

領域略称名： $\pi$ 造形科学  
領域番号：2601

令和元年度科学研究費助成事業  
「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
に係る事後評価報告書

「 $\pi$ 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」

（領域設定期間）

平成26年度～平成30年度

令和元年6月

領域代表者（東京工業大学・科学技術創成研究院・教授・福島 孝典）

## 目 次

1. 研究領域の目的及び概要	9
2. 研究領域の設定目的の達成度	11
3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況	14
4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況	15
5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	17
6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	20
7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況	25
8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	27
9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度	31
10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況	32
11. 総括班評価者による評価	33

**研究組織** (総：総括班, 支：国際活動支援班, 計：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究, 公：公募研究)

研究項目	課題番号 研究課題名	研究期間	代表者氏名	所属機関 部局 職	構成員数
X00 総	26102001 $\pi$ 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	平成26年度 ～ 平成30年度	福島 孝典	東京工業大学・科学技術創成研究院・教授	16
Y00 支	15K21721 $\pi$ -HUB： $\pi$ 造形を支える分子設計のための集約拠点形成活動	平成27年度 ～ 平成30年度	福島 孝典	東京工業大学・科学技術創成研究院・教授	16
A01 計	26102002 バッキーボールをモチーフとする湾曲 $\pi$ 造形	平成26年度 ～ 平成30年度	櫻井 英博	大阪大学・工学研究科・教授	2
A01 計	26102003 反芳香族化合物による拡張 $\pi$ 造形	平成26年度 ～ 平成30年度	忍久保 洋	名古屋大学・工学研究科・教授	2
A01 計	26102004 新しい触媒的芳香環構築反応を駆使したらせん $\pi$ 造形	平成26年度 ～ 平成30年度	田中 健	東京工業大学・物質理工学院・教授	1
A01 計	26102005 革新的合成手法を駆使した自在開殻 $\pi$ 造形	平成26年度 ～ 平成30年度	鈴木 修一	大阪大学・基礎工学研究科・准教授	1
A01 計	26102006 元素の特性を活かした典型元素 $\pi$ 造形	平成26年度 ～ 平成30年度	斎藤 雅一	埼玉大学・理工学研究科・教授	2
A02 計	26102007 強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフト $\pi$ 造形システム	平成26年度 ～ 平成30年度	芥川 智行	東北大学・多元物質科学研究所・教授	5
A02 計	26102008 大規模分子集積化による巨視的 $\pi$ 造形システム	平成26年度 ～ 平成30年度	福島 孝典	東京工業大学・科学技術創成研究院・教授	4
A02 計	26102009 共役ポリマーのアンサンブル $\pi$ 造形システム	平成26年度 ～ 平成30年度	竹内 正之	物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・グループリーダー	4
A02 計	26102010 複合アセンブリー $\pi$ 造形システム	平成26年度 ～ 平成30年度	矢貝 史樹	千葉大学・大学院工学研究院・教授	1
A03 計	26102011 複合電磁波分光法による $\pi$ 造形分子設計と電子機能予測	平成26年度 ～ 平成30年度	関 修平	京都大学・工学研究科・教授	4
A03 計	26102012 $\pi$ 造形システム集合体の物性制御	平成26年度 ～ 平成30年度	竹延 大志	名古屋大学・工学研究科・教授	2

A03 計	26102013 単一 $\pi$ 造形システムの物 性解明	平成 26 年度 ～ 平成 30 年度	木口 学	東京工業大学・理学院・教授	1
A03 計	26102014 放射光X線を用いた $\pi$ 造 形システムの構造物性	平成 26 年度 ～ 平成 30 年度	足立 伸一	高エネルギー加速器研究機構・物 質構造科学研究所・教授	2
A03 計	26102015 $\pi$ 造形科学のための理論 設計・解析手法の開発と 応用	平成 26 年度 ～ 平成 30 年度	杉本 学	熊本大学・大学院先端科学研究部 (工)・准教授	1
A03 計	26102016 $\pi$ 造形分子機械のナノ力 学	平成 26 年度 ～ 平成 30 年度	佐々木 成朗	電気通信大学・大学院情報理工学 研究科・教授	3
A03 計	26102017 局在分子スピン操作のため の外場制御型 $\pi$ 造形の 理論的設計	平成 26 年度 ～ 平成 30 年度	多田 朋史	東京工業大学・元素戦略研究セン ター・准教授	2
統括・支援・計画研究 計 18 件					
A01 公	15H00981 ラセン不斉非平面 $\pi$ 電子 芳香族化合物の合成・分子 集合体と非平衡熱力学的 応答	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	重野 真徳	東北大学・薬学研究科・講師	1
A01 公	15H00982 多様な刺激に応答する $\pi$ 組織体の構築	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	村岡 貴博	東京工業大学・生命理工学院・助 教	1
A01 公	17H05147 多様な刺激に応答する $\pi$ 組織体の応用	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	村岡 貴博	東京農工大学・工学(系)研究科 (研究院)・准教授	1
A01 公	15H00985 リン含有曲面分子の曲率 制御を用いた多彩な $\pi$ 共 役集積体の造形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	山村 正樹	筑波大学・数理物質系・講師	2
A01 公	17H05140 ヘテロ原子の特徴に基づ く柔軟な曲面 $\pi$ 共役分子 の動的挙動	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	山村 正樹	富山県立大学・工学部・准教授	1
A01 公	15H00987 ジベンゾクリセンをモチー フとする曲面 $\pi$ 電子系の 開発	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	辻 勇人	神奈川大学・理学部・教授	1
A01 公	17H05163 嵩高いケトンのカップリン グ反応に基づく立体混雑 アルケンの開発	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	辻 勇人	神奈川大学・理学部・教授	1

A01 公	15H00989 非対称モノマーの配列を 鍵とした巨大双極子 $\pi$ 造 形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	山下建（アル ブレヒト建）	東京工業大学・科学技術創成研究 院・助教	2
A01 公	17H05146 双極子モーメントを有する モノマーによる分極 $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	山下建（アル ブレヒト建）	九州大学・先導物質化学研究所・ 准教授	2
A01 公	15H00992 面性不斉分子で彩る光学 活性段違い $\pi$ 造形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	森崎 泰弘	関西学院大学・理工学部・教授	1
A01 公	17H05165 面性不斉分子を基盤とす る光学活性段違い $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	森崎 泰弘	関西学院大学・理工学部・教授	1
A01 公	15H00993 サブナノ空間の官能基化 による球状 $\pi$ 造形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	村田 靖次郎	京都大学・化学研究所・教授	1
A01 公	17H05152 サブナノ空間の官能基化 による球状 $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	村田 靖次郎	京都大学・化学研究所・教授	1
A01 公	15H00996 縮環型シロールの二重交 差カップリングによる振れ たパイ共役系の精密合成 と機能開発	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	清水 正毅	京都工芸繊維大学・工芸科学・教 授	1
A01 公	15H00997 有機リン化合物のしなや かな反転特性を活かした $\pi$ 造形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	武田 洋平	大阪大学・工学研究科・准教授	1
A01 公	17H05155 しなやかな構造変化を機 能の鍵とする $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	武田 洋平	大阪大学・工学研究科・准教授	1
A01 公	15H01001 芳香族性の新たな物性 指標を指向したアザボル フィリノイドの創出	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	清水 宗治	九州大学・工学研究院・准教授	1
A01 公	17H05160 アザボルフィリノイドの特 性を活かした $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	清水 宗治	九州大学・工学研究院・准教授	1
A01 公	15H01004 タンデムヘテロ Fried-Crafts 反応を鍵と した拡張 $\pi$ 造形	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	畠山 琢次	関西学院大学・理工学部・准教授	1
A01 公	17H05164 タンデムヘテロ Friedel-Crafts 反応を鍵 とした自在 $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	畠山 琢次	関西学院大学・理工学部・教授	1

A01 公	17H05141 三成分連結反応を用いた 多様な $\pi$ 電子系の構築	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	桑原 純平	筑波大学・数理物質系・准教授	1
A01 公	17H05145 最小エネルギー円錐交差 構造へのアクセス制御を 導く $\pi$ 造形による光機能 の創出	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	小西 玄一	東京工業大学・物質理工学院・准 教授	1
A01 公	17H05149 汎用的な新規 $\pi$ 拡張反応 を鍵とする湾曲 $\pi$ 造形	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	瀬川 泰知	名古屋大学・理学研究科・特任准 教授	1
A02 公	15H00980 結晶中での極性芳香族 分子の運動と制御による 誘電機能の創出	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	原田 潤	北海道大学・理学研究院・准教授	3
A02 公	17H05135 $\pi$ 電子系二次元柔粘性結 晶中の分子運動と結晶格 子変形を利用した機能性 材料の創出	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	原田 潤	北海道大学・理学研究院・准教授	2
A02 公	15H00983 $\pi$ -集積型ピラードレイ ヤ一構造による格子・空間 物性制御	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	宮坂 等	東北大学・金属材料研究所・教授	2
A02 公	17H05137 層状分子磁石における動 的 $\pi$ 造形による物性制御	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	宮坂 等	東北大学・金属材料研究所・教授	2
A02 公	15H00986 $\pi$ 電子球体の自己形成と 新しい光エレクトロニクス の創出	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	山本 洋平	筑波大学・数理物質系・准教授	3
A02 公	17H05142 様々な励起プロセスを介 した $\pi$ 電子球体への発光 閉じ込めと共鳴発光の変 調	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	山本 洋平	筑波大学・数理物質系・教授	1
A02 公	15H00988 水素結合ダイナミクスと 連動するスイッチャブル $\pi$ 造形システム	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	上田 顕	東京大学・物性研究所・助教	1
A02 公	17H05143 水素結合ダイナミクスと 連動する動的 $\pi$ 造形シ ステム	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	上田 顕	熊本大学・大学院先端科学研究部 (理)・准教授	1
A02 公	15H00990 柱状 $\pi$ 分子の 2 次元集積 化による $\pi$ 造形システム	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	生越 友樹	金沢大学・物質化学系・教授	1

A02 公	17H05148 柱型 $\pi$ 分子の2次元集積化による動的構造制御 $\pi$ 造形システム	平成29年度 ～ 平成30年度	生越 友樹	京都大学・工学研究科・教授	2
A02 公	15H00994 外部刺激による動的構造制御を特長とする $\pi$ 電子系ユニット不斉集積ポリマーの創成	平成27年度 ～ 平成28年度	長田 裕也	京都大学・工学研究科・助教	1
A02 公	15H00998 3回対称 $\pi$ 電子系による非相互貫入ヘキサゴナルネットの造形と構造・物性ダイナミズム	平成27年度 ～ 平成28年度	久木 一郎	大阪大学・工学研究科・助教	1
A02 公	15H01002 ディスクリートな $\pi$ グラフェンのテンプレート合成と機能性創出	平成27年度 ～ 平成28年度	藤ヶ谷 剛彦	九州大学・工学研究院・准教授	2
A02 公	15H01003 $\pi$ 造形システムの電子励起状態制御	平成27年度 ～ 平成28年度	羽會部 卓	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授	1
A02 公	17H05162 励起状態制御を基盤とした光機能性 $\pi$ 造形システム	平成29年度 ～ 平成30年度	羽會部 卓	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授	1
A02 公	17H05134 発光性ベンディングクロミック結晶の開発と応用	平成29年度 ～ 平成30年度	関 朋宏	北海道大学・工学研究院・助教	1
A02 公	17H05144 先進印刷技術を用いた層状分子集積システム構築と $\pi$ 電子機能の創出	平成29年度 ～ 平成30年度	長谷川 達生	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・教授	1
A02 公	17H05150 DNA骨格を利用した色素間相互作用の解析と機能性 $\pi$ 造形システムの創製	平成29年度 ～ 平成30年度	檜田 啓	名古屋大学・工学研究科・准教授	1
A02 公	17H05153 ヨウ素結合を利用した多孔性 $\pi$ 電子システムの構築とその熱電材料への応用	平成29年度 ～ 平成30年度	中野 義明	京都大学・理学研究科・助教	1
A02 公	17H05159 平面 $\pi$ 共役分子の革新的機能創出	平成29年度 ～ 平成30年度	灰野 岳晴	広島大学・理学研究科・教授	3
A02 公	17H05161 ヘテロ分子集積化技術を基盤とした $\pi$ 造形光科学の開拓	平成29年度 ～ 平成30年度	小野 利和	九州大学・工学研究院・助教	1

A02 公	17H05170 固液界面を利用した高制御性メゾスコピック $\pi$ 造形システムの構築	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	長谷川 裕之	島根大学・学術研究院教育学系・准教授	1
A02 公	17H05171 柔軟で稠密な $\pi$ 機能素材“繊維状単結晶”を使用した高機能発光導波路の創製	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	林 正太郎	防衛大学校・応用科学群・講師	1
A03 公	15H00984 機械的応力がもたらす $\pi$ 造形機能物質の巨大分極応答の探索	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	橋本 顕一郎	東北大学・金属材料研究所・助教	4
A03 公	17H05138 水素ダイナミクスと結合した $\pi$ 造形システムにおける確率共鳴による新規デバイスの創出	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	橋本 顕一郎	東北大学・金属材料研究所・助教	1
A03 公	15H00995 表面重合した新規ナノ炭素細線の分子レベル電子計測	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	坂口 浩司	京都大学・エネルギー理工学研究所・教授	1
A03 公	17H05154 表面重合した新規ナノ炭素細線の分子レベル電子計測	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	坂口 浩司	京都大学・エネルギー理工学研究所・教授	1
A03 公	15H00999 開殻超分子系の非線形光学効果の外部静電場印加効果の理論研究	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	中野 雅由	大阪大学・基礎工学研究科・教授	1
A03 公	17H05157 外部電場印加及び構造変化による開殻性の制御に基づく新規非線形光学分子系の理論設計	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	中野 雅由	大阪大学・基礎工学研究科・教授	1
A03 公	15H01000 非平衡状態下での分子振動と $\pi$ 電子輸送との結合による巨大ゼーベック効果の理解と制御	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	中村 雅一	奈良先端科学技術大学院大学・物質創成科学研究科・教授	3
A03 公	15H01005 $\pi$ 電子系強相関物質を用いた歪み制御型相転移デバイスの開発	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	須田 理行	分子科学研究所・協奏分子システム研究センター・助教	2
A03 公	17H05168 $\pi$ 電子系単分子膜 FET における歪み誘起相転移現象の探索	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	須田 理行	分子科学研究所・協奏分子システム研究センター・助教	2

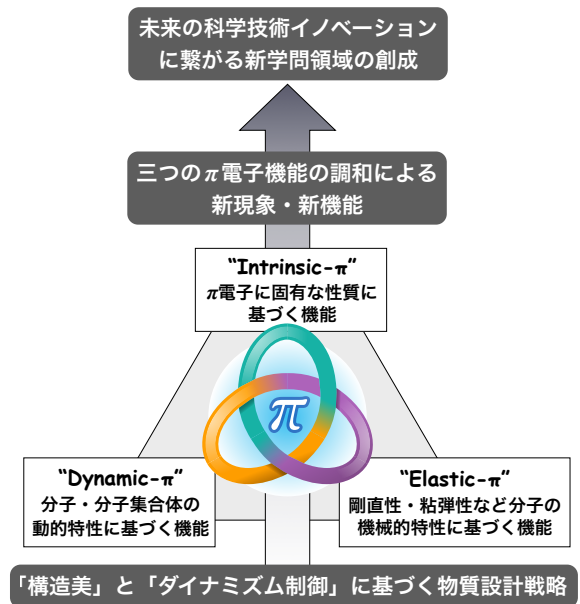


A03 公	15H01006 機械的刺激に応答する 光・電子機能 $\pi$ 造形分子 システムの理論設計	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	河東田 道夫	理化学研究所・計算科学研究機 構・特別研究員	3
A03 公	17H05169 全自動 $\pi$ 造形シミュレーシ ョンによるメカノクロミック 分子の探索	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	河東田 道夫	早稲田大学・理工学術院・客員主 任研究員	3
A03 公	17H05139 球と面の複合 $\pi$ 造形によ る超伝導体と量子磁性体 の開発	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	プラシデス コスマス	大阪府立大学・工学（系）研究科 （研究院）・教授	1
A03 公	17H05151 縮重 $\pi$ 電子系の異方的構 造制御と機能化	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	清水 康弘	名古屋大学・理学研究科・講師	3
A03 公	17H05158 電流と熱流の結合による 巨大ゼーベック効果の包 括的理解	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	小島 広孝	奈良先端科学技術大学院大学・先 端科学技術研究科・助教	3
A03 公	17H05167 有機界面設計に基づく新 奇 $\pi$ 機能の創成と制御	平成 29 年度 ～ 平成 30 年度	山根 宏之	理化学研究所・放射光科学研究セ ンター・研究員	1
公募研究 計 61 件					

# 1. 研究領域の目的及び概要（2ページ以内）

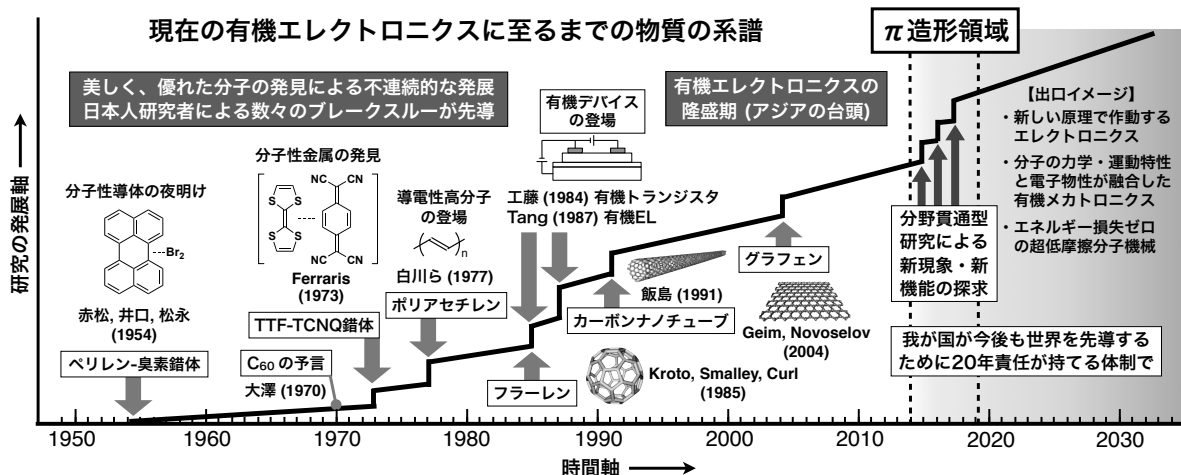
研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時に記述した内容を簡潔に記述してください。どのような点が「我が国の学術水準の向上・強化につながる研究領域」であるか、研究の学術的背景（応募研究領域の着想に至った経緯、応募時までの研究成果を進展させる場合にはその内容等）を中心に記述してください。

