

領域略称名： π 造形科学

領域番号：2601

平成28年度科学研究費補助金「新学術領域研究
(研究領域提案型)」に係る中間評価報告書

「 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」

(領域設定期間)

平成26年度～平成30年度

平成28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

研究領域全体に係る事項

1. 研究領域の目的及び概要	6
2. 研究の進展状況	8
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	11
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	13
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開発表等）	16
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	21
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	23
8. 研究費の使用状況（設備の有効活用、研究費の効果的使用を含む）	24
9. 総括班評価者による評価	25
10. 今後の研究領域の推進方策	27

研究組織 (総括：総括班，支援：国際活動支援班，計画：総括班及び国際活動支援班以外の計画研究，公募：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 総括	26102001 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	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 支援	15K12345 π -HUB： π 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
A01-1 計画	26102002 バッキーボールをモチーフとする湾曲 π 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
A01-2 計画	26102003 反芳香族化合物による拡張 π 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	3
A01-3 計画	26102004 新しい触媒的芳香環構築反応を駆使したらせん π 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
A01-4 計画	26102005 革新的合成手法を駆使した自在開殻 π 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
A01-5 計画	26102006 元素の特性を活かした典型元素 π 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
A02-1 計画	26102007 強誘電性・強弾性機能の発現を目指したソフト π 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	3
A02-2 計画	26102008 大規模分子集積化による巨視的 π 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	6
A02-3 計画	26102009 共役ポリマーのアンサンブル π 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
A02-4 計画	26102010 複合アセンブリ π 造形システム	平成26年度 ～ 平成30年度	矢貝 史樹	千葉大学・工学研究科・准教授	1
A03-1 計画	26102011 複合電磁波分光法による π 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	7
A03-2 計画	26102012 π 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

A03-3 計画	26102013 単一 π 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
A03-4 計画	26102014 放射光X線を用いた π 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
A03-5 計画	26102015 π 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・ 准教授	2
A03-6 計画	26102016 π 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・情報理工学研究科・ 教授	4
A03-7 計画	26102017 局在分子スピン操作の ための外場制御型 π 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	4
計画研究 計 18 件					
A01 公募	15H00981 ラセン不斉非平面 π 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 公募	15H00982 多様な刺激に応答する π 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 公募	15H00985 リン含有曲面分子の曲 率制御を用いた多彩な π 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 公募	15H00987 ジベンゾクリセンをモチ ーフとする曲面 π 電子系 の開発	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	辻 勇人	神奈川大学・化学科・教授	1
A01 公募	15H00989 非対称モノマーの配列 を鍵とした巨大双極子 π 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 公募	15H00992 面性不斉分子で彩る光 学活性段違い π 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 公募	15H00993 サブナノ空間の官能基 化による球状 π 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	3

A01 公募	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 公募	15H00997 有機リン化合物のしな やかな反転特性を活か した π 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 公募	15H01001 芳香族性の新たな物性 指標を指向したアザポ 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・工学府・准教授	1
A01 公募	15H01004 タンデムヘテロ Friedel-Crafts 反応を鍵 とした拡張 π 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
A02 公募	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・理学部化学科・准教授	3
A02 公募	15H00983 π -集積型ピラードレイ ヤー構造による格子・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 公募	15H00986 π 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 公募	15H00988 水素結合ダイナミクスと 連動するスイッチャブル π 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 公募	15H00990 柱状 π 分子の 2 次元集 積化による π 造形システ ム	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	生越 友樹	金沢大学・理工学域・教授	1
A02 公募	15H00994 外部刺激による動的構 造制御を特長とする π 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 公募	15H00998 3 回対称 π 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	2

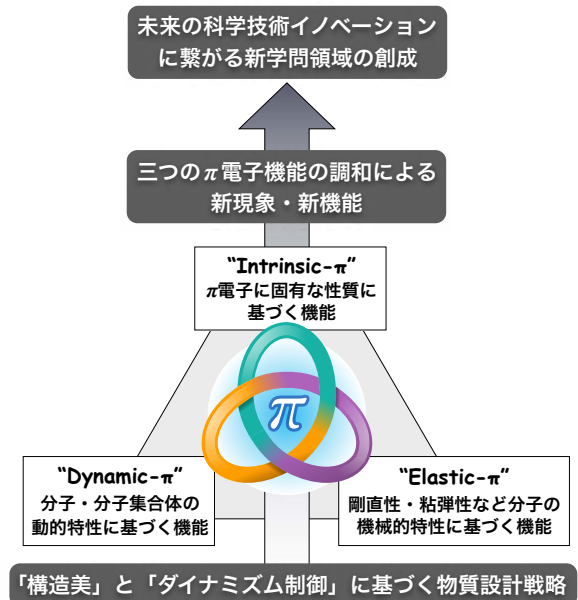
A02 公募	15H01002 ディスクリートな π グラフ ェンのテンプレート合成 と機能性創出	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	藤ヶ谷 剛彦	九州大学・工学研究院・准教授	1
A02 公募	15H01003 π 造形システムの電子 励起状態制御	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	羽會部 卓	慶應義塾大学・理工学部・准教授	2
A03 公募	15H00984 機械的応力がもたらす π 造形機能物質の巨大 分極応答の探索	平成 27 年度 ～ 平成 28 年度	橋本 顕一郎	東北大学・金属材料研究所・助教	4
A03 公募	15H00995 表面重合した新規ナノ 炭素細線の分子レベル 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 公募	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 公募	15H01000 非平衡状態下での分子 振動と π 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 公募	15H01005 π 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・助教	2
A03 公募	15H01006 機械的刺激に応答する 光・電子機能 π 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	独立行政法人理化学研究所・研究 員	3
公募研究 計 26 件					

研究領域全体に係る事項

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す新学術領域である。 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。そして、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。合成、物性、理論の研究者による分野貫通型研究を通じて、次世代機能物質科学の新たな潮流を拓く学術領域を創成する。



1. 学術的背景および我が国の学術水準の向上・強化へ向けて

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」というかつての常識を覆し、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から明らかなように、我が国の研究者が数々のブレイ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、そして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、その結果、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、論文の引用件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。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る。

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」の三学理を貫通させた研究手法により、他の追随を許さないスピードで新機能物質創製を推進する。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術領域創成を目指す。

2. 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 年度まで実施された「高次 π 空間の創発と機能(π 空間領域)」がある。この領域は、これまで当該分野をリードしてきた 50~60 歳台の研究者を主体に、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、 π 空間領域の質の高さを継承しな

目的(つづき)

表. π 空間領域から π 造形領域への進化

π 空間から π 造形へ	「空間」と「場の制御」を基本概念とする Intrinsic- π 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- π /Dynamic- π /Elastic- π 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へ	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 歳台の研究者(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

がらも、上の表に記載した新たな指針に基づき、研究内容と体制を刷新して臨む。

3. 研究期間における取り組み

本領域名の「 π 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をもつ分子は、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強い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「 π 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 π 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が引き起こす様々な現象を三つの π 電子機能として捉える。

(1) **Intrinsic- π** : 分子の大きな動きに依らない π 電子に固有な性質に基づく機能

(2) **Dynamic- π** : 分子・分子集合体に特有の動的特性に基づく機能

(3) **Elastic- π** : π 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

π 電子系物質に能動的または受動的に生じる動的(Dynamic- π)、機械的(Elastic- π)変化は、電子機能(Intrinsic- π)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- π とDynamic- π の調和による熱分子モーターや、Intrinsic- π とElastic- π 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「 π 造形科学の概念」を具現化するため、A01(π 分子造形)班は、独自の有機合成技術を駆使し、 π 分子造形の基盤となる新規分子骨格を創製する。A02(π 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 π 造形システムを構築する。A03(π 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 π 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に取り組む。

4. 領域の発展につながる研究人材の育成

当該分野における新現象・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る。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」、領域内の「中長期滞在型共同研究」を推進するとともに、領域外研究者を対象とする「 π 造形スクール」を開設する。これらの活動を通じて、大学院生も含めた活発な交流・議論の場を提供し、異分野間での価値観共有や斬新なアイデア創出を触発する。そして、複数の学理を身に付けた「マルチリンガル」な若手を育成する。領域全体で 100 名程度の博士学位取得者を輩出し、20 年後のリーダーを育成する。

2. 研究の進展状況〔設定目的に照らし、研究項目又は計画研究ごとに整理する〕(3ページ以内)

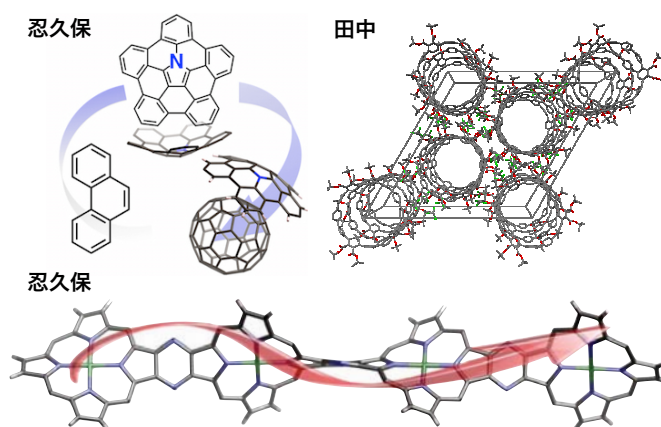
研究期間内に何をどこまで明らかにしようとし、現在までにどこまで研究が進展しているのか記述してください。また、応募時に研究領域として設定した研究の対象に照らして、どのように発展したかについて研究項目又は計画研究ごとに記述してください。

【研究項目 A01: π 分子造形 世界をリードする独自の有機合成技術】

A01 班では、世界をリードする独自の有機合成技術を駆使し、既存の手法では合成できなかった π 分子造形の基盤となる新規分子骨格を創製することを目的としている。具体的には、湾曲構造、らせん構造、反芳香族性、三次元芳香族性などの特徴をもつ、独自の分子群を造形する。また、 π 電子骨格に安定ラジカル(スピニュート)や典型元素を組み込み、 π 電子との相互作用を誘起し、特異な電子構造の発現を可能とする分子を造形する。これらの課題を実現する合成技術をもつ研究者を計画研究に配置し、検討を進めてきた。平成 27 年度からは、 π 電子物質群の多様性と深化を両立するため、独創的な合成技術を有する化学者 11 名を公募研究者として迎え、新奇な π 造形分子ライブラリの構築に力を入れてきた。

