

文部科学省科学研究費補助金「新学術領域研究(研究領域提案型)」
 π造形科学: 電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出領域略称名「π造形」
 領域番号2601(平成26~30年度)



π造形科学 NEWS Vol. 06

單一分子測定で物質の究極に迫る 木口 学 博士(東京工業大学)



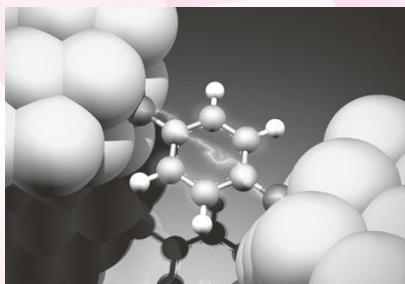
木口研究室のみなさん

——木口先生の研究分野は?

木口 もともと学生時代は、真空中での放射光による表面構造の解析を行っていました。北海道大学に移ってからは、溶液系での電気化学に取り組みました。その他、オランダで極低温物理学を学んできたり、全て現在の研究につながっています。

——現在の主なテーマは?

木口 まずは、単分子の物性計測があります。単一の分子の伝導度やラマン分光など、各種物性を計測するというものです。たとえば金の電極の間に、ベンゼンなどの分子を挟んで、電気伝導度を測定します。



金電極に挟まれたベンゼン環

——素朴な疑問ですが、どうやって一分子を挟むのですか?

木口 要するに、金の電極を「割る」わけです。圧電素子などを使うと、割った時のギャップを極めて精密に制御できますので、この間にベンゼン環がはまり込むよう調整できます。

——単分子の世界は、バルクとはだいぶ違うのですか?

木口 たとえば金のナノ粒子は赤色で、触媒作用を持つなど、バルクの金とは全く違う性質を示します。

——サイズの違いで、あらゆる性質が変わってくるのですね。

木口 また、たとえば金属触媒は分子と金属の界面で、通常起きない反応が起きるなど、非常にユニークな性質が出てきます。しかし電極に挟まれた分子は、金属と分子の界面を2つ持つ状態ですから、今までにない可能性が引き出せると思ってい

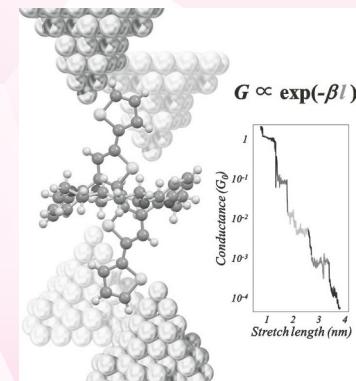
ます。このあたりを研究していた学生さんが昨年のロレアル・ユネスコ賞を受賞するなど、注目をいただいている。

——さらなる展開としては?

木口 単に単分子の電気伝導度を測るだけでなく、ラマンスペクトルなど新しい分光法の開発を通じて、原子・分子の姿を動的に捉えることに挑戦しています。さらには、分子が変化する姿、化学反応の追跡を行うのが大きな目標ですね。

——最近の成果としては?

木口 竹内正之さんらと共同で、電気抵抗が3段階に変化する単分子スイッチを開発しました(*J. Am. Chem. Soc.*, 2014, 136, 7327)。チオフェンが4つ連結した分子を金電極間に挟んでやると、どの硫黄原子が金と接続するかによって、抵抗を変化させることができます。



3段階に抵抗が変化する単分子スイッチ

——他にも共同研究が動いているとか?

木口 たとえば多田朋史さんには、理論計算の面から我々の研究を支えてもらっています。また、櫻井英博さんのスマネン、忍久保洋さんの反芳香族化合物など、魅力的な化合物がたくさんあります。それらが単分子レベルでどういう性質を示すか、ぜひ取り組んでみたいと思っています。

本領域では、領域外の博士課程学生や若手研究者向けのインターンシップとして
 π 造形スクールを開校します。詳しくは、本領域ウェブサイトをご覧下さい。
<http://pi-figuration.jp>

理論計算から新しい機能を 多田朋史博士(東京工業大学)



多田研究室のみなさん

——多田さんの研究分野は、計算化学ということですね。

多田 はい、新材料の探索に、理論面から貢献していくことを目指しています。

——昔からこの分野に興味があったのですか？

多田 子供の頃、外では球技が好きでしたが、家の中ではパソコンでBASICのプログラムを打ち込んで、狙い通りに動くとともに嬉しかった記憶があります。今の研究の喜びも、その延長上にあるのかもしれません。

——研究生活に入ってからはずっと理論計算を？

多田 広島大学で分子性固体の電子物性を研究し、博士号を取りました。その後博士研究員として九州大学に移り、単分子電気伝導の仕事に取り組みました。これは、現在行っている木口さんとの共同研究の原点になっています。

——東大に移られたのはその後ですか。

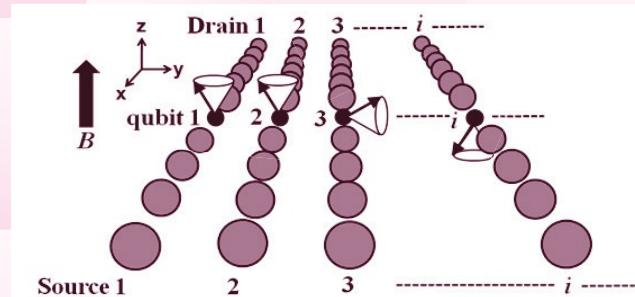
多田 はい、8年間務めまして、導電性高分子における電子の拡散伝導、酸化物中でのイオン輸送、電極反応など、いろいろなことを手がけました。

——木口さんとの共同研究は、どのような形で始まったのでしょうか？

多田 応用物理学会で互いの研究を知ったのがきっかけです。その後たまたま同じ大学になり、 π 造形でも一緒にすることになりました。木口さんの実験結果を理論的にサポートする形です。

——こうした研究の出口として、「量子コンピュータ」を挙げておられますね。

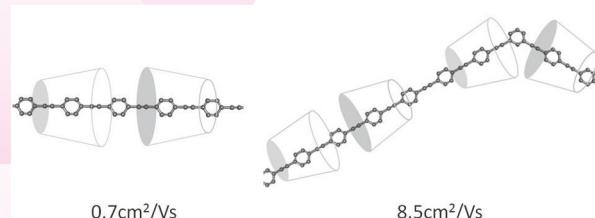
多田 量子状態本来の性質を利用する計算機です。ある種の計算に限れば、現在のコンピュータとは比べ物にならない速度でこなせます。もちろん、量子コンピュータに求められる条件すべてを満たす物理/化学系を作ることは技術的に難しい点が多く、実用化は簡単ではありませんが、 π 造形のメンバーと新しいアプローチを模索しております。



機能を持った二次元集積体のイメージ

——面白そうですね。ところで π 造形領域に加わったきっかけは？

多田 大阪大学の関修平さんらと共同で、 π 共役高分子の電子移動について研究したのがきっかけです。ベンゼン環と三重結合が交互に連結した高分子は、パラ位で直線的につながるのではなく、メタ位での結合を入れてジグザグ型にした方が、電荷移動度が高まるというユニークな研究です（*Nature Communications* 4, 1691）



結合位置による電荷移動度の変化

—— π 造形にふさわしい内容ですね。その他、この領域で取り組みたいことは？

多田 現代のコンピュータの計算性能は大変高く、様々な状況のシミュレーションができるようになっています。これを生かし、新しい機能を引き出せる分子ダイナミズムを見つけてたいと思っています。

もっと詳しく→ <http://pi-figuration.jp>