π造形科学とは、電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出を目指した新学術領域である。π電子に固有な電気・光・磁気物性などの電子機能（Intrinsic-π機能）に、分子や集合体特有の運動性（Dynamic-π機能）や摩擦・粘弾性などの機械的特性（Elastic-π機能）を加えた新たな視点からπ電子機能を捉える。これら三つの機能の調和を、「構造美」と「ダイナミズム」を物質設計の基本概念として、破格の設計自由度をもつ分子性物質で具現化する（=π造形）。「理論シミュレーション・モデル化」⇔「物質創製」⇔「物性計測」の双方向ベクトルをもつ協働研究により、新現象・新機能の探求を強力に推進する。そして、合成・物性・理論の研究者による分野貫通型研究により、次世代機能物質科学の新たな潮流を拓く学問領域を創成することを本新学術領域のミッションとした。



## 【学術的背景と我が国の学術水準の向上・強化へ向けた取り組みについて】

昨今有機エレクトロニクスが隆盛を極め、実用化へ向けた研究開発が世界中で活発に繰り広げられている。「エレクトロニクスはシリコンを中心とする無機物質の世界」という従来の常識を覆し、この新しい研究領域を開いたのはπ電子系科学の発展である。例えば有機導体研究の系譜（下図）から明らかなように、我が国の研究者が数々のブレークスルーを成し遂げ、この科学分野を先導するとともに、不連続的発展に貢献してきた。しかし、合成・分析技術と情報化が格段に進歩した現在、先端技術と強大なマンパワーを享受できる中国をはじめとするアジア各国は急速に研究の速度を向上させ、結果として、有機エレクトロニクスの分野も熾烈な競争にさらされている。例えば、中国からの有機エレクトロニクスに関する2011年の発表論文数が、我が国の10倍に達している事実は注目すべきである。一方、論文の被引用回数を比較するとほぼ等しい。この現状に鑑みると、将来の科学技術にとって破格に重要な学術領域であるπ電子系科学を、我が国が引き続き牽引していくためには、「数ではなく、質の高い研究」を迅速に推進するしか道はないと考えた。事実、我が国の学術水準の向上・強化へ向け、(1)革新的物質設計手法の開発、(2)革新的研究手法の開発、(3)戦略的人材育成を喫緊に推進すべきという、科学技術振興機構研究開発戦略センター（JST-CRDS）からの提言がなされていた。本新学術領域はその先駆けとして、「π造形」という、構造美により機能を追求する物質設計の新概念を基盤とし、「合成化学」、「物性科学」、「理論科学」という3つの学理を貫通させた研究手法により、他の追従を許さないスピードで新機能物質創製に取り組んだ。さらに、本領域独自の攻めの若手人材育成策も推進することで、未来の科学技術イノベーションに通じる物質科学の新学問領域創成を目指した（下図は応募時の申請書で示した図をそのまま引用）。



### 【応募領域の着想に至った経緯等】

本領域に関連する新学術領域として、平成 24 年度（2012 年度）まで実施された「高次  $\pi$  空間の創発と機能（ $\pi$  空間領域）」があった。この領域は、これまで当該分野をリードしてきた 50~60 歳代の研究者を主体に、1500 報を超える原著論文を発表した極めて生産性の高い領域であり、成功裏に終了した。「科学技術・学術審議会学術分科会研究費部会での審議：科学研究費助成事業の在り方について」にあるように、新学術領域研究は新展開を目指す後継領域の採択が肯定的に捉えられている。本領域では、 $\pi$  空間領域の質の高さを継承しながらも、以下の表に記載した新指針に基づき、研究内容と体制を刷新して臨んだ。

表.  $\pi$  空間領域から  $\pi$  造形領域への進化

$\pi$ 空間から $\pi$ 造形へ	「空間」と「場の制御」を基本概念とする Intrinsic- $\pi$ 機能創成から、「構造美」と「ダイナミズム」を基本概念とする Intrinsic- $\pi$ /Dynamic- $\pi$ /Elastic- $\pi$ が調和した新現象・新機能の創成へ
分子化学から物質科学へ	「合成化学」、「構造有機化学」の手法による分子化学から、「合成化学」、「物性科学」、「理論科学」の三学理を貫通させた研究手法による物質科学へ
継続性を重視した体制	新学問分野創成に必要な長期的研究に責任を持てる 30~40 歳代の研究者（申請時平均年齢 44 歳）を中心とした体制と攻めの人材育成へ

### 【研究期間における取り組み】

本領域名の「 $\pi$  造形」は単なる分子合成や集合体構築を意味するものではない。この領域名には、「歴史的なブレークスルーをもたらし、分野創成に寄与した優れた機能分子は、全てシンプルで均整のとれた構造美を有する」という事実を物質設計概念に取り入れる意志が込められている。もう一つの重要な概念は「ダイナミズム」であり、この言葉は「秘めたエネルギー・活力・動き」を意味している。すなわち「 $\pi$  造形領域」は、「構造美」と「ダイナミズム」を併せもつ革新的機能物質の創製を目指している。具体的には、柔軟な  $\pi$  電子系分子が有する可変性・可撓性に焦点を当て、「分子構造の変化＝異性化」とする従来の概念から脱却し、単一分子・分子集合体の構造変化に伴う様々な現象を三つの  $\pi$  電子機能として捉えた。

- (1) **Intrinsic- $\pi$** ：分子の大きな動きに依らない  $\pi$  電子に固有な性質に基づく機能
- (2) **Dynamic- $\pi$** ：分子・分子集合体に特有の動的特性に基づく機能
- (3) **Elastic- $\pi$** ： $\pi$  電子系分子の剛直性、粘弾性などの力学・機械的特性に基づく機能

$\pi$  電子系物質に能動的または受動的に生じる動的 (Dynamic- $\pi$ )、機械的 (Elastic- $\pi$ ) 変化は、電子機能 (Intrinsic- $\pi$ ) に摂動を与えるため、これら三つの機能の調和による新物質システムを探求する。例えば、Intrinsic- $\pi$  と Dynamic- $\pi$  の調和による熱分子モーターや、Intrinsic- $\pi$  と Elastic- $\pi$  の調和による異方的エネルギー輸送など、同種・異種物質間での摩擦・圧力などの相互作用や協奏的構造変化を引き金とする非線形的な新現象・新機能を探求する。そこで「 $\pi$  造形科学の概念」を具現化するため、A01 ( $\pi$  分子造形) 班は、独自の有機合成技術を駆使し、 $\pi$  分子造形の基盤となる新規分子骨格を創製する。A02 ( $\pi$  造形システム) 班は、独自の分子集積化技術を駆使し、ナノ~メゾ~マクロスケールの次元性をもつ  $\pi$  造形システムを構築する。A03 ( $\pi$  造形理論・計測) 班は、独自の計測技術、素子形成、シミュレーション技術を駆使して  $\pi$  造形分子・システムが示す様々な調和機能の予測・設計・解明を行う。研究期間を通じて一貫して「理論シミュレーション・モデル化」⇔「物質創製」⇔「物性計測」の双方向ベクトルによる分野貫通型研究を推進し、新機能物質創製と新学問領域創成を目指した。

### 【領域の発展につながる研究人材の育成】

新現象・新機能創出の土台を築くべく、次世代を担う人材育成に力を入れた。新発見は、旺盛な野心、豊かな感性、異分野の吸収力をもつ若手研究者が好奇心駆動型研究を集中的に行うことで生まれる可能性が高い。そこで、「若手研究会」に加えて領域内・外研究者を対象とした「中長期滞在型共同研究」推進のための新インターンシッププログラム「 $\pi$  造形スクール」を開設した。これらを通じて、大学院生も含めた活発な交流・議論の場を提供し、異分野間の価値観共有や斬新なアイデア創出を促進した。これらの人材育成の取り組みにより、複数の学理を身に付けた「マルチリンガル」な若手の育成を目論んだ。

### 【国際共同研究加速に向けた取り組み】

本領域は、 $\pi$  電子系分子機能材料の設計から物性展開までを包括的に、網羅的に進めることのできる世界的にも有数の研究者集団である。そこで、本領域の研究成果を世界に発信するとともに、関連分野の最新情報や知見を集約することを目的に、本領域では平成 27 年度から国際活動支援班を設けた。本国際活動支援班の活動により、世界に先駆けて、 $\pi$  造形分子設計図を手に入れるとともに知の集積を進め、領域内、領域外の協働研究を通じた国際共同研究ネットワーク（「 $\pi$ -HUB」と呼ぶ）の形成を推進した。

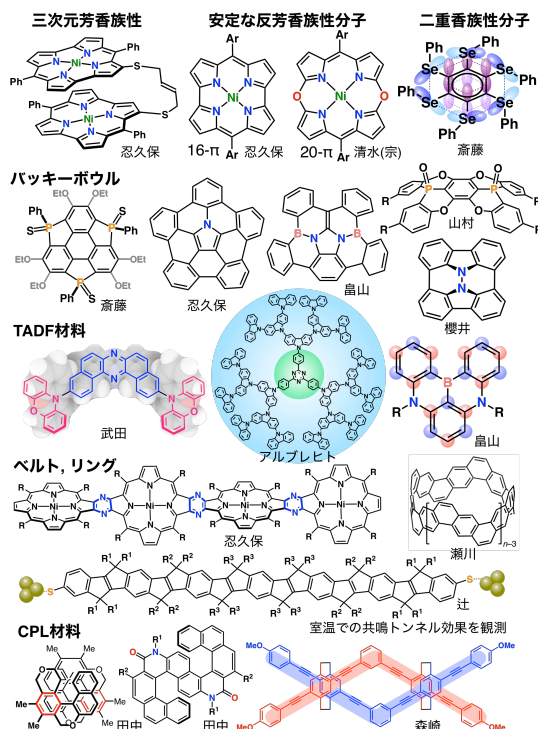
## 2. 研究領域の設定目的の達成度（3ページ以内）

研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らしての達成度合いについて、具体的に記述してください。必要に応じ、公募研究を含めた研究項目ごとの状況も記述してください。

**研究項目 A01(π分子造形)** A01班では、優れた有機合成技術をもつ研究者を組織し、新たなπ電子機能創出の礎となる新規分子骨格を創製することをミッションとした。具体的には、湾曲構造、らせん構造、反芳香族性などの特徴をもつ独自の分子や、π電子骨格に安定ラジカル(スピニュニット)や典型元素を組み込むことで、特異な電子構造の発現を可能とする分子などをターゲットとし、これらを具現化する力量ある計画研究者を配置した。さらに、平成27年度に11名、平成29年度に12名の公募研究者を迎えて組織を拡充し、「新規なπ造形分子ライブラリの構築」に向けた研究を展開した。研究期間を通じて、計画班・公募班問わず、各研究者はオリジナルの研究を追求するとともに、領域内共同研究の推進に大きく貢献した。本領域発足当初より、A01班が創製した分子をA02班によってシステム化し、そのシステムをA03班が計測・解析するというかたちの研究者協働を推進してきたが、実際には想定以上に多彩かつ多くの共同研究が立ち上がった。重要なことには、A03班の理論研究者が提案した分子システムをA01班が具現化することで、顕著な成果に繋がった点が挙げられる。この事実は、本領域研究の推進に不可欠な双方向ベクトル型の協働研究体制が円滑に機能したことを明確に示している。研究項目間の連携に加えて、本領域に見られるユニークな共同研究の形態として、合成化学者同士の共同研究が実現していることも挙げられる。A01班の研究者がそれぞれ独自の分子技術を提供し合い、単独では達成し得ない新分子が生まれるなど、当初の期待以上に研究開発が進展した。

主な成果として、第一に、反芳香族分子による「3次元芳香族性」を初めて実験的に実証したことが挙げられる(忍久保/清水(宗)/A02久木/A03中野との協働)。この課題は本領域採択時に審査所見でも期待する点として挙げられていた重要なミッションであった。また、反芳香属性を示す安定な種々のポルフィリノイドの合成(忍久保、清水(宗))と特異な電気物性解明(忍久保/A03木口との協働)など、これまで未知であった反芳香族性物質の物性研究にも大きな進展が見られた。加えて、「二重芳香属性」を示す分子の発見(斎藤)、歴史に残る世界初の「カーボンナノペルト」合成(瀬川)、複数のグループから生まれた独自のバッキーボウル合成(忍久保、櫻井、斎藤、山村、畠山)、バッキーボウルのElastic-π機能の発見(櫻井/A03木口との協働)、捻れたポルフィリン多量体の合成と外部刺激によるキラリティ制御(忍久保/A02久木との協働)、「世界初」のメビウス状のπ電子系分子の触媒的不斉合成(田中)、不斉合成による高性能円偏光発光分子の開発(田中/A02竹内との協働、および森崎)、多官能性シクロパラフェニレンの合成とナノチューブ生成(田中/A03木口との協働)、高性能熱活性化遅延蛍光(TADF)分子の開発(畠山、武田、アルブレヒト)などの成果は、関連分野におけるマイルストーンと位置付けられる。さらに、分野融合による量子コンピュータ素子としての可能性を有する内包フラーレンの合成(村田/A03多田との協働)や常温で作動する分子素子の開発(辻)などは、将来の分子素子のモチーフを提供するものである。以上、A01班は、「π造形」の設計概念を基盤とする分子創製にとどまらず、有機化学における最も基本的な概念の一つである芳香属性に関する新学理構築から、Elastic-π機能の観測、社会実装された分子の創製、学理融合による新物質開拓に至る、広い分野でインパクトある成果を挙げており、設定した目標は十分達成できたと考えている。

**研究項目 A02(π造形システム)** A02班では、π電子系分子および高分子を対象とし、独自の分子集積化技術により、π電子雲の空間的配置や配向を合目的的に制御し、ナノ～メゾ～マクロスケールの次元性を有する分子集合体を造形し、新現象・新機能を探ることをミッションとした。計画研究では、外場応答する強誘電体・弾性体、分子配列の乱れを極限まで低減可能な大規模二次元分子集積体、π共役高分子鎖間相互作用の自在制御による階層組織体、リング・らせんなどの精緻な微細構造を有するナノ分子集積体を造形する技術基盤を有し、関連分野で世界的な成果を挙げてきた研究者を配置した。平成27年度には9件、平成29年度には14件の公募研究者が参画し、溶液～薄膜～単結晶に至る多様な分子集合体にお



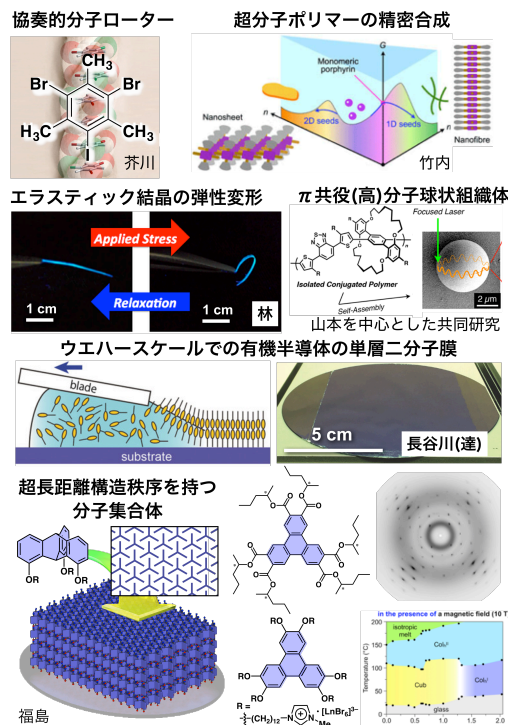
るキャリア輸送、発光特性、光応答、強誘電応答などの機能開発を実施する体制を整えた。A02 班では、合成化学にも熟達した研究者による独自性の高いテラーメイド分子も多く見出されている。Intrinsic- $\pi$ 、Dynamic- $\pi$ 、Elastic- $\pi$  機能を分子集合体の視点から捉え、特に本領域が新たに設定する Dynamic- $\pi$ 、Elastic- $\pi$  機能を精力的に探求し、結果として、これまで未知の分子集合体の振る舞いを多く発見するに至っている。計画研究による分子集合体の超長距離構造秩序制御、Dynamic な分子集合体の機能創製、ならびに超分子ポリマーの機能-形態制御については、計画研究者間の協働のもと、当初の計画以上の進捗があった。さらに、公募研究者らとの協働により、分子間相互作用の空間制御や配向を制御するための手法に関する提案が数多くなされた。A01 班で造形された  $\pi$  電子系分子を集積化によりシステム化する取り組みや、卓越した計測技術を有する A03 との協働による新機能、新現象の発掘も着実に進んだ。事実、全研究期間を通して、A02 班が関わる領域内共同研究の割合が最も高く、このことは、A02 班が領域研究の効果的なメディエーターとして機能したことを示している。

顕著な成果の例として、Dynamic- $\pi$  機能を明確に体现する協奏的分子ローター（芥川）、有機強誘電体（芥川、原田）、水素結合ダイナミクスを利用した発光性強誘電体（芥川/A03 関/足立/竹延との協働）の開発、動的なお椀型分子の一次元集積化による新規液晶の開発（福島/芥川/A01 櫻井との協働）、コーン型分子の一次元集積化（山本/A01 山村との協働）、「世界初」の超分子リビング重合や Intrinsic- $\pi$  機能を引き出す被覆  $\pi$  共役高分子の開発（竹内/A03 関との協働）、「世界初」の配列制御超分子ポリマー（灰野）、ナノスケール光応答性超分子ポリマーの創製とメソスケールにおける動的挙動の発見（矢貝/A03 関、足立との協働）、ピラーアレーンの創始者による数々の先駆的研究（生越/長田/A03 多田との協働）、結晶状態における Elastic- $\pi$  機能の発見（林、関(朋)）、均一な  $\pi$  共役高分子球状組織体における共鳴発光現象の開拓（山本/竹内/A03 関/A01 桑原/A01 アルブレヒト/A01 山村/A01 辻との協働）、特異なナノ構造体の創製（山本/A01 森崎との協働）、ウエハースケールでの有機半導体の単層二分子膜化（長谷川(達)）などが挙げられる。これらの例に加え、公募研究者らにより、有機分子集合体における光、電気、磁気物性、などの Intrinsic- $\pi$  を深化させる研究成果が得られている。

本領域は新しい学理構築につながる新現象発掘も重要なミッションとしていた。福島らは独自の設計により、数ミリ~数センチメートルにも及ぶ超長距離構造秩序を発現する三つの分子集合体のシステムを見出している（A03 足立、A03 関との協働）。このスケール感を実世界に例えれば、畳をユーラシア大陸に境界領域なく敷き詰めるに等しい。それ自体新現象であるが、この発見に基づき、従来想定されたことのない新構造を示す液晶、磁場による反磁性分子集合体の相の書き換え、結晶・液体・液晶の性質（動的かつ弾性的性質）を併せ持つ新物質など、これまで知られている分子集合体の科学では説明できない性質を示す物質を見出している。基礎科学的興味はもちろん、新物質創製の足がかりになる可能性を秘めた成果として位置付けられる。以上、低分子から高分子に至る多様な分子の集合状態を制御し、静的~動的~弾性的な分子間相互作用を利用することで、Intrinsic- $\pi$ 、Dynamic- $\pi$ 、および Elastic- $\pi$  機能の実現に成功した。従来、静的挙動が主な研究対象であった  $\pi$  電子系分子集合体の化学からの脱却を促し、動的および弾性的な分子集合体を対象とする新しい機能物質科学の学理構築に貢献する十分な成果を挙げたと考えている。