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、といった形式の研究者協働が期待されていたが、実際は想定以上に様々なタイプの共同研究が立ち上がった。研究項目間の連携はもちろん、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が挙げられる。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分子が生まれるなど、期待以上の新規分子、骨格の創製に成功している。

計画研究における主な成果として、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(櫻井)、複数のグループからそれぞれ独自の含窒素バッキーボウルの合成(図、忍久保、櫻井)、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(図、忍久保、A02 久木との協働)、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開発(田中、A02 竹内との協働)、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(図、田中、A03 木口との協働)などが挙げられる。特に、忍久保と公募研究の武田との A01 班員同士の協働研究においては、それぞれの得意分野を生かしたリン架橋ポルフィリノイドの合成に初めて成功し、それが近赤外領域まで吸収を持つ色素としての機能を示すことを見出しており、本学術領域研究によって初めてもたらされた成果であると言える。



一方、A03 木口との協働による金(111)表面でのスマネンの STM 観察とボウル反転操作の成功や、先述の含窒素バッキーボウルの導電性評価を含めた物性研究が A03 関によって実施されるなど、共同研究による成果も順調に現れている。さらに、Elastic- π へ向けた歪み分子への圧力印可効果研究のための計算手法開発を A03 杉本と協働で実施するなど、従来の共同研究とは一線を画した連携も生まれている。その結果、領域発足以来、計画班単独の研究のみで62報の論文として成果が既に公表されている。計画・公募研究を問わず、研究項目間の協働が活性化している。公募班も含めると、発表論文は130報に昇る。造形された分子のシステム化を通じ、新現象・新機能の探求に向けた研究が益々加速化するものと考えられる。

一方、A03 木口との協働による金(111)表面でのスマネンの STM 観察とボウル反転操作の成功や、先述の含窒素バッキーボウルの導電性評価を含めた物性研究が A03 関によって実施されるなど、共同研究による成果も順調に現れている。さらに、Elastic- π へ向けた歪み分子への圧力印可効果研究のための計算手法開発を A03 杉本と協働で実施するなど、従来の共同研究とは一線を画した連携も生まれている。その結果、領域発足以来、計画班単独の研究のみで62報の論文として成果が既に公表されている。計画・公募研究を問わず、研究項目間の協働が活性化している。公募班も含めると、発表論文は130報に昇る。造形された分子のシステム化を通じ、新現象・新機能の探求に向けた研究が益々加速化するものと考えられる。

【研究項目 A02: π 造形システム 世界をリードする π 分子集合体設計力】

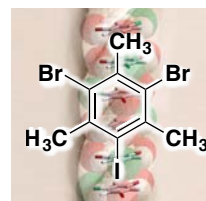
A02 班では、 π 電子系分子・高分子を構成要素に用いた独自の分子集積化技術により、 π 電子雲の空間的配置や配向を合目的的に制御し、ナノ～メゾ～マクロスケールの次元性をもつ π 造形システムを造形し、新現象・新機能を探ることを目的としている。計画研究では、外場応答する強誘電体・弾性体(芥川)、分子配列の乱れを極限まで低減可能な大規模二次元分子集積体(福島)、 π 共役高分子鎖間相互作用の自在制御による階層組織体(竹内)、リング・らせんなどの精緻な微細構造を有するナノ分子集積体(矢貝)の造形に

関する研究を実施した。

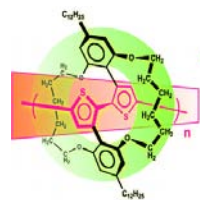
平成27年度からは9件の公募研究の参画を迎え、溶液～薄膜～単結晶に至る多様な分子集合体におけるナノ～メゾ～マクロスケールのキャリア輸送、発光特性、光応答、強誘電応答などの機能制御に関する研究を進めてきた。領域発足後およそ2年を迎えるにあたり、計画研究による分子集合体の構造制御、Dynamic な分子集合体の機能創製、ならびに超分子ポリマーの機能－形態制御については、計画研究者間の協働のもと、当初の計画以上の進捗があった。さらに、公募研究者らとの協働により、分子間相互作用の空間制御や配向を合目的的に制御するための手法に関する提案が数多くなされている。A01 班で造形された π 電子系分子を集積化によりシステム化する取り組みも着実に進んでいる。公開した例として、動的なお椀型分子をモチーフに、それを一次元的に精緻に集積した初めての液晶材料の開発(福島、A01 櫻井)、コーン型分子の集積化(山本、A01 山村)が挙げられる。

計画研究の主な進捗状況として、芥川らによる結晶中で協奏的に駆動する分子ローターの開発(図)、福島らによる独自の空間充填デザインによる大面積・高秩序分子薄膜の構築(図)、竹内らの超分子ポリマーの時間発展プログラムおよび被覆 π 共役高分子(図)、矢貝らによるナノスケールの光応答性超分子ポリマーの創製(図)などが挙げられる。物性計測を担うA03 班との協働も活発である。例えば、芥川は水素結合ダイナミクスを利用した発光性強誘電体の開発を、A03 関、足立、竹延との協働により成し遂げた。また、福島が開発したらせん状 π 共役オリゴマーや湾曲 π 分子の一分子挙動を A03 木口が探索し、Dynamic または Elastic- π に関する新機能発掘の糸口を掴みつつある。公募研究者の活躍も目覚ましい。山本らによる、 π 共役高分子を均一な球状組織体へと集積化し、共鳴発光現象を明らかにした成果は顕著な例である。これらの取り組みを通じて、領域発足以来、計画研究単独のみで57報、公募研究者の成果も加えると119報の論文が成果として既に公表されている。

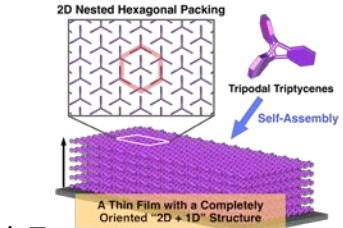
芥川



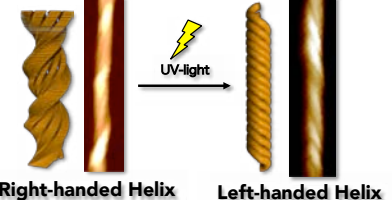
竹内



福島



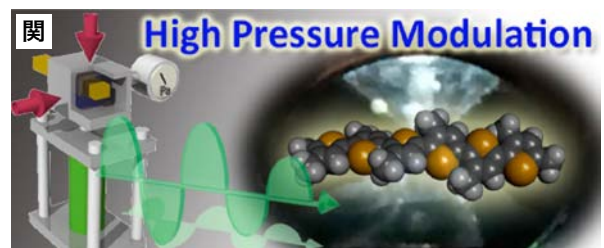
矢貝



【研究項目 A03: 世界をリードする理論・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、 π 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、実験・理論の両面からアプローチし、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設定している。これを実現するための実験手法として、複合電磁波分光法、電界効果素子法、単分子非弾性トンネル電子分光法、時間分解放射光 X 線回折などの手法の構築と展開を主に計画研究において進めてきた。同時に、理論的手法として、 π 造形分子・システムの電子状態・構造を最適化するシミュレーション法および分子探索技術の開発に着手した。平成27年度からは6件の公募研究者を迎えた。特に、計画研究では完全にカバーしきれなかった、分子計測技術、強相関・開殻分子系の光物性、熱電変換システム、巨大分極応答性、機械刺激の理論的理解などの分野において、物性・理論から強化・拡充が実現できた。領域発足後およそ2年を迎え、計画研究による物性制御・計測技術の構築と展開、ならびに理論的アプローチによる現象の理解については当初の計画を超えて驚くべき速さで進捗しており、すでに分子造形に関わる提言が始まっている。

主な計画研究の進捗状況として、時間分解X線回折法の確立と展開に伴って、平成27年度には物質の化学結合形成の過程を直接フェムト秒 X 線パルスによって撮像することに成功した例(足立)や、複合電磁波分光法による発達共役分子中の高い電子輸送特性の非接触・非破壊定量(図、関)をはじめとして、精力的な成果公表が進



められている。実験的計測手法と理論的なアプローチの協奏としては、たとえばかご状分子の中に内包された共役分子による単分子記憶素子の実証と解釈(木口、多田)などを端緒として、領域発足以来、計画班単独の研究のみで、すでに149報、公募研究を加えると170報の学術論文を発表するに至っている。研究項目 A01 および A02 の欄において成果を記したように、 π 造形分子合成(A01)、 π 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んでいる。特に、実験系研究者と理論系研究者の協働は、項目3に示す「審査結果の所見」でコメントするように、当初の懸念を完全に払拭するほどの活性化を見せている。また、公募研究としての中村の参画は、未だ未開拓分野と言える熱電変換へ向けた物質創製への意識を高めた。この機能は当初本領域研究のスコープとしてあまり重要視していなかったが、後半の領域研究で取り組むべき課題の一つとして位置付けられた。

【研究項目全体を通じて】

これまでの研究期間を見渡すと、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「 π 造形」の分子設計概念は領域研究者全員に浸透し、かつ「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」も順調に進んでいる。これにより、本領域独自の π 電子機能の捉え方、「Intrinsic- π 」、「Dynamic- π 」、「Elastic- π 」のうち、特に前者二つに関しては、新しい現象や機能を示す物質群も多数発掘されるに至っている。一方、自己評価として、真に新しい概念である「Elastic- π 」については、それを明確に定義し、世界に認知させるには今後継続的な取り組みが必要である。これに関しては、今後、単一分子状態での Elastic- π 機能、 π 電子系分子集合体としての Elastic- π 機能など、対象を明確化して研究を推進するという意識共有がなされている。また、既に見出されている新現象については、領域研究者が一丸となって、それらを新機能発現へと結実させるための準備を整える。

