

領域略称名：ソフトクリスタル 領域番号：2903

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）」
に係る中間評価報告書

「ソフトクリスタル：
高秩序で柔軟な応答系の学理と光機能」

（領域設定期間）

平成29年度～令和3年度

令和元年6月

領域代表者 （北海道大学・大学院理学院・教授・加藤 昌子）

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	8
2. 研究の進展状況	10
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	13
4. 主な研究成果（発明及び特許を含む）	15
5. 研究成果の公表の状況（主な論文等一覧、ホームページ、公開發表等）	18
6. 研究組織（公募研究を含む）と各研究項目の連携状況	23
7. 若手研究者の育成に関する取組状況	25
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）	26
9. 総括班評価者による評価	27
10. 今後の研究領域の推進方策	29

研究組織 (総：総括班，計：総括班以外の計画研究，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	17H06366 ソフトクリスタル:高秩 序で柔軟な応答系の学 理と光機能	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	加藤 昌子	北海道大学・理学研究院・教授	1
A01 計	17H06367 発光性スマートソフト クリスタルの環境応答 制御と機能化	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	加藤 昌子	北海道大学・理学研究院・教授	3
A01 計	17H06368 ソフトクリスタルの熱 機械的評価手法ならび に制御手法の開拓	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	高見澤 聡	横浜市立大学・理学部・教授	2
A01 計	17H06369 ケイ素-ケイ素結合の 特性を利用した外部応 答性ソフトクリスタル の開発	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	山野井 慶徳	東京大学・大学院理学系研究科・ 准教授	1
A02 計	17H06370 ドミノ型相転移ソフト クリスタルの機構解明 と新機能創成	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	伊藤 肇	北海道大学・大学院工学研究院・ 教授	3
A02 計	17H06371 ソフトクリスタル化学 発光系の創製と刺激応 答機能の時空間制御	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	平野 誉	電気通信大学・大学院情報理工学 研究科・教授	2
A02 計	17H06372 X 線分子動画撮影法を 用いたソフトクリスタ ルにおける外場応答過 程の観測	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	佐藤 文菜	自治医科大学・医学部・講師	2
A02 計	17H06373 金属錯体の結晶ポテン シャルの開発と多形転 移現象のメカニズム解 析	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	後藤 仁志	豊橋技術科学大学・大学院工学研 究科・准教授	1

A03 計	17H06374 ソフトクリスタルの界面制御による光物性開拓	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	長谷川 美貴	青山学院大学・理工学部・教授	3
A03 計	17H06375 ソフトクリスタルの準安定状態創製技術の開発と相転移現象の解明	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	石井 和之	東京大学・生産技術研究所・教授	5
A03 計	17H06376 ソフトフォトニッククリスタルの創製	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	グン 剣萍	北海道大学・先端生命科学研究 院・教授	3
A03 計	17H06377 らせん生体高分子組織化ソフトクリスタルの創製と革新的光・電子機能素子開発	平成 29 年度 ～ 平成 33 年度	小林 範久	千葉大学・大学院工学研究院・教授	1
総括・計画研究 計 12 件					
A01 公	18H04495 多孔性結晶のソフト化による刺激応答性異方伸縮ソフトクリスタルの開発	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	小門 憲太	北海道大学・理学研究院・助教	1
A01 公	18H04498 多孔性分子導体を基盤とした導電性ソフトクリスタルの創製	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	井口 弘章	東北大学・大学院理学研究科・助教	1
A01 公	18H04500 金属酸化物ソフトクリスタルの創製と機能制御	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	鈴木 康介	東京大学・大学院工学系研究科・准教授	1
A01 公	18H04501 フェロセン環状オリゴマーを鍵とする 2 次元ソフトクリスタルの創成	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	佐藤 弘志	東京大学・大学院工学系研究科・講師	1
A01 公	18H04504 粉末結晶解析による有機ベイポクロミック結晶の創製と結晶転移機	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	植草 秀裕	東京工業大学・大学院理工学研究科・准教授	1

	構の解明				
A01 公	18H04505（廃止） 熱応答性メカニカル結 晶の合理的設計と機能 スイッチ	平成 30 年度 ～ 平成 30 年度	金原 数	東京工業大学・生命理工学院・教 授	1
A01 公	18H04510 柱型環状分子を基にし た弱刺激応答性ソフト クリスタルの創成	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	生越 友樹	京都大学・大学院工学研究科・教 授	1
A01 公	18H04511 内在性細孔を持つイオ ン性結晶を用いた格子 欠陥誘起型ソフトクリ スタルの創製	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	酒田 陽子	金沢大学・理工学域・准教授	1
A01 公	18H04513 遷移金属化学種による 分子性結晶の構造柔軟 性と機能に関する理論 化学	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	榊 茂好	京都大学・福井謙一記念研究セン ター・研究員	1
A01 公	18H04518 キラリティー制御が可 能なソフトクリスタル の開拓	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	松本 有正	奈良女子大学・研究院自然科学 系・助教	1
A01 公	18H04524 高分子ソフトクリスタ ルの創製と光機能の開 拓	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	池田 富樹	中央大学・研究開発機構・教授	1
A02 公	18H04496 分子結晶における励起 状態と発光過程の理論 的解明	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	岩佐 豪	北海道大学・理学研究院・助教	1
A02 公	18H04499 ソフトクリスタルの放 射光その場構造観測	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	西堀 英治	筑波大学・数理物質系・教授	1
A02 公	18H04502 分子配列能を備えた多 孔性結晶細孔における ソフトクリスタリゼー ション法の開発	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	田代 省平	東京大学・大学院理学系研究科・ 准教授	1

A02 公	18H04508 多色発光性有機ソフト クリスタルの創製と機 械的刺激応答性の定量 解析	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	伊藤 傑	横浜国立大学・大学院工学研究 院・准教授	1
A02 公	18H04512 高速 A F M を基盤とし たソフトクリスタルの 構造物性ダイナミクス 評価技術の確立	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	内橋 貴之	名古屋大学・大学院理学研究科・ 教授	1
A02 公	18H04516 光で創る金属錯体系ソ フトクリスタル	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	持田 智行	神戸大学・大学院理学研究科・教 授	1
A02 公	18H04520 D- π -A 型蛍光性色素 のメカノフルオロクロ ミズムの解明とソフト クリスタル群の構築	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	大山 陽介	広島大学・大学院工学研究科・教 授	1
A02 公	18H04522 ソフトクリスタルにお ける光誘起電荷分離・電 荷再結合発光過程の制 御	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	嘉部 量太	九州大学・最先端有機光エレクト ロニクス研究センター・助教	1
A03 公	18H04497 ソフトクリスタル挙動 を示すキラル希土類配 位高分子の合成と光機 能評価	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	長谷川 靖哉	北海道大学・大学院工学研究院・ 教授	1
A03 公	18H04503 新たな光機能を付与し たペロブスカイト材料 の開拓	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	木下 卓巳	東京大学・大学院総合文化研究 科・助教	1
A03 公	18H04506 ソフトクリスタルの熱 的特性精密測定と熱・分 光イメージングによる 熱応答制御	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	森川 淳子	東京工業大学・物質理工学院・教 授	1
A03 公	18H04507 ソフトキラル分子結晶	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	平田 修造	電気通信大学・大学院情報理工学 研究科・助教	1

	による刺激応答性室温円偏光蓄光材料の創生				
A03 公	18H04509 ソフトクリスタルを構成する分子集団の構造変型ダイナミクスの実時間観測	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	岩村 宗高	富山大学・大学院理工学教育部・講師	1
A03 公	18H04514 液晶の深化によるソフトクリスタルの創製と機能開拓	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	尾崎 雅則	大阪大学・大学院工学研究科・教授	1
A03 公	18H04515 双安定性有機材料におけるテラヘルツ超高速スイッチング	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	中嶋 誠	大阪大学・レーザー科学研究所・准教授	1
A03 公	18H04517 ソフトクリスタルにおける刺激応答構造変化の 1 粒子発光観測	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	立川 貴士	神戸大学・大学院理学研究科・准教授	1
A03 公	18H04519 テーブルトップ型超高速電子線を用いたソフトクリスタルの光誘起現象の動画撮影	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	羽田 真毅	筑波大学・エネルギー物質科学研究センター・准教授	1
A03 公	18H04525 水素結合型遷移金属錯体によるナノ多孔質結晶と P C E T 伝導機構の研究	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	田所 誠	東京理科大学・理学部・教授	1
A03 公	18H04527 電場応答性ソフトクリスタルの光電子デバイスへの応用	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	大久保 貴志	近畿大学・理工学部・教授	1
A03 公	18H04528 固体電気化学反応を利用したソフトクリスタルの光学特性制御	平成 30 年度 ～ 平成 31 年度	吉川 浩史	関西学院大学・理工学部・准教授	1
A03 公	18H04529 磁性・電気伝導性交差相	平成 30 年度	石川 立太	福岡大学・理学部・助教	

	関物性型ソフトクリ タル素子の創製と光物 性制御	～ 平成 31 年度			1
公募研究 計 32 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。

1) 研究の学術的背景

一般に『結晶』は、硬く安定で構造の変化が小さい物質であるという認識が持たれている。しかし 2000 年代に入って以降、この認識を覆す現象・物質群が、光をプローブとした研究により相次いで発見され、世界的に注目を集めている。これらの新物質群は、規則正しい結晶構造・周期構造を維持したまま、外部刺激によってその構造や特性が劇的に変化し、独特の性質や光機能を示すという特徴をもつ。例えば、本新学術領域代表者の加藤は、特定の有機物蒸気に感応して発光が可逆的に ON-OFF を示す白金錯体結晶を見出している（*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2002**, 41, 3183.）。また、“棒で擦る”というマクロな低刺激による結晶の発光色変化が、2007 年に務台（計画研究）ら（*J. Am. Chem. Soc.*, **2007**, 129, 1520.）、2008 年に伊藤（A02 班班長）・加藤らにより発見された（*J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, 130, 10044.）。伊藤らによる黄色に発光する結晶相を青く発光する別の準安定な結晶相に接触させると黄色の発光相が「伝染」するという新奇現象（*Nature Commun.* **2013**, 4, 2009.）や、高見澤（計画研究）らによる変形しても元に戻る相転移を伴った有機結晶－超弾性現象（*Nature Commun.*, **2015**, 6, 8934.等）の発見が注目を集めている。このような分子性結晶の“結晶エンジニアリング”は、長らくセレンディピティやスクリーニングに頼っている状況であったが、近年では国際結晶構造予測ブラインドテストが開催されるに至っており、その学理解明への機運が高まってきている（後藤（計画研究）らは有機化合物結晶の構造予測に成功）。他方、外場・環境に応答して準安定な分子集合状態を作成する技術も、革新的に進展しており、マクロな機械的回転により、分子が準安定なキラル集合状態を形成する新奇現象は、石井

（A03 班班長）らの実験・計算により、学理解明に近づきつつある（*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2011**, 50, 9133.等）。このように興味深い系及び関連する興味深い現象が、分野を横断して同時多発的に発見されている。これまで研究されてきた『結晶』は、構成単位が熱力学的に安定で堅固な集合状態、周期構造にあるため、本質的に変化しにくい性質をもつものに対し、これら新しい物質群では、構成単位である分子にゆらぎがあり、安定に単離できながら特定の低強度の刺激により構造変化しやすいことが特徴である。申請者らは、この新しい物質群を『ソフトクリスタル』と名づけた。



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

『ソフトクリスタル』が示す現象は日本発で見出された常識を覆す新奇な現象であり、日本が有する世界最大規模かつ先導的な立場にある錯体化学会、および、世界的視野で活動する光化学協会を基盤としている。このような背景のもと、日本がソフトクリスタル研究で国際的優位性を現在有することを踏まえ、複数の既存分野にまたがる研究者集団を結集し、新たな学術領域を早期に立ち上げることは高い意義を持つ。これにより、革新的・独創的な日本発の“ソフトクリスタルを基盤とするものづくり”に関する格段の発展が期待できる。本新学術領域では、ソフトクリスタルにおけるマクロな低刺

激とナノ構造変化を繋ぐ学理を解明し、これまでに培われてきたナノテクノロジーを積極的かつ有効に利用しつつも、全く新しい機能性素材の開発指針を得ることで、高秩序で柔軟なナノアーキテクチャーをベースにした新領域を開拓することを目指す。