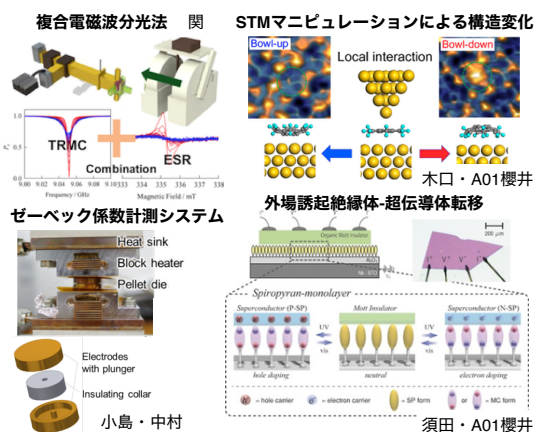
**研究項目 A03(  $\pi$  造形理論・計測技術 )**

A03 班では、独自の計測評価、素子形成、シミュレーション技術の開発を通じて、 $\pi$  造形分子・システムが示す様々な電気・光・磁気・力学・構造物性を、計測・理論・デバイスの視点からアプローチし、新現象・新機能を発掘することを研究期間全体の最終目標として研究を展開した。Intrinsic- $\pi$  の持つ可能性を明らかにするための複合電磁波分光法や電界効果素子法(関)、Elastic-、Dynamic- $\pi$  による反応と機能を明確にするための単分子非弾性トンネル電子分光法(木口)、時間分解放射光 X 線回折(足立)などの手法は、 $\pi$  造形分子の「かたち」「変形」「動き」を機能として引き出す上で極めて重要な役割を果たした。例えば、分子性固体中での電子バンド伝導、分子性固体中での電子相関状態、単分子の界面構造と運動状態、単分子レベルの配向状態など、事象の観測や解明などに貢献した。分子・分子集合体の本質的な性質を探る上記の計測手法に加え、領域研究から生まれた  $\pi$  造形分子システムのデバイスへの実装(竹延)は、これらの機能や物性をより巨視的、複合的、応用的な観点から捉えるために欠かせないツールを提供した。理論的側面からは、造形された分子の電子状態・構造を予



見するシミュレーション法の確立（杉本、多田、佐々木）や、Dynamic- $\pi$  機能を巨視的スケールで利用する機械的特性の理解（佐々木）を進めた。平成 27 年度からは 6 件の、平成 29 年度からは 9 件の公募研究者を迎え、研究期間前半の計画研究・公募研究で特に重点的な研究展開が必要と考えられた表面分子計測技術（坂口、山根）、強相関（橋本、清水（康））・開殻分子系の光物性（中野）、熱電変換システム（中村、小島）、巨大分極応答性・機械刺激の理解（須田、河東田）、量子物性（橋本、コスマス）などの分野において、充実した研究推進体制を構築した。結果として、分子空隙の影響、熱-エントロピー制御、強い相互作用の積極的導入による物性制御といった、 $\pi$  電子系分子固体材料の電子物性を最適化するための具体的な造形指針が提供された。

A01、A02 班の具体的な成果項目として既に記載したように、 $\pi$  造形分子合成（A01）、 $\pi$  造形システム構築（A02）と、物性計測・理論（A03）の研究者間連携は、当初の予想を超えて順調に進行した。加えて、A03 班の取り組みをより特徴付ける成果として、X 線散乱法による分子集合体の動的挙動説明（足立/A02 福島/A02 矢貝の協働）、 $\pi$  造形されたホールドーパントを用いたナノ材料の高伝導化とデバイス化（竹延/A02 福島の協働）、 $\pi$  造形分子を利用した高機能発光電界セルの開発（竹延/A01 アルブレヒトの協働）、光、電界や機械的刺激を利用した有機絶縁体-超伝導体転移の実現（須田/A01 櫻井との協働）、キラル分子によるスピン偏極電流の生成と制御（須田/A03 小島との協働）、三角格子分子性導体における電子のガラス化と結晶化過程の解明（橋本/A02 上田/A03 足立との協働）、バッキーボウルを含む分子性固体における巨大ゼーベック効果の発見（中村、小島/A01 櫻井との協働）、独自の化学気相成長法による新規グラフェンナノリボンの精密合成と物性計測（坂口）などが挙げられる。 $\pi$  造形分子・分子集合体を用いた精密構造解析と物性計測を通じて、広い分野に大きなインパクトを与える数々の新機能・新現象が見出されている。本領域計画において検討項目として掲げた熱物性に関しても、応用上の鍵となる熱電変換機能に関する重要な発見が得られている。機能物質科学における新潮流を生み出すポテンシャルを秘めた成果創出が果たされており、設定した目標は十分達成できたと考えている。



「理論シミュレーション・モデル化」⇔「物質創製」⇔「物性計測」の双方向ベクトルをもつ協働研究の推進を掲げた本領域において、理論主導型の研究展開については、本領域発足時から中間評価までは審査員からの留意事項に挙げられていた。しかし後半では、理論系研究者から実験研究者に向けたいくつもの提案がなされ、本領域研究推進の大きな駆動力となった（理論主導型の研究例は、「4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況」に具体的に記載）。

**設定目的の達成度の総括** 本領域の大きな目的は、「有機トランジスタ、有機 EL、有機薄膜太陽電池など、有機エレクトロニクス一辺倒になっている」昨今の  $\pi$  電子系科学研究に対し、 $\pi$  電子系分子・分子集合体の本質を、「Intrinsic- $\pi$ 、Dynamic- $\pi$ 、Elastic- $\pi$  という新たな視点」から探り、この分野の予想される発展軸とは異なる不連続性をもたらす（1. 研究領域の目的及び概要の図参照）新機能や新現象を発掘し、学理構築のシーズを見出し、育てることであった。そのために設定した、化学者の目から見た「構造美」を分子デザインに積極的に取り入れるという「 $\pi$  造形」という概念は領域内研究者全員に浸透し、Intrinsic-、Dynamic-、Elastic- $\pi$  全てにおいて数々の新たな性質、機能、現象を発現する分子ライブラリの構築に至った。研究手法として掲げた「理論シミュレーション・モデル化-物質創製-物性計測の双方向ベクトルをもった分野貫通型研究」は、特に後半になって実を結び、理論主導型研究を実現できたことは、領域研究者が一体感をもって研究に取り組んだことの証左と考えられる。本領域が提案した真に新しい機能概念である「Elastic- $\pi$ 」については、一分子レベルと分子集合体レベルに分類して捉えることで明確に提示することができた（Elastic- $\pi$ 機能の明確化については、「4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況」に具体的に記載）。

以上、卓越した個々の研究成果とともに、全体としても一貫性と進歩性のある研究成果が得られ、設定目標は不足なく達成できたと考えている。結果として、領域内研究者による総発表論文総 1271 報（うち領域内共同研究論文 130 報、および国際共同研究加速基金（ $\pi$ -HUB）による計画研究者の国際共同研究論文 58 報）の実績を挙げる事ができた。論文発表実績が示す研究の成果に加え、本領域で構築された研究者ネットワークから生まれた発展的課題提案、本領域が初めて導入したインターンシップ制度を通じた充実した若手育成、実用化されたまたはその途上の物質系の創出など、いずれも、当初の予想を大きく超えて円滑に領域研究を推進できたと考えている（本新学術領域活動を総括、概観した図を「9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度」の項に示した）。

### 3. 研究領域の研究推進時の問題点と当時の対応状況（1ページ以内）

研究推進時に問題が生じた場合には、その問題点とそれを解決するために講じた対応策等について具体的に記述してください。また、組織変更を行った場合は、変更による効果についても記述してください。

本研究領域では、全研究期間を通じて対応すべき問題が生じることなく想定以上に円滑に研究が推進でき、組織変更も行なっていないため、本項目は該当しない。

#### 4. 審査結果の所見及び中間評価の所見等で指摘を受けた事項への対応状況（2 ページ以内）

審査結果の所見及び中間評価において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

応募時の審査結果の所見、および中間評価時の評価結果の所見を以下に示し、指摘事項には下線を付けた。

**応募時** 本研究領域は、日本の誇るべき研究分野からの申請であり、「高次パイ空間の創発と機能開発」で培った若手の成果からさらに発展させようとする意欲的な提案である。先行の「高次パイ空間の創発と機能開発」からの進化についても整理されており、 $\pi$ 系での新構造化学、三次元芳香族性など、新しい概念に加えて、物性面での実力のある研究者を加えて、白川ポリアセチレン以降の大成果を目指している。この分野は新材料の開発に関係しており、今こそ新しい概念、理論構築の提案が極めて重要で、領域計画書はそういった意欲が盛り込まれたものとなっている。有機エレクトロニクス、有機メカトロニクス、ゼロエミッション超低摩擦分子機械などの応用に繋がる研究領域であり、科学技術イノベーション総合戦略との関連性も高く、新学術領域として推進するに相応しい。準備状況についても問題なく、領域代表者のマネジメントの実績も充分である。一方で、(1)理論と実験の共同体制が明確でなく、実施においては連携の強化が望まれる。長い歴史のある分野の単なる継承を打破して、急発進するためには、各研究計画班の強い問題意識が必要であり、出口のはっきりした方向性を維持しなければならないが、(2)各研究項目どうし、各研究者どうしの融合的連携によりこうした点を克服し、時代を切り開いてゆくことを期待したい。

**中間評価時** 研究領域の設定目的に向けて、合成化学、超分子化学、理論・計算科学などを専門とする幅広い分野の研究者が協働し、 $\pi$ 電子に固有な電子機能 (Intrinsic- $\pi$ 機能)、運動性 (Dynamic- $\pi$ 機能) および機械的特性 (Elastic- $\pi$ 機能) という観点から、新物質・新機能の探求および新現象の発掘を目指す研究に取り組んでいる。対象とする3つの $\pi$ 電子機能のうち、(3)Elastic- $\pi$ 機能の研究は研究期間後半の課題として残しつつも、Intrinsic- $\pi$ 機能とDynamic- $\pi$ 機能の研究に関しては、既にすぐれた成果が数多く得られており、領域代表者の強力なリーダーシップの下、順調に研究が推進されている。(4)審査所見において指摘された連携の強化に関しては、若く精鋭な研究者による共同研究が奨励されており、それぞれの研究者固有の成果のみならず、グループ間の共同研究の結果として研究領域全体にまたがる成果が出ていることは高く評価できる。また、 $\pi$ -HUB の構築に向けて円滑な国際活動支援が進んでおり、若手研究者育成のための取組やアウトリーチ活動も精力的に行われていると認められる。本研究領域では構造美を持つ分子を起点とする機能創出研究が主に行われているが、(5)双方向ベクトル型の研究者協働として、新機能を有する分子を理論的に設計し、導出するアプローチにも取り組むことが望まれる。

#### ①応募時の審査結果の所見（下線部1）と中間評価時の評価結果の所見（下線部5）で指摘された「理論と実験の研究者協働、連携強化」について

応募時の所見を受け、全計画研究者で連携意識の共有を持つとともに、各理論系研究者にそれぞれの本領域内における役割を再確認した。平成27年度には、公募研究者として、大規模計算と第一原理計算を専門とする河東田、開殻分子系の計算における世界のリーダーである中野が参画した。これにより広範囲の理論分野をカバーする体制を構築することに成功している。そして、連携強化を目的とする非公開の領域全体会議（合宿形式での徹底討論会）を通じて、自由で闊達な議論が行われた結果、発足前はわずかに4件しか無かった理論-実験系研究者間の共同研究が、公募研究者も含め、中間評価時には26件（杉本11件、多田4件、佐々木3件、中野4件、河東田4件）にまで増加した。しかしながら、中間評価時点では評価結果の所見にも見られるように、実験研究者の結果を理論系研究者が解釈のサポートをするという、従来型の「実験→理論」という一方向ベクトルの研究がほとんどであったことは否めない。そこで中間評価以降は、領域全体会議の際に、理論系からの物質設計提案を強く意識する議論を展開した結果、研究機関後半にかけて、多くの「理論→実験」のベクトルをもった研究が立ち上がった。結果として、双方向ベクトルの「理論」⇔「実験」研究は82件（杉本22件、多田18件、佐々木5件、中野15件、河東田22件）にまで上った。以下に理論から提案された研究例について記載する。

**分子量子ビットの提案：**量子コンピュータに必要とされる量子ビットとして、A03 多田は表面上吸着分子の自己組織性を利用した分子スピン集積系（量子ビット集積系）を提案し、その単一ユニットに求められる分子特性（スピン状態の安定保持と確実な状態操作）をもつ分子を理論設計した。これを受けて A01 村田は酸素内包分極性フラレン（分極性 $\pi$ ケージで酸素分子を内包した分子）を合成し、この分子が量子ビットに必要とされる特性を有していることを実証した (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 4261)。

**金属-分子コンタクトの提案：**理想的な分子三脚の提案：A03 多田は、高規則的かつ高密度に金属基板表面を分子で化学修飾するための理想的な三脚型分子を、A02 福島が推進していたトリプチセンで実現できる可能性を提案した (*J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 4401)。実際、この提案に基づいて合成された分子は、理想的なジオメトリーで金表面に安定に吸着することが実証された (*J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 5995)。さらに、多田は、吸着構造と電子状態がロバストに規定できる金属-分子コンタクトを設計し、A01 斎藤が



具現化した (*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5787)。

## ②応募時の審査結果の所見 (下線部 2) で指摘された研究項目・研究者間の融合的連携について

「2. 研究領域の設定目的の達成度」の項で既に記述したように、本領域では研究項目・研究者間の融合的連携は円滑に進み、多くの共同研究成果を生み出した (詳細は「7. 研究組織と各研究項目の連携状況」にも記載)。この事実は、中間評価時の評価結果の所見 (下線部 4) で高く評価されている。

## ③中間評価時の評価結果の所見 (下線部 3) で指摘された Elastic- $\pi$ 機能の明確化と展開

Elastic- $\pi$  機能は本領域が初めて提案した概念であったため、研究当初は「この概念をいかに捉えるか?」という点を領域研究者間で共有できていなかった感がある。しかし、領域研究の実施過程で、「一分子レベルの Elastic- $\pi$  機能と分子集合体の Elastic- $\pi$  機能を区別して捉える」という方向性を定めて以来、この機能の解釈や機能探索の手法が明確化された。結果として、一分子レベルでは、A03 木口が中心となって推進した「化学刺激によるお椀分子 (A01 櫻井との協働) または歪み分子 (A02 福島との協働) の可逆的構造変化とそれに伴う電導性の変調の観測 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 12142) など、一分子レベルで、Intrinsic- $\pi$  と Elastic- $\pi$  機能が調和した系を見出すに至った。A03 佐々木の、お椀型分子の固体表面吸着構造のナノ力学 (摩擦、潤滑) に関する理論研究も一分子 Elastic- $\pi$  機能に当てはまる。さらに、分子集合体ではより広くこの概念が適用でき、 $\pi$  電子系からなる Elastic 結晶 (A02 林、A02 関)、有機モット絶縁体の歪み効果による電界誘起両極性超伝導転移の初観測 (A03 須田)、ナノ構造体のトポロジ変化 (A02 矢貝) など、多数の Elastic- $\pi$  機能に由来する現象の発見に繋がった。A02 福島が最近見出した、自発的単結晶状液滴形成とキラル流動は、Elastic- $\pi$  機能と Dynamic- $\pi$  機能が絶妙に調和して起こる新現象と言える。

### 【中間評価で受けた留意事項(非公開情報)への対応】

- ・ 本領域研究を円滑に発展させるためには、どんな構造であれば期待する物性が発揮されるのかを理論的に予測する研究も必要である。研究項目 A03 の理論グループから理想の分子構造を提案してもらい、その合成と機能評価を行うアプローチが求められる。

=> 上記①の項目で既に記載。

- ・ 研究項目 A03「単一  $\pi$  造形システムの物性解明」については、研究遂行のための人的補強が必要である。

=> 研究費の制約のためポスドク等の人的補強は現実的に困難であった。しかし、研究期間を通じ 102 報の論文を発表しており、本領域研究に対する貢献は絶大であった。

### 【中間評価で受けた参考意見への対応】

- ・ 研究項目 A01「バッキーボウルをモチーフとする湾曲  $\pi$  造形」については、理論化学者の支援を得て、望ましい曲面  $\pi$  電子構造を新たに追求することが期待される。

=> 上記①の項目で記載したように、光機能に関して望ましい構造提案が中野によりなされている。

- ・ 研究項目 A02「大規模分子集積による巨視的  $\pi$  造形システム」については、分子の配列構造と物性の関係を共同研究により明らかにすることが期待される。

=> 多くの共同研究成果に加えて、自発的単結晶状液滴形成とキラル流動の発見でそれが結実している。

- ・ 研究項目 A03「複合電磁波分光法による  $\pi$  造形分子設計と電子機能予測」については、構造材料と物性発現との相関の解明にチャレンジし、そこから標的分子を提案する段階に進むことが期待される。

=> 高速電荷輸送特性発現の鍵が二次元非局在化  $\pi$  電子系にあることを明確化し、イオン対を用いた合理的かつ汎用性の高い二次元集合構造の構築法を A02 芥川とともに開発した。

- ・ 有機 EL や有機太陽電池が実用化段階にある現状において、本研究領域は何を明らかにするのか、何を目指すのかをより明確にした上で、研究を推進していくことが望まれるという意見があった。

=> 本研究の目的・設定目標、およびその総括は「2. 研究領域の設定目的の達成度」の項で詳述した。

- ・ 研究期間後半では、学理の確立と具体的な実用化へのアプローチが望まれるという意見があった。

=> A01 島山が開発したホウ素を組み込んで造形した分子が有機 EL 材料として実用化された。

## 5. 主な研究成果（発明及び特許を含む）〔研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理する〕

（3 ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果（発明及び特許を含む）について、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、図表などを用いて研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に整理し、具体的に記述してください。なお、領域内の共同研究等による研究成果についてはその旨を記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

各研究成果について、本領域が掲げる Intrinsic- $\pi$ 、Dynamic- $\pi$ 、Elastic- $\pi$  機能との関連を明確化するため、それぞれ <I>、<D>、<E> を付記した。また、計画研究者には実線で下線、公募研究者には点線で下線を付記した。

### 研究項目 A01( $\pi$ 分子造形)

**櫻井英博**: <I> <D> 歪んだ複素環骨格の特徴を生かした酸刺激応答性電子移動不均化反応の開発 (*Chem. Sci.* **2015**, *6*, 4160). <D> <E> お椀分子の湾曲構造と柔軟性を活かした、異方的圧力応答性水素結合ネットワークの構築 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 15294. A02 久木との共同研究).

**忍久保洋**: <I> 新規含窒素バッキーボウルの合成と  $C_{60}$  との錯形成 (*Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8215. A03 関との共同研究). <D> ねじれたポルフィリン多量体の合成と外部刺激によるキラリティ制御 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 142. *Chem. Asian J.* **2016**, *11*, 936. A02 久木との共同研究). <I> 反芳香族化合物の積層により三次元芳香族性の実証に世界で初めて成功 (*Nat. Commun.* **2016**, *7*, 13620. A01 清水、A02 久木、A03 中野との共同研究).

