
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

領域番号：2601

平成26年度～平成30年度
科学研究費助成事業（科学研究費補助金）
（新学術領域研究（研究領域提案型））
研究成果報告書

令和2年6月

領域代表者 福島 孝典
東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

はしがき

電子・光物性・磁性など、物性や機能の根源となる π 電子をもつ分子は、基礎化学はもとより、物質科学から生命科学に至る広い分野において極めて重要な役割を果たしてきた。なかでも、歴史的にブレークスルーをもたらした π 電子系分子にはシンプルで均整のとれた構造美がある。本領域では、「構造美」を物質設計の基本とし(= π 造形)、 π 電子機能を、 π 電子に固有な電子・光物性、磁性などの電子機能(Intrinsic- π 機能)とともに、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)という独自の視点から捉え、新物質・新機能の探求と新現象の発掘を目指した。本領域では、合成化学を駆使した π 造形科学の基盤となる新分子骨格の構築(A01)、機能分子の開発と分子集積化技術を駆使した様々な長さスケールでの π 造形システムの構築(A02)、先端計測、素子作製、シミュレーション技術を駆使した π 造形分子・分子集合体の機能予測・設計・解明(A03)を行う3つの班を組織し、「理論シミュレーション・モデル化」 \Leftrightarrow 「物質創製」 \Leftrightarrow 「物性計測」の双方向ベクトル型の研究者協働を推進した。本領域研究は、既存の有機デバイスにおける物性値の向上よりむしろ、 π 電子系に内在する未知の能力を引き出すための基礎学理の創成に焦点を当てた研究を推進した。 π 造形の物質設計概念に基づく分野貫通型研究による新機能・新現象の発掘と、それらを活かした新たな作動原理に基づく有機デバイスなど、 π 電子系物質科学の新しいパラダイム創出を目指した。

本領域の取り組みの結果、領域の研究成果が学術論文(計1271件)、国際学会における招待講演・基調講演(計596件)などとして発表され、数多くの学会賞等を受賞するに至った。また、若手研究者の成長も大きく、多くの研究成果を出し、またそれが評価された。その証左として、若手研究者の受賞(337件)、学生賞の受賞(238件)が挙げられる。さらに、領域に関与した博士学生75名が博士の学位を取得し、そのうち36名がアカデミアに進んだ。助教、講師、准教授から昇進した者も21名となった。

研究組織

計画研究

領域代表者 福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)

(総括班)

研究代表者 福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)
研究分担者 櫻井 英博 (大阪大学・工学研究科・教授)
研究分担者 芥川 智行 (東北大学・多元物質科学研究所・教授)
研究分担者 矢貝 史樹 (千葉大学・大学院工学研究院・教授)

(国際支援班)

研究代表者 福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)
研究分担者 櫻井 英博 (大阪大学・工学研究科・教授)
研究分担者 忍久保 洋 (名古屋大学・工学研究科・教授)
研究分担者 芥川 智行 (東北大学・多元物質科学研究所・教授)
研究分担者 矢貝 史樹 (千葉大学・大学院工学研究院・教授)
研究分担者 関 修平 (京都大学・工学研究科・教授)
研究分担者 竹延 大志 (名古屋大学・工学研究科・教授)
研究分担者 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)
研究分担者 杉本 学 (熊本大学・大学院先端科学研究部(工)・准教授)
研究分担者 斎藤 雅一 (埼玉大学・理工学研究科・教授)
研究分担者 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)
研究分担者 木口 学 (東京工業大学・理学院・教授)
研究分担者 佐々木 成朗 (電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授)
研究分担者 多田 朋史 (東京工業大学・元素戦略研究センター・准教授)

(成果取りまとめ班)

研究代表者 福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)
研究分担者 櫻井 英博 (大阪大学・工学研究科・教授)
研究分担者 芥川 智行 (東北大学・多元物質科学研究所・教授)
研究分担者 矢貝 史樹 (千葉大学・大学院工学研究院・教授)

(計画研究 A01 班)

研究代表者 櫻井 英博 (大阪大学・工学研究科・教授)
研究分担者 東林 修平 (慶應義塾大学・薬学部 (芝共立) ・准教授)