マクロで、かつ極めて低い刺激に応答するこれらの“ソフトクリスタル”は、通常の結晶・液晶とは異なる特徴を持つ(右表)。

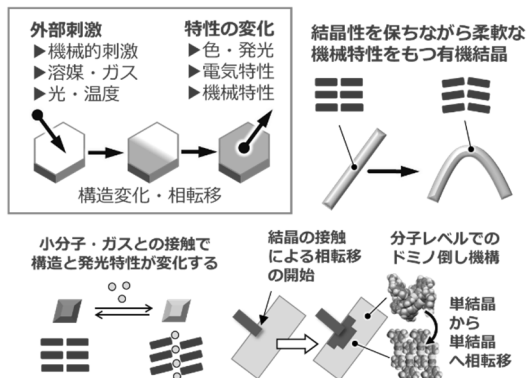
しかし、ソフトクリスタルの特異な現象は、発光により結晶構造変化を追う方法論により見出されたものであるため、マクロな刺激とナノ構造変化を繋ぐ学理は未開拓であり、分子をモデル化して相転移現象を取り扱う理論物理的アプローチも試みられていない。このような“マクロで、かつ極めて低い刺激が、どのように nm オーダーの分子集合構造の変化を与えるか”という従来の科学では対応できない難問の出現は、金属錯体“Complex”の発見当初に似ていると言えよう。また、“分子内の強い原子間結合”と“分子間の強くはないが無視できない原子間相互作用”が混在している分子性結晶の複雑さから、分子性結晶の合成は、セレンディピティやスクリーニングに頼っているのが現状である。すなわち、この研究の鍵となる、分子性結晶の生成機構と転移現象の学理は未解明であり、近年の分子科学技術における最も挑戦的な課題の一つであると言えよう。1983 年に Taube 金属錯体、1987 年に超分子化学に対して、ノーベル化学賞が授与され、これらは後に、イリジウム錯体の強燐光を利用した有機 EL 材料の開発につながった。

このような社会に大きなインパクトを与えた超分子化学・錯体化学の発展に倣えば、2020 年代は、これまでの分子性結晶を超える性質を有する新規物質群“超結晶—ソフトクリスタル”の時代になると期待される。

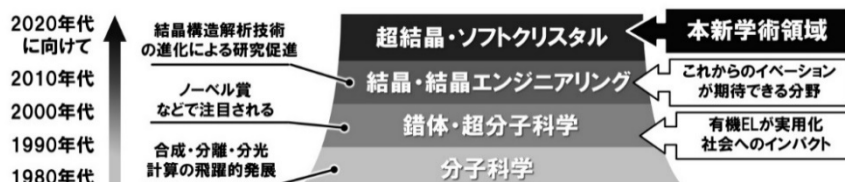
物質創製と、物性測定・計算科学・理論物理を融合し、“ソフトクリスタルの生成機構”や“結晶多形間の相転移現象”を解明し、これら現象の根底にある原理を導き出すことができれば、“物質科学と計算科学の適切な融合による分子性結晶の革新的予測”、“分子そのものを取り扱う計算科学とモデル化する理論物理の連携による特異な相転移現象の解明”に基づいたソフトクリスタルの学理を世界に先駆けて確立することに繋がり、世界的に極めて高い学術評価を得ることができると期待される。

さらに、このような学理解明は、未踏領域であった分子性結晶のエンジニアリングを可能とするだけでなく、ソフトクリスタルの準安定状態・周期構造を目的に合わせて制御することで、これまでの『結晶』ベースでは到達不可能な機能性材料を自由に創造でき、光学特性・誘電性・磁性などの様々な機能と相関する相転移現象を利用した未踏機能材料開発へと繋がると考えられる。加えて、ソフトクリスタルは、これまでの結晶にはない身近な環境変化レベルの低刺激に応答する“スマートクリスタル”となり得る。このような次世代機能性素材“ソフトクリスタル”について、多様な材料科学との融合研究や、電気電子工学・画像科学・光工学等と連携した研究を展開し、産業界等との適切な連携も視野に入れることにより、これまでにない新材料開発に基づく、社会に大きなインパクトを与えるイノベーション創出が大いに期待でき、その科学技術発展に伴う大きな波及効果が予想される。

▶ソフトクリスタル：高秩序で柔軟な新物質の特徴と例



	通常の無機・分子性結晶	ソフトクリスタル	ソフトマテリアル・液晶
ゆらぎ	小さい	小さい	大きい
厳密な構造制御	○	○	△～×
相転移の $\Delta G^\ddagger$	大	適度	小
機能の特徴	単一の機能	多様な構造変化(多形形成)に伴う多様な機能	構造変化に伴う(主に二種類)ON/OFF型機能
低刺激応答	×	○	○
相転移の伝搬・増幅	×	○	△～○
物質の発見	古くから知られている	2002年ごろ	1888年



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。

本新学術領域の目標は、①ソフトクリスタルの学理を構築し、その概念・研究意義を世界的に認められる学術領域とすること、②ソフトクリスタルの光機能を開拓し、イノベーションのきっかけとなる機能性材料創出に繋げることである。以下に研究項目・計画研究ごとの進展状況を記述する。

研究項目 A01 ソフトクリスタルの形態開拓

本研究項目の目的は、金属間相互作用や有機分子間相互作用、水素結合等を巧みに織り込むことにより、構成分子の形態を制御して様々な刺激に応答するソフトクリスタルを創製することにある。計画研究 A01-01 では、「発光性スマートソフトクリスタルの環境応答制御と機能化」の課題のもと、蒸気、温度、機械的刺激などの低刺激に応答する発光性クロミック金属錯体、 π 電子系有機結晶、発光性超分子等を基盤に、更なる鋭敏性や高選択性を有する発光性スマートソフトクリスタルの構築とそれらの物性解明、及び現象の原理を探究している。また、刺激応答による構造変換を時間的、空間的に制御することに焦点をあて、新機能性素材の開発も目指している。現在までに、水蒸気に対して、乾燥過程の識別や蒸気存在履歴を記録する蒸気応答性白金(II)錯体の構築 (*Cryst. Growth Des.* **2018**, *18*, 3419. 他)、青から赤まで自在に発光色制御を制御できる強発光性 N-ヘテロ環状カルベン-白金(II)錯体結晶の構築等に成功している (*Inorg. Chem.* **2018**, *57*, 14086. 他)。また、メソポーラス有機シリカに白金(II)錯体を担持させることにより、迅速で安定なバイポクロミック応答を実現するとともに、ソフトクリスタル化に向けた種々の新奇クロミック錯体や強発光性有機結晶の構築にも成功している (論文投稿中)。時間・空間分解分光測定や構造解析、及び理論計算に基づく種々の領域内共同研究により、これらの結晶に関する機構解明を追跡中であり、学理の深化のための成果が現れつつある。

計画研究 A01-02 では、「ソフトクリスタルの熱機械的評価手法ならびに制御手法の開拓」の課題のもと、有機超弾性研究の観点からソフトクリスタルの形態制御研究促進に貢献するため、有機超弾性結晶の創製および手法の開拓と物性評価手法の深化・発展、ならびに超弾性とカップルする光学特性・変調特性の開拓を目的としている。脂肪酸結晶は、柔軟な弾性変形と多形結晶間で温度誘起相転移を示す。その中でペンタデカン酸結晶を用い、応力負荷で 3 つの多形間転移を誘起することで、相転移に基づく超弾性・強弾性・形状記憶効果を達成した (*Cryst. Growth Des.* **2019**, *19*, 1912.)。また、超塑性と呼ばれる大変形性を示す有機超弾性体を見出し、新たに“有機超塑性”の概念を提唱した (*Nature Commun.*, **2018**, *9*, 3984.)。その中で、温度変化に敏感な柔らかい結晶や大変形を示す超塑性結晶の機械特性評価法を確立した。さらに、多様な屈曲角度や応力で変形する結晶に対応した機械特性を評価することで、結晶変形応力やエネルギー散逸特性制御因子を解明した (*CrystEngComm*, **2018**, *20*, 3807; *RSC Adv.*, **2018**, *8*, 21933; *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, *57*, 11888.)。研究領域が設定したソフトクリスタルの熱機械的評価・制御手法の開拓に関して、着実に研究が進展している。

計画研究 A01-03 では、「ケイ素-ケイ素結合の特性を利用した外部応答性ソフトクリスタルの開発」の課題のもと、代表者が開発した有機ケイ素化合物の合成反応を活用して、弱い外部刺激により構造と物性の連動変化を発現するソフトクリスタルの創製を行う。直鎖状芳香族ジシラン類の外部刺激による SHG のオン、オフや発光特性変化の調査は終了し、おおむね計画通りに進捗している (*ACS Appl. Mater. Inter.* **2018**, *10*, 12164. *Tetrahedron Lett.* **2019**, *60*, 1108. *Molecules* **2019**, *24*, 521. *J. Org. Chem.* 投稿予定)。環状芳香族ジシラン類の蛍光特性については、当初考えていた 2 量体 (テトラシラシクロファン類) は、溶液中でのみ *syn* と *anti* 間のコンホメーション変化を起こし、固体状態では外部刺激による構造変化を起こさなかった (*J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 11214.)。これは環構造を拡張することにより解決できた。3 量体までは、弱い刺激による固体状態の構造変化は起こらないものの、4 量体では、固体状態における温度変化による結晶相転移を発見した。合わせて相転移前後で結晶ジャンプ挙動 (サーモサリエント挙動) も見られており、現在固体発光特性変化と関連付けて研究を行っている (投稿準備中)。また、4 量体は拡散型塑性変形を示すことが見いだされ、検討を進めている。

研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓

本研究項目の目的は、ソフトクリスタルの生成機構と相転移機構を解明し、それらに基づいた構造を開拓することにある。計画研究 A02-01 では、「**ドミノ型相転移ソフトクリスタルの機構解明と新機能創成**」の課題のもと、「分子ドミノ型相転移」「外部刺激によりジャンプする結晶」のバリエーションを数多く開発し、それらの性質を詳細に分析することで、現象の基礎原理解明と一般化の達成、及び材料デザイン手法の開発を目指している。メタノールの包含、放出を伴う、リバーシブルな分子ドミノ型相転移を発見した (*J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 2875)。計算化学の専門家である A02-04 後藤と A01 公募 榊との領域内共同研究により、ドミノ型相転移を示す結晶の構造を分子力場計算で再現し、相転移の過程についても部分的に再現することに成功した (*J. Comput. Chem. Jpn.*, **2018**, *17*, 155; *J. Phys. Chem. C*, **2019**, *123*, 4773)。ドミノ型相転移のバリエーション作成には大きな成功を収めている (*Chem. Sci.*, **2019**, *Just Accepted*; *J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 2875; *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *revised*)。またソフトクリスタルの基本コンセプトである、有機結晶の「秩序を保ちながら変化する」という知見をもとに、強制的に構造を変化させることで、ソフトクリスタルでの共有結合形成、固体のままでのクロスカップリング反応を実現した (*Nature Commun.* **2019**, *10*, 111)。以上のように、研究は着実に進展、予想を超えた成果も得られている。今後はソフトクリスタルの加工による機能化などを進める。

計画研究 A02-02 では、「**ソフトクリスタル化学発光系の創製と刺激応答機能の時空間制御**」の課題のもと、結晶への外部刺激付与で発光反応を開始するソフトクリスタル化学発光系を創製し、結晶内部での刺激応答発現の作用機序解明と時空間制御を目的としている。化学発光基質として、蛍光色素やアリール基を連結した 1,2-ジオキセタン化合物群を中心に用いて、結晶状態での化学発光特性を調査した。その結果、(a) 異性体間における発光挙動の比較より、結晶構造変化のダイナミクスが結晶内反応進行と相関することを見出し、(b) 蛍光色素との共鳴エネルギー移動効率を最大にする分子設計と結晶工学が化学発光特性制御に重要であり、(c) 励起分子の運動性が励起錯体生成を促進することも突き止めた。これらは、化学発光における柔らかな結晶内特有の新現象、新発見である。また、(d) エネルギー移動型発光系に用いる発光性金属錯体結晶の外部刺激応答性を見出し、時空間発展する発光現象の観測に成功した。いずれも論文発表を進めており、領域目標「ソフトクリスタル材料創製」と「発光を手掛かりとする学理解明、機能創出」に向けた成果を着実に生み出している。

計画研究 A02-03 では、「**X 線分子動画撮影法を用いたソフトクリスタルにおける外場応答過程の観測**」の課題のもと、ソフトクリスタルの相転移過程における構造・電子状態の変化を X 線分子動画撮影法によって可視化し、その動的情報から、ソフトクリスタルが弱い外場に対して柔軟であることの起源について知見を得ることを目的としている。現在までに、領域内共同研究を複数件進めており、放射光施設で実験を行ってきた。中でも、ベイポクロミズムを示す Mn 錯体単結晶では、発光中に結晶溶媒 THF 分子が回転し、Mn に配位することが示唆された。これはソフトクリスタル中で、主要分子団が結晶状態を保ちながらも、結晶溶媒である THF 分子がある程度の自由度をもって動きうることを示しており、柔軟な反応を示す起源となっている可能性が示されたと言える (A02-02 班との領域内共同研究、論文準備中)。他にも、X 線吸収分光測定、光電子顕微鏡、衝撃圧縮構造解析 (*Sci. Reports* **2019**, *accepted*) 等を用いた領域内外との共同研究を進めている。今後は無機・有機低分子、および高分子機能性結晶など様々なソフトクリスタルについて、動的構造解析を含めた研究を行う予定である。