**田中 健**: <I> 高次アザヘリセンの不斉合成による高性能円偏光発光分子の創出 (*J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 5555. A02 竹内との共同研究). <I> ロジウム錯体触媒を用いた [2+2+2] 付加環化反応による多官能性シクロパラフェニレン誘導体の合成と、そのナノチューブ形成能の発見 (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 18900. A03 木口との共同研究). <I> ロジウム触媒を用いた分子間 [2+2+2] 付加環化反応を用いた高歪み  $\pi$  共役ケージ分子の合成に成功 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, DOI: 10.1002/anie.201903422).

**鈴木修一**: <I> 新規開殻性金属錯体の簡便合成法開発 (*Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, *28*, 4740). 基底四重項三核金(I)トリラジカル錯体の合成に成功し、ゼロ磁場分裂定数に対してスピン軌道相互作用が大きく寄与することを実証 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 10791).

**斎藤雅一**: <I> 磁性材料開発を指向したトリプルデッカー錯体の創製 (*J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 13059. A02 宮坂、A03 多田との共同研究に展開). <I> ヘキサセレンルベンゼンにて二重芳香族性を観測 (*Comms. Chem.* **2018**, *1*, 60). <I> 14 族二価化学種を主鎖に持つ配位高分子の異方性結晶の合成と、第二次高調波発生の観測 (*Organometallics* **2017**, *36*, 2487). <I> 表裏を持つトリホスファスマネントリスルフィドの合成と大きな面外異方的な電子物性を観測 (*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5787. A03 木口、A03 多田との共同研究).

**重野真徳**: <D> 繊維膜を形成する新規ヘリセンオリゴマーの合成 (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 17676).

**桑原純平**: <I> ハロゲンおよび有機金属官能基の双方を必要としない C-H/C-H クロスカップリング反応を用いた共役高分子合成法の開発 (*ACS Macro Lett.* **2018**, *7*, 90).

**小西玄一**: <I> 円錐交差を経由するメカニズムを利用した新しい凝集誘起発光色素の開発 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 8194, *J. Org. Chem.* **2017**, *82*, 6865).

**村岡貴博**: <D> <E> 熱応答性結晶多形現象を利用した動的  $\pi$  電子系材料開発に向けた熱応答性部位の詳細な解析 (*Chem. Asian J.* **2015**, *11*, 1028. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 969. *Chem. Asian J.* **2019**, *14*, 141. A02 福島・芥川との共同研究). <D> <E> 脂質二分子膜の張力に応答して可逆的に開閉する人工イオンチャネルの開発に世界で初めて成功 (*Langmuir* **2016**, *32*, 4546, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 18016).

**山村正樹**: <I> リン含有お椀分子およびそのお椀分子の集積化による新規  $\pi$  電子系液晶材料の開発 (*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2016**, *89*, 42. *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 4585. A02 山本との共同研究).

**辻 勇人**: <I> <D> 立体的に嵩高い芳香族ケトンの新カップリング反応の開発. テトラベンゾフラニルエテン類におけるソルバトクロミズムと凝集誘起発光現象の発見 (*Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 296). <I> 低い発振閾値と長寿命を併せ持つ炭素架橋オリゴフェニレンビニレン (COPV) をモノマーユニットとする  $\pi$  共役系高分子の合成 (*Macromolecules* **2018**, *51*, 2961. *Adv. Opt. Mater.* **2018**, 1800069). <I> COPV 類の単一分子電子計測により常温で共鳴トンネル電子輸送が起こることを世界で初めて実証 (*ACS Omega* **2018**, *3*, 5125).

**山下(アルブレヒト) 健**: <I> カルバゾール dendrimer のポテンシャル勾配を活かした塗布型熱活性化遅延蛍光材料を開発し (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 5677)、世界初の有機層全塗布型 TADF 有機 EL 素子 (*Sci. Rep.* **2017**, *7*, 41780. *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 2439. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 1097. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2018**, *10*, 33343)、世界最高の外部量子効率を示す電気化学発光セルの開発に成功 (*Chem. Mater.* **2017**, *29*, 6122. A03 竹延との共同研究). <I> dendrimer を利用した原子模倣型超分子ポリマーの開発 (*Sci. Adv.* **2016**, *2*, e1601414).

**森崎泰弘**: <I> 高異方性かつ高輝度に円偏光発光する面性不斉分子の開発 (*Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 2291. *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 6323. *Macromolecules* **2017**, *50*, 1790. A01 清水、A02 長田、A02 生越との共同研究).

**村田靖次郎**: <I> <E> フラーレン内部での孤立した水単分子、水二量体の実現 (*Nature Chem.* **2016**, *8*, 435. A03 多田との共同研究に展開). <I> 開口フルラーレン  $C_{60}$  内部への  $N_2$ 、 $CO_2$ 、および  $O_2$  の挿入と物性解明 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 14791. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 4261). <I> 1 個の水分子で水和されたフッ化水素分子を内包したフルラーレン  $C_{70}$  の合成に世界で初めて成功 (*Sci. Adv.* **2017**, *3*, e1602833).

**清水正毅**: <I> 高効率・長寿命で室温リン光を発するメタルフリー・ハロゲンフリー材料の開発 (*J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 11631. A02 羽曾部との共同研究).

**武田洋平**: <I> <D> 新規酸化反応を利用した TADF 材料、メカノクロミック材料、室温リン光材料の開発 (*Chem.*

*Commun.* **2018**, *54*, 6847, *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 2677, *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 6234). <I>リン架橋ポルフィリノイド (ホスファコロール)の合成と物性解明 (*J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 4800. A01 忍久保との共同研究).  
清水宗治: <I>アザポルフィリノイド骨格を有する拡張 $\pi$ 電子系化合物の合成 (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 2893. A03 関との共同研究, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 10639). <I>安定な反芳香族性分子であるジオキサポルフィリンの合成とその反応性の検討 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 9728).  
瀬川泰知: <I>カーボンナノチューブの部分構造をもつ筒状縮環芳香族炭化水素「カーボンナノベルト」の合成・単離・物性解明に世界で初めて成功 (*Science* **2017**, *356*, 172. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 10054).  
島山琢次: <I>含ホウ素縮環 $\pi$ 電子系化合物のワンポット合成と長寿命・高効率緑色有機 EL 素子の実用化 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 13581, *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 2777). ホウ素原子と窒素原子を2つずつ有するテトラベンゾコラニレンを市販品から短段階で効率的合成することに成功 (*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13562).

### 研究項目 A02( $\pi$ 造形システム)

芥川智行: <I><D>メゾ~マクロスケールの分子集合体中の分子間水結合ダイナミクスを利用した発光性強誘電体の開発 (*J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, *6*, 1813. A03 竹延との共同研究). <D>協奏的に駆動する分子ローターの開発 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 13115). <D>ヘリセン骨格を持つ分子を利用した優れた性能パラメータを有する強誘電材料を開発 (*J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2391, A01 重野との共同研究).

福島孝典: <I><D><E>空間充填モデルに基づく大面積・高秩序有機薄膜の合理的な構築法の開発と超分子足場や分子三脚としての応用 (*Science* **2015**, *348*, 1122. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 11727; *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13497. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 5995. A02 芥川, A03 関, A03 多田および  $\pi$ -Hub での国際共同研究). <I><D>湾曲拡張 $\pi$ 電子系骨格の一挙構築を可能にする新反応の発見とその応用 (*Nat. Commun.* **2016**, *7*, 12704. *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 12314. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 807.). <I><D>磁場の印加により相図が変化する液晶材料を発見 (*Nat. Commun.* **2018**, *9*, 4431). <I><D><E>液状単結晶物質:キラルトリフェニレンヘキサカルボン酸エステルの発見 (*Nat. Mater.* **2019**, *18*, 266).

竹内正之: <I>共役ポリマー1本の中のキャリアを安定化する分子設計の確立 (*Chem. Asian J.* **2015**, *10*, 1820. *Macromolecules* **2015**, *48*, 3928. *Chem. Asian J.* **2016**, *11*, 2284. *ACS Macro Lett.* **2016**, *5*, 781. A03 関, A03 杉本との共同研究)および電子輸送特性を示す近赤外吸収 $\pi$ 共役系化合物の開発 (*Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 7385. A03 関との共同研究). <D>超分子ポリマーの時間発展プログラムに成功 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 14363). 単一の分子から1次元および2次元の超分子ポリマーを作り分ける技術確立 (*Nat. Chem.* **2017**, *9*, 493. *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 2425. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 15465).

矢貝史樹: <D>光による分子集合体の螺旋反転およびらせん構造の消去 (*Nature Commun.* **2015**, *6*, 8936. *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15254. A03 足立との共同研究). <D>自発湾曲を有する超分子ポリマーの創製と溶液中の集合体の構造解析 (*Sci. Adv.* **2018**, *4*, eaat8466. A03 足立との共同研究).

原田 潤: <I><D>極性芳香族分子の電荷移動錯体結晶における面内回転運動による誘電応答の発見 (*Cryst. Growth Des.* **2019**, *19*, 291). <I><D> 柔粘性結晶を用いて分極方向の三次元制御と成形加工が可能な誘起強誘電体を開発 (*Nat. Chem.* **2016**, *8*, 946. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 346).

宮坂 等: <I>分子の授受で物性変化を起こす多孔性分子磁石の開発 (*Nat. Commun.* **2018**, *9*, 5420. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 5644).

山本洋平: <I> $\pi$ 共役分子・高分子からなる集合体の形成と共鳴発光、連結球体間での高効率放射エネルギー移動、共鳴発光とフォトンダイオード効果などの実現 (*Macromolecules* **2015**, *48*, 3928. A02 竹内との共同研究, *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 19635, *ACS Nano* **2016**, *10*, 5543. A03 佐伯との共同研究, *RSC Adv.* **2016**, *6*, 52854. A03 佐伯との共同研究, *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, *8*, 4580. A01 桑原, A03 河東田との共同研究. *Nano Lett.* **2018**, *18*, 4396. A01 辻との共同研究, *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 2534. A01 アルブレヒトとの共同研究).

上田 顕: <I><D>水素結合ダイナミクスおよびこれと連動した $\pi$ 電子物性スイッチング機能の制御 (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 15020)と、A03 橋本との密接な共同での物性解明.

生越友樹: <I><D>柱状 $\pi$ 分子 Pillararene を集積した分子レベルの空孔を有するマルチレイヤーの創製 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 10962, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 1544)と、その面性不斉を利用した不斉配位子の開発 (*Synlett.* **2018**, *29*, 2167. A02 長田との共同研究). <I><D>Pillararene の包摂挙動を利用したイソオクタン、ポリエチレンオキシドの新規精製法開発 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 1592; *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 479).

長田裕也: <D> $\pi$ 電子系らせん高分子集合体の不斉増幅に成功 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 9333).

久木 一朗: <D>複数の空孔を有する水素結合性ヘキサゴナルネットワークの構築と炭化水素吸着の選択性を解明 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 6617. A02 生越, A03 河東田との共同研究).

小野利和: <I><D>超分子ホストと芳香族分子ゲストから構成される多成分結晶を用いることにより、ゲスト分子の種類に応じた結晶化誘起発光、電荷移動発光、室温燐光発光を実現 (*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 17487).

櫻田 啓: <I><D>シアヌル酸及びメラミン誘導体を人工塩基として利用することにより、世界で初めて六重鎖の調製に成功した (*J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8456). DNA 骨格に蛍光色素及び消光剤を導入することにより同種色素間エネルギー移動の詳細な解析に世界で初めて成功 (*Comms. Chem.* **2018**, *1*, 91).

藤ヶ谷剛彦: <I>大気下安定な n 型カーボンナノチューブ材料の発見と熱電変換材料への応用 (*Chem. Lett.* **2016**, *45*, 875. A02 福島, A03 竹延との共同研究へ展開).

羽會部卓: <I>分発光性ヘリセン誘導体の合成とデバイス化 (*J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 13937. *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 4263. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 16889. A03 竹延との共同研究). <I>アセン系分子や分子集合体で一重項分裂による高効率三重項生成を実現 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 5230; *J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 3354. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 1115).

林 正太郎: <I><D><E>スリップスタック集合化に基づく大きな弾性変形を示すエラストック結晶の開発と、そ

の変形に伴う物性変化を観測 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 2701. *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 9453, *Cryst. Grow. Des.* **2017**, *17*, 6158. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 17002).

**関 朋宏**: <I><D><E>金イソシアニド錯体結晶の弾性変形挙動とメカノクロミック特性の発見 (*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 6514, *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 6700).

**長谷川達生**: <I><D>異種アルキル鎖のフラストレーション効果により、ウエハースケールの半導体分子の単層2分子膜状単結晶超薄膜の構築に世界で初めて成功 (*Adv. Mater.* **2018**, *30*, 1707256).

**長谷川裕之**: <I><D>ナノ電解法とインクジェットプロセスとの融合により、ナノ単結晶デバイスを真空プロセスなしで実現することに成功 (*Appl. Mater. Today* **2017**, *9*, 487).

**灰野岳晴**: <I><D>三元系配列制御超分子ポリマーの合成に世界で初めて成功 (*Nat. Commun.* **2017**, *8*, 634).

**中野義明**: <I><D>ヨウ素結合能を有するEDO-TTF-Iの塩が分子が $\beta$ '型分子配列をとり、室温付近ではダイマーモット絶縁体になっていることを解明 (*Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 752).

### 研究項目 A03 ( $\pi$ 造形理論・計測技術)

**関 修平**: <I><E>圧力下マイクロ波伝導度を測定: High-Pressure Time-Resolved Microwave Conductivity (HP-TRMC)の開発による、 $\pi$ 共役高分子の有効共役長の伸長と、それに伴う分子鎖内電荷移動度の向上の観測 (*J. Phys. Chem. B* **2015**, *119*, 7219). <I>電荷キャリアのスピンの状態と伝導度状態を同時に観測できる複合分光法を構築し、P3HTの様々なドープ状態における電子構造を解明 (*J. Phys. Chem. Lett.* **2018**, *9*, 3639).

**竹延大志**: <I><E>両極性トランジスタ・発光トランジスタ・電気二重層トランジスタの作製および歪みを導入する柔軟性・伸縮性トランジスタの作製と評価 (*Sci. Rep.* **2015**, *5*, 10221, *Appl. Phys. Lett.* **2015**, *15*, 153505). <E><D>歪導入下での伝導特性・発光特性・熱電変換特性測定装置の開発 (A03 須田との共同研究). <I>新規なナノカーボンホールドーパントの発見 (*npj 2D Mater. Appl.* **2019**, *3*, 7. *Appl. Phys. Express* **2017**, *10*, 35101. A02 福島、A03 杉本との共同研究). <I>有機導体を用いた電気二重層トランジスタを作製し、超伝導転移や超伝導特性の解明に成功 (*Nat. Commun.* **2016**, *7*, 12356. *Sci. Adv.* **2019**, *5*, eaav7282).

**木口 学**: <I><D>単分子接合における界面構造決定法の開発 (*Sci. Rep.* **2016**, *6*, 26606. A03 多田との共同研究). <I>表面増強ラマン散乱と電流-電圧特性の同時計測による単一分子の構造評価法の開発 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1294). <D><E>スマネンのボウル反転の単一分子レベルでのSTM観測と探針によるマニピュレーションによりスイッチングを達成 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 12142. A01 櫻井との共同研究). <I>反芳香族化合物の高い伝導性を実証 (*Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15984. A01 忍久保との共同研究).

**足立伸一**: <D>パルス放射光 X線を用いた時間分解構造解析法の開発. <I> $\pi$ 電子系化合物単結晶への圧力印加および温度変化による構造・物性の変調 (A01 櫻井、A02 竹内、A03 関との共同研究). <D><E>高温および剪断応力下での液晶化合物の時間分解 X線回折測定 (A02 福島との共同研究).

**杉本 学**: <I>第一原理計算による機能ハイブリッド型 $\pi$ 電子系物質の構造機能相関の解明 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9519). <I>電子状態インフォマティクス手法の開発 (*AIP Conf. Proc.* **2015**, *1702*, 090038).

**佐々木成朗**: <I><D> $\pi$ 造形分子吸着表面のナノ力学計測を目的とした、フォノン摩擦のエネルギー散逸過程計測が可能なたらばフォノンスペクトロスコーピー (TPS)法の提案と、層状物質表面での予備測定、およびそのメカニズムの解明 (*Phys. Rev. B* **2016**, *93*, 201401). <I><D><E>計算時間を従来の10000分の1程度まで短縮可能なグラフェン剥離の高速計算に適したモデルポテンシャルを開発 (*Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 2098).

**多田 朋史**: <I>理想的な表面吸着状態を実現する理想的分子三脚の構造の提案 (*J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 4401. A02 福島との共同研究). <I>分子スピン内包型フラーレンによる量子ユニット造形 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 4261. A01 村田との共同研究).

**橋本顕一郎**: <D>純有機導体  $k\text{-H}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$  において水素結合ダイナミクスがもたらす新規なガラス化現象や量子液体状態の発見 (*Science* **2017**, *357*, 1381, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1821. A02 上田との共同研究).

**坂口浩司**: <I><D>高性能半導体特性を持つアセン型炭素リボンの開発に成功 (*Nat. Chem.* **2017**, *9*, 57).

**中野雅由**: <I>静電場印加時の非線形光学効果 (第二超分極率  $\gamma$ ) の解明の基礎となる電荷分布の非対称性の  $\gamma$  に対する効果の解明に成功 (*J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 1193). <I>N原子およびB原子含有チチバピン炭化水素の非対称性-開殻性- $\gamma$  の相関を高精度量子化学計算により検討 (*Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 1913. *ChemPhysChem* **2017**, *18*, 142. *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 861).

**須田理行**: <I><D><E>光、電界や圧縮歪みを利用した有機絶縁体-超伝導体転移の実現 (*Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1606833. A01 櫻井との共同研究, *Adv. Mater.* **2019**, *31*, 1805715). <I><D>キラル分子によるスピン偏極電流の生成と制御 (*Nat. Commun.* *10*, 2455. A03 中村、小島との共同研究).

**中村雅一**: <I> $\text{C}_{60}$ における0.1 V/Kを超える巨大ゼーベック効果の発見 (*Appl. Phys. Express* **2015**, *8*, 121301).

**小島広孝**: <I>スマネンなどの有機半導体における巨大ゼーベック効果の一般性の確認と構造-物性相関の解明. (*Chem. Lett.* **2018**, *47*, 524. A01 櫻井と共同研究. *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 1276).

**河東田道夫**: <I>京コンピュータを活用した高精度量子化学計算による高次フラーレンの生成熱の高精度予測 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1420). <I>オリゴマーの量子化学計算とHuckel法に基づく $\pi$ 共役系ポリマーの電子物性の高速予測法を開発 (*J. Phys. Chem. C* **2017**, *121*, 28275; *Chem. Phys. Lett.* **2018**, *707*, 44).