研究代表者 忍久保 洋 (名古屋大学・工学研究科・教授)
研究分担者 Shin Jiyoung (名古屋大学・工学研究科 (国際) ・特任教授)

研究代表者 田中 健 (東京工業大学・物質理工学院・教授)

研究代表者 鈴木 修一 (大阪大学・基礎工学研究科・准教授)

研究代表者 斎藤 雅一 (埼玉大学・理工学研究科・教授)

(計画研究 A02 班)

研究代表者 芥川 智行 (東北大学・多元物質科学研究所・教授)
研究分担者 帯刀 陽子 (東京農工大学・工学(系)研究科 (研究院) ・講師)

研究分担者 森 寛敏 (お茶の水女子大学・基幹研究院・准教授)

研究分担者 松田 真生 (熊本大学・自然科学研究科・准教授)

研究代表者 福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)

研究分担者 庄子 良晃 (東京工業大学・科学技術創成研究院・准教授)

研究分担者 石割 文崇 (東京工業大学・科学技術創成研究院・助教)

研究分担者 梶谷 孝 (東京工業大学・科学技術創成研究院・特任講師)

研究代表者 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)

研究分担者 高井 淳朗 (物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主任研究員)

研究分担者 杉安 和憲 (物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員)

研究代表者 矢貝 史樹 (千葉大学・大学院工学研究院・教授)

(計画研究 A03 班)

研究代表者 関 修平 (京都大学・工学研究科・教授)

研究分担者 櫻井 庸明 (京都大学・工学研究科・助教)

研究分担者 佐伯 昭紀 (大阪大学・産業科学研究所・その他)

研究分担者 酒巻 大輔 (京都大学・工学研究科・特定助教)

研究代表者 竹延 大志 (名古屋大学・工学研究科・教授)

研究代表者 木口 学 (東京工業大学・理学院・教授)

研究分担者 藤井 慎太郎 (東京工業大学・理工学研究科・特任准教授)

研究代表者 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)

研究代表者 杉本 学 (熊本大学・大学院先端科学研究部 (工)・准教授)

研究代表者 佐々木 成朗 (電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授)

研究代表者 多田 朋史 (東京工業大学・元素戦略研究センター・准教授)

研究分担者 南山 英美 (東京大学・工学系研究科(工学部)・講師)

公募研究

(平成27年度～平成28年度)

研究代表者 重野 真徳 (東北大学・薬学研究科・講師)

研究代表者 村岡 貴博 (東京工業大学・生命理工学院・助教)
研究代表者 山村 正樹 (筑波大学・数理物質系・講師)
研究代表者 辻 勇人 (神奈川大学・理学部・教授)
研究代表者 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)
研究代表者 森崎 泰弘 (関西学院大学・理工学部・教授)
研究代表者 村田 靖次郎 (京都大学・化学研究所・教授)
研究代表者 清水 正毅 (京都工芸繊維大学・工芸科学・教授)
研究代表者 武田 洋平 (大阪大学・工学研究科・准教授)
研究代表者 清水 宗治 (九州大学・工学研究院・准教授)
研究代表者 畠山 琢次 (関西学院大学・理工学部・准教授)
研究代表者 原田 潤 (北海道大学・理学研究院・准教授)
研究代表者 宮坂 等 (東北大学・金属材料研究所・教授)
研究代表者 山本 洋平 (筑波大学・数理物質系・准教授)
研究代表者 上田 顕 (東京大学・物性研究所・助教)
研究代表者 生越 友樹 (金沢大学・物質化学系・教授)
研究代表者 長田 裕也 (京都大学・工学研究科・助教)
研究代表者 久木 一朗 (大阪大学・工学研究科・助教)
研究代表者 藤ヶ谷 剛彦 (九州大学・工学研究院・准教授)
研究代表者 羽會部 卓 (慶應義塾大学・理工学部 (矢上) ・准教授)
研究代表者 橋本 顕一郎 (東北大学・金属材料研究所・助教)
研究代表者 坂口 浩司 (京都大学・エネルギー理工学研究所・教授)
研究代表者 中野 雅由 (大阪大学・基礎工学研究科・教授)
研究代表者 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)
研究代表者 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)
研究代表者 河東田 道夫 (理化学研究所・計算科学研究機構・特別研究
員)