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（2ページ以内）

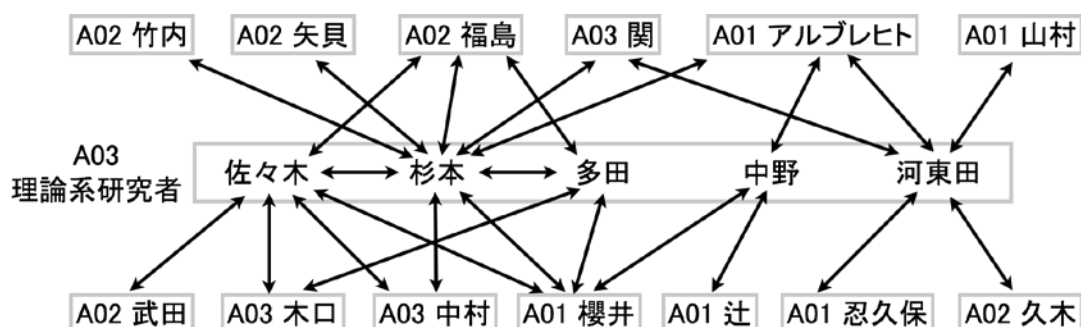
審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該コメント及びそれへの対応策等を記述してください。

公開された審査結果の所見を以下に示す。概ね高い評価を受けているが、指摘を受けている下線部についての対応について記述する。

「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、 π 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。」

(1) 理論と実験の共同体制、連携の強化について

本所見を受け、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、現在では26件にまで増加しており、予想以上の連携強化が実現できている。共同体制・連携強化については、今後一層増大する雰囲気にも溢れており、発足時に指摘を受けた事項に対して短期間で十分対応できたと考えている。そのエビデンスとして、以下に実験系研究者と理論系研究者との共同研究ネットワーク(様式2-1総括班報告書「現在までの活動評価項目」にも記載)、ならびにその成果を示す。



実験系研究者との共同研究：26件(杉本11件、多田4件、佐々木3件、中野4件、河東田4件)

学会発表実績：17件(杉本1件、多田2件、佐々木8件、中野4件、河東田2件)

共著論文発表実績：4件(多田2件、河東田2件)

(2) 各研究項目どうし、各研究者どうしの融合的連携

「項目6. 研究組織(公募研究を含む)と各研究項目の連携状況」で示すように、極めて多くの共同研究がスタートしており、十分な融合的連携が達成されている。事実、領域発足時には34件に過ぎなかった領域内研究者間の共同研究件数が、平成28年6月の段階で155件にまで増大している。特筆すべきは、全て

の領域内研究者が何らかの共同研究に関与していることである。これは、本領域において強力な研究組織が形成されたことの証左であると考えている。

4. 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。

以下の各研究成果について、本領域が掲げる Intrinsic- π 、Dynamic- π 、Elastic- π 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。

【研究項目 A01: π 分子造形 世界をリードする独自の有機合成技術】

計画研究

櫻井英博：<I>湾曲 π 電子系化合物における特異な光化学挙動、早い項間交差過程の解明 (*Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2015**, *88*, 1612). <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).

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 (*Nature 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).

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). 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).

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).

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).

公募研究

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

村岡貴博：<D><E>熱応答性結晶多形現象を利用した動的 π 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. A02 福島・芥川との共同研究に展開). 膜張力に応答する動的分子システムの開発へ向けた基盤分子の設計と合成 (*Langmuir* **2016**, *32*, 4546).

山村正樹：<I>お椀分子の集積化による新規 π 電子系液晶材料の開発 (*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.

山下(アルブレヒト)建：<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の開発 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 5677. A02 山本、A03 竹延との共同研究に展開).

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. A01 清水、A02 山本、A02 長田、A02 生越との共同研究に展開).

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>開口フラーレン C_{60} 内部への N_2 、 CO_2 の挿入 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 14791).

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 班羽曾部との共同研究).

武田洋平：<D><E>リン含有ポリマーの金への配位に基づくバンドギャップの変調 (*Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, in press, doi: 10.1002/chem.201602392). <I>リン架橋ポルフィリノイドの合成 (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 π 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).

畠山琢次: <I> 含ホウ素縮環 π 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 素子の開発 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 13581, *Adv. Mater.* **2016**, *28*, 2777).

【研究項目 A02: π 造形システム 世界をリードする π 分子集合体設計力】

計画研究

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). 互変異性や励起状態分子間プロトン移動を利用した発光性 π 電子システムの開発 (*RSC Adv.* **2015**, *5*, 80283. A03 関との共同研究). <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).

福島孝典: <I> <D> 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 (*Science* **2015**, *348*, 1122. A02 芥川、A03 関、A03 竹延、A03 多田との共同研究に展開, *Nature Commun.* **2016**, *7*, 10653). <I> 新規なナノカーボンホールドーパントの発見 (A03 竹延、A03 杉本との共同研究). <I> <D> 湾曲拡張 π 電子系骨格の一挙構築を可能にする新反応の発見.

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 (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 π 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). <I> <D> 動的挙動を示す超分子 π 集積体の構造解析 (A02 福島との共同研究). <E> 共役ポリマーの電気化学発光セルの開発 (A03 竹延との共同研究).

矢貝史樹: <D> 光による分子集合体の螺旋反転 (*Nature Commun.* **2015**, *6*, 8936). <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 (A03 足立との共同研究). <I> 拡張した π 共役系を有する大環状オリゴマーの超分子ポリマー化 (*Chem. Commun.* **2016**, doi: 10.1039/C6CC03430F. A02 福島との共同研究).

公募研究

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.

宮坂等: <I> 電子ドナー・アクセプターの $d\pi$ - $p\pi$ の重なりによる単層磁石の開発.

山本洋平: <I> π 共役ポリマー球体の形成と共鳴発光および連結球体間での高効率放射エネルギー移動および共鳴発光とフォトンダイオード効果の実現 (*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, A01 辻、アルブレヒト、武田、畠山、A02 芥川、A03 竹延、関、河東田との共同研究に展開).

上田顕: <I> <D> <E> 水素結合ダイナミクスおよびこれと連動した π 電子物性スイッチング機能の制御 (*Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 15020) と、新奇なサーモクロミズム現象の発見 (A03 橋本との共同研究).

生越友樹: <I> <D> 柱状 π 分子 Pillar[5]arene を積み上げ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) と、その面性不斉を利用した不斉配位子 (A02 長田との共同研究) およびキラリティ反転材料の開発 (A02 長田との共同研究).

長田裕也: <D> 溶液状態での圧力印加による主鎖らせん反転現象の発見 (*Chem. Commun.* **2015**, *51*, 11182). <D> π 電子系不斉集積ポリマーの主鎖骨格を活かした不斉増幅システムの開発に成功 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 9333). <D> Pillar[5]arene における溶媒依存性キラリティ反転現象の発見 (A02 生越との共同研究).

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).

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 (A02 福島、A03 竹延との共同研究).

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. A03 竹延との共同研究).

【研究項目 A03: π 造形理論・計測 世界をリードする理論・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、 π 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). <D>ダブルヘリセンの簡便合成と動的特性 (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 5404. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, in press, doi: 10.1002/anie.201603409).

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>レーザー発振を目指した電気化学発光セルの大電流化・高速化・高機能化 (A01 武田、アルブレヒト、A02 竹内、山本との共同研究).

木口学：<I><D> 金基板上に吸着した動的らせん分子のコンホメーション観測 (*RSC Adv.* **2016**, *6*, in press, doi:10.1039/C6RA07173B. A02 福島との共同研究). 機能を自由に置き換え可能な単一 π 分子素子の開発 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 893. A03 多田との共同研究). 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). 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).

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> π 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：<E> 単一分子の弾性応答機能解析を可能にする第一原理計算手法の開発 (A01 櫻井、A03 佐々木との共同研究). <I> 第一原理計算による機能ハイブリッド型 π 電子系物質の構造-機能相関の解明に成功 (*J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9519). <I> 機能分子探索のための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> π 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トライボフォノスペクトロスコピー (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).

多田朋史：<I><D> ヘテラスマネン-金属接合に組み込まれた伝導パス/フォノンパス分離型接合の設計 (A01 斎藤 A03 木口との共同研究). <I> 分子スピン内包型フラレンによる量子ユニット造形 (A01 村田との共同研究). <I> 分子スピン量子ユニットのためのトリプルデッカー錯体造形 (A01 斎藤との共同研究) <I><D><E> 分子スピンへの電流アクセスのための空間充填モデル造形 (A02 福島との共同研究)

公募研究

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サーモクロミズム現象の発見 (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. 柔軟性アセン型炭素リボンの表面合成 (A01 斎藤との共同研究). 室温燐光性有機材料の開発 (A01 班清水との共同研究).

中野雅由：<I><D> 反芳香族分子とその積層系における誘導電流密度異方性、開殻性、非線形光学効果の相関の解明 (A01 忍久保との共同研究). <I> 非対称ビルディングブロックからなる dendrimer の非線形光学効果の解明 (A01 アルブレヒトとの共同研究).

須田理行：<I> 有機結晶に圧縮歪みを印加可能な歪み制御型超伝導トランジスタの開発. <I> 圧縮歪みを用いた π 電子系絶縁体の超伝導転移挙動を発見.

中村雅一：<I> C_{60} におけるゼーベック係数 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). <I> 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.