**清水康弘**: <I>幾何学的なフラストレーションを有するカイラルなラジカル塩  $(\text{TBA})_{1.5}(\text{NDI-}\Delta)$  における量子スピン液体で期待される特異な挙動を観測 (*Phys. Rev. Lett.* **2017**, *119*, 057201).

**Kosmas Prassides**: <I>イオン性多環芳香族炭化水素 (PAH) における量子スピン-液体状態を観測 (*Nat. Chem.* **2017**, *9*, 635). <I>カリウムがインターカレーションした PAH の構造解明 (*Nat. Chem.* **2017**, *9*, 644).

**山根宏之**: <I>分子間空隙や分子配列対称性が異なる種々の PAH の超構造単分子膜の角度分解光電子分光測定より、長距離分子間相互作用による価電子バンド形成を解明 (*J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 26472).

## 6. 研究成果の取りまとめ及び公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）（5ページ以内）

本研究課題（公募研究を含む）により得られた研究成果の公表の状況（主な論文、書籍、ホームページ、主催シンポジウム等の状況）について具体的に記述してください。記述に当たっては、本研究課題により得られたものに厳に限ることとします。

- 論文の場合、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究項目ごとに計画研究・公募研究の順に記載し、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、連携研究者には点線の下線を付し、corresponding author には左に\*印を付してください。
- 別添の「(2) 発表論文」の融合研究論文として整理した論文については、冒頭に◎を付してください。
- 補助条件に定められたとおり、本研究課題に係り交付を受けて行った研究の成果であることを表示したもの（論文等の場合は謝辞に課題番号を含め記載したもの）について記載したもののについては、冒頭に▲を付してください（前項と重複する場合は、「◎▲・・・」と記載してください。）。
- 一般向けのアウトリーチ活動を行った場合はその内容についても記述してください。

### 【主要論文】(全て査読あり)

#### 研究項目 A01( $\pi$ 分子造形)

##### 計画研究

- ▲ "Synthesis of a Strained Spherical Carbon Nanocage by Regioselective Alkyne Cyclotrimerization", N. Hayase, J. Nogami, Y. Shibata, \*K. Tanaka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, ASAP, DOI: 10.1002/anie.201903422.
- ▲ "Ni(II) 10-Phosphacorrole: A Porphyrin Analogue Containing Phosphorus at the Meso Position", H. Omori, S. Hiroto, Y. Takeda, \*H. Fliegl, S. Minakata, \*H. Shinokubo, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 4800–4805. (A01 忍久保/A01 武田)
- ▲ "Figuration of bowl-shaped  $\pi$ -conjugated molecules: properties and functions", \*M. Saito, \*H. Shinokubo, \*H. Sakurai, *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 635–661. (A01 櫻井/A01 忍久保/A01 斎藤)
- ▲ "Benzonorcorrole Ni(II) Complexes: Enhancement of Paratropic Ring Current and Singlet Diradical Character by Benzo-Fusion", T. Yoshida, K. Takahashi, Y. Ide, R. Kishi, J. Fujiyoshi, S. Lee, Y. Hiraoka, D. Kim, \*M. Nakano, T. Ikeue, H. Yamada, \*H. Shinokubo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 2209–2213. (A01 忍久保/A03 中野)
- ▲ "Hexathioalkyl sumanenes: An electron-donating buckybowl as a building block for supramolecular materials", Y. Shoji, T. Kajitani, F. Ishiwari, Q. Ding, H. Sato, H. Anetai, T. Akutagawa, H. Sakurai, \*T. Fukushima, *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 8405–8410. (A01 櫻井/A02 福島/A02 芥川)
- ▲ "Highly-conducting molecular circuits based on antiaromaticity", \*S. Fujii, S. Marqués-González, J.-Y. Shin, \*H. Shinokubo, T. Masuda, T. Nishino, N. P. Arasu, \*H. Vázquez, \*M. Kiguchi, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15984(8 pages). (A01 忍久保/A03 木口)
- ▲ " $(\eta^4$ -Butadiene)Sn(0) Complexes: A New Approach for Zero-valent  $p$ -Block Elements Utilizing a Butadiene as a  $4\pi$ -Electron Donor", T. Kuwabara, M. Nakada, J. Hamada, J. D. Guo, S. Nagase, \*M. Saito, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 11378–11382.
- ▲ "Stacked antiaromatic porphyrins", R. Nozawa, H. Tanaka, W.-Y. Cha, Y. Hong, I. Hisaki, S. Shimizu, J.-Y. Shin, \*T. Kowalczyk, S. Irle, \*D. Kim, \*H. Shinokubo, *Nat. Commun.* **2016**, *7*, 13620(7 pages). (A01 忍久保/A01 清水/A02 久木)
- ▲ "Redox-Dependent Transformation of Hydrazinobuckybowl between Curved and Planar Geometries", \*S. Higashibayashi, P. Pandit, R. Haruki, S. Adachi, R. Kumai, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 10830–10834. (A01 櫻井/A03 足立)
- ▲ "Cyclic Triradicals Composed of Iminonitroxide–Gold(I) with Intramolecular Ferromagnetic Interactions", S. Suzuki, T. Wada, R. Tanimoto, M. Kozaki, D. Shiomi, K. Sugisaki, K. Sato, T. Takui, Y. Miyake, Y. Hosokoshi, \*K. Okada, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 10791–10794.
- ▲ "Nitrogen-embedded buckybowl and its assembly with  $C_{60}$ ", H. Yokoi, Y. Hiraoka, \*S. Hiroto, D. Sakamaki, S. Seki, \*H. Shinokubo, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8215(9 pages). (A01 忍久保/A03 関)
- ▲ "Enantioselective Synthesis of [9] and [11]Helicene-Like Molecules: Double Intramolecular [2+2+2] Cycloaddition", Y. Kimura, N. Fukawa, Y. Miyauchi, K. Noguchi, \*K. Tanaka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 8480–8483.

##### 公募研究

- ▲ "Control of Circularly Polarized Luminescence by Orientation of Stacked  $\pi$ -Electron Systems", K. Kikuchi, J. Nakamura, Y. Nagata, H. Tsuchida, T. Kakuta, T. Ogoshi, \*Y. Morisaki, *Chem. Asian J.* **2019**, *14*, 1681–1685. (A01 森崎/A02 長田/A02 生越)
- ▲ "Four-Step Synthesis of  $B_2N_2$ -embedded Corannulene", S. Nakatsuka, N. Yasuda, \*T. Hatakeyama, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13562–13565.
- ▲ "Synthesis and Size-Dependent Properties of [12], [16], and [24]Carbon Nanobelts", G. Povie, \*Y. Segawa, T. Nishihara, Y. Miyauchi, \*K. Itami, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 10054–10059.
- ▲ "Rational Synthesis of Antiaromatic 5,15-Dioxaporphyrin and Oxidation into  $\beta,\beta$ -Linked Dimers", S. Nishiyama, M. Fukuda, S. Mori, K. Furukawa, \*H. Fliegl, \*H. Furuta, \*S. Shimizu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 9728–9733.

- 5) ▲ "Mechano-Sensitive Synthetic Ion Channels", \*T. Muraoka, K. Umetsu, K. V. Tabata, T. Hamada, H. Noji, T. Yamashita, \*K. Kinbara, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 18016–18023.
- 6) ▲ "One-shot Multiple Borylation toward BN-Doped Nanographenes", K. Matsui, S. Oda, K. Yoshiura, K. Nakajima, N. Yasuda, \*T. Hatakeyama, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 1195–1198.
- 7) ▲ "An ionic liquid that dissolves semiconducting polymers: a promising electrolyte for bright, efficient and stable light-emitting electrochemical cells", \*T. Sakanoue, \*F. Yonekawa, K. Albrecht, K. Yamamoto, T. Takenobu, *Chem. Mater.* **2017**, *29*, 6122–6129. (A01 アルブレヒト/A03 竹延)
- 8) ▲ "Isolation of the Simplest Hydrated Acid", R. Zhang, M. Murata, A. Wakamiya, T. Shimoaka, T. Hasegawa, \*Y. Murata, *Sci. Adv.* **2017**, *3*, e1602833(6 pages).
- 9) ▲ "Thermally Activated Delayed Fluorescent Phenothiazine-dibenzo[*a,j*]phenazine-phenothiazine Triads Exhibiting Tricolor-Changing Mechanochromic Luminescence", M. Okazaki, \*Y. Takeda, \*P. Data, P. Pander, H. Higginbotham, A. P. Monkman, \*S. Minakata, *Chem. Sci.* **2017**, *8*, 2677–2686.
- 10) ▲ "Chiroptical Switching Caused by Crystalline/Liquid Crystalline Phase Transition of a Chiral Bowl-shaped Molecule", \*M. Yamamura, K. Sukegawa, D. Okada, Y. Yamamoto, \*T. Nabeshima, *Chem. Commun.* **2016**, *52*, 4585–4588. (A01 山村/A02 山本)
- 11) ▲ "Synthesis of a Distinct Water Dimer inside Fullerene C<sub>70</sub>", R. Zhang, M. Murata, T. Aharen, A. Wakamiya, T. Shimoaka, T. Hasegawa, \*Y. Murata, *Nat. Chem.* **2016**, *8*, 435–441.
- 12) "Carbon-bridged Oligo(*p*-phenylenevinylene) for Photostable and Broadly Tunable, Solution-Processable Thin Film Organic Lasers", M. Morales-Vidal, P. G. Boj, J. M. Villalvilla, J. A. Quintana, Q. Yan, N.-T. Lin, X. Zhu, N. Ruangsupapichat, J. Casado, \*H. Tsuji, \*E. Nakamura, \*M. A. Díaz-García, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8458(8 pages).

## 研究項目 A02(π 造形システム)

### 計画研究

- 1) ◎▲ "Triptycene Tripods for the Formation of Highly Uniform and Densely Packed Self-Assembled Monolayers with Controlled Molecular Orientation", F. Ishiwari, G. Nascimbeni, E. Sauter, H. Tago, Y. Shoji, S. Fujii, M. Kiguchi, T. Tada, \*M. Zharnikov, \*E. Zojer, \*T. Fukushima, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 5995–6005. (A02 福島/A03 木口/A03 多田)
- 2) ◎▲ "Chiral Crystal-Like Droplets Displaying Unidirectional Rotational Sliding", T. Kajitani, K. Motokawa, A. Kosaka, Y. Shoji, R. Haruki, D. Hashizume, T. Hikima, M. Takata, K. Yazawa, K. Morishima, M. Shibayama, \*T. Fukushima, *Nat. Mater.* **2019**, *18*, 266–272. (A02 福島/A03 足立)
- 3) ◎▲ "Ferroelectric Alkylamide Substituted Helicene Derivative with 2D Hydrogen-Bonding Lamellar Phase", H. Anetai, T. Takeda, N. Hoshino, H. Kobayashi, N. Saito, M. Shigeno, M. Yamaguchi, and \*T. Akutagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2391–2397 (A01 重野/A02 芥川)
- 4) ▲ "Self-Folding of Supramolecular Polymers into Bioinspired Topology", D. D. Prabhu, K. Aratsu, Y. Kitamoto, H. Ouchi, T. Ohba, M. J. Hollamby, N. Shimizu, H. Takagi, R. Haruki, S. Adachi, \*S. Yagai, *Sci. Adv.* **2018**, *4*, eaat8466(8 pages). (A02 矢貝/A03 足立)
- 5) ▲ "Terminal Functionalization with a Triptycene Motif that Dramatically Changes the Structural and Physical Properties of an Amorphous Polymer", F. Ishiwari, G. Okabe, H. Ogiwara, T. Kajitani, M. Tokita, M. Takata, \*T. Fukushima, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13497–13502.
- 6) ▲ "Light-induced Unfolding and Refolding of Supramolecular Polymer Nanofibers", B. Adhikari, Y. Yamada, M. Yamauchi, K. Wakita, X. Lin, K. Aratsu, T. Ohba, T. Karatsu, M. Hollamby, N. Shimizu, H. Takagi, R. Haruki, S. Adachi, \*S. Yagai, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 15254(10 pages). (A02 矢貝/A03 足立)
- 7) ▲ "Photo-regulated living supramolecular polymerization established by combining energy landscapes of photoisomerization and nucleation-elongation processes", M. Endo, T. Fukui, S.-H. Jung, S. Yagai, \*M. Takeuchi, \*K. Sugiyasu, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 14347–14353. (A02 竹内/A02 矢貝)
- 8) ▲ "Control over differentiation of a metastable supramolecular assembly in one and two dimensions", T. Fukui, S. Kawai, S. Fujinuma, Y. Matsushita, T. Yasuda, T. Sakurai, S. Seki, \*M. Takeuchi, \*K. Sugiyasu, *Nat. Chem.* **2017**, *9*, 493–499. (A02 竹内/A03 関)
- 9) ▲ "Boron-Mediated Sequential Alkyne Insertion and C–C Coupling Reactions Affording Extended π-Conjugated Molecules", Y. Shoji, N. Tanaka, S. Muranaka, N. Shigeno, H. Sugiyama, K. Takenouchi, F. Hajjaj and \*T. Fukushima, *Nat. Commun.* **2016**, *7*, 12704.
- 10) ◎▲ "Supramolecular Scaffold for Tailoring the Two-Dimensional Assembly of Functional Molecular Units into Organic Thin Films", F. K.-C. Leung, F. Ishiwari, T. Kajitani, Y. Shoji, T. Hikima, M. Takata, A. Saeki, S. Seki, Y. M. A. Yamada, T. Fukushima, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 11727–11733. (A02 福島/A03 関)
- 11) ▲ "Photoreactive Helical Nanoaggregates Exhibiting Morphology Transition upon Thermal Reconstruction", M. Yamauchi, T. Ohba, T. Karatsu, \*S. Yagai, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8936(10 pages).
- 12) ▲ "A Collective In-plane Molecular Rotator based on Dibromiodomesitylene π-Stacks", J. Ichikawa, N. Hoshino, T. Takeda, \*T. Akutagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 13155–13160.
- 13) ▲ "Rational synthesis of organic thin films with exceptional long-range structural integrity", N. Seiki, \*Y. Shoji, T. Kajitani, F. Ishiwari, A. Kosaka, T. Hikima, M. Takata, T. Someya, \*T. Fukushima, *Science* **2015**, *348*, 1122–1126.

## 公募研究

- 1) ▲ "Guest Vapor-Induced State Change of Structural Liquid Pillar[6]arene", \*T. Ogoshi, K. Maruyama, Y. Sakatsume, T. Kakuta, T. Yamagishi, T. Ichikawa, M. Mizuno, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 785–789.
- 2) ▲ "Gas-responsive porous magnet distinguishes the electron spin of molecular oxygen", W. Kosaka, Z. Liu, J. Zhang, Y. Sato, A. Hori, R. Matsuda, S. Kitagawa, \*H. Miyasaka, *Nat. Commun.* **2018**, *9*, 5420(9 pages).
- 3) ◎▲ "Ring shape-dependent self-sorting of pillar[n]arenes assembled on a surface", \*T. Ogoshi, S. Takashima, N. Inada, H. Asakawa, T. Fukuma, Y. Shoji, T. Kajitani, T. Fukushima, T. Tada, T. Dotera, T. Kakuta, T. Yamagishi, *Commun. Chem.* **2018**, *1*, 92. (A02 生越/A02 福島/A03 多田)
- 4) ▲ "Creating Elastic Organic Crystals of  $\pi$ -Conjugated Molecules with Bending Mechanofluorochromism and Flexible Optical Waveguide", \*S. Hayashi, S. Yamamoto, D. Takeuchi, Y. Ie, K. Takagi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 17002–17008.
- 5) ◎▲ " $\pi$ -Electronic Cocrystal Microcavities with Selective Vibronic-Mode Light Amplification: Toward Förster Resonance Energy Transfer Lasing", D. Okada, S. Azzini, H. Nishioka, A. Ichimura, H. Tsuji, E. Nakamura, F. Sasaki, C. Genet, T. W. Ebbesen, \*Y. Yamamoto, *Nano Lett.* **2018**, *18*, 4396–4402. (A01 辻/A02 山本)
- 6) ▲ "Bifacial nucleobases for hexaplex formation in aqueous solution", \*H. Kashida, Y. Hattori, K. Tazoe, T. Inoue, K. Nishikawa, K. Ishii, S. Uchiyama, H. Yamashita, M. Abe, Y. Kamiya, \*H. Asanuma, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8456–8462.
- 7) ▲ "Elucidating the Solvent Effect on the Switch of the Helicity of Poly(quinoxaline-2,3-diyl)s: A Conformational Analysis by Small-Angle Neutron Scattering", \*Y. Nagata, T. Nishikawa, \*M. Suginoe, S. Sato, \*M. Sugiyama, L. Porcar, A. Martel, R. Inoue, N. Sato, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 2722–2726.
- 8) ▲ "Quantum-disordered state of magnetic and electric dipoles in an organic Mott system", \*M. Shimozawa, \*K. Hashimoto, A. Ueda, Y. Suzuki, K. Sugii, S. Yamada, Y. Imai, R. Kobayashi, K. Itoh, S. Iguchi, M. Naka, S. Ishihara, H. Mori, T. Sasaki, M. Yamashita, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 1821(6 pages). (A02 上田/A03 橋本)
- 9) ▲ "Hydrogen-bonded Hexagonal Buckybowl Framework", \*I. Hisaki, H. Toda, \*H. Sato, N. Tohno, \*H. Sakurai, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 15294–15298. (A01 櫻井/A02 久木)
- 10) ▲ "Luminescent Mechanochromic 9-Anthryl Gold(I) Isocyanide Complex with an Emission Maximum at 900 nm after Mechanical Stimulation", \*T. Seki, N. Tokodai, S. Omagari, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, T. Iwasa, T. Taketsugu, \*H. Ito, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 6514–6517.
- 11) ▲ "Directionally tunable and mechanically deformable ferroelectric crystals from rotating polar globular ionic molecules", \*J. Harada, T. Shimojo, H. Oyamaguchi, H. Hasegawa, Y. Takahashi, K. Satomi, Y. Suzuki, J. Kawamata, \*T. Inabe, *Nat. Chem.* **2016**, *8*, 946–952.
- 12) ◎▲ "High-Yield Triplet Excited States in Pentacene Self-Assembled Monolayers on Gold Nanoparticle through Singlet Exciton Fission", D. Kato, H. Sakai, \*N. V. Tkachenko, \*T. Hasobe, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 5230–5234.