(平成29年度～平成30年度)

研究代表者 村岡 貴博 (東京農工大学・工学(系)研究科(研究

院)・准教授)

- 研究代表者 山村 正樹 (富山県立大学・工学部・准教授)
- 研究代表者 辻 勇人 (神奈川大学・理学部・教授)
- 研究代表者 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)
- 研究代表者 森崎 泰弘 (関西学院大学・理工学部・教授)
- 研究代表者 村田 靖次郎 (京都大学・化学研究所・教授)
- 研究代表者 武田 洋平 (大阪大学・工学研究科・准教授)
- 研究代表者 清水 宗治 (九州大学・工学研究院・准教授)
- 研究代表者 畠山 琢次 (関西学院大学・理工学部・教授)
- 研究代表者 桑原 純平 (筑波大学・数理物質系・准教授)
- 研究代表者 小西 玄一 (東京工業大学・物質理工学院・准教授)
- 研究代表者 瀬川 泰知 (名古屋大学・理学研究科・特任准教授)
- 研究代表者 原田 潤 (北海道大学・理学研究院・准教授)
- 研究代表者 宮坂 等 (東北大学・金属材料研究所・教授)
- 研究代表者 山本 洋平 (筑波大学・数理物質系・教授)
- 研究代表者 上田 顕 (熊本大学・大学院先端科学研究部 (理)・准教授)
- 研究代表者 生越 友樹 (京都大学・工学研究科・教授)
- 研究代表者 羽會部 卓 (慶應義塾大学・理工学部 (矢上)・准教授)
- 研究代表者 関 朋宏 (北海道大学・工学研究院・助教)
- 研究代表者 長谷川 達生 (東京大学・大学院工学系研究科 (工学部)・教授)
- 研究代表者 檜田 啓 (名古屋大学・工学研究科・准教授)
- 研究代表者 中野 義明 (京都大学・理学研究科・助教)
- 研究代表者 灰野 岳晴 (広島大学・理学研究科・教授)
- 研究代表者 小野 利和 (九州大学・工学研究院・助教)
- 研究代表者 長谷川 裕之 (島根大学・学術研究院教育学系・准教授)
- 研究代表者 林 正太郎 (防衛大学校・応用科学群・講師)
- 研究代表者 橋本 顕一郎 (東北大学・金属材料研究所・助教)
- 研究代表者 坂口 浩司 (京都大学・エネルギー理工学研究所・教授)
- 研究代表者 中野 雅由 (大阪大学・基礎工学研究科・教授)

研究代表者 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)

研究代表者 河東田 道夫 (早稲田大学・理工学術院・客員主任研究員)

研究代表者 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)

研究代表者 清水 康弘 (名古屋大学・理学研究科・講師)

研究代表者 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)

研究代表者 山根 宏之 (理化学研究所・放射光科学研究センター・研究員)

交付決定額 (配分額)

	合計	直接経費	間接経費
平成26年度	295,893,000 円	227,610,000 円	68,283,000 円
平成27年度	301,340,000 円	231,800,000 円	69,540,000 円
平成28年度	293,670,000 円	225,900,000 円	67,770,000 円
平成29年度	311,220,000 円	239,400,000 円	71,820,000 円
平成30年度	311,610,000 円	239,700,000 円	71,910,000 円
総計	1,513,733,000 円	1,164,410,000 円	349,323,000 円

研究発表

雑誌論文 (計 1271 件, 以下は代表論文, 全て査読有り)

研究項目 A01 (π 分子造形)

計画研究

1. 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*, 9439–9442.
2. 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.
- Figuration of bowl-shaped π -conjugated molecules: properties and functions, M. Saito, H. Shinokubo, H. Sakurai, *Mater. Chem. Front.* **2018**, *2*, 635–661.
 - 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.
 - 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.
 - 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.
 - (η^4 -Butadiene)Sn(0) Complexes: A New Approach for Zero-valent *p*-Block Elements Utilizing a Butadiene as a 4π -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.
 - 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.
 - 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 C₆₀, H. Yokoi, Y. Hiraoka, S. Hiroto, D. Sakamaki, S. Seki, H. Shinokubo, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8215.
 - 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

