晶に代わるディスプレイ技術として注目される有機EL(エレクトロルミネッセンス、電界発光)素子や、電子デバイスの新たなスイッチング素子となる有機薄膜トランジスタなどが代表例として挙げられます。有機ELにいたってはすでに携帯電話やデジタルカメラに実用化されています。これらの一番の魅力は、やはり有機分子ならではの応用の可能性でしょう。折り曲げられるフレキシブルディスプレイや、可溶性有機半導体を使ったプリンタブル集積回路など、その可能性はつきません。

この分野で主役となる材料は、炭素—炭素不

飽和結合( $\pi$ 結合)が鎖状、平面上、球状につながった $\pi$ 電子系化合物です。これらの化合物では、 $\pi$ 電子の非局在化により特異な電子的、磁氣的、光学的特性をもちます。これまで、C、N、Oといった元素を中心に多様な分子構造をもつ材料が開発されてきました。真に優れた材料の開発はこの分野にプレクスルーをもたらします。我々が本研究プロジェクトで目指すのは、この分野の基幹材料となりうるような優れた基本骨格をもつ分子群を創り出すことです。

我々の分子デザインの切り口は、「典型元素」の特性を活かした分子設計です。ここでいう典型元素とはB、Si、P、Sなどの13族から16族ぐらいまでの元素を指すこととします。これら典型元素と $\pi$



ケイ素を含む新 $\pi$ 電子系分子:シロール誘導体(左)とケイ素架橋ラダー型オリゴ(p-フェニレンビニレン)(右)

研究プロジェクト名

# 温度可変超高压高分解能NMR



## Variable-temperature High-resolution NMR at Ultrahigh Pressures

大学院環境学研究所・助手

**奥地 拓生**  
Takuo Okuchi



**おうち たくお プロフィール**

- 1993年 京都大学理学部地質学鉱物学教室 卒業
- 1995年 東京工業大学大学院理工学研究科応用物理学専攻 修士課程 修了
- 1998年 東京工業大学大学院理工学研究科応用物理学専攻 博士課程 修了
- 1998年 博士(理学)
- 研究経歴**
- 1995年 日本学術振興会 特別研究員(DC1)
- 1998年 日本学術振興会特別研究員(PD)
- 北海道大学低温科学研究所に滞在
- 1998年 名古屋大学理学部 助手
- 1998年 科学技術振興事業団「さきがけ研究21」研究員
- 2001年~ 名古屋大学大学院環境学研究所 助手
- 2003年 日本学術振興会 海外特別研究員
- Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washingtonに滞在

**研究分野**

超高压実験、水の物理学、地球惑星物質の物性実験

性的氷となる(水素結合の対称化)。この変化により氷の融点が大きく上昇して、温度が1000℃を超えても融解しない、「灼熱の氷」がつけられることが、私の留学先で昨年確認された。もちろん、われわれの地球においてはこのような氷は存在しない。だが太陽系の外側にある巨大氷惑星の内部につくられた、超高压高温の世界においては、この灼熱の氷が天然の形で存在する可能性がある。さらに、いま発見が相次いでいる太陽系外の惑星の数を考えると、その可能性はさらに広がってゆく。H<sub>2</sub>Oが宇宙にごく普遍的に存在する分子である以上、それこそ星の数ほどある惑星の中には、天王星や海王星のように氷でつくられているが、より巨大で、より内部の圧力が高い惑星もたくさん存在するだろう。そしてこの巨大惑星の世界では、異なる圧力下にあるさまざまな種類のH<sub>2</sub>Oが、さまざまな種類の惑星の材料となっている。このように宇宙に目を向けると、われわれの良く知っている液体の水はH<sub>2</sub>Oのごく特別な形態で、灼熱の氷のほうが普通の存在なのかもしれない。少なくとも、多様なH<sub>2</sub>Oの状態を新しく知ること、液体の水がどのようなものかを、より深く理解できることは間違いない。