計画研究 A02-04 では、「**金属錯体の結晶ポテンシャルの開発と多形転移現象のメカニズム解析**」の課題のもと、ソフトクリスタルが示す様々な新奇現象を理論的に解析するために、金属錯体を扱える結晶ポテンシャルを開発するとともに、金属錯体の結晶多形探索を活用し、相転移現象のメカニズム解析を行う。ドミノ型相転移を起こすフェニル(フェニルイソシアニド)金の二つの結晶構造 (Ib, IIy) を再現する結晶ポテンシャルを開発し (*J. Comput. Chem., Jpn.*, **2018**, *17*, 155.)、相転移動力学を解析したところ、実験では観測されていない中間多形構造 (III) を見出した。Ib から III を経て IIy に至る多段階転移経路が存在する可能性が示唆され、III から IIy に至るまでの経路を探索中である。また、超弾性を示すテレフタルアミド (TPA) が屈曲する際に現れる $\alpha \rightarrow \beta$ 相転移を再現する結晶ポテンシャルのランドスケープを明らかにした (論文執筆中)。マクロな現象である超弾性を分子レベルで解析できることを実証した初めての事例である。さらに、様々な発光色を呈するランタニド錯体の結晶構造において、一連のランタニド金属に関連する結晶ポテンシャルを開発するとともに (256th ACS National Meeting, 2018, INOR-164; 論文執筆中)、ソフトクリスタル現象が期待される有機 Ru 錯体の特異的な配位子交換反応の機構も明らかにしている (*ACS Omega*, **2018**, *3*, 11286.; *Chirality*, **2019**, *31*, 52.)。

研究項目 A03 ソフトクリスタルの機能物性開拓

高分子材料・ゲル等のソフトな機能性材料や無機材料との複合化、電子・光デバイスとの融合等を行うことで、既存の材料では達成できないソフトクリスタルの物性・機能を開拓する。計画研究 A03-01 では、「ソフトクリスタルの準安定状態創製技術の開発と相転移現象の解明」の課題のもと、機械的回転等のマクロな低刺激を利用したソフトクリスタル準安定状態の創製技術の開発、ソフトクリスタル相転移現象の理論的解明、及び新しい機能性素材の開発指針を得ることを目的としている。ロータリーエバポレーターでマクロな機械的回転をかけながら、フタロシアニン溶液を濃縮・乾固して作製した薄膜のキラリティーは、回転方向に依存して反転する。このキララル誘起機構を解明し、当初の目的の一つを達成した（論文改訂中）。このキララル薄膜が、ソフトクリスタルの特性（サーモクロミズム、メカノクロミズム）を示すことを新たに見出し、準安定状態を創製する技術の開発にも成功している。また、分子モデルを用いて、強誘電－反強誘電相転移に関する理論計算を行い、相転移動力学機構等を明らかにしている（*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2018**, *115*, 9917.）。このように、研究領域が設定したソフトクリスタル創製技術、相転移現象の理論的解明に関して、着実に研究が進展している。今後、上記研究を深化させるとともに、ソフトな材料との複合化による光機能開拓も進める予定である。

計画研究 A03-02 では、「ソフトクリスタルの界面制御による光物性開拓」の課題のもと、分子化学を基盤として、希土類錯体の直線偏光発光や発光の長寿命化など奇異な光化学の支配因子を解明し、ソフトクリスタルの界面制御による分子集合体の光物性開拓を目的としている。気/水界面で、光アンテナ能を有する両親媒性配位子を希土類と錯形成させた柔らかい分子膜を固体基板に移しとり、希土類からの直線偏光発光を発現させた。これにより、本来球状である希土類の電子雲に、配位子の遷移モーメントが光励起エネルギー移動を経由し転写されることを証明した（*New J. Chem.*, **2019**, *43*, 6472.）。これは、光アンテナ効果がエネルギー移動促進の駆動力としてだけでなく、希土類錯体形成による配位子場が f 軌道の電子状態を変調させたことを示す初めての例である。また、希土類酸化物（*Sci. Tech. Adv. Mater.*, **2018**, *20*, 44.）や酸化チタン（*ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2018**, *10*, 5706.）をコアとした希土類界面錯形成が、青緑赤のアップコンバージョン発光および 10000% の EQE 値の光電子増倍能創出に、それぞれ有用であることを発見した。これらは研究領域が目指すソフトクリスタルの光機能創成とその原理解明に資する成果であり着実に研究が進展している。

計画研究 A03-03 では、「ソフトフォトリソグラフィッククリスタルの創製」の課題のもと、構造色を示す脂質二分子膜ラメラゲルの二分子膜の形成メカニズムと、力学物性の高度な制御及び圧力可視化センサーなどへの応用を目指している。脂質二分子膜の形成には“ずり応力”が必要であり、種々制御されたずり速度においてゲルを合成したところ、速度の上昇とともに脂質二分子膜の配向性が向上し、欠陥が少なく単色性の高い構造色を示すことが認められた。また、ゲルの乾燥によって高分子の体積分率を上昇した際、ある体積分率以上でゴム－ガラス転移が観察され、極めて強靱化することが示された（*Macromolecules*, **2017**, *50*, 8169.）。シート状のラメラゲルの構造色はブラッグ条件に起因する角度依存性を示すが、角度に依存しない構造色を有する、同心円状に二分子膜が配向したラメラゲルの合成に成功した（*ACS Omega*, **2018**, *3*, 55.）。さらに、フランスの Linder 教授（ESPCI）と共同で、流体の静水圧を可視化する圧力センサーへの応用を目指して、マイクロ流路デバイスに本ゲルを組み込んだ結果、圧力勾配を可視化することにも成功している。

計画研究 A03-04 では、「らせん生体高分子組織化ソフトクリスタルの創製と革新的光・電子機能素子開発」の課題のもと、構造的・電子的に特徴ある DNA 等の生体高分子と機能分子を組織化した“DNA ソフトクリスタル”を創製し、その機能を基とする革新的電気化学素子開発を目的とする。これまで、発光性 Eu(III)錯体と疎水化 DNA 溶液を混合する簡便な手法で、発光円偏光度-0.7（左円偏光が右円偏光の 2 倍）、発光量子収率 18%と、高い両特性を示す DNA 複合体を見出した（*J. Mater. Chem. C*, **2018**, *6*, 4516.; 論文改訂中）。一方、DNA と電気化学発光（ECL）材料である[Ru(bpy)₃]²⁺錯体の複合体を用いた交流 ECL 素子を作製し、通常の ECL 素子に比べて飛躍的に高速な 50 μs の発光応答性を見出し、ソフトクリスタルの活用ともいえる特徴ある ECL デバイスが初めて作製可能となった（*Sci. Rep.*, **2018**, *7*, 8525）。さらにソフトクリスタルの特性（メカノルミノクロミズム、バイポルミノクロミズム）を示す材料系も見出しており（論文執筆中）、研究領域が設定した融合研究としてのソフトクリスタルの電子・光デバイス化に関して、着実に研究が進展している。今後、上記研究の深化とともに、領域内共同研究によりソフトクリスタルの新奇的な電子機能開拓、素子化を目指す予定である。

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。

（審査結果の所見）

本研究領域は、低刺激により構造および物性を変化させる分子性結晶をソフトクリスタルと定義し、その生成機構と相転移現象の解明を機軸とした学理構築を目的とする。更に、ソフトクリスタルの準安定状態・周期構造を合目的に制御する技術確立し、既存の結晶の概念を超越した機能性材料の創成を目指す。以上の研究目的は、新たな概念に基づいた物質科学分野を開拓する学術的意義を持つだけでなく、独自機能を有する材料を産業界へ展開できる波及効果をも有する。しかしながら、(1)ソフトクリスタルの特異性・優位性を明確にするためには、相転移を誘起する「低刺激」に関する定量的基準を、既存のハードクリスタルとの対比に基づいて整理する必要がある。

研究組織は、4つの階層からなる計画研究に、物質創製・物性測定解析・複合化・融合研究の4つの方向性を組み合わせた分野横断的研究組織が配置され、相互連携に基づいた共同研究の枠組みが構築されている。しかしながら、(2)構造解析・材料開発・機能創出研究の一部において、計画研究の構成および共同研究体制の見直しが必要である。

また、計算科学および理論物理との連携により、研究期間終了後にはソフトクリスタルの学理を世界に先駆けて確立することを目指している。しかしながら、(3)その目的の達成のためには計算科学・理論物理からの研究をより厚くする必要がある。海外における類似研究との差別化を目指すためにも、本研究領域全体としての戦略・領域組織・役割分担を明確にしたうえで研究を遂行していくことが期待される。

（留意事項）

・5つの計画研究は不採択とする。(4)本研究領域としての運営体制の見直しが必要である。
・英語プレゼンの講習会は研究ではなく教育の側面が強いと考えられるため、(5)国際活動支援班として、より適切な計画となるよう検討が必要である。

（参考意見）

・様々な現象・材料での研究事例が提案されると期待されるが、(6)総花的研究で終わらせるのではなく、学理として構築するための明確な道筋を作ることが望まれるとの意見が複数あった。
・計画研究の多くは巨視的視点からの測定・機能創出に焦点を当てているが、(7)普遍的な物性解釈へ向けては、刺激点近傍からの相転移の広がりを微視的に捉える研究も重要ではないか、との意見があった。

下線部各項目への対応状況

(1)ソフトクリスタルの特異性・優位性を明確にするためには、相転移を誘起する「低刺激」に関する定量的基準を、既存のハードクリスタルとの対比に基づいて整理する必要がある。

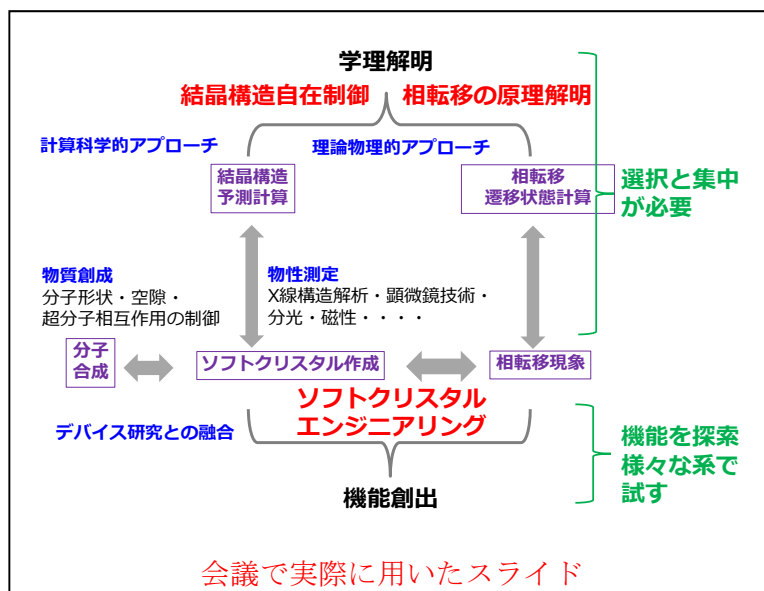
（対応策） 既存のハードクリスタルにおけるイオン結合（例、NaCl：785 kJ/mol）、共有結合（数百 kJ/mol）と比べ、①分子間における水素結合（10～20 kJ/mol）や van der Waals 相互作用（10～30 kJ/mol）等がエネルギー的に小さいこと、②大きな空隙や置換基の柔軟さが、結晶構造相転移における活性化ポテンシャルを急峻にしないこと等が、ソフトクリスタルの特徴と整理された。本件は、下記ソフトクリスタル物性解明研究グループ会議において、領域メンバー間で情報共有している。

(2)+(4)構造解析・材料開発・機能創出研究の一部において、計画研究の構成および共同研究体制の見直しが必要である。本研究領域としての運営体制の見直しが必要である。

（対応策） 申請時の4班構成（A01班：形態開拓、A02班：構造開拓、A03班：物性開拓、A04班：機能開拓）から、3班構成（A01班：形態開拓、A02班：構造開拓、A03班：物性・機能開拓）に変更し、学理を深化させるための構造解析はA02班が担当、物性や機能創出に関する研究はA03班が担当するように計画研究を再構築した。

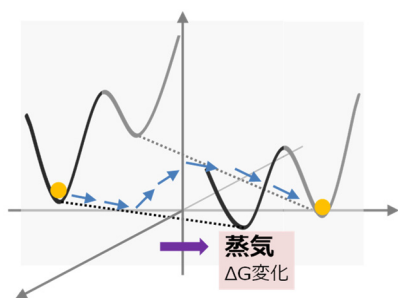
さらに、①学理として構築するための明確な道筋を作ること、②共同研究体制を強化することを目的として、理論・計算・測定系研究者などを中心に、ソフトクリスタル物性解明研究グループ会議（第1回2018年5/25、第2回2019年2/1、第3回2019年4/26、毎回50名程度参加）を開催している。本会議では、総花的研究とならないように、学理解明に向けては「選択と集中」、機能創出に向けては「様々な系で機能を探索」という領域としてのコンセプトを共有している（次頁図）。

また本グループ会議では、領域立ち上げの契機となったベイポクロミズム・メカノクロミズム・超弾性の学理解明に向けて、下記の定性的なポテンシャルを用いて議論することで、イメージの共有を行っている（下図）。さらに、①物性測定には、ポテンシャルに具体的なエネルギー、微視的に捉えた分子構造等を決定すること、②計算科学には、①の実験結果と照らし合わせることで、③理論物理には、これらの原理の解明をそれぞれ依頼している。機能創出に向けては、各研究グループが進捗状況を報告するとともに、ソフトクリスタル特有の測定方法を共有したり、種々の物性に特化した意見交換を行うことで議論を深めている。