1. Control of Circularly Polarized Luminescence by Orientation of Stacked π -Electron Systems", K. Kikuchi, J. Nakamura, Y. Nagata, H. Tsuchida, T. Kakuta, T. Ogoshi, Y. Morisaki, *Chem. Asian J.* **2019**, *14*, 1681–1685.
2. Four-Step Synthesis of B₂N₂-embedded Corannulene, S. Nakatsuka, N. Yasuda, T. Hatakeyama, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 13562–13565.
3. 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.
4. Rational Synthesis of Antiaromatic 5,15-Dioxaporphyrin and Oxidation into β,β -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.
8. Isolation of the Simplest Hydrated Acid, R. Zhang, M. Murata, A. Wakamiya, T. Shimoaka, T. Hasegawa, Y. Murata, *Sci. Adv.* **2017**, *3*, e1602833.
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.

11. Synthesis of a Distinct Water Dimer inside Fullerene C₇₀, 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. Ruangsapapichat, J. Casado, H. Tsuji, E. Nakamura, M. A. Díaz-García, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8458.

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.
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.
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, T. Akutagawa, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 2391–2397.
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.
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.

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.
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.
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, 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.
11. Photoreactive Helical Nanoaggregates Exhibiting Morphology Transition upon Thermal Reconstruction, M. Yamauchi, T. Ohba, T. Karatsu, S. Yagai, *Nat. Commun.* **2015**, *6*, 8936.
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.
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.
 4. Creating Elastic Organic Crystals of π -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. π -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.
 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. Sugimoto, 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.
 9. Hydrogen-bonded Hexagonal Buckybowl Framework, I. Hisaki, H. Toda, H. Sato, N. Tohnai, H. Sakurai, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 15294–15298.
 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 (π 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.
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, 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. A Triphosphasumanene Trisulfide: High Out-of-Plane Anisotropy and Janus-type π -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.
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.
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.
 10. Experimental observation of phonon generation and propagation at a MoS₂(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.
 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.

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.
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.
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.
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.
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. π -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. Buurma, 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 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.

学会発表（国際学会における招待講演・基調講演 計 596 件，以下に代表的な成果を抜粋）

1. H. Sakurai, Colloidal Composite of Gold Nanoparticles and Hydroxylated Fullerenes, 233rd ECS Meeting, Seattle (USA), **2018**.
2. H. Shinokubo, Strongly Antiaromatic Porphyrins with Singlet Biradical Character, 233rd ECS Meeting, Seattle (USA), **2018**.
3. K. Tanaka, Enantioselective Construction of Helical Chirality by Rhodium-Catalyzed [2+2+2] Cycloaddition, The 4th International Conference on Organometallic and Catalysis 2018 (OM&Cat 2018), Taipei (Taiwan), **2018**.
4. S. Suzuki, R. Tanimoto, M. Kozaki, K. Okada, Cross-Coupling Reaction of (Nitronyl Nitroxide-2-ido)(Triphenylphosphino)Gold(I) with Aryl Halides, The 8th Russian-Japanese Workshop on Open Shell Compounds and Molecular Spin Devices, Kazan (Russia), **2014**.
5. M. Saito, New Insight into the Chemistry of Sandwich Complexes: Utilization of

Metallole Dianion, 11th International Conference on Heteroatom Chemistry, Caen (France), **2015**.