結論を述べる。いま述べてきたH<sub>2</sub>Oをはじめとした、超高压下でのさまざまな分子の変幻自在の変化を、NMRという分子を調べる最終兵器ともいえる手法により、直接調べてみたい。この構想を実現すべく、名古屋大学に就職して以来、継続的に実験装置作りを進めてきた(図2)。構想してきた実験の方法は単純で、ダイヤモンドではさんだ水を強い力で押しつぶし、数十万気圧の圧力をかけて封印した状態でNMR分光を行う。ダイヤモンドは強く、圧力の発生は問題なくできるのだが、封印した極微量の試料から、もともと微弱なNMR信号を取り出して、高分解能スペクトルを得ることが難しかった。実際、これは数年前まで誰もできるとは信じていなかった実験である。詳細はここでは省略するが、いまやその実現は手の届くところにきている。

確かな技術を新しくつくり、それを使って大きな夢を見たい。基礎研究とはたとえばそのようなものだ、自分の学位審査でお世話になったある先生の生き方から教わった。3時間かかった審査会の思い出がいまだに残っていて、それに背中を押されて研究を進めてきた。高等研究院に採用されたことで、また背中を強く押しもらえることができた。テーマは違うが、同じような想いで研究をすすめている方々との新たな出会いを期待している。

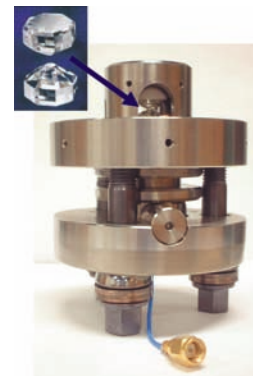


図2: NMR用超高压力発生装置

核磁気共鳴分光(Nuclear Magnetic Resonance: NMR)は、多様な物質について、その未知なる分子構造、つまり空間情報と、分子運動、つまり時間情報を、ともに高い精度で調べることができる強力な手法である(図1)。たとえば水(H<sub>2</sub>O)が温度を下げると凍り、温度を上げると沸騰するように、分子がつくるさまざまな物質の構造と運動は、その置かれた外場条件によって自在に変化する。この変化を詳しく調べることは、物質の性質を調べるための基本的な研究手法である。そこでひとつの物質のNMR分光をいろいろな温度で行うことにより、基礎・応用の両面から重要かつ多彩な成果が得られてきた。

水の沸騰が分子どうしを結ぶ水素結合の切断によって起こるように、分子性物質の性質の大きな変化は、分子の間に働く相互作用が変わることによって起こることが多い。そして分子間相互作用は、本研究プロジェクトのキーワードである圧力を使って、分子間の距離を無理やりに縮めると、必然的に大きく変化する。より専門的に述べると、圧力は分子

間ポテンシャルを人工的に操作するための、最も効果的な変数である。特にGigapascal (GPa; 約1万気圧)を単位とする超高压領域では、まさに分子間相互作用の質が大きく変わる現象が頻繁に起きてくる。そして圧力のもとらす変化のなかでも最も劇的な事例のひとつとして、いま新発見が相次いでいる注目の物質が、いわば分子の代表選手であり、ここでも引き合いに出してきた分子、H<sub>2</sub>Oである。

H<sub>2</sub>Oは水素結合という高い自由度の分子間相互作用を持つ物質の代表であり、このために外場の変化に対応した柔軟な構造変化が許される。温度を変化させて得られるH<sub>2</sub>Oの状態は、水・水蒸気のほかに3種類の異なる構造の水があるが、これに圧力の変化を加えると、わかっているだけで16種類もの異なる構造の水がつけられる。この変幻自在の分子にさらに数十万気圧の圧力をかけると、H<sub>2</sub>O分子の間の距離が限界を超えて縮むことにより、分子の内と外の化学結合が混ざりあい、ついには酸素と水素がばらばらになったイオ