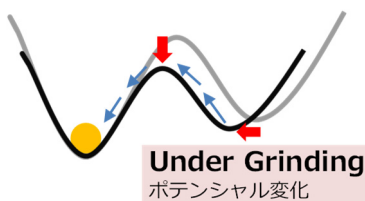
<ベイポクロミズムの機構>

関与する物質が変化するので
当然ポテンシャルが変化する

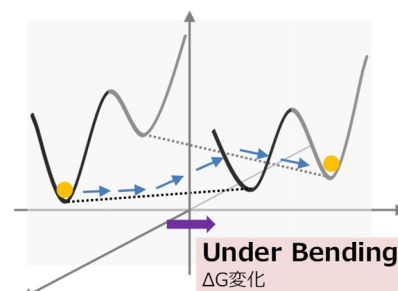


<メカノクロミズムの機構>

準安定状態、室温付近で起こる
結晶の過冷却



<超弾性の機構>



(3) その目的の達成のためには計算科学・理論物理からの研究をより厚くする必要がある。海外における類似研究との差別化を目指すためにも、本研究領域全体としての戦略・領域組織・役割分担を明確にしたうえで研究を遂行していくことが期待される。

(対応策) 理論計算を専門とする A01 公募に榊 茂好シニアリサーチフェロー(京大福井センター)、A02 公募に岩佐 豪助教(北大院理)に参画いただき、分子性結晶の理論的研究を厚くしている。

(5) 英語プレゼンの講習会は研究ではなく教育の側面が強いと考えられるため、国際活動支援班として、より適切な計画となるよう検討が必要である。

(対応策) 英語プレゼン講習会は、各研究室(もしくは所属部局)で実施することとし、総括班(含旧国際活動支援班)としては、若手海外派遣に注力することとした。

(6) 様々な現象・材料での研究事例が提案されると期待されるが、総花的研究で終わらせるのではなく、学理として構築するための明確な道筋を作ることが望まれるとの意見が複数あった。

(対応策) 学理として構築するための明確な道筋を作ることの方策を、以下のように行っている。

・前述した物性解明研究グループ会議において、「総花的研究とならないように学理解明に向けた選択と集中というコンセプト」、「主要な研究対象に関する定性的なポテンシャルのイメージ」を共有している。

・トップダウン的な共同研究推奨が、幾つかの研究対象に対して行われている。

・「10. 今後の研究領域の推進方策」に記述しているように、ソフトクリスタルにおける“興味深い現象の分類”と“特徴の体系化”を行い、共有することで、研究の焦点を明確化している。

(6)+(7) これら参考意見についても十分に配慮し、学理を構築するための明確な道筋の作成、普遍的な物性解釈のための微視的アプローチを含め、対応は上記(2)+(4)にまとめて記載した。

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定とします。

研究項目 A01 ソフトクリスタルの形態開拓

A01-01（計画・加藤(代表)）

コンセプト論文の発表 ソフトクリスタルの新しい概念を世界に先駆けて発信するために、ヨーロッパ化学協会 ChemPubSoc Europe の主要雑誌にコンセプト論文を発表した（*Chem. Eur. J.*, **2019**, 25, 5105–5112）。今後、この論文を基にソフトクリスタルの国際的アウトリーチ活動をより強力に推進する予定である。

強発光性白金(II)錯体結晶の構築と発光色制御 N-ヘテロ環状カルベン（NHC）を用いてアニオン性白金(II)錯体を構築し、高いアニオンで結晶化することにより、発光に効果的な結晶内孤立環境の形成に成功した。 π 拡張位置により青から橙に発光色が変化することを見出すとともに、発光強度とエネルギー変化の要因を明らかにした（*Inorg. Chem.*, **2018**, 57, 14086–14096. Supplementary Cover Art）。中性の白金(II)-NHC 錯体では、積層構造を有する一連の錯体結晶の作製に成功し、置換基の高さに基づき積層構造をチューニングした結果、青から赤まで自在な発光色を実現した。

A01-02（計画・高見澤(代表)）

有機超塑性の発見 拡散型の固体変形でありながら結晶性を保持できる厳密固体変形の探索を行い、新たに“有機超塑性”と言える現象を見出した。単結晶の大変形を許す N,N-ジメチル-4-ニトロアニリンの単結晶が、多層すべりによって 500%以上の変形を示すのが明らかとなった（*Nature Commun.* **2018**, 9, 3984. 毎日新聞 web 版、SankeiBiz web 版）。

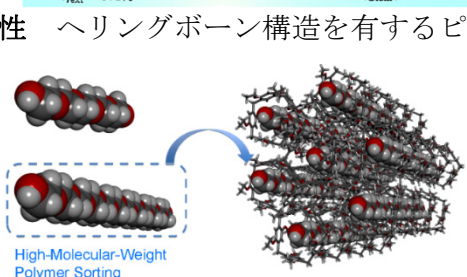
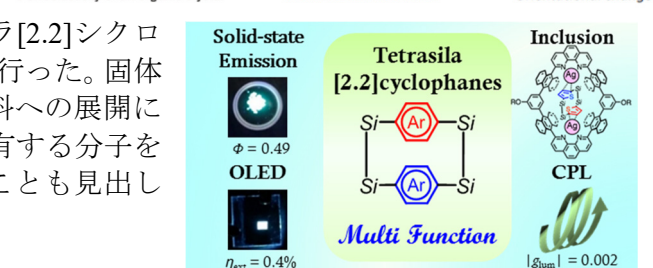
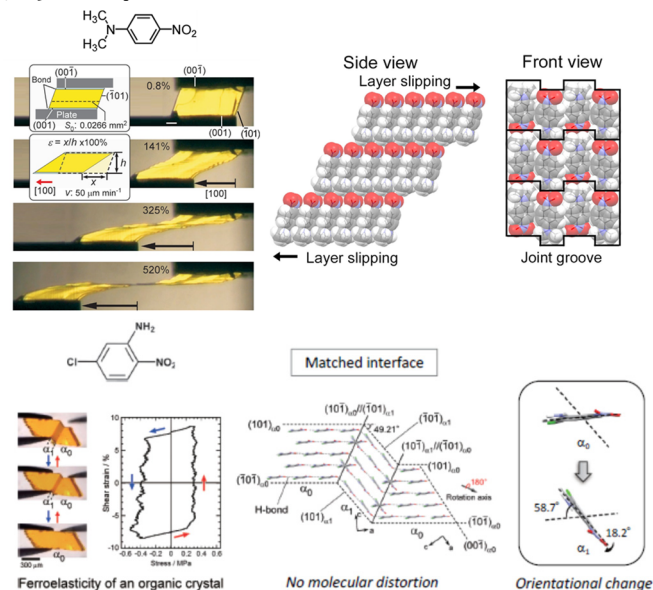
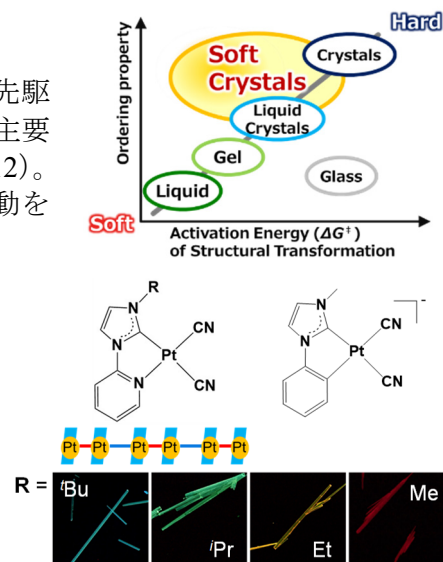
分子構造変化を媒介とする強弾性誘起結晶の創出 双晶変形において、分子歪みを必要としない整合界面を生成する機構を持つ有機強弾性体を見出した。これは、原子性固体では実現不可能な分子の高い構造自由度を活かした新しいタイプの強弾性である（*Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 15882–15885. Very Important Paper、Inside Cover）。

A01-03（計画・山野井(代表)）

テトラシラ[2.2]シクロファン類の光機能 テトラシラ[2.2]シクロファン類について、分子運動の制御と光物性の調査を行った。固体状態で強い青緑色の蛍光を示し、電界発光（EL）材料への展開に成功した。また、適切な置換基を施すことで面不斉を有する分子を合成することができ、良好な円偏光発光を発現することも見出した（*J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139 (32), 11214–11221.）。

A01（公募・生越(代表)）

ピラー[5]アレーン結晶内へのゲスト分子の取り込み・放出・運動性 ピラー[5]アレーン結晶よりもチャンネル構造を有するピラー[5]アレーン結晶の方が、低ゲスト分子圧で取り込み、安定に貯蔵できることが分かった。また溶融した高分子であるポリエチレンオキシドにピラー[5]アレーン結晶を浸漬させると、ポリエチレンオキシドが結晶内に取り込まれ、ポリ擬ロタキサン構造を形成することが分かった。興味深いことに、ピラー[5]アレーン結晶は



高分子量のポリエチレンオキシドを選択的に取り込むことを見出した (*Nature Commun.* **2019**, *10*, 479.)。

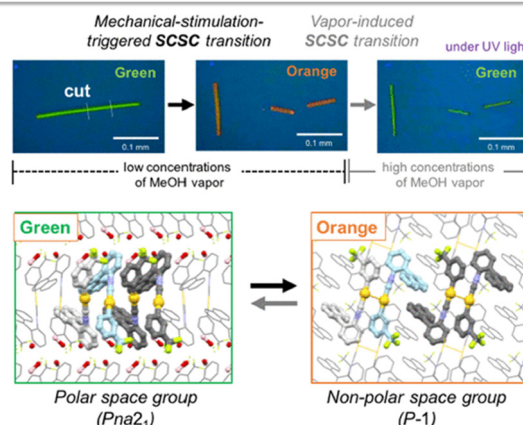
研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓

A02-01 (計画・伊藤(代表))

メカノケミストリーによる固体クロスカップリングの開発 有機合成反応は一般的に溶媒を用いて実施することが必要で、反応剤そのものを直接反応に用いることはほとんどない。ドミノ型結晶相転移やメカノクロミズムに関する研究から、有機結晶の構造がかなり緩やかで反応性に富む可能性があるという知見を利用し、ある種の添加剤を用いると、有機溶媒を用いずに固体状態で進行するパラジウム触媒によるクロスカップリング反応が実施可能であることを見出した (*Nature Commun.* **2019**, *10*, 111. *Nature Communications Editor's Highlights, Behind the Paper* (Nature Research Chemistry Community))に出、NHK、日経産業新聞、日刊工業新聞)。

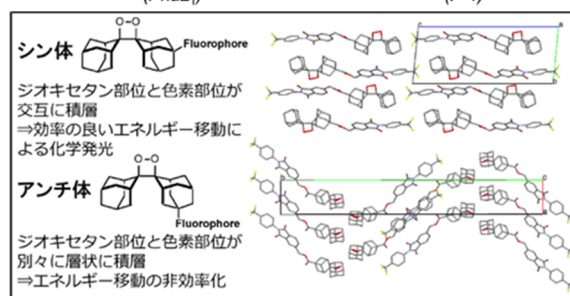


リバーシブルな分子ドミノ型相転移の発見 金イソシアニド錯体誘導体は、メタノールから再結晶すると、メタノールを含んだ緑色発光の結晶を与える。この結晶に、ある一定のメタノール蒸気濃度下において機会的刺激を与えると、メタノール溶媒が結晶から追い出されながら単結晶-単結晶相転移が進行し、オレンジ色発光する別の構造に変化することを見出した。メタノール蒸気濃度を上げるとメタノールが再び結晶に取り込まれ、相転移前のメタノールを含んだ結晶が単結晶-単結晶相転移を経て再生されることがわかった (*J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 2875-2879.)。



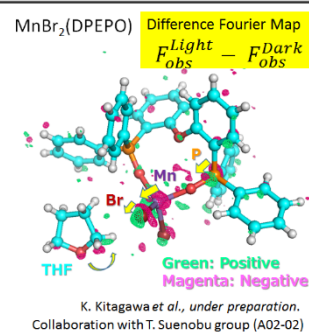
A02-02 (計画・平野(代表))

結晶内化学発光 (A01 公募 植草、A02-03 佐藤、A03 公募 森川との共同研究) 蛍光色素を連結した発光基質のシン/アンチ異性体について化学発光特性を比較し、アンチ体に比してシン体の発光強度が著しく高いことを見出した。結晶構造は、ジオキセタン部位と色素部位の積層の様式が明確に異なることを示し、結晶内特有の反応性として、結晶構造変化のダイナミクスの違いが、反応進行を制御することが解った (論文作成中)。



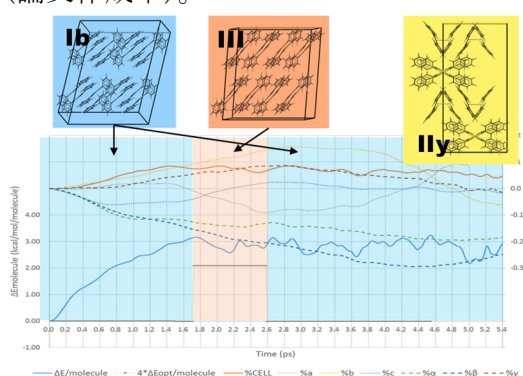
A02-03 (計画・佐藤(代表))