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レンの生成熱の高精度予測 (*J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 1420). <I><D> 分子動力学シミュレーションと量子化学計算による有機薄膜太陽電池のドナー・アクセプタ界面における電荷分離・再結合機構の解析. <I> フラレンを分子認識する含リン湾曲ホスト分子集合体のホスト-ゲスト相互作用解析 (A01 山村との共同研究)

5. 研究成果の公表の状況（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定とします。

- 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】

研究項目 A01: π 分子造形 世界をリードする独自の有機合成技術: 全 133 報

計画研究(全 62 報)

- ▲1 “Soft Wet-chemical Synthesis of Ru-Sn Nanoparticles from Single-source Ruthenocene-stannole Precursors in an Ionic Liquid”, S. Wegner, M. Saito, J. Barthel, *C. Janiak, *J. Organomet. Chem.* **2016**, *in press*, doi: 10.1016/j.jorganchem.2016.05.010 (国際共同研究)。
- ▲2 “Chemo- and Regioselective Reduction of 5,15-Diazaporphyrins Providing Antiaromatic Azaporphyrinoids”, A Yamaji, H. Tsurugi, *Y. Miyake, K. Mashima, *H. Shinokubo, *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, 403–405.
- ▲3 “2,11-Dibromo-13,14-dimesityl-5,8-dioxapentaphene: A Stable and Twisted Polycyclic System Containing the *o*-Quinodimethane Skeleton”, C. Sato, S. Suzuki, M. Kozaki, *K. Okada, *Org. Lett.* **2016**, *18*, 1052–1055.
- ▲4 “Diversity-oriented Synthesis of Tetrathia[8]circulenes by Sequential C-H Borylation and Annulation”, S. Kato, Y. Serizawa, D. Sakamaki, S. Seki, *Y. Miyake, H. Shinokubo, *Chem. Commun.* **2015**, *51*, 16944–16947 (A01 忍久保–A03 関 共同研究)。
- ◎▲5 “Concise Synthesis and Facile Nanotube Assembly of a Symmetrically Multi-Functionalized Cycloparaphenylene”, Y. Miyauchi, K. Johmoto, N. Yasuda, H. Uekusa, S. Fujii, M. Kiguchi, H. Ito, K. Itami, *K. Tanaka, *Chem. Eur. J.* **2015**, *21*, 18900–18904 (Frontispiece, Hot Paper, A01 田中–A03 木口 共同研究)。
- ◎▲6 “Intra- and Intermolecular Reactivity of Triplet Sumanenetrione”, K. Kanahara, MD. M. R. Badal, S. Hatano, M. Abe, S. Higashibayashi, N. Takashina, H. Sakurai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2015**, *88*, 1612–1617.
- ▲7 “Nitrogen-embedded bucky bowl and its assembly with C_{60} ”, H. Yokoi, Y. Hiraoka, *S. Hiroto, D. Sakamaki, S. Seki, *H. Shinokubo, *Nature Commun.* **2015**, *6*, 8215 (A01 忍久保–A03 関 共同研究)。
- ▲8 “Regioselective Nucleophilic Functionalization of Antiaromatic Ni(II) Norcorrole”, R. Nozawa, K. Yamamoto, J.-Y. Shin, S. Hiroto, *H. Shinokubo, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 8454–8457.
- 9 “Acid/base-regulated reversible electron transfer disproportionation of N-N linked bicarbazole and biacridine derivatives”, P. Pandit, K. Yamamoto, T. Nakamura, K. Nishimura, Y. Kurashige, T. Yanai, G. Nakamura, S. Masaoka, K. Furukawa, Y. Yakiyama, M. Kawano, S. Higashibayashi, *Chem. Sci.* **2015**, *6*, 4160–4173.
- ▲10 “Synthesis of Highly Twisted and Fully π -Conjugated Porphyrinic Oligomers”, S. Ito, *S. Hiroto, S. Lee, M. Son, I. Hisaki, T. Yoshida, *D. Kim, *N. Kobayashi, *H. Shinokubo, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 142–145 (A01 忍久保–A02 久木 共同研究)。
- ▲11 “Diverse Coordination Modes in Tin Analogues of a Cyclopentadienyl Anion Depending on the Substituents on the Tin Atom”, T. Kuwabara, M. Nakada, J. D. Guo, S. Nagase, *M. Saito, *Dalton Trans.* **2015**, *44*, 16266–16271.
- ◎12 “Substitution Effects on Optical Properties of Iminonitroxide-substituted Iminonitroxide Diradical”, R. Nakamura, *Y. Shigeta, K. Okuno, M. Hasegawa, M. Fukushima, S. Suzuki, M. Kozaki, K. Okada, M. Nakano, *Mol. Phys.* **2015**, *113*, 267–273 (A01 鈴木–A03 中野 共同研究)。
- ◎13 “Synthesis and Properties of a Bis[(Nitronyl Nitroxide)-2-ide Radical Anion]-Palladium Complex”, S. Suzuki, H. Yokoi, M. Kozaki, Y. Kanzaki, D. Shiomi, K. Sato, T. Takui, *K. Okada, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2014**, *28*, 4740–4744.
- ▲14 “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.
- ◎▲15 “Enantioselective Synthesis and Enhanced Circularly Polarized Luminescence of S-Shaped Double Azahelicenes”, K. Nakamura, S. Furumi, M. Takeuchi, T. Shibuya, *K. Tanaka, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 5555–5558 (A01 田中–A02 竹内 共同研究)。

公募研究(全 71 報)

- ▲1 “Thieno[3,4-*c*]phosphole-4,6-dione: A Versatile Building Block for Phosphorus-containing Functional π -Conjugated Systems”, *Y. Takeda, K. Hatanaka, T. Nishida, *S. Minakata, *Chem. Eur. J.* **2016**, *22*, *in press*, doi: 10.1002/chem.201602392.
- ▲2 “Siloxo Group-Induced Highly Efficient Room Temperature Phosphorescence with Long Lifetime”, *M. Shimizu, R. Shigitani, M. Nakatani, K. Kuwabara, Y. Miyake, K. Tajima, H. Sakai, T. Hasobe, *J. Phys. Chem. C* **2016**, *120*, 11631–11639 (A01 清水(正)–A02 羽曾部 共同研究)。
- ◎▲3 “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 共同研究)。
- ◎▲4 “Synthesis of a Distinct Water Dimer inside Fullerene C_{70} ”, R. Zhang, M. Murata, T. Aharen, A. Wakamiya, T. Shimoaka, T. Hasegawa, *Y. Murata, *Y. Nature Chem.* **2016**, *8*, 435–441.

- ▲5 “Synthesis of Optically Active X-Shaped Conjugated Compounds and Dendrimers Based on Planar Chiral [2.2]Paracyclophane, Leading to Highly Emissive Circularly Polarized Luminescence Materials”, M. Gon, *Y. Morisaki, R. Sawada, *Y. Chujo, *Chem. Eur. J.* **2016**, 22, 2291–2298 (Front Cover, Hot Article).
- ◎▲6 “Trapping N₂ and CO₂ on the Sub-nano Scale in Confined Internal Spaces of Open-cage C₆₀ Derivatives: Isolation and Structural Characterization of Host-Guest Complexes”, T. Futagoishi, M. Murata, A. Wakamiya, *Y. Murata, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 14791–14794.
- ▲7 “Fibril Film Formation of Pseudoenantiomeric Oxymethylenehelicene Oligomers at Liquid-Solid Interface: Structural Change, Aggregation, and Discontinuous Heterogeneous Nucleation”, M. Shigeno, T. Sawato, *M. Yamaguchi, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 17676–17682.
- ◎▲8 “One-Step Borylation of 1,3-Diaryloxybenzenes Towards Efficient Materials for Organic Light-Emitting Diodes”, H. Hirai, K. Nakajima, S. Nakatsuka, K. Shiren, J. Ni, S. Nomura, T. Ikuta, *T. Hatakeyama, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 13581–13585.
- ▲9 “Twofold fused concave hosts containing two phosphorus atoms: modules for the sandwich-type encapsulation of fullerenes in variable cavities”, *M. Yamamura, D. Hongo, *T. Nabeshima, *Chem. Sci.* **2015**, 6, 6373–6378 (highlighted in Synfacts).
- ◎10 “Rational Molecular Design Towards vis/NIR Absorption and Fluorescence using Pyrrolopyrrole aza-BODIPY and its Highly Conjugated Structures for Organic Photovoltaics”, *S. Shimizu, T. Iino, A. Saeki, S. Seki, *N. Kobayashi, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 2893–2904 (A01 清水(宗)– A03 関 共同研究).

研究項目 A02:π 造形システム 世界をリードする π 分子集合体設計力: 全 119 報

計画研究(全 57 報)

- ▲1 Hydrogen-bonded Oligothiophene Rosettes with Benzodithiophene Terminal Unit: Self-assembly and Application to Bulk Heterojunction Solar Cells, H. Ouchi, X. Lin, T. Kizaki, D. D. Prabhu, F. Silly, T. Kajitani, T. Fukushima, K. Nakayama, *S. Yagai, *Chem. Commun.* **2016**, *in press*, doi: 10.1039/C6CC03430F (A02 矢貝–A02 福島 共同研究).
- ◎▲2 “Chlorine-based Inductively Coupled Plasma Etching of GaAs Wafer Using Tripodal Paraffinic Triptycene as an Etching Resist Mask”, *A. Matsutani, F. Ishiwari, Y. Shoji, T. Kajitani, T. Uehara, M. Nakagawa, T. Fukushima, *Jpn. J. Appl. Phys.* **2016**, 55, 06GL01-1–06GL01-3.
- ◎▲3 “Seamless growth of a supramolecular carpet”, J.-H. Kim, J.-C. Ribierre, Y. S. Yang, C. Adachi, M. Kawai, *J. Jung, *T. Fukushima, *Y. Kim, *Nature Commun.* **2016**, 7, 10653.
- ▲4 “Mechanochromic Luminescence Based on Crystal-to-Crystal Transformation Mediated by a Transient Amorphous State”, *S. Yagai, T. Seki, H. Aonuma, K. Kawaguchi, T. Karatsu, T. Okura, A. Sakon, H. Uekusa, H. Ito, *Chem. Mater.* **2016**, 28, 234–241.
- ▲5 “Ferrocene-substituted Naphthalenediimide with Broad Absorption and Electron-transport Properties in the Segregated-stack Structure”, *A. Takai, D. Sakamaki, S. Seki, Y. Matsushita, *M. Takeuchi, *Chem. Eur. J.* **2015**, 22, 7385–7388 (A02 竹内–A03 関 共同研究).
- ◎▲6 “¹¹B Solid-state NMR Interaction Tensors of Linear Two-coordinate Boron: The Dimesitylborinium Cation”, A. E. Alain, Y. Shoji, T. Fukushima, *D. L. Bryce, *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 11889–11896 (国際共同研究).
- ▲7 “Photoreactive helical nanoaggregates exhibiting morphology transition on thermal reconstruction”, M. Yamauchi, T. Ohba, T. Karatsu, *S. Yagai, *Nature Commun.* **2015**, 6, 8936.
- ◎▲8 “Raising the metal–insulator transition temperature of VO₂ thin films by surface adsorption of organic polar molecules”, H. Shioya, Y. Shoji, N. Seiki, M. Nakano, T. Fukushima, *Y. Iwasa, *Appl. Phys. Express* **2015**, 8, 121101 (Spotlight Article).
- ◎▲9 “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.
- ◎▲10 “The molecular and electronic structures of a thioaroyl cation formed by borinium ion-mediated C=S double bond cleavage of CS₂”, *Y. Shoji, N. Tanaka, D. Hashizume, T. Fukushima, *Chem. Commun.* **2015**, 51, 13342–13345.
- ▲11 “Conjugated Oligomers and Polymers Sheathed with Designer Side Chains”, C. Pan, C. Zhao, *M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, *Chem. Asian J.* **2015**, 10, 1820–1835 (Focus Review).
- ◎▲12 “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.
- ◎▲13 “Fluorescent Ferroelectrics of Hydrogen-Bonded Pyrene Derivatives”, H. Anetai, Y. Wada, T. Takeda, N. Hoshino, S. Yamamoto, M. Mitsuishi, T. Takenobu, T. Akutagawa, *J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, 6, 1813–1818 (A02 芥川–A03 竹延 共同研究).
- 14 “Supramolecularly Engineered Functional π-Assemblies based on Complementary Hydrogen Bonding Interactions”, *S. Yagai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2015**, 88, 28–58 (Award Account).
- ◎▲15 “Kinetic Control over Pathway Complexity in Supramolecular Polymerization through Modulating the Energy Landscape by Rational Molecular Design”, S. Ogi, T. Fukui, M. L. Jue, *M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 14363–14367.
- ◎▲16 “Highly Efficient Tunable Solid State Emission via the Excited-state Intramolecular Proton-transfer (ESIPT) with 2-(2'-Hydroxy) Benzothiazole (HBT) and Fluorene motifs”, V. S. Padalkar, D. Sakamaki, S. Seki, N. Tohnoi, *T. Akutagawa, and K. Sakai, *RSC Adv.* **2015**, 5, 80283–80296 (A02 芥川–A03 関 共同研究).
- ◎▲17 “The Formation of Organogels and Helical Nanofibers from Simple Organic Salts”, Y. Yoshii, N. Hoshino, T. Takeda, H. Moritomo, J. Kawamata, T. Nakamura, *T. Akutagawa, *Chem. Eur. J.* **2014**, 20, 16279–16285.