## 研究項目 A03( $\pi$ 造形理論・計測)

### 計画研究

- 1) ▲ "Two-dimensional ground-state mapping of a Mott-Hubbard system in a flexible field-effect device", Y. Kawasugi, K. Seki, S. Tajima, J. Pu, T. Takenobu, S. Yunoki, H. M. Yamamoto, R. Kato, *Sci. Adv.* **2019**, *5*, eaav7282(9 pages).
- 2) ▲ "Observation of Dissociative Quasi-Free Electron Attachment to Nucleoside via Excited Anion Radical in Solution", \*J. Ma, A. Kumar, Y. Muroya, S. Yamashita, T. Sakurai, S. A. Denisov, M. D. Sevilla, A. Adhikary, \*S. Seki, \*M. Mostafavi, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 102.
- 3) ▲ "A first-principles prediction on the "healing effect" of graphene preventing carrier trapping near the surface of metal halide perovskites", W. W. Wang, W. W. Wang, J. S. Dang, J. S. Dang, R. Jono, \*H. Segawa, \*M. Sugimoto, *Chem. Sci.* **2018**, *9*, 3341–3353.
- 4) ▲ "Fluctuation in Interface and Electronic Structure of Single-Molecule Junctions Investigated by Current versus Bias Voltage Characteristics", Y. Isshiki, S. Fujii, T. Nishino, \*M. Kiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 3760–3767.
- 5) ▲ "The Divergent Dimerization Behavior of N-Substituted Dicyanomethyl Radicals: Dynamically Stabilized versus Stable Radicals", K. Okino, S. Hira, Y. Inoue, \*D. Sakamaki, \*S. Seki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 16597–16601.
- 6) ◎▲ "High Current Injection into Dynamic p–n Homo Junction in Polymer Light-Emitting Electrochemical Cells", T. Sakanoue, J. Li, H. Tanaka, R. Ito, S. Ono, S. Kuroda, \*T. Takenobu, *Adv. Mater.* **2017**, *29*, 1606392(7 pages).
- 7) ▲ "A Triphosphasumanene Trisulfide: High Out-of-Plane Anisotropy and Janus-type  $\pi$ -Surfaces", \*S. Furukawa, Y. Suda, J. Kobayashi, T. Kawashima, \*T. Tada, \*S. Fujii, M. Kiguchi, \*M. Saito, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 5787–5792. (A01 斎藤/A03 木口/A03 多田)
- 8) ▲ "A Stable, Soluble, and Crystalline Supramolecular System with a Triplet Ground State", T. Futagoishi, T. Aharen, T. Kato, A. Kato, T. Ihara, T. Tada, M. Murata, A. Wakamiya, H. Kageyama, Y. Kanemitsu, \*Y. Murata, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 4261–4265. (A01 村田/A03 多田)
- 9) ▲ "Bowl Inversion and Electronic Switching of Buckybowls on Gold", S. Fujii, M. Ziatdinov, S. Higashibayashi, H. Sakurai, \*M. Kiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 12142–12149. (A01 櫻井/A03 木口)

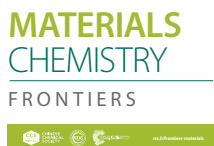
- 10) ▲ "Experimental observation of phonon generation and propagation at a MoS<sub>2</sub>(0001) surface in the friction process", M. Ishikawa, N. Wada, T. Miyakawa, H. Matsukawa, M. Suzuki, N. Sasaki, \*K. Miura, *Phys. Rev. B* **2016**, *93*, 201401(4 pages).
- 11) ▲ "Resolving metal-molecule interfaces at single-molecule junctions", Y. Komoto, S. Fujii, H. Nakamura, T. Tada, T. Nishino, \*M. Kiguchi, *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 26606(9 pages). (A03 木口/A03 多田)

### 公募研究

- 1) ▲ "Light-driven Molecular Switch for Reconfigurable Spin Filters", \*M. Suda, Y. Thathong, V. Promarak, H. Kojima, M. Nakamura, T. Shiraogawa, M. Ehara, \*H. M. Yamamoto, *Nat. Commun.* **2019**, *10*, 2455(7 pages). (A03 須田/A03 小島)
- 2) ©▲ "Giant Seebeck Effect in Sumanene: The Unique Thermal Conductivity Elucidated by Molecular Simulations", \*H. Kojima, M. Nakagawa, R. Abe, F. Fujiwara, Y. Yakiyama, H. Sakurai, \*M. Nakamura, *Chem. Lett.* **2018**, *47*, 524–527 (A01 櫻井/A03 中村/A03 小島).
- 3) ▲ "Thiophene and Its Sulfur Inhibit Indenoindenodibenzothiophene Diradicals from Low-Energy Lying Thermal Triplets", J. J. Dressler, M. Teraoka, G. L. Espejo, R. Kishi, S. Takamuku, C. J. Gómez-García, L. N. Zakharov, \*M. Nakano, \*J. Casado, \*M. M. Haley, *Nat. Chem.* **2018**, *10*, 1134–1140.
- 4) ▲ "Crystallization and vitrification of electrons in a glass-forming charge liquid", S. Sasaki, \*K. Hashimoto, R. Kobayashi, K. Itoh, S. Iguchi, Y. Nishio, Y. Ikemoto, T. Moriwaki, N. Yoneyama, M. Watanabe, A. Ueda, H. Mori, K. Kobayashi, R. Kumai, Y. Murakami, J. Muller, T. Sasaki, *Science* **2017**, *357*, 1381–1385. (A02 上田/A03 橋本)
- 5) ▲ "Strain-induced skeletal rearrangement of a polycyclic aromatic hydrocarbon on a copper surface", \*A. Shiotari, \*T. Nakae, K. Iwata, S. Mori, T. Okujima, H. Uno, H. Sakaguchi, Y. Sugimoto, *Nat. Commun.* **2017**, *8*, 16089(8 pages).
- 6) ▲ "High Hole-Mobility Molecular Layer Made From Strong Electron Acceptor Molecules with Metal Adatoms", \*H. Yamane, N. Kosugi, *J. Phys. Chem. Lett.* **2017**, *8*, 5366–5371.
- 7) ©▲ "Redox-controlled potassium intercalation into two polyaromatic hydrocarbon solids", F. D. Romero, M. J. Pitcher, C. I. Hiley, G. F. S. Whitehead, S. Kar, A. Y. Ganin, D. Antypov, C. Collins, M. S. Dyer, G. Klupp, R. H. Colman, \*K. Prassides, \*M. J. Rosseinsky, *Nat. Chem.* **2017**, *9*, 644–652.
- 8) ©▲ " $\pi$ -electron  $S = 1/2$  quantum-spin-liquid state in an ionic polyaromatic hydrocarbon", Y. Takabayashi, M. Menelaou, H. Tamura, N. Takemori, T. Koretsune, A. Stefancic, G. Klupp, A. J. C. Burma, Y. Nomura, R. Arita, D. Arcon, \*M. J. Rosseinsky, \*K. Prassides, *Nat. Chem.* **2017**, *9*, 635–643.
- 9) ▲ "Homochiral polymerization-driven selective growth of graphene nanoribbons", \*H. Sakaguchi, S. Song, T. Kojima, T. Nakae, *Nat. Chem.* **2017**, *9*, 57–63.
- 10) ▲ "Diindeno-Fusion of an Anthracene as a Design Strategy for Stable Organic Biradicals", G. E. Rudebusch, J. L. Zafra, K. Jorner, K. Fukuda, J. L. Marshall, I. Arrechea-Marcos, G. L. Espejo, R. Ponce Ortiz, C. J. Gómez-García, L. N. Zakharov, \*M. Nakano, \*H. Ottosson, \*J. Casado, \*M. M. Haley, *Nat. Chem.* **2016**, *8*, 753–759.
- 11) ▲ "From C<sub>60</sub> to Infinity: Large-Scale Quantum Chemistry Calculations of the Heats of Formation of Higher Fullerenes", \*B. Chan, Y. Kawashima, M. Katouda, T. Nakajima, K. Hirao, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1420–1429.

### 【国際誌上での特集号】

最新の研究成果とともに、本領域独自の「構造美」を「機能美」と捉える物質設計概念を世界に発信するために、英国王立化学協会 (RSC) のオープンアクセス誌「Materials Chemistry Frontiers」で特集号を企画し、総説3報と38報の論文を発表した。

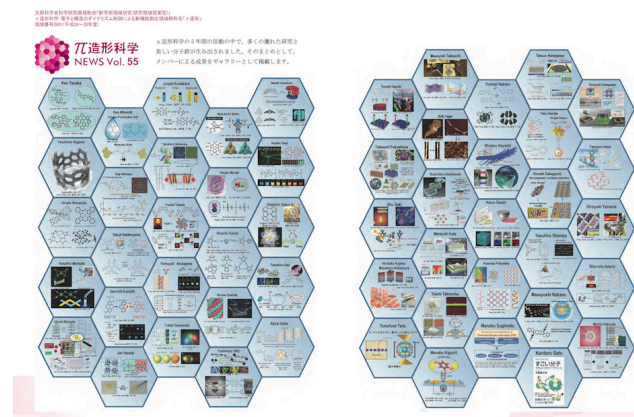


Themed collection  
Pi conjugated system bricolage (figuration) toward functional organic molecular systems

Editorial  
Pi conjugated system bricolage (figuration) toward functional organic molecular systems  
Takanori Fukushima

### 【領域ウェブサイト】

本領域の研究成果と活動を広く発信するために、和文と英文の両方で記載したウェブサイト (<http://pi-figuration.jp/>) を作成し、領域発足にあたり (領域の趣旨と目的)、領域研究概要、メンバー、研究業績、トピックス一覧、イベント、研究業績、公募研究を公開してきた。シンポジウムの開催に際しては、特設サイトを開設して参加申込み受付を行い、開催後にも詳細が閲覧できるようになっている。研究業績は月に一度更新を行い、論文業績等の最新情報を常時公開している。また、「現代化学」に毎月





掲載している佐藤健太郎氏による領域紹介は、ニュースレターとしてウェブサイト上で公開している (<http://pi-figuration.jp/newsletter/index.php>)。図は本領域で造形されたシステムのギャラリーを掲載したニュースレターの最終号である。

### 【シンポジウム実績】

最新研究成果を日本語で発表する「公開シンポジウム」を、研究期間を通じて年1回定期開催した。海外から顕著な研究者を招待して英語で発表を行う「公開国際シンポジウム」は、2016年まで年1回国内で開催した。しかし、限られた数の外国人研究者を招待してシンポジウムを開いても、国際共同研究の加速、世界に向けた情報発信、密接な研究者交流にはあまり効果的でないと実感した。そこで、国際シンポジウムのあり方を見直し、2017年からは新たな取り組みとして、本領域の研究者集団と、海外の研究所または研究プロジェクトグループの集団とが合同シンポジウムを開催するという、「海外遠征型シンポジウム」を実施した。結果として、海外インターンシップ（学生交流）、新たな共同研究、今年度も引き継がれる国際ワークショップなど、実質的な国際交流が生まれた。

- 第1回公開：2014年9月5～6日，東京工業大学蔵前会館，参加者191名
- 第1回国際：2015年4月30日，大阪大学中之島センター，参加者119名
- 第2回公開：2015年6月8～9日，大阪市中央公会堂，参加者128名
- 第2回国際：2016年4月14～15日，さいたま市浦和コミュニティセンター，参加者120名
- 第3回公開：2016年10月20～21日，東北大学さくらホール，参加者99名
- 第3回国際：2017年1月27～28日，名古屋大学，参加者87名
- 第4回公開：2017年10月19～20日，東京工業大学蔵前会館，参加者107名
- 第4回国際（海外遠征型）：2017年11月13～14日，ハイデルベルグ，ドイツ，参加者47名
- 第5回国際（海外遠征型）：2018年11月4～7日，ドブロブニク，クロアチア，参加者47名
- 第6回国際（海外遠征型）：2018年11月23～25日，マドリッド，スペイン，参加者22名
- 第7回国際・領域成果報告会：2019年3月29～30日，大阪大学シグマホール，参加者125名

### 【 $\pi$ 造形コロキウム】

$\pi$ 造形科学の研究に関係する国内外の研究者を積極的に招聘し、公開の講演会やミニシンポジウム、あるいは勉強会形式の会議を「 $\pi$ 造形コロキウム」と銘打ってシリーズとして開催した。第1回の2014年10月7日 Thomas Torres 教授（Universidad Autonoma de Madrid）講演会（大阪大学）を皮切りに、2019年3月末までに、計93回のコロキウムを開催した (<http://pi-figuration.jp/colloquium/>)。

### 【国際会議との連携】

国際会議と連携することで、広く $\pi$ 造形科学の理念や研究成果を国際的にアピールする機会を増やすとともに、大学院生を含む若手研究者に国際会議への参加機会を与えるための取り組みを継続的に行った。国際会議との連携実績を以下に記す。

- (1) 8th International Conference on Materials for Advanced Technologies of the Materials Research Society of Singapore & International Conference in Asia Together with 4th Photonics Global Conference 2015 (ICMAT 2015 & IUMRS-ICA 2015), 2015.6.28–7.3, Singapore（セッションを設置）
- (2) International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2016), 2015.1.18–20, 京都テルサ（協賛）
- (3) 229th ECS MEETING, 2016.5.29–6.2, San Diego, Oregon, USA（セッションを設置）
- (4) International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic  $\pi$ -Molecules & Materials (Curo-Pi-II), 2016.9.12–14, Eugene, Oregon, USA（共催）
- (5) 231st ECS MEETING, 2017.5.28–6.1, Los Angeles, California, USA（ $\pi$ -Figuration Session を設置）
- (6) The 53rd CMS International Seminar, 2017.6.24, 九州大学伊都キャンパス（共催）
- (7) 233rd ECS MEETING, 2018.5.13–17, Seattle, Washington, USA（ $\pi$ -Figuration Session を設置）
- (8) 43rd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018), 2018.7.30–8.4, 仙台（協賛）
- (9) International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic  $\pi$ -Molecules & Materials (Curo-Pi-III), 2018.9.5–7, Oxford, UK（共催）

### 【アウトリーチ活動】

上述した一般雑誌である「現代化学」への記事掲載に加え、領域ウェブサイトや Facebook・Twitter などの SNS を通じたリアルタイムでの情報発信、さらに数多くのアウトリーチ活動を行なった。現在までに、①大学・研究所の広告誌・パンフレットへの寄稿9件、②一般向けセミナー17件、③オープンキャンパスを含む小中高生向けセミナーや実験演習83件、④サイエンスカフェへの出展2件、⑤イベント参加・出展19件の活動実績がある。加えて、テレビ報道16件、プレスリリース50件、新聞報道80件、一般雑誌による研究紹介13件など、幅広いメディアで領域研究成果が発信されている。その他、多くのネットニュースで領域成果が紹介された。

## 7. 研究組織（公募研究を含む。）と各研究項目の連携状況（2ページ以内）

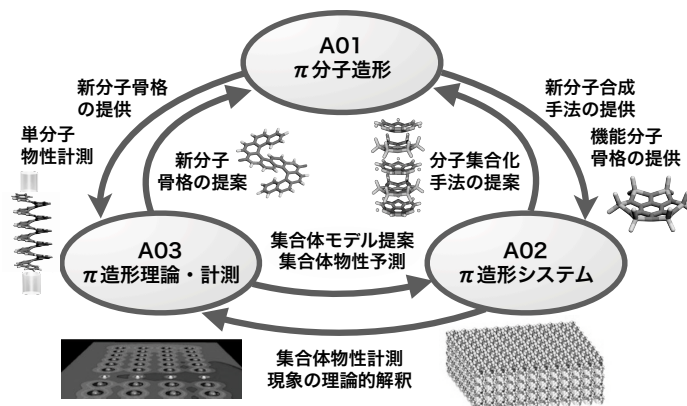
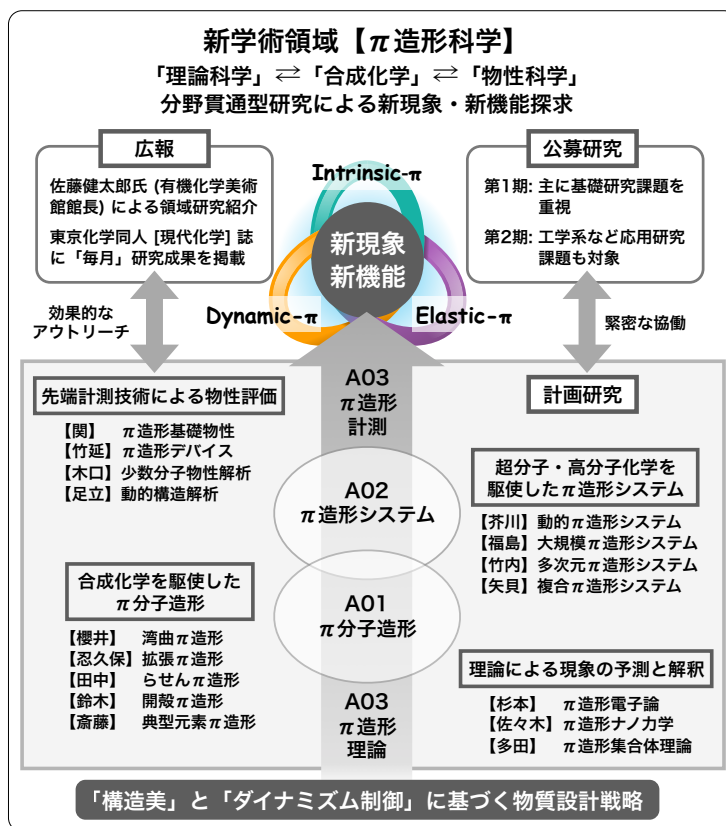
領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係を記述し、総括班研究課題の活動状況も含め、どのように研究組織間の連携や計画研究と公募研究の調和を図ってきたか、組織図や図表などを用いて具体的かつ明確に記述してください。

本領域では Intrinsic- $\pi$ 、Dynamic- $\pi$ 、Elastic- $\pi$  という3つの $\pi$ 電子機能の調和による新現象・新機能創出を目的に、(1) $\pi$ 電子の空間配置を精密に制御した一分子骨格からナノ～メゾ～マクロスケールの構造体を造形し、(2)造形した物質が外部刺激などの摂動に対して発現する新現象のサインを逃さず捉えて理論的解釈を与える、または(3)理論モデルから予測される $\pi$ 造形システムの物性を実験科学者が実証するといった、「理論シミュレーション・モデル化」⇔「物質創製」⇔「物性計測」の連動による研究を目指した。それを踏まえ、研究項目として $\pi$ 分子造形 (A01)、 $\pi$ 造形システム (A02)、 $\pi$ 造形理論・計測 (A03) 班を設けた。各班の計画研究者と研究キーワード、ならびにミッションを右図に示す。

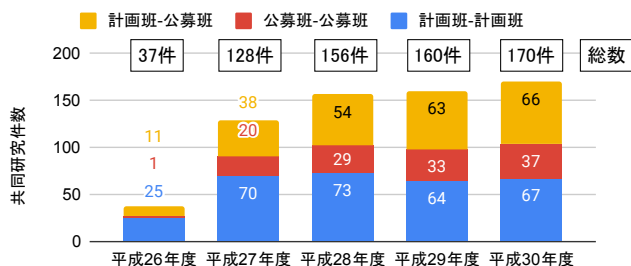
本領域の目的を実現する鍵は、多様な物質ライブラリの構築と、多角的アプローチによる徹底的な物性解明にある。研究組織の充実を図るため、計画研究にやや不足している分野（電子状態計算、高分子化学、表面・界面科学、有機固体物性など）は公募研究で補い、領域研究の体制を一層堅固かつ発展的なものとした。