ベイポクロミズムを示す結晶の光照射下における X 線構造解析 (A02-02 末延 (分担) との共同研究) Mn 錯体単結晶は、結晶溶媒の違いにより、異なる発光色を示し、発光寿命などの性質も異なる挙動を示す。光照射前後での差フーリエ電子マップを用いた結晶構造解析を行い、微小な分子構造変化を可視化した。その結果、図のように発光中に THF 分子が回転し、Mn に配位していることが示唆された。これはソフトクリスタル中で、主要分子団が結晶状態を保ちながらも、THF 結晶溶媒分子が自由度をもって動きうる事を示しており、柔軟な反応を示す起源となる可能性が示された (論文作成中)。



A02-04 (計画・後藤(代表))

イソシアニド金の結晶ポテンシャルの開発と相転移の動的反応座標解析 (A02-01 伊藤との共同研究) ドミノ型単結晶-単結晶相転移機構を解明するため、フェニル(フェニルイソシアニド)金(I)錯体の結晶力場ポテンシャルを決定し、二つの結晶多形構造 (Ib 相と Ily 相) を再現できることを確認した (*J. Comput. Chem., Jpn.*, **2018**, *17*, 155-157.)。この結晶力場ポテンシャルを用いて、基準振動解析の結果得られた格子振動モードを用いて動的反応座標解析を行う方法を汎用システムとして初めて開発した (論文執筆中)。



結晶ポテンシャルの開発と超弾性現象のメカニズム解析 (A01-02 高見澤との共同研究) 有機超弾性を示すテレフタルアミド (TPA) の結晶 α 相と β 相を正しく再現する結晶力場の検討を行い、結晶ポテ

ンシヤルエネルギー面の相転移ランドスケープを明らかにした（論文執筆中）。

A02（公募・内橋(代表)）

高速原子間力顕微鏡（高速 AFM）による超分子重合過程の直接観察と分子操作 高速 AFM を用い、ポルフィリン分子が自発的に集合するプロセスをリアルタイムで観察することに成功した。高速 AFM の探針によって分子集合体を分断するトップダウン的手法と、分子の自己組織化とを組み合わせ、分子の集合体を分子レベルで操作・改変することにも成功した（*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, 57, 1-7. 日本経済新聞、化学工業日報）。

研究項目 A03 ソフトクリスタルの物性・機能開拓

A03-01（計画・石井(代表)）

ソフトな材料との複合化による新規機能開拓 ソフトクリスタルの構成要素である光機能性フタロシアニン錯体とウシ血清アルブミンを複合化することで、効果的なビタミン C 検出用蛍光プローブを開発した（*Sci. Rep.*, **2018**, 8, 1560. Top 10 in Biochemistry and Molecular Biology に選出、日本経済新聞 web 版、日経産業新聞、海外 web 記事多数）。

A03-01（計画・高江(分担)）

モデル化による相転移の原理解明 強誘電ー反強誘電相転移を示す分子モデルを用いて、両相の物性を詳細に比較した。両相における分子振動の分散関係を計算し、反強誘電相における低エントロピー状態の実現が、分子の回転運動の抑制に起因していることを見出した。また、相転移動力学について調べ、そのメカニズムを明らかにした（*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2018**, 115, 9917-9922. 日本経済新聞 web 版、goo ニュース等 web 記事多数）。

A03-02（計画・長谷川美貴(代表)）

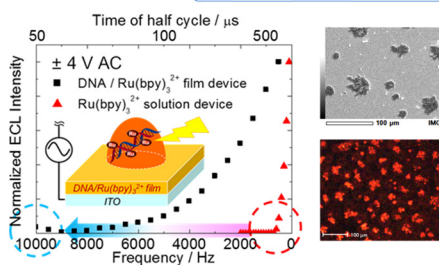
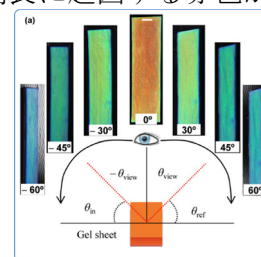
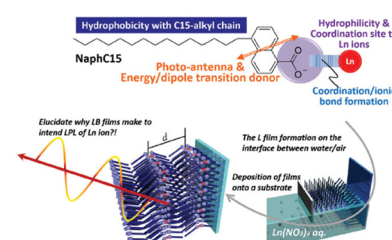
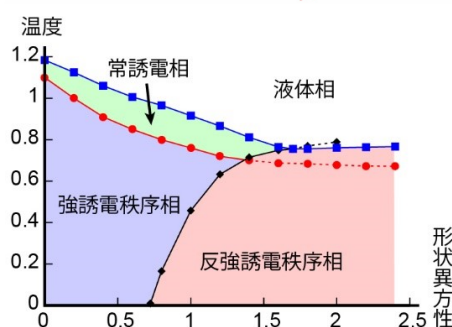
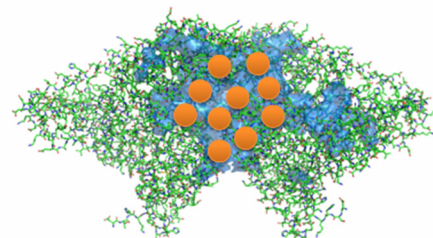
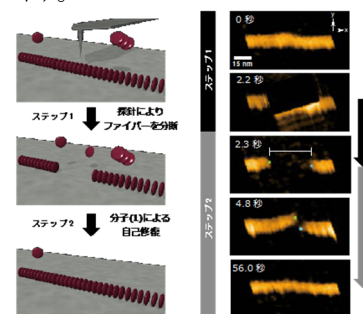
両親媒性ナフトエ酸-Eu 薄膜による偏光発光発現とその原理解明 ナフトエ酸に長鎖アルキル基を連結させた配位子を用い、単分子膜を石英基板上に 10 層累積させた系の開発を試みた。ナフトエ酸の高い平面性と光励起による遷移双極子モーメントの見積もりから、Ln の発光の偏光性が光アンテナであるナフトエ酸の配向に依存することを実験的に証明することができた（*New J. Chem.*, **2019**, 43, 6472-6479. Cover、読売新聞 web 版、毎日新聞 web 版、朝日新聞 web 版、web 記事多数）。

A03-03（計画・ゲン(代表)）

配向様式による構造色の角度依存性の制御 poly(dodecyl glyceryl itaconate) (PDGI) 二分子膜とポリアクリルアミド (PAAm) 層の積層構造から成る PDGI/PAAm ゲルは PAAm 層の層間長に起因する赤色から紫色まで連続的な構造色を示す。PAAm-PDGI 交互積層によるラメラ層の配向様式がシート状及び同心円状のハイドロゲルを作製し、構造色の角度依存性を検証した。シート状のラメラゲルは、強い角度依存性を示し、ブラッグの回折と対応して浅い角度ほどブルーシフトすることが観察された。ラメラ層の配向が同心円状のゲルは、角度に依存しない構造色が観測された。これより、ラメラ層の配向様式と構造色の角度依存性との相関を解明した（*ACS Omega*, **2018**, 3, 55-62）。

A03-04（計画・小林(代表)）

DNA/Ru(bpy)₃²⁺複合膜における超高速電気化学発光（ECL）応答 DNA 膜中に ECL 材料である Ru(bpy)₃²⁺錯体を導入し、交流電圧下における ECL 特性の評価を行った。DNA と相互作用した Ru(bpy)₃²⁺が高さ数 μm ・直径数十 μm 程度の大きさで凝集し、それが膜全体に存在する DNA ソフトクリスタルとも言える特異的なメゾスコピック構造を形成していた。膜構造の解析や電気化学特性の検討の結果、この特異なメゾスコピック構造が超高速（10000 Hz 印加時に 50 μs ）の電気二重層充電と ECL 応答を可能にすることを見出した（*Sci. Rep.*, **2017**, 7, 8525.）。



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。

<発表論文>

- 謝辞に課題番号を記載した査読付英語論文 191 報（内領域内共同研究 23 報を紫色で表示）を以下に示す。

研究項目 A01 ソフトクリスタルの形態開拓

A01-01（計画・加藤(代表)） 計 26 件（査読有 26 件、内 2 件は領域内共同研究先 A01-02 山野井、A02-02 平野に記載）

- ◎▲1, "Robust Triplatinum Redox-chromophore for a Post-synthetic Color-tunable Electrochromic System", *M. Yoshida, H. Shitama, W. M. C. Sameera, A. Kobayashi, *M. Kato, *Chem. Eur. J.*, in press. (**Hot paper, Inside Cover Art**)
- ▲2, "Surfactant-assisted Synthesis of Large Cu-BTC MOFs Single Crystals and the Potential Utilization as Photodetectors", *Y. Sun, M. Amsler, S. Goedecker, A. Caravella, M. Yoshida, *M. Kato, *CrystEngComm*, in press (2019).
- ▲3, "Stability tuning of vapor-adsorbed state of vapochromic Pt(II) complex by introduction of chiral moiety", Y. Shigeta, *A. Kobayashi, M. Yoshida, *M. Kato, *Inorg. Chem.*, **58**, 7385–7392 (2019).
- ▲4, "Soft Crystals - Flexible Response Systems with High Structural Order" *M. Kato, H. Ito, M. Hasegawa, K. Ishii, *Chem. Eur. J.*, **25**, 5105–5112 (2019). (領域内共同研究 A02-01 伊藤、A03-01 石井、A03-02 長谷川美)
- ▲5, "Quantitative Solvent-Free Thermal Synthesis of Luminescent Cu(I) Coordination Polymers", *A. Kobayashi, M. Fujii, Y. Shigeta, M. Yoshida, *M. Kato, *Inorg. Chem.*, **58**, 4456–4464 (2019).
- ◎▲6, "Two-step Vapochromic Luminescence of Proton-conductive Coordination Polymers Composed of Ru(II)-metalloligands and Lanthanide Cations" *A. Kobayashi, K. Shimizu, A. Watanabe, Y. Nagao, N. Yoshimura, M. Yoshida, *M. Kato, *Inorg. Chem.*, **58**, 2413–2421 (2019).
- ▲7, "Effect of the Chirality of Counter Anions on the Vapochromic Behavior of Luminescent Pt(II) Complexes" Y. Shigeta, *A. Kobayashi, M. Yoshida, *M. Kato, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **2019**, 1011–1017 (2019).
- ▲8, "The Effect of Pyridyl Anchoring Groups at the Surfaces of Ru(II)-dye-sensitized TiO₂ Nanoparticles on Photocatalytic Oxygen Evolution" H. Otsuka, *A. Kobayashi, M. Yoshida, *M. Kato, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **369**, 189–194 (2019).
- ▲9, "Development of Imidazo[1,2-a]pyridine Derivatives with an Intramolecular Hydrogen-Bonded Seven-Membered Ring Exhibiting Bright ESIPT Luminescence in the Solid State", *T. Mutai, T. Muramatsu, I. Yoshikawa, H. Houjou, M. Ogura, *Org. Lett.*, **21**, 2143–2146 (2019).
- ▲10, "Photoluminescence of platinum(II) diethynylphenanthroline organometallic complexes with bis-arylethynyl derivatives in solution and solid state" *M. Shiotsuka, R. Ono, Y. Kuroki, T. Asano, Y. Sakae, *J. Organomet. Chem.*, **880**, 116–123 (2019).
- ▲11, "Excited-State Intramolecular Proton-Transfer Process of Crystalline 6-Cyano-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazo[1,2-a]pyridine, as Revealed by Femtosecond Pump-Probe Microspectroscopy" Y. Ishibashi, M. Murakami, K. Araki, T. Mutai, *T. Asahi, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 11224–11232 (2019).
- ▲12, "Re-evaluation of tert-butyl method in crystal engineering of salicylideneanilines by simultaneous observation of photochromism and thermochromism in single crystals" *H. Houjou, T. Kato, H. Huang, Y. Suzuki, I. Yoshikawa, T. Mutai, *Cryst. Growth Des.*, **19**, 1384–1390 (2019).
- ▲13, "Phosphorescence Properties of Discrete Platinum(II) Complex Anions Bearing N-heterocyclic Carbenes in the Solid State" T. Ogawa, W. M. C. Sameera, D. Saito, M. Yoshida, A. Kobayashi, *M. Kato, *Inorg. Chem.*, **57**, 14086–14096 (2018). (**Supplementary Cover Art**)
- ▲14, "Photocatalytic Hydrogen Evolution Driven by Platinated CdS Nanorods with a Hexacyanidoruthenate Redox Mediator" H. Kitano, *A. Kobayashi, M. Yoshida, *M. Kato, *Sustain. Energy Fuels*, **2**, 2609–2615 (2018). (**Cover Art**)
- ▲15, "Mechanochemical Switching between Delayed Fluorescence and Phosphorescence of Luminescent Coordination Polymers Composed of Dinuclear Copper(I) Iodide Rhombic Cores" *A. Kobayashi, Y. Yoshida, M. Yoshida, *M. Kato, *Chem. Eur. J.*, **24**, 14750–14759 (2018).
- ▲16, "Importance of the Molecular Orientation of an Ir(III)-heteroleptic Photosensitizer Immobilized on TiO₂ Nanoparticles" *A. Kobayashi, S. Watanabe, M. Yoshida, *M. Kato, *ACS Appl. Energy Mater.*, **1**, 2882–2890 (2018).
- ▲17, "Crystal Engineering of Vapochromic Porous Crystals Composed of Pt(II)-diimine Luminophores for Vapor History Sensors" Y. Shigeta, A. Kobayashi, M. Yoshida, *M. Kato, *Cryst. Growth Des.*, **18**, 3419–3427 (2018).
- ◎▲18, "Solvent-free Thermal Synthesis of Luminescent Dinuclear Cu(I) Complexes with Triarylphosphines" P. Liang, *A. Kobayashi, W. M. C. Sameera, M. Yoshida, *M. Kato, *Inorg. Chem.*, **57**, 5929–5938 (2018).
- ◎▲19, "Luminescent Ionic Liquids Based on Cyclometalated Platinum(II) Complexes Exhibiting" T. Ogawa, W. M. C. Sameera, M. Yoshida, A. Kobayashi, *M. Kato, *Dalton Trans.*, **47**, 5589–5594 (2018). (**Back Cover**)
- ▲20, "Alternative preparation and characterization of platinum(II) organometallic dinuclear complexes and oligomers with 3,8-diethynylphenanthroline derivatives" *M. Shiotsuka, T. Hashimoto, K. Matsubara, K. Sako, *Trans. Met. Chem.*, **43**, 693–703 (2018).
- ▲21, "Two-way Vapochromism of a Luminescent Platinum(II) Complex with Phosphonic-acid-functionalized Bipyridine Ligand" *A. Kobayashi, N. Yamamoto, Y. Shigeta, M. Yoshida, *M. Kato, *Dalton Trans.*, **47**, 1548–1566 (2018).
- ▲22, "Regulation of metal-metal interactions and chromic phenomena of multi-decker platinum complexes having π -systems", M. Yoshida, *M. Kato, *Coord. Chem. Rev.*, **355**, 101–115 (2018).
- ◎▲23, "Immobilization of Luminescent Platinum(II) Complexes on Periodic Mesoporous Organosilica and their Water Reduction Photocatalysis" M. Yoshida, K. Saito, H. Matsukawa, S. Yanagida, M. Ebina, Y. Maegawa, S. Inagaki, A. Kobayashi, *M. Kato, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **358**, 334–344 (2018).
- ▲24, "Thermal and Mechanochemical Syntheses of Luminescent Mononuclear Copper(I) Complexes" P. Liang, A. Kobayashi, T. Hasegawa, M. Yoshida, *M. Kato, *Eur. J. Inorg. Chem.*, **44**, 5134–5142 (2017).