公募研究(全 62 報)

- ◎▲1 “Conjugated Polymer Blend Microspheres for Efficient, Long-Range Light Energy Transfer”, S. Kushida, D. Braam, T. D. Dao, H. Saito, K. Shibasaki, S. Ishii, T. Nagao, A. Saeki, J. Kuwabara, T. Kanbara, M. Kijima, A. Lorke, *Y. Yamamoto, *ACS Nano*

2016, 10, 5543–5549 (A02 山本–A03 佐伯協働研究).

- ▲2 “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.
- ◎▲3 “A Series of Layered Assemblies of Hydrogen-bonded, Hexagonal Networks of C_3 -Symmetric π -Conjugated Molecules: A Potential Motif of Porous Organic Materials”, *I. Hisaki, S. Nakagawa, N. Ikenaka, Y. Imamura, M. Katouda, M. Tashiro, H. Tsuchida, T. Ogoshi, H. Sato, N. Tohnai, M. Miyata, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, 138, 6617–6628 (A02 久木–A02 生越–A03 河東田 共同研究).
- ◎▲4 “Arrangement Modulation of π -Stacked Columnar Assemblies of Octadehydridibenzo[12]annulene: Substituent Effects of Peripheral Thienyl and Phenyl Rings”, *I. Hisaki, K. Osaka, N. Ikenaka, A. Saeki, N. Tohnai, S. Seki, M. Miyata, *Cryst. Growth Des.* **2016**, 16, 714–721 (A02 久木–A03 関 共同研究).
- ▲5 “Modulation of a Molecular π -Electron System in a Purely Organic Conductor that Shows Hydrogen-Bond-Dynamics-Based Switching of Conductivity and Magnetism”, *A. Ueda, A. Hatakeyama, M. Enomoto, R. Kumai, Y. Murakami, *H. Mori, *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 15020–15028 (A02 上田–A03 熊井 共同研究).
- ▲6 “Whispering Gallery Resonance from Self-Assembled Microspheres of Highly Fluorescent Isolated Conjugated Polymers”, S. Kushida, D. Braam, C. Pan, T. D. Dao, K. Tabata, K. Sugiyasu, M. Takeuchi, S. Ishii, T. Nagao, A. Lorke *Y. Yamamoto, *Macromolecules* **2015**, 48, 3928–3933 (A02 山本–A02 竹内 共同研究).
- ▲7 “Unexpected Formation of *ortho*-Benzoquinone-fused Tetraselenafulvalene (TSF): Synthesis, Structures, and Properties of a Novel TSF-based Donor-acceptor Dyad”, *A. Ueda, H. Kamo, *H. Mori, *Chem. Lett.* **2015**, 44, 1538–1540.
- ◎▲8 “Highly Fluorescent [7]Carbohelicene Fused by Asymmetric 1,2-Dialkyl-Substituted Quinoxaline for Circularly Polarized Luminescence and Electroluminescence”, *H. Sakai, S. Shinto, J. Kumar, *Y. Araki, T. Sakanoue, *T. Takenobu, T. Wada, *T. Kawai, *T. Hasobe, *J. Phys. Chem. C.* **2015**, 119, 13937–13947 (A02 羽曾部–A03 竹延 共同研究).
- ▲9 “Molecular Recognition with Microporous Multilayer Films Prepared by Layer-by-layer Assembly of Pillar[5]arenes”, *T. Ogoshi, S. Takashima, T. Yamagishi, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 10962–10964.

**研究項目 A03: π 造形理論・計測 世界をリードする理論・計測技術: 全 170 報
計画研究(全 149 報)**

- ▲1 “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 (A03 木口–A03 多田協働研究).
- ▲2 “Experimental observation of phonon generation and propagation at a $\text{MoS}_2(0001)$ surface in the friction process”, M. Ishikawa, N. Wada, T. Miyakawa, H. Matsukawa, M. Suzuki, N. Sasaki, *K. Miura, *Phys. Rev. B* **2016**, 93, 201401–1/5 (R).
- ◎▲3 “*N*-Substituted Dicyanomethylphenyl Radicals: Dynamic Covalent Properties and Formation of Stimuli-Responsive Cyclophanes by Self-Assembly”, T. Kobashi, *D. Sakamaki, *S. Seki, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, in press, doi: 10.1002/anie.201603409R1.
- ◎▲4 “Unraveling Unprecedented Charge Carrier Mobility through Structure Property Relationship of Four Isomers of Didodecyl[1]benzothieno[3,2-b][1]benzothiophene”, Y. Tsutsui, G. Schweicher, B. Chattopadhyay, T. Sakurai, J.-B. Arlin, C. Ruzié, A. Aliev, A. Ciesielski, S. Colella, A. R. Kennedy, V. Lemaury, Y. Olivier, R. Hadji, L. Sanguinet, F. Castet, D. Beljonne, J. Cornil, P. Samori, *S. Seki, *Y. H. Geerts, *Adv. Mater.*, **2016**, in press, doi: 10.1002/adma.201601285.
- ◎▲5 “Excited-state Intramolecular Proton-transfer (ESIPT)-inspired Solid State Emitters”, V. S. Padalkar *S. Seki, *Chem. Soc. Rev.*, **2016**, 45, 169–202.
- ◎▲6 “Preferential Formation of Columnar Mesophases via Peripheral Modification of Discotic π -Systems with Immiscible Side Chain Pairs”, *T. Sakurai, Y. Tsutsui, K. Kato, M. Takata, *S. Seki, *J. Mater. Chem. C* **2016**, 4, 1490–1496.
- ◎▲7 “Ambipolar Light-emitting Organic Single-crystal Transistors with a Grating Resonator”, K. Maruyama, K. Sawabe, T. Sakanoue, J. Li, W. Takahashi, S. Hotta, Y. Iwasa, *T. Takenobu, *Sci. Rep.* **2015**, 5, 10221.
- ◎▲8 “Strategy for Improved Frequency Response of Electric Double-layer Capacitors”, Y. Wada, J. Pu, *T. Takenobu, *Appl. Phys. Lett.* **2015**, 15, 153505.
- ◎▲9 “Ultrafast photoinduced electron transfer in face-to-face charge-transfer π -complexes of planar porphyrins and hexaazatriphenylene derivatives”, T. Aoki, H. Sakai, K. Ohkubo, T. Sakanoue, *T. Takenobu, *S. Fukuzumi, *T. Hasobe, *Chem. Sci.* **2015**, 6, 1498–1509 (A03 竹延–A02 羽曾部 共同研究).
- ◎▲10 “Modulation and Evaluation of Charge Carrier Mobility in Polymer Alloy of Polythiophene and Insulating Matrix with Electron Accepting Molecule” T. Fukumatsu, *A. Saeki, *S. Seki, *Polym. Chem.* **2015**, 6, 5860–5868 (Back Cover).
- ◎▲11 “A Triphenylamine with Two Phenoxy Radicals Having Unusual Bonding Patterns and a Closed-Shell Electronic State”, *D. Sakamaki, S. Yano, T. Kobashi, *S. Seki, T. Kurahashi, S. Matsubara, *A. Ito, K. Tanaka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 8267–8270.
- ◎▲12 “A Facile and Versatile Approach to Double *N*-Heterohelicenes: Tandem Oxidative C-N Coupling Method of *N*-Heteroacenes via Cruciform Dimers”, *D. Sakamaki, D. Kumano, E. Yashima, *S. Seki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 5404–5407 (Front Cover).
- ◎▲13 “Pressure Modulation of Backbone Conformation and Intermolecular Distance of Conjugated Polymers Toward Understanding the Dynamism of π -Figuration of their Conjugated System”, Y. Noguchi, A. Saeki, T. Fujiwara, S. Yamanaka, M. Kumano, T. Sakurai, N. Matsuyama, M. Nakano, N. Hirao, Y. Ohishi, *S. Seki, *J. Phys. Chem. B*, **2015**, 119, 7219–7230.
- ◎▲14 “Semiconducting Nanotubes by Intrachain Folding Following Macroscopic Assembly of a Naphthalene Diimide (NDI) Appended Polyurethane”, T. Mondal, T. Sakurai, S. Yoneda, *S. Seki, *S. Ghosh, *Macromolecules* **2015**, 48, 879–888.
- ◎▲15 “Highly Ordered *n/p*-Co-assembled Materials with Remarkable Charge Mobilities”, J. Lopez-Andarias, M. J. Rodriguez, C. Atienza, J. L. Lopez, T. Mikie, S. Casado, *S. Seki, J. L. Carrascosa, *N. Martin, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 893–897.
- ◎▲16 “Rectifying Electron-Transport Properties through Stacks of Aromatic Molecules Inserted into a Self-Assembled Cage”, *S.