6. T. Akutagawa, Y. Nakane, K. Sakai, Dual-locking Fluorescent Molecular Assembly of an Ion-sensing Quinoxalinone Derivative, The 6th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC6), Melbourne (Australia), **2017**.
7. T. Fukushima, Construction and Modification of π -Electronic Systems Using Organic Boron Compounds, 17th International Symposium on Novel Aromatics (ISNA 2017), Stony Brook (USA), **2017**.
8. M. Takeuchi, Supramolecular Approach Toward Functional π -Materials Ensemble, ICMAT2015 & IUMRS-ICA 2015, Singapore (Singapore), **2015**.
9. S. Yagai, Supramolecular Polymers with Well-Defined Topologies, SICC-10, National University of Singapore, Singapore (Singapore), **2018**.
10. S. Seki, Backbone configuration of conjugated polymers at the interfaces and under high pressure—Assessed by non-contact microwave-based conductivity measurements, MACRO 2017, Thiruvananthapuram (India), **2017**.
11. T. Takenobu, Thermoelectric Energy Conversion Optimized by Electrolyte Gating, 231st ECS Meeting, New Orleans (USA), **2017**.
12. M. Kiguchi, Single Molecular Dynamics Using the Surface Enhanced Raman Scattering, van der Waals colloquium, Leiden (Netherlands), **2014**.
13. S. Adachi, Capturing Structural Dynamics of Photocatalyst by Ultrafast X-ray Spectroscopy, International Conference on Artificial Photosynthesis 2017 (ICARP2017), Kyoto (Japan), **2017**.
14. M. Sugimoto, Electronic-Structure Informatics on Functional Molecules for Perovskite Solar Cells, Asia Pacific Conference in Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC8), Mumbai (India), **2017**.
15. N. Sasaki, Nanoscale superlubricity, peeling and fracture at carbon and silicon interfaces, MMM2014, 7th International Conference on Multiscale Materials Modeling, California (USA), **2014**.
16. T. Tada, Hybrid density functional study on electron transport through π -stack molecular junctions for high conductance, PacifiCHEM2015, Honolulu (USA), **2015**.

図書 (計 18 件)

1. 佐藤健太郎, 講談社「すごい分子 世界は六角形でできている」2019年, 333 ページ.
2. 杉本学, 井手尾俊宏, 田中大佑生, 森川郁美 他, 技術情報協会編, 技術情報協会「マテリアルズ・インフォ マティクスによる材料開発と活用集」2019年, 463 ページ.
3. 林正太郎 他, 技術情報協会編, 技術情報協会「次世代のポリマー・高分子開発～新しい用途展開と将来展望～」2019年, 608 ページ.
4. 舟橋良次 監修, 小原春彦 監修, 岩室憲幸, 梅沢仁, 山崎聡, 小原春彦, 小島広孝, 中村雅一 他, NTS 出版「サーマルデバイス 新素材・新技術による熱の高度制御と高効率利用」2019年, 448 ページ.
5. D. Budker 原著, D. F. Kimball 原著, D. P. Demille 原著, 清水康弘 訳, 共立出版「原子物理学—量子テクノロジーへの基本概念」2019年, 482 ページ.
6. 東北放射光施設推進会議室 編集, 長谷川達生 他, アグネ技術センター「放射光利用の手引き」2019年, 344 ページ.
7. J. S. Miller (editor), H. Miyasaka *et al.*, World Scientific Pub. Co. Pte. Ltd “World Scientific Reference on Spin in Organics Volume 4: Spin in organics”, 2018, 353 pages.
8. T. Ogawa (editor), T. Nakano, H. Sakaguchi *et al.*, Springer “Molecular Architectonics: The Third Stage of Single Molecule Electronics” 2017, 548 pages.
9. L. E. Watson (editor), M. Yamamura *et al.*, Nova science publishers “Azobenzene: Aspects, Applications and Research” 2017, 155 pages.
10. 民谷栄一 監修, 関谷毅 監修, 八木康史 監修, 中村雅一 他, シーエムシー出版「IOT を志向するバイオセンシング・デバイス技術」2016年, 193 ページ.
11. 日本化学会 編, 杉野目道紀, 長田裕也 他, 化学同人「精密重合が拓く高分子合成」2016年, 204 ページ.
12. 有賀克彦 監修, 高坂亘, 宮坂等 他, エヌ・ティー・エス「ナノ空間材料ハンドブック ナノ多孔性材料、ナノ層状物質等が切り拓く新たな応用展開」2016年, 548 ページ.
13. B. Sieklucka (editor), D. Pinkowicz (editor), Y. Sekine *et al.*, Wiley-VCH “Molecular Magnetic Materials: Concepts and Applications” 2016, 484 pages.