A01-02（計画・高見澤(代表)） 計 8 件（査読有 8 件）

- ▲1, "Controllability of coercive stress in organoferroelasticity by the incorporation of a bulky flipping moiety in molecular crystals" S. H. Mir, Y. Takasaki, E. R. Engel, *S. Takamizawa, *CrystEngComm*, **20**, 3807–3811 (2018).
- ▲2, "Enhancement of dissipated energy by large bending of an organic single crystal undergoing twinning deformation" S. H. Mir, Y. Takasaki, E. R. Engel, *S. Takamizawa, *RSC Advances*, **8**, 21933–21936 (2018).
- ▲3, "Versatile ferroelastic deformability in an organic single crystal by twinning about a molecular zone axis" E. R. Engel, *S. Takamizawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**, 11888–11892 (2018). (**Cover Picture**)
- ▲4, "Superplasticity in an organic crystal" *S. Takamizawa, Y. Takasaki, T. Sasaki, N. Ozaki, *Nature Commun.*, **9**, 3984 (2018). (**プレスリリース**)
- ▲5, "Versatile Shape Recoverability of Odd-Numbered Saturated Long-Chain Fatty Acid Crystals" *S. Takamizawa, Y. Takasaki, *Cryst. Growth Des.*, **19**, 1912–1920 (2019).
- ▲6, "Ferroelasticity in an organic crystal: a macroscopic and molecular level study" H. S. Mir, Y. Takasaki, R. E. Engel, *S. Takamizawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 15882–15885 (2017). (**VIP paper, Inside Cover**)
- ▲7, "Twinning ferroelasticity facilitated by the partial flipping of phenyl rings in single crystals of 4,4-dicarboxydiphenyl ether" R. E. Engel, Y. Takasaki, H. S. Mir, *S. Takamizawa, *R. Soc. Open Sci.*, **5**, 171146 (2018).
- ▲8, "An organoferroelasticity driven by molecular conformational change" H. S. Mir, Y. Takasaki, *S. Takamizawa, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **20**, 4631–4635 (2018). (**Cover**)

A01-03（計画・山野井(代表)） 計 6 件（査読有 6 件）

- ▲1, "Dioxacyclophanes as a Scaffold for Silicon-based Circularly Polarized Luminescent Materials" *Y. Yamanoi, T. Usuki, K. Omoto, M. Shimada, H. Koike, M. Iwamura, K. Nozaki, D. Saito, M. Kato, *H. Nishihara, *Tetrahedron Lett.*, **60**, 1108–1112, (2019). (領域内共同研究 A01 計画 加藤、A03 公募 岩村)

- ▲2, "Effects of Substituents on the Blue Luminescence of Disilane-Linked Donor-Acceptor-Donor Triads" T. Usuki, K. Omoto, M. Shimada, *Y. Yamanai, H. Kasai, E. Nishibori, *H. Nishihara, *Molecules*, **24**, 521 (2019). (領域内共同研究 A02 公募 西堀)
- ▲3, "Aggregation-Induced Emission Enhancement from Disilane-Bridged Donor-Acceptor-Donor Luminogens Based on the Triarylamine Functionality" T. Usuki, M. Shimada, *Y. Yamanai, T. Ohto, H. Tada, H. Kasai, E. Nishibori, *H. Nishihara, *ACS Appl. Mater. Inter.*, **10**, 12164-12172 (2018). (領域内共同研究 A02 公募 西堀)
- ▲4, "Attachment chemistry of aromatic compounds on a Silicon(100) surface" A. Henriksson, D. Nishiori, H. Maeda, M. Miyachi, *Y. Yamanai, H. Nishihara, *Surf. Sci.*, **669**, 140-144 (2018).
- ▲5, "Multifunctional Octamethyltetrasil[2.2]cyclophanes: Conformational Variations, Circularly Polarized Luminescence, and Organic Electroluminescence" M. Shimada, *Y. Yamanai, T. Ohto, S. Pham, R. Yamada, H. Tada, K. Omoto, S. Tashiro, M. Shionoya, M. Hattori, K. Jimura, S. Hayashi, H. Koike, M. Iwamura, K. Nozaki, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.*, **139**, 11214-11221 (2017). (領域内共同研究 A01 公募 田代, A03 公募 岩村)
- ▲6, "A photochemical hydrogen evolution system combining cyanobacterial photosystem I and platinum nanoparticle-terminated molecular wires" M. Miyachi, K. Okuzono, D. Nishiori, *Y. Yamanai, T. Tomo, M. Iwai, I. S. Allakhverdiev, *H. Nishihara, *Chem. Lett.*, **46**, 1479-1481 (2017).

A01 (公募・小門(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

- ▲1, "Step-growth copolymerization between immobilized monomer and mobile monomer in metal-organic frameworks" S. Anan, Y. Mochizuki, *K. Kokado, *K. Sada, *Angew. Chem. Int. Ed.*, in press.
- ▲2, "Post-synthetic Modification of Metal-Organic Framework through Urethane Formation" S. Anan, *K. Kokado, *K. Sada, *Chem. Lett.*, **48**, 285-287 (2019).
- ▲3, "Control of Aggregation-Induced Emission from a Tetraphenylethene Derivative through the Components in the Co-crystal" T. Jimbo, M. Tsuji, R. Taniguchi, *K. Kokado, *K. Sada, *Cryst. Growth Des.*, **18**, 3863-3869 (2018).

A01 (公募・井口(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件)

- ◎▲1, "Porous Molecular Conductor: Electrochemical Fabrication of Through-Space Conduction Pathways among Linear Coordination Polymers" L. Qu, *H. Iguchi, S. Takaishi, F. Habib, C. F. Leong, D. M. D'Alessandro, T. Yoshida, H. Abe, E. Nishibori, *M. Yamashita, *J. Am. Chem. Soc.*, in press. (領域内共同研究 A02 公募 西堀)
- ◎▲2, "Formation of Pores and π -Stacked Columns in Benzothienobenzothiophene-Based Linear Coordination Polymers" S. Koyama, *H. Iguchi, S. Takaishi, G. Cosquer, S. Kumagai, J. Takeya, N. Okamoto, *M. Yamashita, *Chem. Lett.*, in press.
- ◎▲3, "MX-type single chain complexes with an aromatic in-plane ligand: incorporation of aromatic interactions for stabilizing the chain structure" U. Afrin, *H. Iguchi, M. R. Mian, S. Takaishi, H. Yamakawa, T. Terashige, T. Miyamoto, H. Okamoto and *M. Yamashita, *Dalton Trans.*, 2019, 48, 7828-7834 (2019).
- ◎▲4, "Smallest Optical Gap for Pt(II)-Pt(IV) Mixed-Valence Pt-Cl and Pt-Br Chain Complexes Achieved by Using a Multiple-Hydrogen-Bond Approach" M. R. Mian, *H. Iguchi, S. Takaishi, U. Afrin, T. Miyamoto, H. Okamoto, *M. Yamashita, *Inorg. Chem.*, **58**, 114-120 (2019).

A01 (公募・鈴木(代表)) 計 5 件 (査読有 5 件)

- ▲1, "Self-Assembly of Anionic Polyoxometalate-Organic Architectures Based on Lacunary Phosphomolybdates and Pyridyl Ligands" C. Li, N. Mizuno, *K. Yamaguchi, *K. Suzuki, *J. Am. Chem. Soc.*, **141**, 7687-7692 (2019). (Supplementary Cover)
- ▲2, "Exploring orientationally aligned anisotropic large spin molecules with unusual long-distance intermolecular ferromagnetic interactions" T. Minato, Y. Ohata, K. Ishii, K. Yamaguchi, N. Mizuno, *K. Suzuki, *J. Mat. Chem. C*, in press. (領域内共同研究 A03-01 石井)
- ◎▲3, "Effect of Heteroatoms on Field-Induced Slow Magnetic Relaxation of Mononuclear Fe(III) ($S = 5/2$) Ions within Polyoxometalates" M. Takuo, *D. Aravena, E. Ruiz, K. Yamaguchi, N. Mizuno, *K. Suzuki, *Inorg. Chem.*, **57**, 6957-6964 (2018).
- ▲4, "Hexavacant γ -Dawson-type phosphotungstates supporting an edge-sharing bis(square-pyramidal) $\{O_2M(\mu_3-O)_2(\mu-OAc)MO_2\}$ core ($M = Mn^{2+}, Co^{2+}, Ni^{2+}, Cu^{2+}$, or Zn^{2+})" *K. Suzuki, T. Minato, N. Tominaga, I. Okumo, K. Yonesato, N. Mizuno, *K. Yamaguchi, *Dalton Trans.*, **48**, 7281-7289 (2019).
- ▲5, "Polyoxometalate Photocatalysis for Liquid-Phase Selective Organic Functional Group Transformations" *K. Suzuki, N. Mizuno, K. Yamaguchi, *ACS Catalysis*, **8**, 10809-10825 (2018).

A01 (公募・佐藤(代表)) 計 1 件 (査読有 1 件)

- ▲1, "Stepwise Expansion of Layered Metal-Organic Frameworks for Nonstochastic Exfoliation into Porous Nanosheets" V. K. Au, K. Nakayashiki, H. Huang, S. Sugimoto, *H. Sato, *T. Aida, *J. Am. Chem. Soc.*, **141**, 53-57 (2019).

A01 (公募・植草(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

- ◎▲1, "Reversible on/off switching of photochromic properties in N-salicylideneaniline co-crystals by heating and humidification" H. Sugiyama, K. Johmoto, A. Sekine, *H. Uekusa, *CrystEngComm*, **21**, 3170-3175 (2019).
- ◎▲2, "Triplon band splitting and topologically protected edge states in the dimerized antiferromagnet" *K. Nawa, K. Tanaka, N. Kurita, T. J. Sato, H. Sugiyama, *H. Uekusa, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, *H. Tanaka, *Nature Commun.*, **10**, 2096 (2019).
- ◎▲3, "Capturing a new hydrate polymorph of amodiaquine dihydrochloride dihydrate via heterogeneous crystallisation" P. O. Dwichandra, A. Pettersen, S. O. N. Lill, D. Umeda, E. Yonemochi, Y. P. Nugraha, *H. Uekusa, *CrystEngComm*, **21**, 2053-2057 (2019).