Fujii, *T. Tada, Y. Komoto, T. Osuga, T. Murase, *M. Fujita, *M. Kiguchi, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 5939–5947 (A03 木口-A03 多田 共同研究).

17 “Direct Observation of Bond Formation in Solution with Femtosecond X-ray Scattering”, K. H. Kim, J. G. Kim, S. Nozawa, T. Sato, K. Y. Oang, T. W. Kim, H. Ki, J. Jo, S. Park, C. Song, T. Sato, K. Ogawa, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi, T. Ishikawa, J. Kim, R. Ryoo, J. Kim, *H. Ihee, S. Adachi, *Nature* **2015**, *518*, 385–389.

◎▲18 “Multicomponent Molecular Puzzles for Photofunction Design: Emission Color Variation in Lewis Acid–Base Pair Crystals Coupled with Guest-to-Host Charge Transfer Excitation”, *T. Ono, M. Sugimoto, *Y. Hisaeda, *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 9519–9522.

▲19 “Molecular design of electron transport with orbital rule: toward conductance-decay free molecular junctions”, *T. Tada and *K. Yoshizawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 32099–32110.

公募研究(全 21 報)

◎▲1 “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. P. Ortiz, C. J. Gómez-García, L. N. Zakharov, *M. Nakano, *H. Ottosson, *J. Casado and *M. M. Haley, *Nature Chem.* **2016**, *in press*, doi:10.1038/nchem.2518.

◎▲2 “Theoretical investigation of curved π -conjugated fullerene flakes: open-shell character, aromaticity, and third-order nonlinear optical property”, K. Fukuda, J. Fujiyoshi, Y. Minamida, T. Nagami, H. Matsui, S. Ito, R. Kishi, Y. Kitagawa, *M. Nakano, B. Champagne, *J. Phys. Org. Chem.* **2016**, *in press*, doi: 10.1002/poc.3581.

◎▲3 “From C₆₀ 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.

◎4 “Room Temperature Phosphorescence of Crystalline 1,4-Bis(aryl)-2,5-dibromobenzenes”, M. Shimizu, A. Kimura, H. Sakaguchi, *Eur. J. Org. Chem.* **2016**, *2016*, 467–473 (A03 坂口-A03 清水(正) 共同研究).

◎▲5 “Theoretical Design of Open-Shell Singlet Molecular Systems for Nonlinear Optics”, *M. Nakano, B. Champagne, *J. Phys. Chem. Lett.* **2015**, *6*, 3236–3256. (Perspective, Cover article)

▲6 “Giant Seebeck Effect in Pure Fullerene Thin Films”, H. Kojima, R. Abe, M. Ito, Y. Tomatsu, F. Fujiwara, R. Matsubara, N. Yoshimoto, *M. Nakamura, *Appl. Phys. Express* **2015**, *8*, 121301.

【領域ウェブサイト】

広く情報発信するために和文と英文両方でウェブサイト(<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いる。シンポジウムの開催に際しては、特設サイトを開設し、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すべて公開している(<http://pi-figuration.jp/newsletter/index.php>)。以下に、これまで発行したニュースレターを示した。



【公開シンポジウム】

最新の領域研究成果を日本語でわかりやすく発表する「公開シンポジウム」(年1回)、海外からの招待講演を含む、英語での発表を行う「国際シンポジウム」(年1回)を開催している。これらのシンポジウムには、一般参加者も募集している。各研究者は、全てのシンポジウムにおいて口頭、あるいはポスターでの発表が義務付けられ、常に研究の進展状況を公開している。

第1回公開シンポジウム：2014年9月5～6日，東京工業大学蔵前会館(東京都目黒区)，口頭発表17件 参加者191名

第1回国際シンポジウム：2015年4月30日，大阪大学中之島センター(大阪府大阪市北区)，特別講演：Dirk M. Guldi (Friedrich-Alexander-University)、Francis D'Souza (University of North Texas)、

Wonwoo Nam (Ewha Womans University), 口頭発表 9 件 参加者 114名

第2回公開シンポジウム: 2015年6月8~9日, 大阪中央公会堂(大阪府大阪市北区), 口頭発表 29件, ポスター発表 39件, 参加者 122名

第2回国際シンポジウム: 2016年4月14~15日, さいたま市浦和コミュニティセンター(さいたま市浦和区), 特別講演: Lawrence T. Scott (Boston College), 他海外招待講演1件, 国内招待講演2件, 口頭発表 11件, ポスター発表 61件, 参加者 120名

【 π 造形コロキウム】

π 造形科学に関わ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、 π 造形コロキウムと銘打ってシリーズとして開催し、広く π 造形科学の意義をアピールしている。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、2016年5月末日現在、計45回の π 造形コロキウムが開催されている。

【国際会議との連携】

π 造形科学に関連した国際会議と連携することで、広く π 造形科学の理念や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努力を行っている。昨年の国際会議との連携実績、ならびに今年度連携(協賛)予定の国際会議を以下に記す。

(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 (「Pi-Figuration」を Technical Session として設置)

(2) International Symposium on the Synthesis and Application of Curved Organic pi-Molecules & Materials (Curo-Pi-II), 2016.9.12-14, Eugene, Oregon, USA (協賛)

【アウトリーチ活動】

本領域では、アウトリーチ活動にも力を入れている。前述した「現代化学」への記事掲載に加え、領域ウェブサイトや Facebook・Twitter などのソーシャルネットワークを通じたリアルタイムでの情報発信を行っている。また、その他にも数多くのアウトリーチ活動を展開している。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7件、(2)一般向けセミナー6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30件、(4)サイエンスカフェへの出展3件、(5)イベント参加・出展6件の活動実績がある。加えて、テレビ報道2件、プレスリリース17件、新聞報道19件、一般雑誌による研究紹介4件など、幅広いメディアで多数の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ている状況である。以下に、本領域で特に注力している、小中高生向けアウトリーチ活動の様子を抜粋して示した。

A03 関、H28年4月20日
出前授業@千葉県立木更津高校



A01 鈴木、H26年8月2日
高校化学セミナー講師@大阪市立大



A03 佐々木、H27年6月19日
土浦第二高校見学会@電通大



A02 竹内、H26年10月30日
大阪市立東高校見学会@NIMS



A02 藤ヶ谷、H27年8月2日
オープンキャンパス@九州大学



A03 中村、H27年11月8日
オープンキャンパス@奈良先端大



6. 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、研究組織間の連携状況について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- π 、Dynamic- π 、Elastic- π という三つの π 電子機能の調和による新現象・新機能創出を目的に、(1) π 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 π 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」の連動により研究を推進する。これを踏まえ、研究項目として、 π 分子造形(A01)、 π 造形システム(A02)、 π 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。

また、本領域の目的を実現する鍵は、(1)多様な物質ライブラリの構築と、(2)多角的アプローチによる徹底的な物性解明にある。そこで、計画班にやや不足している分野(高分子、表面・界面科学、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。参画している公募研究者の分野、ミッションを以下に示す。

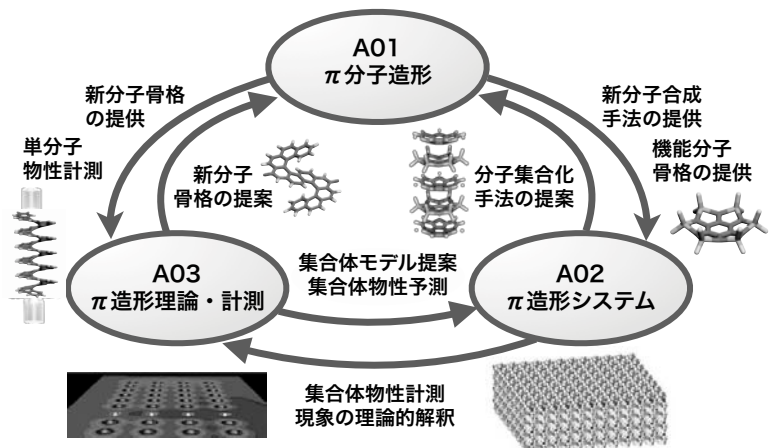
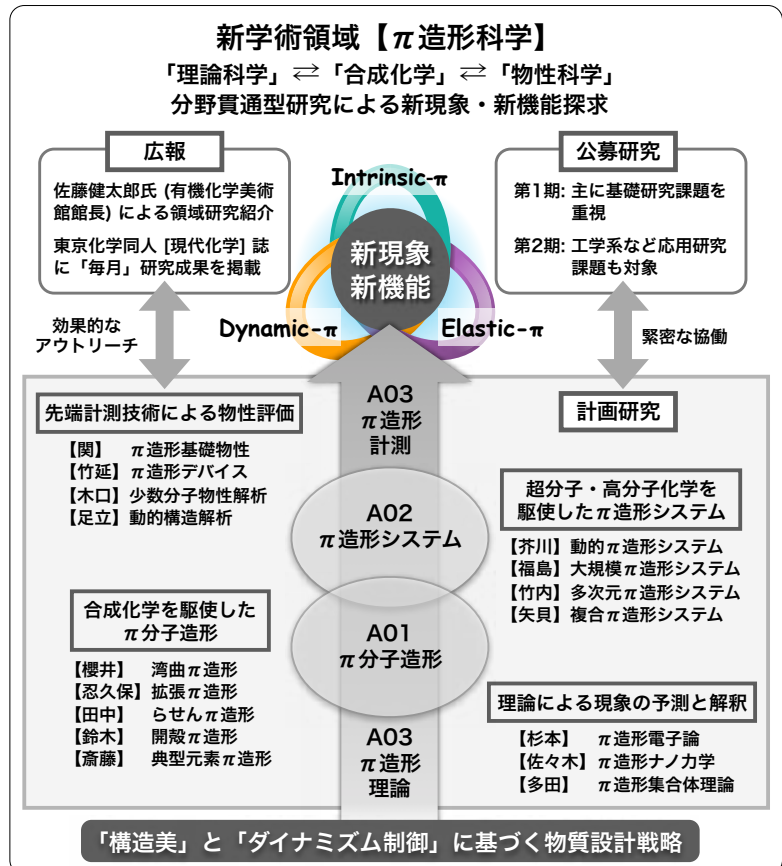
【合成・構造有機化学分野】（全てA01）重野真徳(らせん π 造形)、村岡貴博(動的 π 造形)、山村正樹(典型元素融合 π 造形)、辻 勇人(曲面 π 造形)、森崎泰弘(光学活性 π 造形)、村田 靖次郎(サブナノ π 空間造形)、清水正毅(捻れ π 造形)、武田洋平(典型元素融合 π 造形)、清水宗治(アザポルフィリノイド造形)、畠山琢次(拡張 π 造形)