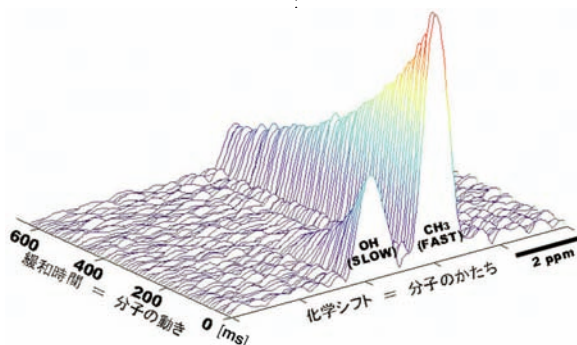


図1: メチルアルコール(CH<sub>3</sub>OH)の超高压高分解能NMRスペクトルとその緩和(Okuchi et al., 2005)



研究プロジェクト名

# 比較惑星学的視点の導入による固有磁場強度が地球周辺宇宙環境に与える影響に関する研究



## Effects of the Intrinsic Magnetic Field Strength on the Space Environment Around Earth: A Comparative Approach of Terrestrial Planets

太陽地球環境研究所・助教授

**関 華 奈 子**  
Kanako Seki



**せき かなこ プロフィール**

1995年 東京大学理学部 卒業  
1997年 東京大学大学院理学系研究科博士前期課程 修了 理学修士  
2000年 東京大学大学院理学系研究科博士後期課程 修了 博士(理学)

**研究経歴**

1997年 日本学術振興会 特別研究員  
1999年 米国ロスアラモス国立研究所 Graduate Research Assistant  
2000年 日本学術振興会 特別研究員(PD)  
2002年~ 名古屋大学太陽地球環境研究所 助教授

**研究分野**

宇宙空間プラズマ物理学、惑星磁気圏物理学

**受賞歴、レクチャーシップなど**

2001年 米国地球物理学会より 2001 Fred L. Scarf Award  
2001年 地球電磁気・地球惑星学会より 第13号大林奨励賞

そして、Space Physicsの第三の視点は、地球物理学的な見地から地球の最外圏の成り立ちと変動を理解しようというアプローチです。現在の地球に関する理解が進むにつれて、最近では、比較惑星学的な視点からの研究や、より長い時間スケールに関する研究も始まっています。異なる境界条件をもつ他の惑星で生起する現象を知ることは、地球に関する理解を深めることにも役立ちます。例えば、惑星からの大気の散逸過程は、惑星がもつ固有磁場の強さに大きく依存することが想像されています。これまでの研究から、十分強い固有磁場を持つ現在の地球(図1)と、全く固有磁場を持たなかった過去の地球(図2)については、大気流出量の見積りがある程度可能になっています。しかし、地球が弱い磁場をもった時に、磁場の強さの変化にともなって大気流出過程がどのように変わるのかについては殆どわかっていないため、その大気進化への影響を、定量的に議論する段階には至っていません。

今回私たちが高等研究院に提案した研究計画では、固有磁場強度が現在の地球よりも弱まった場合に、大気流出量と高エネルギー粒子生成過程がどのように変化するかを調べるために必要な、数値実験手法の基礎を確立することを目指しています。地球の約1500分の1の固有磁場をもつ水星をテスト問題として選び、磁場のソレノイダル性を自動的に保証する磁気流体コードを用いたグローバルシミュレーションと、その中で粒子運動論を記述する数値アルゴリズムを3年間かけて開発しようという計画です。

こうした新しい数値コードの開発は、科学的な成果を出す前の検証に時間がかかるため、高等研究院の制度が実質的に機能すれば、初期開発の重要な時期に高等研究院で集中して研究を行える意義は大きいと考えています。グローバルな場の中の運動論の記述に関する数値実験手法は、実現すれば上述のSpace Physicsの第一から第三の視点全てに应用が可能で、各視点の研究の焦点にブレイクスルーをもたらし得る大切なステップです。そのため世界中に、この同じゴールを目指して、異なるルートから研究しているグループが存在するのが現状です。どのルートが正解であったかは、数年後にならないとわからないことでしょう。その意味で一朝一夕には成功しないリスクをもつ、野心的な本計画を採択してくださったことに感謝しつつ、共同研究者と密接に連携しながら研究に邁進したいと考えています。