本領域発足当時は、あまり交流がなかった異分野の30、40代の若手研究者からなる組織であったため、個人を基盤とする限られた連携しか行われていなかった。したがって、領域発足時、平成26年7月時点では、その後合流する公募研究者を含めても、共同研究の件数はわずか34件に過ぎなかった。しかも共同研究の手法は、物質合成研究者 (A01 班または A02 班) と物性評価研究者 (主に A03 班) との間の、いわゆる従来型の一方向ベクトルの協力関係がそのほとんどであった。

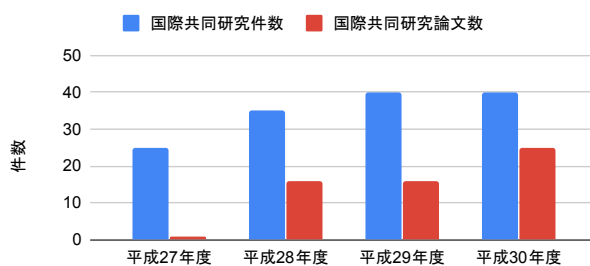
総括班は、秘密保守契約を結んだ上での完全非公開形式の領域全体会議を含む、多くの議論の場を設定し、さらに本領域の理念を徹底する取り組みを行なった結果、計画研究者に限らず、平成27年4月および平成29年4月より参画した公募研究者も含めて、数多くの共同研究が立ち上がり、活発な融合的連携が達成された。共同研究（継続や終了した共同研究を含めた各年度の共同研究数）の推移を以下に記す。平成26年度末で37件であった領域内共同研究は、昨年度末には170件に増大した。領域研究終了後の現在も、本領域活動で構築された共同研究体制は維持されている。これは、本領域の理念が公募班員にも浸透し、まさに新学術領域研究に望まれている強力な連携研究組織が形成されたことの証左である。さらに、すでに「項目3. 審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況」で既に述べたように、領域発足時に懸念されていた、実験系研究者と理論系研究者との連携に対する懸念も払拭する体制も構築できている。結果として現在までに、領域内共同研究による共著論文が130報に及ぶ。以上のように、「理論シミュレーション・モデル化」⇔「物質創製」⇔「物性計測」の双方向ベクトルをもって分野貫通型研究を実施する体制が確立するとともに、例えば物質創製のスペシャリスト同士が組み、新たな分子を合成するなど、これまでの常識にとらわれない、多様な研究者協働の枠組みが生まれている。



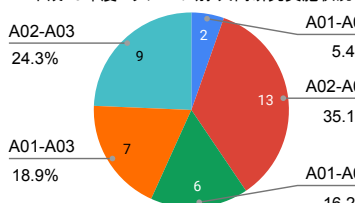
### 領域内共同研究実施数の推移



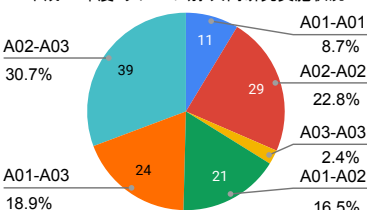
### 国際活動支援班の実績の推移 ( $\pi$ -HUBによる計画研究者の国際共同研究の推移)



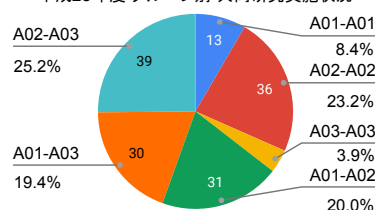
平成26年度 グループ別 共同研究実施状況



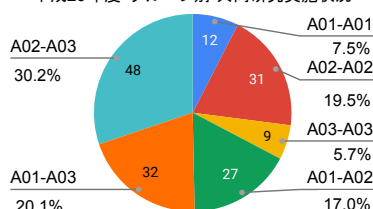
平成27年度 グループ別 共同研究実施状況



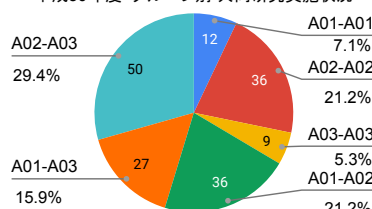
平成28年度 グループ別 共同研究実施状況



平成29年度 グループ別 共同研究実施状況



平成30年度 グループ別 共同研究実施状況



本領域研究における総括班の役割と活動実績を以下に示す。これらは、応募時に設定した総括班のミッションと完全に一致しており、全て当初の計画通りに遂行した。

企画・運営	<ul style="list-style-type: none"> <li>・領域運営のための全体的な方針策定、企画、予算措置、共同研究の支援</li> <li>・総括班会議（運営会議）、国内・国際シンポジウム開催</li> <li>・若手研究会を支援</li> <li>・<math>\pi</math>造形スクールの開設と運営</li> </ul>
若手研究会	<ul style="list-style-type: none"> <li>・若手研究会の組織運営、若手研究会開催</li> <li>・企画・運営グループと連携し、<math>\pi</math>造形スクールを運営</li> </ul>
広報・連携支援	<ul style="list-style-type: none"> <li>・広報活動と領域内情報共有のためのウェブサイト運営</li> <li>・東京化学同人「現代化学」誌上への研究成果発信</li> <li>・「語り部」の筆による領域研究内容紹介を含むアウトリーチ活動</li> <li>・プレスリリース等による研究成果発信の支援</li> <li>・中長期滞在型共同研究による領域内研究者間の連携支援</li> <li>・領域内の共有機器情報の収集と情報配信</li> </ul>
国際活動支援班 (H27年度以降)	<ul style="list-style-type: none"> <li>・計画研究者により構成され、国際共同研究の加速化を目的とした国際共同研究</li> <li>・ネットワーク「<math>\pi</math>-HUB」の構築</li> </ul>
評価員	<ul style="list-style-type: none"> <li>・学術水準向上に向けた評価・助言、ならびに領域運営に対する評価・助言</li> <li>・若手研究会への助言</li> </ul>

企画・運営：福島孝典（研究代表者：領域代表・領域の総括）、櫻井英博（分担者：広報・連携支援・ $\pi$ 造形スクール運営担当）、芥川智行（分担者：事務局、シンポジウム担当）、関 修平（連携研究者：共同研究推進担当）

若手研究会：矢貝史樹（分担者：責任者）、鈴木修一（連携研究者：補佐）

広報・連携支援：福島孝典（研究代表者：広報・連携支援補佐）、櫻井英博（分担者：広報担当、連携支援責任者）、関 修平（連携研究者：共同研究推進担当）、「語り部」佐藤健太郎（サイエンスライター：記事執筆、研究活動取材担当）

国際活動支援班：福島孝典、櫻井英博、忍久保洋、齋藤雅一、芥川智行、竹内正之、矢貝史樹、関 修平、竹延大志、木口 学、足立伸一、杉本 学、佐々木成朗、多田朋史

評価員：相田卓三、赤坂 健、川島隆幸、澤本光男、徳丸克巳、中村栄一、永瀬 茂、福住俊一、山口茂弘、吉野勝美、Dirk M. Guldi、Jay S. Siegel

## 8. 研究経費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む。）（1ページ以内）

領域研究を行う上で設備等（研究領域内で共有する設備・装置の購入・開発・運用・実験資料・資材の提供など）の活用状況や研究費の効果的使用について記述してください（総括班における設備共用等への取組の状況を含む。）。

### 【設備等の活用状況について】

本新学術領域の経費で購入した設備をはじめ、既存の設備も含めて、領域ウェブサイト上で情報を共有することで、積極的に設備・装置の共同運用や共同研究への利用を行なっている。以下に具体例を示す。

- (1) FT-NMR 日本電子 JNM-ECZ400S (A01・大阪大学・櫻井英博)：同大学内の A03 佐伯（関の分担）・A02 久木とともに3研究室で共同運用した。
- (2) 飛行時間型質量分析システム一式 ESI-TOF MS/microOTOFII-OCU (A01・大阪大学・鈴木修一)：A01 櫻井・山村・斎藤・古川・武田との共同研究で合成したサンプルの測定に活用。本質量分析装置は NMR が測定できない開設系物質でも迅速に検出可能なため、共同研究の推進に大きく貢献した。
- (3) 温度一周波数可変誘電率測定システム (A02・東北大学・芥川智行)：A01 櫻井・斎藤・重野・A02 福島との共同研究において、 $\pi$ 造形分子集合体の誘電率評価に用いた。
- (4) 示差走査熱量測定装置 メトラー・トレド DSC1-TS システム (A02・東北大学・芥川智行)：A01 櫻井・忍久保・鈴木・斎藤・重野・山村・A02 福島・宮坂との共同研究に利用。
- (5) 温度一周波数可変誘電率測定システム (A02・東北大学・芥川智行)：A01 櫻井・斎藤・重野・A02 福島・竹内との共同研究において、 $\pi$ 造形分子集合体の電場一分極応答評価に用いた。
- (6) ストップフロー分光光度計 JASCO FS-110, SFS-472 (A02・物質材料研究機構・竹内正之)：2016年度の追加配分で購入し、A02 矢貝との共同研究で分子集合体の形成プロセス評価に利用した。
- (7) 熱起電力計測ユニット オミクロン AFM 計測ユニット/ケースレー電流アンプ (A03・東京工業大学・木口学)：本装置は2016年度の追加配分で購入し、A01 忍久保・A02 福島・A03 多田との共同研究において単分子の熱起電力測定に活用した。
- (8) 高開口角ダイヤモンドアンビル (A03・高エネルギー加速器研究機構・足立伸一)：本備品は2016年度の追加配分で購入し、A01 櫻井・忍久保・A02 福島・A03 関との共同研究において高圧下での単結晶 X線構造解析に活用した。
- (9) クラスタ計算機 DL360 Gen9 サーバ 3台 (A03・熊本大学・杉本学)：本設備は2016年度の追加配分で購入し、A01 櫻井・A02 福島・竹内・矢貝・A03 中村・小島らとの共同研究において、 $\pi$ 造形分子・分子集合体の電子状態計算による解析に活用された。
- (10) 単結晶試料熱電特性測定装置 (A03・奈良先端科学技術大学院大学・小島広孝)：A01 櫻井・忍久保・辻・畠山・A02 林・A03 小島らとの共同研究において、 $\pi$ 造形分子・分子集合体の結晶状態での熱起電力測定に活用された。

### 【総括班経費の効果的使用について】

**人件費** 総括班の活動においては、過度な事務負担を避け、できる限り自由な研究環境を確保するために、①代表（福島）、②事務局（芥川：シンポジウム運営など）、③広報（櫻井：含 $\pi$ 造形スクール運営）、④国際（関： $\pi$ -Hub）に分担し、代表と事務局にはそれぞれ事務補佐員を配置し、また広報には、新学術領域研究ではまだ例の少ないリサーチアドミニストレーター（URA）相当の事務職員を充て、可能な限り研究者の負担を軽減する体制を整えた。さらに総括班付きの広報担当特任研究員として、有機化学美術館をはじめ数多くの著作で知られるサイエンスライター、佐藤健太郎氏を招き、一般市民にもわかりやすい情報発信のチャンネルを確保した。具体的には、東京化学同人者が出版している一般誌「現代化学」に毎月2ページ分、広告記事の形で $\pi$ 造形科学のニュースレターを発信しており、その執筆は佐藤氏が担当している。研究期間の後半には、産学連携を担う特任研究員を雇用し、本領域成果や開発された物質群を産業界にも広く紹介し、社会実装の取り組みを推進した。

**旅費** 旅費には、公開シンポジウムや国際シンポジウムで招待した外部からの講演者の旅費や、総括班会議のための旅費の他に、「 $\pi$ 造形スクール」の費用が含まれている。 $\pi$ 造形スクールは、本領域が創設した重要なシステムの一つであり、領域外を含む異なる研究グループ間や異分野間の価値観の共有を触発する場としての中長期滞在型共同研究を推進するもので、主として大学院生や学位取得前後の若手研究者を対象としている。従来、大学間での学生交流は比較的手続きが煩雑となり、個人ベースでの申請では、その面倒さが共同研究の機運を削いでしまう要因ともなっていたが、この費用を総括班経費として適宜機動的に運用することで、短期招聘も含め、多くの若手研究者の活動支援に寄与することが可能となった。

**その他** ホームページ制作、シンポジウム開催経費等については、それぞれ担当を一元化することで効率良く運用した。

・研究費の使用状況 ((1), (2), (3) を合わせて3ページ以内)

(1) 主要な物品明細(計画研究において購入した主要な物品(設備・備品等。実績報告書の「主要な物品明細書」欄に記載したもの。)について、金額の大きい順に、枠内に収まる範囲で記載してください。)

年度	品名	仕様・性能等	数量	単価(円)	金額(円)	設置(使用)研究機関
26	FT-NMR	日本電子 JNM-ECZ400S	1	23,695,200	23,695,200	大阪大学
	飛行時間型 質量分析シス テム一式	超高精度 ESI-TOF MS/micrOTOFII-OCU	1	17,922,600	17,922,600	大阪市立大学
	飛行時間型 質量分析装 置	米ブルカー Microflex リ ニア-NE	1	14,094,000	14,094,000	名古屋大学
	MultiMode8 型 SPM システム	MM8-HS1409	1	11,997,720	11,997,720	大阪大学
	レーザーラマ ン分光光度計 システム	NRS-4100(SYS)	1	11,858,400	11,858,400	大阪大学
27	核磁気共鳴 装置	独国ブルカー・バイオス ピン社製 核磁気共鳴 装置 AVAN	1	21,653,244	21,653,244 (4,330,650)	東京工業大学
	試料水平型 X 線回折装置	(株)リガク製・ SmartLab-ASD	1	6,999,156	6,999,156	東北大学
	ハイパフォー マンス・コンピ ューター式	HPC システムズ HPC5000-XH224RIP	1	3,402,000	3,402,000	電気通信大学
28	高速 1 次元検 出器	(株)リガク製・D/teX Ultra250-ASD	1	5,961,600	5,961,600	東北大学
	ストップフロ ー分光光度 計(共用)	FS-110, SFS-472	1	4,536,000	4,536,000	物質・材料研究機構
	ナノ秒 YAG レ ーザー	リトアニア国 EKSP LA 社製 NT341A-YAG-4H 型	1	4,536,000	4,536,000	京都大学
29	高精度ガス/蒸 気吸着量測 定装置	マイクロトラック・ベル・ BELSORP-maxII-SPTA	1	4,622,400	4,622,400	東北大学
	水平ローテー タプローブ	米国カンタム・デザ イン社製 4084-304R	1	2,095,200	2,095,200	名古屋大学
	窒素ガス発生 装置(共用)	米国ブルカー・ダ ルトニクス社製 AT10NP-CST-NK	1	2,000,000	2,000,000	名古屋大学
30	高精度ガス/蒸 気吸着量測 定装置	BELSORP-maxII-SPTA 用追加オプション	1	4,622,400	4,622,400	東北大学
	リサイクル分 取 HPLC	LaboACE LC-5060	1	3,888,000	3,888,000	物質・材料研究機構
	nanoscope v 高性能演算シ ステム	米国ブルカーナ ノ社 SPC-180508-03	1	3,794,688	3,794,688	東京工業大学

- (2) 計画研究における支出のうち、旅費、人件費・謝金、その他の主要なものについて、年度ごと、費目別に、金額の大きい順に使途、金額、研究上必要な理由等を具体的に記述してください。

【平成 26 年度】

**旅費**

1.  $\pi$ 造形スクール（中長期滞在型共同研究 1 件、招聘型 1 件）の実施 計 602,475 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当） 担当：A01 櫻井、A02 福島
2. 公開・国際シンポジウムに係る招待講演者、評価班の旅費 計 167,630 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）計 7 名

**人件費・謝金**

1. ポスドクの雇用費 計 3 名 9,171,611 円 所属先：A02 竹内、A03 竹延、木口
2. 技術職員、研究員の雇用費 計 4 名 3,820,139 円 所属先：A02 福島（2 名）、A03 多田、足立
3. 事務職員の雇用費 計 2 名 1,790,081 円 所属先：A02 芥川
4. URA の雇用費 計 1 名 1,612,411 円 所属先：A01 櫻井

**その他**

1. Web サイト作成費（若手研究会 Web サイト含む） 2,388,960 円
2. 月刊「現代化学」広告掲載料 756,000 円
3. シンポジウムの会場利用料 119,818 円

【平成 27 年度】

**旅費**

1. ICMAT2015&IUMRS-ICA2015（シンガポール、\*領域協賛学会）への参加 計 1,867,162 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）参加者：A01 櫻井、忍久保（他研究協力者 5 名）、斎藤、鈴木、A02 福島 計 10 名
2.  $\pi$ 造形スクール（中長期滞在型共同研究 4 件、招聘型 1 件）の実施 計 1,691,585 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）担当：A01 櫻井、忍久保、斎藤、武田、A02 芥川、長田、生越、宮坂
3. 公開・国際シンポジウムに係る招待講演者、評価班、学術調査官の旅費 計 332,240 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）計 8 名

**人件費・謝金**

1. ポスドクの雇用費 計 8 名 29,711,239 円 所属先：A01 櫻井、A02 矢貝、竹内、A03 木口、竹延、足立
2. 技術職員、研究員の雇用費 計 7 名 12,694,658 円 所属先：A02 芥川、福島（4 名）、A03 関、多田
3. 事務職員の雇用費 計 4 名 4,416,960 円 所属先：A01 田中、A02 芥川（2 名）、福島
4. URA の雇用費 計 1 名 3,949,804 円 所属先：A01 櫻井
5. 国際シンポジウム講演謝金 計 3 名 75,393 円

**その他**

1. 月刊「現代化学」広告掲載料 1,296,000 円
2. 要旨集印刷費、ポスター制作費 計 581,904 円
3. シンポジウムの会場利用料 計 228,000 円

【平成 28 年度】

**旅費**

1. 公開・国際シンポジウムに係る招待講演者、評価班、学術調査官の旅費 計 1,694,871 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）計 21 名
2. 229th ECS MEETING（アメリカ、サンディエゴ \*領域共催学会）への参加 計 1,274,618 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）参加者：A01 忍久保、櫻井、A02 福島、A03 竹延 計 4 名
3.  $\pi$ 造形スクール（中長期滞在型共同研究 2 件、招聘型 1 件）の実施 計 547,520 円（内訳：航空券代を含む交通費、宿泊費、日当）担当者：A01 櫻井、忍久保、A02 竹内、A03 関

**人件費・謝金**

1. ポスドクの雇用費 計 8 名 35,448,368 円 所属先：A02 矢貝、竹内、A03 木口、竹延、関、足立
2. 技術職員、研究員の雇用費 計 4 名 1,101,212 円 所属先：A02 福島（4 名）
3. URA の雇用費 計 1 名 4,573,220 円 所属先：A01 櫻井
4. 事務職員の雇用費 計 4 名 4,251,165 円 所属先：A01 田中、A02 福島（2 名）、芥川
5. 国際シンポジウム講演謝金 計 8 名 266,256 円
6. 公開シンポジウム講演謝金 計 1 名 17,509 円

## その他

1. 月刊「現代化学」広告掲載料 1,296,000円
2. CUR0-Pi II (アメリカ、オレゴン \*領域共催学会) 学会共催費 1,187,910円
3. 要旨集印刷費、ポスター制作費、看板作成費 735,804円
4. シンポジウムの会場利用料 計288,906円