【高分子分野】 A01 アルプレヒト建(巨大双極子 π 造形)、A02 山本洋平(球状 π 集積システム)、A02 長田裕也(動的キラル π ポリマー)、A02 藤ヶ谷剛彦(グラフィティック π システム)

【超分子分野】 A02 久木一朗(固体 π ネットワーク)、A02 生越 友樹(二次元 π 集積システム)

【光化学分野】 A02 羽會部 卓(電子励起状態制御)

【固体物性分野】 A02 原田 潤(動的 π システム)、A02 宮坂 等(π 集積金属錯体システム)、A02 上田 顕(スイッチャブル π システム)、A03 橋本 顕一郎(巨大分極の力学制御)、A03 中村雅一(熱電変換システム)、A03 須田理行(歪み制御型相転移デバイス)



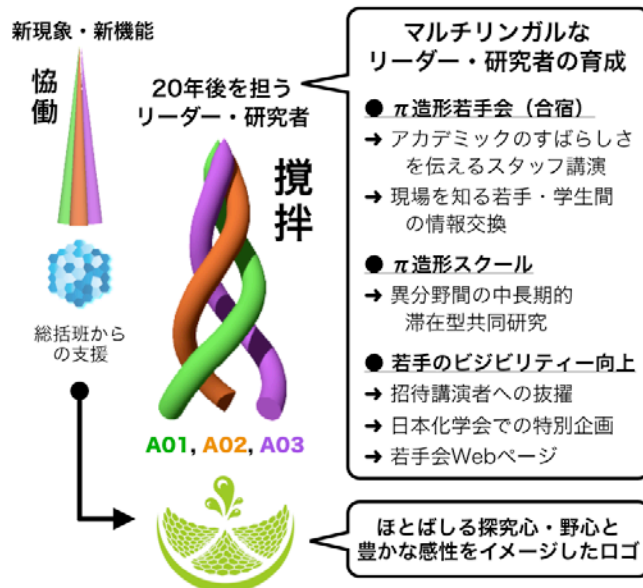
【表面・界面科学分野】 A03 坂口浩司(ナノ π 細線)

【理論分野】 A03 中野雅由(開殻超分子系理論)、A03 河東田 道夫(機械的刺激応答システムの理論)

7. 若手研究者の育成に係る取組状況（1ページ以内）

領域内の若手研究者の育成に係る取組状況について記述してください。

本領域では、領域内の若手研究者および大学院生による若手会を立ち上げ、緊密な相互交流を図るとともに、次世代を担う若手育成の場としている。若手会のロゴ(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。さらに、これまでにない「攻めの」若手育成策として、領域内外の大学院生を他の領域研究者の研究室に中長期間滞在させ、密接な共同研究を実施する「 π 造形スクール」を開設した。これらの取り組みを通じて、分野貫通型共同研究を強力に促進するとともに、複数の学理を身に付けた「マルチリンガル」として将来活躍する人材を育成することが、本領域の大きな目標の一つである。



【 π 造形若手会(合宿形式)】

領域内の研究を引力的かつ加速度的に推進するため、合宿形式で領域内若手研究者（若手スタッフ・ポスドク・大学院生）のみが参加する完全 closed の研究会を、年一回を目処に開催している。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ている。また、アカデミックのすばらしさやサイエンスの魅力を学生に伝えることをテーマに、若手スタッフの講演を実施している。第一回若手会(平成26年度)は52名、第二回若手会(平成27年度)は公募班も含め100名が参加し、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ていることが伺え、指導教員に対するアンケート結果からは、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。

【 π 造形スクール】

これまでに5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ている。 π 造形スクールは単なる共同研究の促進だけでなく、若手育成にとって極めて重要なシステムとして機能しており、評価委員からも高い評価を受けている。総括班経費の効率的使用に努め、今後も拡充する。

【若手研究者のビジビリティ向上へ向けて】

若手研究会活動の発信を目的として、若手会ウェブサイト(<http://pi-figuration.jp/foryoung/index.php>)を開設した。若手会に参加した学生によるニュースレター(No.1~5)、 π 造形スクールの体験レポート「国内留学訪問記」(5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(8件)、領域内若手研究者の受賞のニュース等を掲載した。いずれも大学院生のモチベーションの向上を大きく促している。また、若手研究者のビジビリティ向上を目的に、矢貝・杉安(A02)らを中心にした日本化学会年会の特別企画の実施、領域シンポジウムにおける若手研究者の招待講演を積極的に図っている。

本領域の取り組みが功を奏し、領域内の若手研究者と大学院生は、これまでに多数の成果を挙げている。以下に、具体的成果と、領域内の大学院生の進路について記述する。

若手教員の受賞:29件、学生賞の受賞:84件、博士課程に進学した修士学生:32名、博士の学位を取得した学生数:16名、アカデミックポストに就いた博士課程学生数:7名、ポスドクに就いた博士課程学生数:9名、企業に就職した博士課程学生数:5名

8. 研究費の使用状況（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総括班研究課題の活動状況と併せて記述してください。

1. 設備等の活用状況

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、ホームページ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、具体例を示す。

(1) FT-NMR: 日本電子 JNM-ECZ400S (A01 班・大阪大学・櫻井英博)

同じ大阪大学内で研究している、A03 班関の分担研究者である佐伯、A02 公募班久木の 3 研究室で共同運用している。

(2) 飛行時間型質量分析システム一式: 超高感度 ESI-TOF MS/microOTOFII-OCU(A01 班・大阪大学・鈴木修一)...A01 班櫻井、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。また、NMR が測定できない開殻系に関して、目的化合物を迅速に検出可能な MS の導入は、領域内外の共同研究の推進に大きく貢献している。

(3) 示差走査熱量測定装置: メトラー・トレド社製 DSC1-TS システム(A02 班・東北大学・芥川智行) ...A01 班櫻井、忍久保、鈴木、斎藤、重野、山村、A02 班福島、宮坂との共同研究に利用。

(4) 計算機: ビジュアルテクノロジー社製(20core/台を 5 台導入)(A03 班・熊本大学・杉本学)...電子状態計算による解析に活用(独自研究および福島、櫻井、竹内、杉安、矢貝らとの共同研究に活用)

2. 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、出来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:含パイ造形スクール運営)、④国際(関: π -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相当の事務職員を充て、出来る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教員として、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 π 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。

【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、「 π 造形スクール」の費用が含まれている。

π 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研究活動の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、効率良い運用を行なっている。

9. 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

新学術研究として集団でやることの価値が見えて来ていることはよろこばしい。 π 造形による新物質創製、新機能創出が成し遂げられるでしょう。特に、領域内および領域外の共同研究が予想を越えて飛躍的に増加していることは注目に値する。これには若手の力が大きく貢献しているようでさらなる展開を期待する。

相田 卓三

新しいコンセプトのもとに比較的若いメンバーでスタートした新学術領域プロジェクトですが、期待に応え、素晴らしい業績が出ております。トップジャーナルへの論文掲載も数多く見られ、当該分野の強さを世界の見せつけていると思います。外野からのリクエストが多々あるかと思いますが、私自身は、今の方向で研究に集中して行くことが望ましいと感じています。期待しています。

中村 栄一

π 結合系の科学は 19 世紀半ばケクレによるベンゼンの構造の提唱以来の、有機化学分野での中心的な研究課題である。1950 年代の赤松・井口による π 共役化合物の導電性の発見、1970 年代の白川・ヒーガー・マクダーミドによる導電性高分子の発見そして 21 世紀に入ってから有機半導体を利用した発光素子や太陽電池の実用化を経て、 π 結合系の科学は新しい発展段階に達した。本学術領域研究のテーマ設定は大変に時宜を得たものである。

この研究グループは 30~40 歳代の研究者を中心に結成されたものであり、出版論文リストからも分かるように、過去 2 年間の研究期間中に、量、質共に大変に充実した成果を挙げてきた。また運営面ではグループ内で研鑽を積むために行われる研究発表会のほかに、中学・高校での出前授業や若手研究者の短期留学事業など次世代育成に意を用いた事業を行っていることに大変共感を覚える。

事業後半に向かって、研究面ではこれまでの成果が更に発展することは間違いないと考えるが、中高大学生を対象にした啓発事業にもう一步踏み込んではどうだろうか。大学や日本化学会と協力するなど工夫することによって、単発の講義に比べてより少ない労力で最大の効果が得られるようにも思われる。

永瀬 茂

計画された新学術研究として順調に進展しており、分野貫通アプローチにより、新現象および新機能探索に重要な π 造形科学が創成されてきている。理論・計算と実験とのこれまでにない密で斬新なインタープレイにより、画期的な数多くの成果を期待する。また、若い研究者の活発な参加による新展開を期待する。

山口 茂弘

当該分野を代表する若手世代の研究者が集結し、高いビジビリティを示しながら精力的に研究を展開している。多彩な π 共役骨格は迫力があり、我が国のこの分野の基礎研究の強さが窺える一方、測定、理論のグループとの共同研究も多数進められており、新学術研究の意義も十分に見て取れる。このフレームワークの研究の中から、真に価値のある物性・機能をもつ分子系がいくつも創出されてくるのを期待する。