A01 (公募・生越(代表)) 計 8 件 (査読有 8 件、内 1 件は領域内共同研究先 A01 公募 酒田に記載)

- ◎▲1, "Host-Guest Complexation Using Pillar[5]arene Crystals: Crystal-Structure Dependent Uptake, Release, and Molecular Dynamics of an Alkane Guest" *T. Ogoshi, Y. Hamada, R. Sueto, Y. Sakata, S. Akine, A. M. P. Moeljadi, H. Hirao, T. Kakuta, T. Yamagishi, M. Mizuno, *Chem. Eur. J.*, **25**, 2497-2502 (2019). (Cover, 領域内共同研究 A01 公募 酒田)
- ▲2, "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.*, **141**, 785-789 (2019).
- ◎▲3, "Molecular weight fractionation by confinement of polymer in one-dimensional pillar[5]arene channels" *T. Ogoshi, R. Sueto, M. Yagyu, R. Kojima, T. Kakuta, T. Yamagishi, K. Doitomi, A. K. Tummanapelli, H. Hirao, Y. Sakata, S. Akine, M. Mizuno, *Nature Commun.*, **10**, 479 (2019). (領域内共同研究 A01 公募 酒田)
- ▲4, "Applications of Pillar[n]arene-Based Supramolecular Assemblies" *T. Ogoshi, T. Kakuta, T. Yamagishi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 2197-2206 (2019).
- ▲5, "Stimuli-Responsive Supramolecular Assemblies Constructed from Pillar[n]arenes" T. Kakuta, T. Yamagishi, *T. Ogoshi, *Acc. Chem. Res.*, **51**, 1656-1666 (2018).
- ▲6, "A Planar-Chiral Pillar[5]arene-Based Monophosphine Ligand with Induced Chirality at the Biaryl Axis" *Y. Nagata, Y. Shimada, T. Nishikawa, R. Takeda, M. Uno, *T. Ogoshi, M. Sugimoto, *Synlett*, **29**, 2167-2170 (2018).
- ▲7, "An amphiphilic pseudo[1]catenane: neutral guest-induced clouding point change" *T. Ogoshi, T. Akutsu, T. Yamagishi, *Beilstein J. Org. Chem.*, **14**, 1937-1943 (2018).

A01 (公募・酒田(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件、内 2 件は領域内共同研究先 A01 公募 生越に記載)

- ▲1, "Metallonanobelt: A Kinetically Stable Shape-Persistent Molecular Belt Prepared by Reversible Self-Assembly Processes" *Y. Sakata, R. Yamamoto, D. Saito, Y. Tamura, K. Maruyama, T. Ogoshi, *S. Akine, *Inorg. Chem.*, **57**, 15500-15506 (2018). (Cover, 領域内共同研究 A01 公募 生越)

A01 (公募・楠(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

- ◎▲1, "Dependence of Absorption and Emission Spectra on Polymorphs of Gold(I) Isocyanide Complexes: Theoretical Study with QM/MM Approach" S. Aono, T. Seki, H. Ito, *S. Sakaki, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 4773-4794 (2019). (領域内共同研究 A02-01 伊藤)
- ◎▲2, "Theoretical Insight into Gate-Opening Adsorption Mechanism and Sigmoidal Adsorption Isotherm into Porous Coordination Polymer" J. Zheng, S. Kusaka, R. Matsuda, *S. Kitagawa, *S. Sakaki, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 13958-13969 (2018).
- ▲3, "QM/MM Approach to Isomerization of Ruthenium(II) Sulfur Dioxide Complex in Crystal; Comparison with Solution and Gas Phases" S. Aono, *S. Sakaki, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 20701-20716 (2018).

A01 (公募・池田(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件、未記載 2 件)

- 1, ◎▲1, "Photoinduced Deformation and Isomerization of Azobenzene Liquid-Crystalline Polymer Films at Cryogenic Temperature" S. Ogikubo, G. Hashimoto, T. Ube, M. Suda, H. Yamamoto, T. Ikeda, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, in press.
- ▲2, "Fabrication of Photomobile Polymer Materials with Phase-Separated Structures of Crosslinked Azobenzene Liquid-Crystalline Polymer and Poly(dimethylsiloxane)" T. Ube, T. Yoda, *T. Ikeda, *Liq. Cryst.*, **45**, 2269-2273 (2018).

研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓

A02-01 (計画・伊藤(代表)) 計 15 件 (査読有 15 件、内 4 件は A01-01 加藤、A01 公募楠、A02-04 後藤、A03 公募長谷川に記載)

- ▲1, "Luminescent mechanochromism of gold N-heterocyclic carbene complexes with hypso- and bathochromic spectral shifts" *T. Seki, K. Kashiwaga, *H. Ito, *Dalton Trans.*, **48**, 7105-7109 (2019).
- ▲2, "Anisotropic strain release in a thermosensitive crystal: correlation between the microscopic orientation of molecular rearrangements and the macroscopic mechanical motion" *T. Seki, T. Mashimo, *H. Ito, *Chem. Sci.*, **10**, 4185-4191 (2019).
- ▲3, "Concise Synthesis of Potassium Acyltrifluoroborates from Aldehydes through Copper(I)-Catalyzed Borylation/Oxidation" J. Taguchi, T. Takeuchi, R. Takahashi, F. Masero, *H. Ito, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 7299-7303 (2019).
- ▲4, "Mechanochemistry allows carrying out sensitive organometallic reactions in air: glove-box-and-Schlenk-line-free synthesis of oxidative addition complexes from aryl halides and palladium(0)" *K. Kubota, R. Takahashi, *H. Ito, *Chem. Sci.*, **10**, 5837-5842 (2019).
- ▲5, "Iridium(I)-Catalyzed C-H Borylation in Air Using Mechanochemistry" Y. Pang, T. Ishiyama, K. Kubota, *H. Ito, *Chem. Eur. J.*, **25**, 4654-4659 (2019).

- ▲6, "Olefin-accelerated Solid-state C-N cross-coupling reactions using mechanochemistry" K. Kubota, T. Seo, K. Koide, Y. Hasegawa, *H. Ito, *Nature Commun.*, **10**, 111 (2019). (プレスリリース、領域内共同研究 A03 公募 長谷川)
- ▲7, "A Gold Isocyanide Complex with a Pendant Carboxy Group: Orthogonal Molecular Arrangements and Hypsochromically Shifted Luminescent Mechanochromism" T. Seki, K. Kobatashi, T. Mashimo, *H. Ito, *Chem. Commun.*, **54**, 11136-11139 (2018).
- ▲8, "A meta-diisocyanide benzene-based aryl gold isocyanide complex exhibiting multiple solid-state molecular arrangements and luminescent mechanochromism" T. Seki, K. Ida, *H. Ito, *Mater. Chem. Front.*, **2**, 1195-1200 (2018).
- ▲9, "Mechanical-Stimulation-Triggered and Solvent-Vapor-Induced Reverse Single-Crystal-to-Single-Crystal Phase Transitions with Alterations of the Luminescence Color" J. Mingoo, T. Sumitani, H. Sato, T. Seki, *H. Ito, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 2875-2879 (2018).
- ▲10, "Phosphorescence Control Mediated by Molecular Rotation and Auophilic Interactions in Amphidynamic Crystals of 1,4-Bis[tri-(p-fluorophenyl)phosphane-gold(I)-ethynyl]benzene" M. Jin, S. Chung, T. Seki, *H. Ito, *M. A. Garcia-Garibay, *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 18115-18121.
- ▲11, "Synthesis of Acylborons by Ozonolysis of Alkenylboronates: Preparation of an Enantioenriched Amino Acid Acylboronate" J. Taguchi, T. Ikeda, R. Takahashi, I. Sasaki, Y. Ogasawara, T. Dairi, N. Kato, Y. Yamamoto, *J. W. Bode, *H. Ito, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **56**, 13847-13851 (2017).

A02-02 (計画・平野(代表)) 計 5 件 (査読有 5 件)

- ▲1, "Halogen-substituent effect on the spectroscopic properties of 2-phenyl-6-dimethylaminobenzothiazoles" R. Misawa, C. Matsuhashi, M. Yamaji, T. Mutai, I. Yoshikawa, H. Houjou, K. Noguchi, S. Maki, *T. Hirano, *Tetrahedron Lett.*, in press. (領域内共同研究 A01-01 分担 務台)
- ▲2, "Phrixotrix luciferase and 6'-aminoluciferins reveal a larger luciferin phenolate binding site and provide novel far-red combinations for bioimaging purposes" V. R. Bevilacqua, T. Matsuhashi, G. Oliveira, P. S. L. Oliveira, T. Hirano, *V. R. Viviani, *Sci. Rep.*, in press.
- ◎▲3, "Synthesis and luminescence properties of near-infrared N-heterocyclic luciferin analogues for in vivo optical imaging" R. Saito, T. Kuchimaru, S. Higashi, S. Lu, M. Kiyama, S. Iwano, R. Obata, T. Hirano, *S. Kizaka-Kondoh, *S. A. Maki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **92**, 608-618 (2019).
- ◎▲4, "Spectroscopic properties of push-pull 2-(4-carboxyphenyl)-6-dimethylaminobenzothiazole derivatives in solution and the solid state" Y. Takahashi, T. Uehara, C. Matsuhashi, M. Yamaji, T. Mutai, I. Yoshikawa, H. Houjou, K. Kitagawa, T. Suenobu, S. A. Maki, T. Hirano, *J. Photochem. Photobiol. A*, **376**, 324-332, (2019). (領域内共同研究 A01-01 分担 務台, A02-02 分担 末延 (版大))
- ◎▲5, "Structure-fluorescence relationship of push-pull 2-phenylbenzothiazole derivatives designed based on the firefly light-emitter," T. Fujikawa, T. Uehara, M. Yamaji, T. Kanetomo, T. Ishida, S. Maki, *T. Hirano, *Tetrahedron Lett.*, **59**, 1431-1434 (2018).

A02-03 (計画・佐藤(代表)) 計 2 件 (査読有 2 件、未記載 1 件)

- ▲1, "Size and Shape Controlled Crystallization of Hemoglobin for Advanced Crystallography" A. Sato-tomita, *N. Shibayama, *Crystals*, **7**, 282 (2017).

A02-04 (計画・後藤(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

- ▲1, "Soft Crystal Force Field for Reproducing the Crystal Structures of Gold Isocyanide Complexes" N. Nakayama, S. Obata, *H. Goto, T. Seki, H. Ito, *J. Comput. Chem., Jpn.*, **17**, 155-157 (2018). (領域内共同研究 A02-01 伊藤)
- ▲2, "Computational Chemical Analysis of Ru(II)-Pheox Catalyzed Highly Enantioselective Intramolecular Cyclopropanation Reactions" Y. Nakagawa, N. Nakayama, H. Goto, I. Fujisawa, S. Chanthamath, K. Shibatomi, *S. Iwasa, *Chirality*, **31**, 54-61 (2019). (領域内共同研究 A02-04 中山 (コンプレックス欄))
- ▲3, "Ligand Exchange Reaction on a Ru(II)-Pheox Complex as a Mechanistic Study of Catalytic Reactions" Y. Nakagawa, Y. Imokawa, I. Fujisawa, N. Nakayama, H. Goto, S. Chanthamath, K. Shibatomi, *S. Iwasa, *ACS Omega*, **3**, 11286-11289 (2018). (領域内共同研究 A02-04 中山 (コンプレックス欄))

A02 (公募・岩佐(代表)) 計 5 件 (査読有 5 件、内 1 件は領域内共同研究先 A03 公募 長谷川に記載)

- ◎▲1, "First Principles Calculations Toward Understanding SERS of 2,2'-Bipyridyl Adsorbed on Au, Ag, and Au-Ag Nanoalloy" M. Takenaka, Y. Hashimoto, T. Iwasa, T. Taketsugu, G. Seniutinas, A. Balciytis, S. Juodkazis, Y. Nishijima, *J. Comput. Chem.*, **40**, 925-932 (2019).
- ◎▲2, "Combined Automated Reaction Pathway Searches and Sparse Modeling Analysis for Catalytic Properties of Lowest Energy Twins of Cu₁₃" *T. Iwasa, T. Sato, M. Takagi, M. Gao, A. Lyalin, M. Kobayashi, K. Shimizu, S. Maeda, *T. Taketsugu, *J. Phys. Chem. A*, **123**, 210-217 (2019).
- ◎▲3, "Photoluminescence Properties of [Core+exo]-Type Au₆ Clusters: Insights into the Effect of Ligand Environments on the Excitation Dynamics" *Y. Shichibu, M. Zhang, T. Iwasa, Y. Ono, T. Taketsugu, S. Omagari, T. Nakanishi, Y. Hasegawa, K. Konishi, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 6934-6939 (2019). (領域内共同研究 A03 公募 長谷川)
- ◎▲4, "Low-lying Excited States of hqxcH and Zn-hqxc Complex: Toward Understanding Intramolecular Proton Transfer Emission" M. Ebina, Y. Kondo, *T. Iwasa, *T. Taketsugu, *Inorg. Chem.*, **58**, 4686-4698 (2019).

A02 (公募・西堀(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件、内 3 件は領域内共同研究先 A01-03 山野井、A01 公募 井口に記載)

- ▲1, "Hydrothermal reactor for in-situ synchrotron radiation powder diffraction at Spring-8 BL02B2 for quantitative design for nanoparticle" T. Fujita, H. Kasai, *E. Nishibori, *J. Supercritical Fluids*, **147**, 172-178 (2019).

A02 (公募・田代(代表)) 計 2 件 (査読有 2 件)

- ▲1, "Rational synthesis of benzimidazole[3]arenes by CuI-catalyzed post-macrocyclization transofrmation" *S. Tashiro, T. Umeki, R. Kubota, *M. Shionoya, *Chem. Sci.*, **39**, 7614-7619 (2018).
- ▲2, "Preferential photoreaction in a porous crystal, metal-macrocyclic framework: Pd^{II}-mediated olefin migration over [2+2] cycloaddition" H. Yonezawa, S. Tashiro, T. Shiraogawa, M. Ehara, R. Shimada, T. Ozawa, *M. Shionoya, *J. Am. Chem. Soc.*, **48**, 16610-16614 (2018).