## 【平成29年度】

### 旅費

1. 231st ECS MEETING (アメリカ、ロサンゼルス \* $\pi$ 造形共催学会) への参加 計1,141,530円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 参加者: A01 忍久保、A02 福島 (分担者梶谷)、A03 竹延 計3名
2.  $\pi$ 造形スクール (中長期滞在型共同研究2件、招聘型1件、派遣型2件) の実施 計1,045,763円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 担当者: A01 櫻井、清水(宗)、辻、森崎、A02 山本
3. 公開シンポジウムに係る招待講演者、評価班、学術調査官の旅費 計19,180円 (内訳: 交通費、宿泊費、日当) 計4名

### 人件費・謝金

1. ポスドクの雇用費 計10名 45,706,794円 所属先: A01 櫻井、A02 福島、矢貝、竹内(2名)、A03 木口、竹延、関(2名)、足立
2. 技術職員、研究員の雇用費 計7名 11,264,224円 所属先: A02 福島(4名)、A03 竹延、多田(2名)
3. 事務職員の雇用費 計5名 5,085,875円 所属先: A01 田中、芥川(2名)、A02 福島(2名)
4. URAの雇用費 計2名 4,865,819円 所属先: A01 櫻井、A02 福島
5. 国際シンポジウム(ハイデルベルグ) 講演者謝金 計2名 200,000円

## その他

1. 月刊「現代化学」広告掲載料 1,296,000円
2. シンポジウムの会場利用料 計117,200円
3. 要旨集印刷費 93,312円

## 【平成30年度】

### 旅費

1.  $\pi$ 造形スクール (中長期滞在型共同研究3件、招聘型2件、派遣型9件) の実施 計2,843,835円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 担当者: A01 櫻井、忍久保、武田、村岡、辻、忍久保、A02 芥川、福島、矢貝、竹内、山本、小野、A03 関
2. 233rd ECS Meeting(アメリカ、シアトル \*領域共催学会) への参加 計1,892,089円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 参加者: A01 櫻井、忍久保、A02 福島、A03 多田、竹延 (研究協力者田中)、関、計6名
3. 公開・国際シンポジウムに係る招待講演者、評価班、学術調査官の旅費 計813,548円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 計10名
4. CUR0-Pi III (イギリス、オックスフォード \*領域共催学会) への参加 計634,524円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 計2名 参加者: A01 斎藤 (分担者古川)、A02 福島
5.  $\pi$ -Figuration Japan-Spain Symposium 学会 (スペイン) への講演者の招聘費 (すべてヨーロッパ圏内より招聘) 計301,823円 (内訳: 航空券代を含む交通費、宿泊費、日当) 計3名

### 人件費・謝金

1. ポスドクの雇用費 計6名 19,113,864円 確認済 所属先: A02 福島、矢貝(2名)、竹内、A03 関、足立
2. 技術職員、研究員の雇用費 計5名 8,145,586円 所属先: A02 福島(3名)、A03 竹延(2名)
3. 事務職員の雇用費 計6名 6,617,025円 所属先: A02 福島、芥川、矢貝、A03 竹延
4. URAの雇用費 計2名 4,913,753円 所属先: A01 櫻井、A02 福島

## その他

1. 学会共催費 CUR0-Pi III (イギリス、オックスフォード \*領域共催学会) 1,332,760円
2. 月刊「現代化学」広告掲載料 1,296,000円
3. 要旨集印刷費、看板作成費 389,800円

(3) 最終年度(平成30年度)の研究費の繰越しを行った計画研究がある場合は、その内容を記述してください。

該当しない。

## 9. 当該学問分野及び関連学問分野への貢献度（1ページ以内）

研究領域の研究成果が、当該学問分野や関連分野に与えたインパクトや波及効果などについて記述してください。

本領域の研究成果と貢献度を「自己評価」するために、学理構築のシーズ、見出された「新機能・新現象」、我が国の「研究力強化」につながる取り組みと出口、「若手育成」、「国際活動」、「社会貢献」の6つの指標を設け、これらを総括し、特筆すべき事項を以下に示す図としてまとめた。



基礎科学分野における研究プロジェクトの取り組みから生まれる研究成果のインパクトや波及効果を量る指標は、第一に発表論文の「質」と「量」になると考えられる。引用回数も重要な指標であるが、実質的な研究期間と終了して間もない領域であることに鑑みると、現時点で有意なデータを収集することが困難であるため、研究開始から現在までに発表した国際的にも一流誌とみなされている IF の高い学術誌への論文掲載実績を示す (括弧内の数字は2018年のIF)。全発表論文数1271報の実績とともに、

Nature (41.6)	1報	Nat. Chem. (26.2)	11報
Nat. Nanotech. (37.5)	1報	Nat. Mater. (39.2)	4報
Nat. Photon. (32.5)	1報	Nat. Commun. (12.4)	26報
Science (41.1)	5報	Sci. Adv. (11.5)	6報
J. Am. Chem. Soc. (14.4)	68報	Nano Lett. (12.1)	3報
Angew. Chem. Int. Ed. (12.1)	77報	Adv. Mater. (22.0)	10報
Chem. Commun. (6.3)	65報	Chem. Sci. (9.1)	19報
Phys. Rev. Lett. (8.8)	4報	Chem. Lett. (1.6)	65報
Bull. Chem. Soc. Jpn. (3.5)	22報		

研究の質を示す国際的一流誌に掲載された論文は、当該学問分野ばかりでなく関連分野にも大きなインパクトを与えるに十分であったと評価している。また、研究期間を通じ、領域研究者間で「構造美」を「機能美」と考える物質設計概念や三つの $\pi$ 電子機能の捉え方は浸透しており、これらを基盤として多くの顕著な「新機能」・「新現象」が見出された。具体的に目に見えるもう一つの出口として、JSTのCRESTプロジェクト「熱制御」2件 (H28.10～研究代表者 A02 福島、分担者 A02 芥川、A03 木口他、および、H28.10～研究代表者 A03 公募 中村)、「革新的反応」1件 (H28.10～研究代表者 A02 公募 生越)、さきがけ「反応制御」1件 (H28.10～研究代表者 A02 公募 アルブレヒト) などが、本領域から立ち上がっている。

研究者ネットワークによる国際的ビジビリティの向上を目指した「国際活動」では、研究期間の後半に開催した海外遠征型の国際シンポジウムが海外の研究者・研究機関との連携強化に繋がり、例えば、今年度11月にもポーランドで国際シンポジウムが継続して開催される予定である。次項で詳述する「若手育成」では、インターンシップ制度 ( $\pi$ 造形スクール) の企画が功を奏し、若手・学生の躍進が目立った。なお、当領域独自のインターンシップ制度は、その後立ち上がった多くの新学術領域で踏襲されている。「社会貢献」に関しては、「ニュースレターを限られたアカデミアに配布する」従来の方法ではなく、一般誌に研究成果をわかりやすく連載する試みや、一般書籍の発行を通じて、広く一般社会への情報発信にも注力した。「基礎科学から実応用まで」というスキームは、短い研究期間で実現することは一般に困難である。本領域で開発された分子や反応試薬が市販された例は多くあるが、真の社会実装は後半まで実現できていなかった。しかし、終了間際に A01 (公募) 畠山が開発した発光分子が有機 EL 素子としてスマートフォンに実装されたことは快挙であった。本領域の他の研究者によって見出された物質や技術を基に、いくつかの産学連携研究も開始されており、今後同様の例が現れることが期待できる。



## 10. 研究計画に参画した若手研究者の成長の状況（1ページ以内）

研究領域内での若手研究者育成の取組及び参画した若手研究者（※）の研究終了後の動向等を記述してください。

※研究代表者・研究分担者・連携研究者・研究協力者として参画した若手研究者を指します。

### 【若手研究者育成の取り組み】

本領域では、若手研究者の豊かな探求心と感性を基盤として、異分野間での人材・価値観・知見の共有・攪拌により、複数の学理を身につけた、20年後を担う研究者育成を目指し、以下に示す具体的な活動を行った。若手会ロゴ（右図）には、「若手研究者のほとばしる探求心と豊かな感性を基盤として、異分野間での積極的な人材・価値観・知見の共有・攪拌を図る」という、本領域の強い思いが込められている。

(1)  $\pi$ 造形若手会（合宿）の開催：引力的かつ加速度的に研究を推進するため、合宿形式で若手研究者（若手スタッフ・ポスドク・大学院生）のみが参加するクローズドな研究会を年1回開催した。秘密保持契約書を交わした上で未公開の研究内容についても発表を行い、現場を知る研究者間での積極的な情報共有を図るとともに、共同研究の可能性を議論した。この合宿から多くの成果が生まれたことは、共同研究実績が物語っている。また、アカデミックや基礎研究の魅力を学生に伝えることを目的に若手スタッフが講演を行なった。初年度の参加者50名の会は、H27年度以降は公募班も含め100-150名となり、大きな盛り上がりを見せた。参加学生へのアンケート結果から、自身の研究や進路を深く考える機会となったことが伺え、若手会に参加することで博士課程への進学を決心した学生が多くいることも明らかになった。

(2)  $\pi$ 造形スクールの開設・運営：領域外を含む異なる研究グループ間や異分野間の価値観の共有を触発する場として、中長期滞在型共同研究を行う $\pi$ 造形スクールを開設した。これまで28名（国内12名；海外16名）が本制度を利用して、それぞれ研鑽を積み、分野貫通型研究を実践し、成果をあげた。

(3) 若手研究者のビジビリティーの向上：活動内容と実績を外部に発信を目的として $\pi$ 造形若手会webページ（<http://pi-figuration.jp/foryoung/index.php>）を開設・運営した。 $\pi$ 造形若手会に参加した学生によるニュースレター（No.1~16）、 $\pi$ 造形スクールの体験レポート「国内留学訪問記」（11件）、「国外留学訪問記」（20件）、および顕著な研究成果をあげた大学院生のインタビュー記事（10件）、領域内若手研究者の受賞のニュース等を掲載し、いずれもモチベーション向上の一旦を担った。また、当該分野における若手のアクティビティを示すべく、矢貝（A02）・杉安（A02 竹内の分担者）らによる日本化学会年会の特別企画、鈴木（A01）によるCSJフェスタでのコラボ企画など、各種シンポジウムにおける招待講演者としての発表を通して、若手研究者のビジビリティーの向上を積極的に図った。



## 11. 総括班評価者による評価（2 ページ以内）

総括班評価者による評価体制や研究領域に対する評価コメントを記述してください。

### 赤坂 健（国際科学振興財団 主席研究員・筑波大学 名誉教授）

新学術研究として集団でやることの価値を存分に見せている。 $\pi$ 造形による新物質創製、新機能創出が成し遂げられている。特に、領域内の共同研究が予想を越えて飛躍的に増加していることが示され、若手の力・形成されたネットワークが大きく貢献していることが示されていることは強みである。今後、本新学術研究の本流から新たな分野開拓のための新学術の立ち上がりとともに、合わせてより特化した分野創出への展開もあらんことを期待する。

### 福住 俊一（名城大学理工学研究科 特任教授・大阪大学 名誉教授）

本領域では、「 $\pi$ 造形」という設計理念に基づき、新物質・新機能の創出と新現象発掘を追求し、個々のメンバーが共同研究を中心に多数の世界レベルの研究成果を挙げたことは高く評価したい。最後のまとめにあたっては、所期の研究目的が全体としてどこまで達成できたと言えるかを俯瞰的に総括するとともに、それに基づいて今後の $\pi$ 造形分野の発展の展望をその真の応用も含めて明確にすることが望まれる。

### 相田 卓三（東京大学 教授・理化学研究所創発物性科学研究センター 副センター長）

領域代表者の破格のリーダーシップの中、比較的若手で構成されたメンバーが情熱と意地を傾けて研究活動を行い、関連分野を激震させる驚くべき、そして世界に思いきり誇れる研究成果を数多く創出した。分野横断型研究成果も含め「新学術領域」の「新」が何を意味するのかをまわりに見せつけた。この驚くべき実績に最高の評価を与えたい。同時にこの予算規模と制度設計でこれだけの成果を出すことが「例外中の例外」であることを我々は認識すべきである。「新学術領域」が研究活動にのみ集中できる制度設計になっていたなら、この破格のメンバーはもっと多くの成果を出せていたに違いない。厳選したメンバーで再構成した研究組織に対して「研究マキシマム/他ミニマム」で発展的な継続予算措置が可能な制度を設けるべきである。さもなければこの評価は単に聞こえの良い評価で終わってしまう。採択率が低い中、選ばれる側と選ぶ側の両方に膨大な労力がかかり、選ばれた後も度重なる会合やアウトリーチでリーダーやメンバーが膨大な労力を使い、ありえない数の提出書類を強要される現行制度は、他国では到底受け入れられない。和を尊ぶ国民性に甘えた制度設計の結果、日本は G8 の中で唯一論文発表数を大きく減らし、トップ 1%論文の数では人口がはるかに少ない多くの国の後塵を拝して世界の 10 位以下に転落している。国際会議の舞台から日本人スピーカーが消え始めている現状も深刻である。制度設計を大きく変える必要がある。少なくとも、破格の成果を上げたこのような研究集団を半自動的に継続サポートする必要がある。さもなければ、日本の未来に立ち込める暗雲は払拭できない。

### 中村 栄一（東京大学総括プロジェクト機構 特任教授・東京大学名誉教授）

$\pi$ 共役分子の化学は 19 世紀のケクレ以来の古典的な研究分野であるが、21 世紀に入り、大きな質的な転換期を迎えた。本研究グループはその期を逃すことなく、様々な分野の比較的若い世代の研究者を糾合して、質量共に充実した研究を実施した。基礎化学としての図抜けた業績を中心に、全員が一致協力して社会や産業へのフィードバックにも意を用いた研究を行ったことを高く評価する。また本研究の成果をさらに発展させるために必要なさらなる研究資金を獲得した研究者、本研究を期に昇進を果たした研究者を数多く輩出していることも、本新学術領域研究の成功の証である。

### 永瀬 茂（京都大学福井謙一記念研究センター FIFC リサーチフェロー・分子科学研究所 名誉教授）

領域代表の研究推進への強力なリーダーシップおよび班員間の密な研究交流と研究連携をもとに、数多くの新現象、新機能、新概念を見出して、当初計画した研究目標以上の成果を達成している。 $\pi$ 造形科学の国内外への更なる波及効果と新たな展開を期待します。

### 山口 茂弘（名古屋大学 教授）

本新学術領域では、「 $\pi$ 造形」の概念のもと、卓越した成果が多く生み出された。 $\pi$ 電子科学における従来型の合成化学-物性化学-理論化学の連携を謳うだけにとどまらず、構造美と動的特性の視点を入れた点が本領域の肝である。この観点からの取り組みにより融合を進め、3次元芳香族性の機能や、数ミリ~数センチメートルにも及ぶ超長距離構造秩序を発現する分子集合体など、多くの重要な発見を生む原動力となった。全 1271 報の論文総数はもとより、そのうちの 130 報が領域内共同論文という数字は、分野融合の証しであり、評価に値する。この融合を数多く生み出されたのも、領域

代表者の強力なリーダーシップによるところが大きい。若手研究者を多く集め、情報発信に努め、勢いのある集団を実に巧く作り上げられたと大いに評価できる。この領域で築かれた学理と人のネットワークは、本領域で完結するものではなく、さらなる発展の起点になるべきものである。その継続的発展を支援する体制が望まれる。

#### 川島 隆幸（群馬大学 客員教授・東京大学 名誉教授）

特異な構造の $\pi$ 分子の新合成法や新機能開発、機能の向上など、多くの成果をあげている。平均年齢が若い研究者からなる本領域研究を成功裏に運営された、領域代表者および班長各位に敬意を表したい。領域内共同研究論文が130件、国際共同研究論文が58件発表され、これは全発表論文の約15%に匹敵するものであり、新学術領域研究のミッションの一つを達成したと言っても過言ではない。加えて、本領域の運営の目玉であった勉強会と海外派遣は、国内外の研究者間の強固なネットワーク作成と、それによる本研究領域に参画した研究者の今後の研究の発展をもたらす企画として、大いに評価できる。

#### 徳丸 克己（筑波大学 名誉教授）

本研究領域は、平面型から湾曲型、さらに球状あるいは層状で、しかもヘテロ原子から構成される場合を含む各種の $\pi$ 電子系ならびにそれら相互間の作用について、多くの事実を見出してきたのは、喜ばしいことである。例えば、古くから知られているトリフェニレンの分子に対称的に6個のエステル基を置換した化合物は、それらの分子間の相互作用により、液体と固体の性質を併せもつ新規な物性を示し、今後の展開が期待される。また、 $\pi$ 電子から構成される環と $\sigma$ 電子から構成される環から成る“double aromaticity”も最近報告された。この領域の研究は基礎的なものであるが、有機エレクトロニクスやセンシングの分野とは、非常に距離が近い。例えば、トリプチセンの分子に同じ向きに3個の長いアルキルオキシル基を置換した分子は極めて規則性の高い自己集合性を示し、センシングのための有機トランジスタの絶縁層として利用される。また、電子受容性の高いホウ素原子と電子供与性の高い窒素原子を含む芳香環が創成され、その光励起状態が極めて特異的な性質を示すことを活用して、有機EL材料として、すでに市販のスマートフォンに搭載されるに至っている。今回本年3月末に開催の終了シンポジウムにおいて、海外からのスピーカーを含めて、それぞれが研究している物質の有機太陽電池や有機EL材料としての利用が報告されたが、しかし、この実用に近い分野で、それぞれの物質の電池やEL材料としての特性の位置づけに触れられたものは必ずしも多くなかったのが現状であった。

本領域では、参画する研究者らそれぞれの研究を雑誌「現代化学」に長い間に亘って連載し、若年の研究者も含めて、その研究の状況を広く紹介することができたのは、よい試みであった。

本領域の終了に際しては、各研究者の報告は示されると思うが、領域全体としての「目玉」にあたる研究成果を、領域代表者らの独断的判断でもよいから、網羅的ではなく、読むだけで分かり易い形で解説して発信して下さるとよいと思う次第である。「現代化学」2019年6月号に掲載の福島領域代表へのインタビュー記事は、まさにそれに沿ったものと言える。敢えて論ずるならば、相応の国費を投入して進めた研究の顕著な成果がわが国の産業の研究者らによっても活用される形をとられることを期待したい。因みに、本評価者が現役で、当時の「特定研究」を受領していた頃、関連のある二三の研究領域を纏めて、数名ずつの代表が研究成果を分かり易い形(当時のプレゼンはOHPであったが、全体の枚数、1枚ごとの字の大きさなど細かい指示があった)で、多くの人々が集まりやすい経団連会館で、最終年度末の冬の朝から満員の会場で講演(各々45分位か)し、刊行物として纏める機会があったことを思い出す次第である。ある時期から科研費のこの形式の発表は行われなくなったが、この領域の目玉ともいえる研究成果の分かり易い形での文章による発信を期待する次第である。