川島 隆幸

新学術領域研究では、計画・公募を問わず、まず各班員が企画した計画を達成するのは当然として、各班員間の共同研究により各班員が研究の幅を広げ、個としては勿論、領域ならではの研究成果を上げることが求められている。その観点から、既に幾つかの共同研究の成果が上がっており、共同研究の芽も多数見受けられる。また、他の領域と比較して若手研究者の活躍も際立っている。今後、より一層の成果を期待する。

吉野 勝美

結論をまず述べると、非常に精力的に研究が進められ、興味深い様々な新規分子構造、分子間に特徴的な相互作用のある構造物質が作られ、詳しく調べられており、この新学術領域研究を高く評価している。評価者は 1960, 1970 年代頃から現在で云えば有機エレクトロニクスに関係する研究をしてきたものにとっては、驚くほどの進化を感じる。当時は化学者で本格的にこの分野で活躍されている方は多くなかったので、電気、電子工学が専門であった我々自身が自ら直観も働かせながら新規物質、機能性の期待できる物質を

合成、作成せざるを得なかった。それと比べると隔世の感がある。定年後 10 年以上経過したものにとって理論的な裏付けをもって指針を持って新しい分子を自在に合成されていることは高く評価できるものである。

評価者は現在、地方の島根県産業技術センターで実際に産業振興に繋がる可能性のある対象を取り上げ研究開発しており、自らの過去の経験もあることから特に有機系材料にも注目しながら進めている。できることであれば自らが関係した内容を事業化に進めたいと云う気持ちがあることも事実である。

自らが最初に手掛けた筈とされていることとしていくつかの例を挙げると、導電性高分子に長い側鎖を導入することによりポリ(3-アルキルチオフェン)の化学合成と溶解性、溶融性の発見(1986 年)、サーモクロミズム、ソルバトクロミズム、ゲルクロミズムの発見(1986 年)、その後有機 EL の基本材料の一つとなったポリ(9-アルキルフルオレン)の合成(1987 年)と最初の青色 EL 発光の報告(1992 年)、導電性高分子と C₆₀ の間での光誘起電子移動の発見(1993 年)とこれを用いたドナー／アクセプター型太陽電池の作成などなど非常に多くのことをやってきたが、それを産業化することは容易ではないのが実際である。その他、導電性高分子、ナノカーボン類の電解コンデンサ、電気二重層キャパシタ、二次電池をはじめ各種デバイス、フォトニック結晶、特にチューナブルフォトニック結晶、液晶、特に強誘電性液晶、各種の光デバイスの研究にもかかわってきた。

たとえば有機 EL、有機太陽電池の旗振り役もやってきたつもりであるが、実際現在の島根県産業技術センターでも有機太陽電池の実用化の研究も進めている。しかし、行っているのはドナー-アクセプタ型でなく色素増感型である。特徴的な特性を持つもの、大型のものなどの開発を進め、近年国のある機関で実施され各機関で作製された有機太陽電池を用いて行われた試験の結果では、国内で大手企業、大学などを含めて実用に繋がる可能性のある太陽電池として評価できるのは当センターのものが唯一と云う話が聞こえてきている。しかしながらそれでもそれを商業ベースに持って行くことは容易ではないと感じているのが実際である。

- ① 何が言いたいかと云うと、現在本新学術領域研究「 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」で様々な研究が進められているが、それぞれが基礎科学的に重要な成果であるのはその通りであり高く評価できるが、一、二件は将来実用化が視野に入るようなものも見出したいものである。従って、このプロジェクトの後半に入った時点ではそのようなものを選んで選択的に重点を置いて進めることも考えに入れておいた方がいいように思う。
- ② 評価者の所属するセンターで行っている研究開発から感じていることは、熱の課題が非常に重要であることである。高熱伝導、高熱電変換などの視点からの研究にももう少し視点を置いてもいいように思う。
- ③ 評価者の個人的な趣味もあって、多くの重要な成果がある中で、面白いと思った内容をあげると、やはり熱に関わる内容、大きなゼーベック効果、液晶との接点がある研究などがある。また、磁性とのかわりにも関心がある。
- ④ 現在センサー機能に非常に関心を持っている者としての立場から見て、本プロジェクトでこれだけ多様で興味深い分子、物質が作成されているので、是非センサーとしての立場からも検討された方がいいように思う。

以上、気の付くところを簡単に述べたが、評価者がこの分野に近い仕事を始めた 30 年くらい以前に於いては、自ら期待される分子構造の検討、素人ながらの新規物質の合成、基礎物性測定、メカニズムの検討、機能性の探索と実用を目指した素子の開発など殆どすべてを行う必要があったが、比較的直観が良いと結果から見て自認している評価者自身にとってもかなり難しい対象であったので、特に優れた化学者が中心となって理論的裏付けを以て、メンバーの中で連携を取りながら効果的に研究を進めているこの新学術領域研究に大きく期待しているものである。この形でさらに良い成果が出るよう一層ご精進されることを祈っている。

Dirk. M. Guldi

Everything is going smoothly, and the members are working very well in this research project. I found no critical issue, and simply go ahead!

10. 今後の研究領域の推進方策（2ページ以内）

今後どのように領域研究を推進していく予定であるか、研究領域の推進方策について記述してください。また、領域研究を推進する上での問題点がある場合は、その問題点と今後の対応策についても記述してください。また、目標達成に向け、不足していると考えているスキルを有する研究者の公募研究での重点的な補充や国内外の研究者との連携による組織の強化についても記述してください。

これまでの活動により、計画研究者、公募研究者問わず、双方向ベクトルを持った緊密かつ広範な協働研究体制が構築され、新学術領域として高いレベルでミッションが共有されている。したがって、原則として、今後もこれまでの方針に沿って本領域を運営するが、さらに活動を活性化させるために、研究期間後半では以下に示す事項に留意しながら領域運営を実施する。

1. 領域運営の方針

【シンポジウム・会議】

公開シンポジウム、国際シンポジウム、領域全体会議（非公開）、若手シンポジウムは本領域の根幹となる行事として継続して開催する。平成 28 年度については以下の予定である。

第 2 回国際シンポジウム 4 月 14-15 日(さいたま)(開催済)	第 3 回領域全体会議 7 月 10-12 日(札幌)
第 3 回公開シンポジウム 10 月 20-21 日(仙台)	第 3 回若手シンポジウム 11 月 11-12 日(金沢)
第 3 回国際シンポジウム 平成 29 年 1 月 27-28 日(名古屋)	

平成 29 年度、30 年度についても、同様に各会議年 1 回程度を目処に開催を予定している。

【第二期公募研究】

第一期で主として発掘されたシーズを最終的に応用展開まで導くために、第二期においては工学系の研究者にも積極的に参画を求める。予算的に可能である限り、第一期より多くの公募研究者の参画を求める。

【若手育成】

若手会運営、若手シンポジウム開催と並び、 π 造形スクールが単なる共同研究の促進だけでなく、若手育成にとって極めて重要なシステムとして機能しており、評価委員からも高い評価を受けている。総括班経費の効率的使用に努め、今後も拡充する。この柔軟な運用は総括班経費で支弁することで可能となっており、このような機動的に運用できる研究予算に余裕があるのであれば、さらに拡充していきたいと考えている。また、国際関連では、 π 造形スクールでは海外の若手研究者の招聘を行ってきたが、逆に日本の大学院生の海外の共同研究グループへの派遣も、国際活動支援班経費などを活用することで行う。

【国際連携研究・教育事業】

本領域で設置した国際活動支援班(44頁～)との連携により推進する。

【研究成果の情報共有・発信】

引き続き、各研究者による論文発表、各領域シンポジウムの定期的開催、および領域ウェブサイト、月刊「現代化学」でのニュースレター掲載により対応する。領域ウェブサイトに、領域研究者のみが自由に書き込み、閲覧可能な掲示板を設置し、総括班で運用する。これにより「予期せぬ現象」や「説明できない実験結果」などをリアルタイムで共有し、新現象のサインを見逃さない仕組みとして機能させる。

【アウトリーチ活動】

これまでも専門の研究者以外に対するアウトリーチ活動に力を入れてきたが、中村栄一評価委員からの提言を踏まえ、今後、「中高大学生を対象にした啓発事業」にさらに踏み込んだ活動についても企画したいと考えている。これまでも、単発的に各研究者による中高大学生を対象とした啓発事業を積極的に行ってきたが、最終年度へ向け、より組織的な事業を計画する。日本化学会や日本学術振興会等で予算化している事業への参加や、各大学、地方自治体が持っているチャンネルを利用することを検討している。また本領域では、サイエンスライター佐藤健太郎氏を総括班メンバーに迎え、本領域の推進する施策や計画・公募研究についての取材結果を、月刊誌「現代化学」にて、一般読者にもわかりやすい形で毎月発信している。同様の内容を領域ウェブサイト上でニュースレターとして公開している。これらの情報発信を継続する。

【組織的な啓発・情報発信事業】

学術誌にて「 π 造形科学」の特集号を組むことで、直裁的に関連研究者にアピールする。現在英国王立化学会の雑誌出版担当と話し合いを行っている。また、成果の取りまとめとして重要な書籍の刊行に関しても、現在複数の出版社からの打診があり、今後具体的検討を進める。加えて、佐藤健太郎氏が継続的な取材で得た内容を基に、より一般読者層を対象にした啓蒙書の出版を計画する。

【国際会議との連携】

π 造形科学に関連した国際会議と連携することで、広く π 造形科学の理念や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。例として、Curo-Pi-II(2016.9.12～14, Oregon, USA)などの国際会議との協賛を予定している。また、海外の研究者に本領域研究の全体像を直接アピールする場として、最終年度には、本領域のメンバーが集団で海外を訪問し、現地でシンポジウムを開催する可能性を検討している(国際活動支援班報告書[44頁～]参照)。各研究者の単独の講演とは異なり、より本領域の意義をアピールできるものと期待される。費用対効果も考慮して、他のイベントとの共催、あるいは多くの研究者の参加が見込まれる国際会議においてセッションを設ける、などの方法を考えている。

【技術展開支援】

これまでの領域研究により蓄積された基礎科学的な「知」を昇華させる取り組みとして、技術展開の支援を行う。企業研究者向けシンポジウムを開催し、本領域の研究成果を次世代技術のシーズとして展開するために意見交換を行う機会を設ける。