私の専門分野はSpace Physicsと呼ばれる分野で、探査機を直接飛ばして測定することが可能な、太陽系内の宇宙空間、身近な宇宙で生起する現象を研究対象としています。地表から上空に100km程度よりも上の高度では、地球大気は太陽紫外線などにより電離され、プラズマ状態となっています。一方、太陽からは常に高温の太陽大気の一部がプラズマの流れとして太陽系内に放出されていて、太陽風と呼ばれています。このように宇宙空間は、真空ではなく、太陽や地球から吐き出された電子や陽子などが飛び交う、にぎやかなプラズマの世界です。そのプラズマの世界で生起するダイナミックなエネルギー変換機構や物質輸送を取り扱う学問が、Space Physicsなのです。

Space Physicsは現在、大別すると3つの異なる視点から研究が行われており、各々が違った魅力を持ちながら相互に影響を及ぼしつつ、進展しています。宇宙に存在する物質の99%はプラズマ状態にあるという表現が時に使われるほど、プラズマは

宇宙ではありふれた存在です。Space Physicsの第一の視点は、この宇宙プラズマ中で生起する現象を直接観測できる利点を活かし、数値シミュレーション研究とも連携しながら、身近な宇宙をプラズマの実験室とすることで、粒子加速、磁気再結合、乱流輸送など、宇宙プラズマ現象解明に重要な物理機構を、深く理解してゆこうというものです。

人工衛星を用いた地球周辺の宇宙空間の探査と利用は、1960年代から本格的に始まり、現在では、天気予報の気象衛星、カーナビ等のGPS衛星など、宇宙利用はいつの間にか私達の生活にも深くかかわっています。Space Physicsは、この宇宙時代の幕開けとともに急速に発展した比較的若い学問分野であり、その第二の視点は、人類の活動域である宇宙環境の正確な把握と、変動メカニズムの理解にあります。地球の影響が強くおよんでいる宇宙空間をジオスペースと呼びますが、オーロラや通信障害を引き起こすジオスペースの嵐(geospace storm)の研究が、現在、焦点の一つとなっています。

1. プラズマとは、マイナスの電荷をもつ電子と、プラスの電荷をもつイオンからなる気体の一種で、全体としては電気的に中性であるが、粒子の電荷のために電気的な力に支配され、ふつうの気体にはない独特な集団的振る舞いをする。物質の「第4の状態」とも呼ばれている。

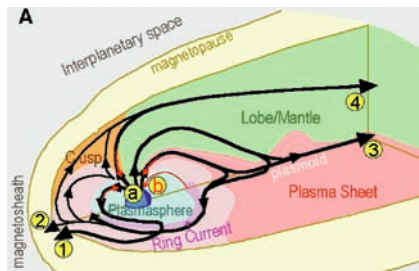


図1: 磁化惑星(現在の地球)からの酸素の主要流出ルートの模式図[Science誌より転載]。

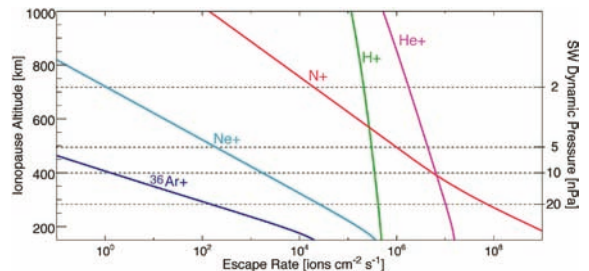


図2: 非磁化惑星(磁場を持たない地球)からのイオン種毎の大気流出率の見積り結果[Nature誌より転載]。