14. M. Kiguchi (editor), T. Tada *et al.*, Springer “An Introduction to Synthesis, Measurement and Theory” 2016, 235 pages.
15. V. K. Thakur (editor), M. K. Thakur (editor), S. Muhammad, M. Nakano *et al.*, Taylor & Francis-CRC Press Publisher “Chemical Functionalization of Carbon Nanomaterials” 2015, 1101 pages.
16. 有機合成化学協会 編集, 中井武 編集, 辻勇人 他, 丸善「有機合成実験法ハンドブック第2版」2015年, 1166 ページ.
17. T. Nishinaga (editor), S. Suzuki, K. Okada *et al.*, Wiley-VCH “Organic Redox Systems: Synthesis, Properties, and Applications” 2015, 596 pages.
18. T. Akasaka (editor), A. Osuka (editor), S. Fukuzumi (editor), H. Kandori (editor), Y. S. Aso (editor), S. Suzuki, H. Tsuji, S. Shimizu *et al.*, “Chemical Science of π -Electron Systems” 2015, 777 pages.

産業財産権

計 3 件

1. 特許第 5994038 号「電気化学発光セル、電気化学発光セルの発光層形成用組成物、及び電気化学発光セルの発光層用イオン性化合物」発明者：米川文広, 坂上 知, 竹延 大志
2. 特許第 6651335 号「白色発光ポリマー体、白色発光ポリマー体を備えた電子機器」発明者：山本 洋平, 櫛田 創, 木島 正志
3. 特許第 6583908 号「強誘電ポリマー球体およびその製造方法」発明者：山本 洋平, 岡田 大地

研究成果

研究項目 A01 では、先端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湾曲、らせん、ベルト、結び目構造など、様々な造形美を有する独自の π 電子系分子ライブラリの構築、ならびに反芳香族性、三次元芳香族性、二重芳香族性など、芳香族性という有機化学の基本概念を更新する発見を成し遂げ、さらに発光材料として実用化された分子も生まれた。

研究項目 A02 では、ナノ～メゾ構造体や単結晶～薄膜に至る多様な分子集合体の造形を通じ、超長距離構造秩序形成、単結晶様物質における流動性の発現、超分子リビング重合などの新現象の発見に加え、分子運動に基づく新しい強誘電応答機能や、優れたキャリア輸送、発光特性、光応答性を示す数々の新システムの構築に成功した。

研究項目 A03 では、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 線回折などの独自の計測手法、および電子状態・構造の解析やシミュレーション法を開発し、 π 造形分子・システムが示す新機能、新現象の発掘に大きく寄与した。

本領域が掲げた「 π 造形」の物質設計概念はすべての領域研究者に浸透し、「理論シミュレーション・モデル化」 \rightleftharpoons 「物質創製」 \rightleftharpoons 「物性計測」の双方向ベクトル型の分野貫通型共同研究も円滑に進行した。結果として、卓越した個人研究と相まって、豊富で優れた領域内・国際共同研究の実績を挙げる事ができた。また、本領域が設定した独自の若手育成プログラムにより若手研究者や大学院生の躍進が見られた。本領域の研究成果と貢献度の自己評価として、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、これらを総括した内容を以下に記す。

基礎科学分野における研究プロジェクト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。全発表論文数 1271 報の実績とともに、研究の質を示す国際的一流誌に掲載された論文 (*Nature* 1 報、*Nature Chemistry* 11 報、*Nature Materials* 4 報、*Nature Communications* 26 報、*Science* 5 報、*Journal of the American Chemical Society* 68 報、*Angewandte Chemie International Edition* 77 報など) 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 π 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 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。

研究者ネットワーキング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った。「若手育成」では、インターンシップ制度（π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。

学理構築に繋がる基礎科学的に重要な知見の集積から社会実装も実現した本領域の取り組みと成果は、当該学問分野を越え、広く関連分野にも多大な貢献をするものと考えられる。

以上