A02 (公募・伊藤(代表)) 計 2 件 (査読有 2 件)

- ▲1, "Efficient and Versatile Mechanochemical Luminescence of Phenanthroimidazolylbenzothiadiazoles: Tricolor Switching and Directional Control over the Chromism" S. Nagai, M. Yamashita, *T. Tachikawa, T. Ubukata, M. Asami, *S. Ito, *J. Mat. Chem. C*, **7**, 4988-4998 (2019). (Inside Back Cover, 領域内共同研究 A03 公募 立川)
- ▲2, "Tricolor mechanochromic luminescence of an organic two-component dye: visualization of a crystalline state and two amorphous states" *S. Ito, G. Katada, T. Taguchi, I. Kawamura, T. Ubukata, M. Asami, *CrystEngComm*, **21**, 53-59 (2019). (Outside Back Cover)

A02 (公募・内橋(代表)) 計 7 件 (査読有 7 件)

- ◎▲1, "Hydrogel Microellipsoids that Form Robust String-Like Assemblies at the Air/Water Interface" K. Honda, Y. Sazuka, K. Iizuka, S. Matsui, T. Uchihashi, T. Kureha, M. Shibayama, T. Watanabe, *D. Suzuki, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 7294-7298 (2019).
- ◎▲2, "Construction of a Quadrangular Tetramer and a Cage-Like Hexamer from Three-Helix Bundle-Linked Fusion Proteins" T. Miyamoto, Y. Hayashi, K. Yoshida, H. Watanabe, T. Uchihashi, K. Yonezawa, N. Shimizu, H. Kamikubo, *S. Hirota, *ACS Synth. Biol.*, **85**, 1112-1120 (2019).
- ◎▲3, "Supramolecular Hemoprotein Assembly with a Periodic Structure Showing Heme-Heme Exciton Coupling" *K. Oohora, N. Fujimaki, R. Kajihata, H. Watanabe, *T. Uchihashi, *T. Hayashi, *J. Am. Chem. Soc.*, **140**, 10145-10148 (2018).
- ◎▲4, "Monitoring Thermo-responsive Morphological Changes in Individual Hydrogel Microspheres" S. Matsui, Y. Nishizawa, *T. Uchihashi, *D. Suzuki, *ACS Omega*, **3**, 10836-10842 (2018).
- ◎▲5, "Direct Observation and Manipulation of Supramolecular Polymerization by High-Speed Atomic Force Microscopy" T. Fukui, *T. Uchihashi, N. Sasaki, *M. Takeuchi, *K. Sugiyasu, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **57**, 15465-15470 (2018). (プレスリリース)
- ◎▲6, "Microtubule self-healing and defect creation investigated by in-line force measurements during high-speed atomic force microscopy" *C. Ganser, *T. Uchihashi, *Nanoscale*, **11**, 125-135 (2019).
- ◎▲7, "A ring-shaped hemoprotein trimer thermodynamically controlled by the supramolecular heme-heme pocket interaction" *K. Oohora, R. Kajihara, N. Fujimaki, *T. Uchihashi, *T. Hayashi, *Chem. Commun.*, **55**, 1544-1547 (2019).

A02 (公募・持田(代表)) 計 1 件 (査読有 1 件)

- ▲1, "Phase Transitions and Crystal Structures of Ionic Plastic Crystals Comprising Quaternary Ammonium Cations and Carborane Anion" H. Kimata, R. Sumitani, *T. Mochida, *Chem. Lett.*, in press.

A02 (公募・大山(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件)

- ▲1, "Fluorescent sensor for water based on photo-induced electron transfer and Förster resonance energy transfer: anthracene-(aminomethyl)phenylboronic acid ester-BODIPY structure", D. Jinbo, K. Imato and *Y. Ooyama, *RSC Adv.*, **9**, 15335-15340 (2019).
- ▲2, "Colorimetric and ratiometric fluorescence sensing of water based on 9-methyl pyrido[3,4-b]indole-boron trifluoride complex" *Y. Ooyama, T. Enoki, *Dalton Trans.*, **48**, 2086-2092 (2019).
- ▲3, "A colorimetric and fluorescent sensor for water in acetonitrile based on intramolecular charge transfer: D-(π-A)-type pyridine-boron trifluoride complex" S. Tsumura, T. Enoki, *Y. Ooyama, *Chem. Commun.*, **54**, 10144-10147 (2018).
- ▲4, "Tetraphenylethene- and diphenyldibenzofulvene-anthracene-based fluorescence sensors possessing photo-induced electron transfer and aggregation-induced emission enhancement characteristics for detection of water" *Y. Ooyama, R. Sagisaka, T. Enoki, N. Tsunaji, J. Ohshita, *New J. Chem.*, **42**, 13339-13350 (2018).

A02 (公募・嘉部(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

- ▲1, "Wide-Range Tuning and Enhancement of Organic Long-Persistent Luminescence Using Emitter Dopants" Z. Lin, *R. Kabe, N. Nishimura, K. Jinnai, *C. Adachi,

Adv. Mat., **30**, 1800365 (2018). (Frontispiece)

▲2, "Organic Long-Persistent Luminescence from a Flexible and Transparent Doped Polymer" K. Jinnai, *R. Kabe, *C. Adachi, Adv. Mat., **30**, 1870286 (2018).

▲3, "Fabrication-Method Independence of Organic Long-Persistent Luminescence Performance" K. Jinnai, N. Nishimura, *R. Kabe, *C. Adachi, Chem. Lett., **48**, 270-273 (2019).

研究項目 A03 ソフトクリスタルの物性・機能開拓

A03-01 (計画・石井(代表)) 計 22 件 (査読有 22 件、内 3 件は共同研究先 A01-01 加藤、A03 公募 長谷川、鈴木に記載、未記載 1 件)

▲1, "Reversible Aggregation of Chlorophyll Derivative Induced by Phase Transition of Lipid Bilayers", N. Nishimura, S. Nakayama, A. Horiuchi, M. Kumoda, *T. Miyatake Langmuir, in press. (Cover Art)

▲2, "Electrochemical Reduction of CO₂ by a Gas-Diffusion Electrode Composed of fac-Re(diimine)(CO)₃Cl and Carbon Nanotubes", K. Murata, H. Tanaka, *K. Ishii J. Phys. Chem. C, in press. (Supplementary Cover Art)

▲3, "Molecular Power Spring: Circular Dichroism Inversion of Polythiophene Aggregates from the Right-Handed Helix to Left-Handed Helix", S. Hattori, S. Vandendriessche, T. Hirano, F. Sato, G. Koeckelberghs, T. Verbiest, *K. Ishii J. Phys. Chem. B, **123**, 2925-2929 (2019). (Supplementary Cover Art)

◎▲4, "Suppression of Structural Change upon S1-T1 Conversion Assists the Thermally Activated Delayed Fluorescence Process in CarbazoleBenzonitrile Derivatives", M. Saigo, *K. Miyata, S. Tanaka, H. Nakanotani, C. Adachi and *K. Onda, J. Phys. Chem. Lett., **10**, 2475-2480 (2019).

▲5, "Pulsed laser induced heat transfer from a phthalocyanine-based thin film to a Bi, Al-substituted DyIG substrate: photothermal demagnetization observed by magnetic circular dichroism and numerical analysis" M. Karasawa, *K. Ishii, Phys. Chem. Chem. Phys., **20**, 12241-12247 (2018)

▲6, "Transient absorption studies on photothermal energy transfer and heat dissipation: Phthalocyanine-based thin films on Bi, Al-substituted DyIG substrates" M. Karasawa, *K. Ishii, Chem. Phys. Lett., **704**, 1-4 (2018).

▲7, "Selenium-containing BODIPY dyes as photosensitizers for triplet-triplet annihilation upconversion" M. Nakashima, K. Iizuka, M. Karasawa, *K. Ishii, *Y. Kubo, J. Mat. Chem. C, **6**, 6208-6215 (2018).

▲8, "Dependence of phthalocyanine-based fluorescence on albumin structure: A fluorescent probe for ascorbic acid" T. Yokoi, *K. Ishii, J. Photochem. Photobiol. A: Chem., **364**, 1-5 (2018).

▲9, "Encapsulation of Zinc Phthalocyanine into Bovine Serum Albumin Aggregates" T. Yokoi, S. Hattori, K. Ishii, J. Coord. Chem., **72**, 707-715 (2019).

▲10, "Investigation of excited state, reductive quenching, and intramolecular electron transfer of Ru(II)-Re(I) supramolecular photocatalysts for CO₂ reduction using time-resolved IR measurements" *K. Koike, D. C. Grill, Y. Tamaki, E. Fujita, K. Okubo, Y. Yamazaki, M. Saigo, T. Mukuta, *K. Onda, *O. Ishitani, Chem. Sci., **9**, 2961-2974 (2018).

▲11, "Novel Techniques for Observing Structural Dynamics of Photoresponsive Liquid Crystals" *M. Hada, S. Saito, R. Sato, K. Miyata, Y. Hayashi, Y. Shigeta, *K. Onda, J. Vis. Exp., **135**, e57612 (2018). (領域内共同研究 A03 公募 羽田)

▲12, "Hydrodynamic simulations of charge-regulation effects in colloidal suspensions" *K. Takae, *H. Tanaka, Soft Matter, **14**, 4711-4720 (2018).

▲13, "Self-organization into ferroelectric and antiferroelectric crystals via the interplay between particle shape and dipolar interaction" *K. Takae, *H. Tanaka, Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **115**, 9917-9922 (2018). (プレスリリース)

▲14, "Temperature-dependent self-assemblies of zinc 3'-hydroxy-chlorins in polydimethylsiloxane oil" *T. Miyatake, Y. Yamamoto, H. Tamiaki, J. Photochem. Photobiol. A: Chem., **353**, 654-660 (2018).

▲15, "Photoelectrochemical Oxygen Reduction Reactions using Phthalocyanine-Based Thin Films on an ITO Electrode" N. T. Hong Trang, *K. Ishii, J. Phys. Chem. C, **122**, 3539-3547 (2018).

▲16, "In vivo fluorescence bioimaging of ascorbic acid in mice: Development of an efficient probe consisting of phthalocyanine, TEMPO, and albumin" T. Yokoi, T. Otani, *K. Ishii, Sci. Rep., **8**, 1560 (2018). (プレスリリース)

▲17, "Structural Monitoring of the Onset of Excited-State Aromaticity" *M. Hada, *S. Saito, S. Tanaka, R. Sato, M. Yoshimura, K. Mouri, K. Matsuo, S. Yamaguchi, M. Hara, Y. Hayashi, F. Rohricht, R. Herges, *Y. Shigeta, *K. Onda and R. J. D. Miller, J. Am. Chem. Soc., **139**, 15792-15800 (2017).

▲18, "Near Infra-Red S₀→T₁ Transitions of Iridium(III) Phthalocyanine: Degeneracy of the T₁ State Evidenced by Magnetic Circular Dichroism" K. Murata, *K. Ishii, Eur. J. Inorg. Chem., **44**, 5103-5107 (2017).

A03-02 (計画・長谷川美貴(代表)) 計 18 件 (査読有 18 件、内 1 件は領域内共同研究先 A01-01 加藤に記載、未記載 1 件)

▲1, "Strong Luminescent Europium Complexes Induced by the Unprecedented Anti-chelate Effect of Acyl Groups on a N⁶-Hexadentate Ligand" S. Ogata, H. Komiya, N. Goto, R. Tanabe, K. Sugimoto, S. Kawaguchi, K. Goto, M. Hatanaka, A. Ishii, *M. Hasegawa, **48**, 593-596 (2019).

▲2, "Preparation of Tetrazole-fused π -Conjugated Molecules and Their Fluorescence Behavior" *T. Hata, Y. Hayashi, Y. Hasegawa, M. Iwai, A. Ishii, *M. Hasegawa, M. Shigeta, *H. Urabe, Chem. Lett., in press.

▲3, "Gelation and luminescence of lanthanide hydrogels formed with deuterium oxide" Y. Zama, K. Yanai, J. Takeshita, A. Ishii, *M. Yamanaka, *M. Hasegawa, RSC Advances, **9**, 1949-1955 (2019). (領域内共同研究 A03-02 分担 山中 (静岡大))

▲4, "Trap-controlled mechanoluminescent materials" J. Zhang, X. Wang, G. Marriott, *C. Xu, Prog. Mat. Sci., **103**, 678-742 (2019).

▲5, "Multicolor Upconversion Luminescence of Dye-Coordinated Er³⁺ at the interface of Er₂O₃ and CaF₂ nanoparticles" *A. Ishii, Y. Adachi, A. Hasegawa, M. Komaba, S. Ogata, *M. Hasegawa, Sci. Tech. Adv. Mater., **20**, 44-50 (2019).

◎▲6, "Alkyl chain elongation and acyl group effects in a series of Eu/Tb complexes with hexadentate π -electronic skeletons and their enhanced luminescence in solutions" S. Ogata, N. Goto, A. Ishii, M. Hatanaka, K. Yoshihara, R. Tanabe, K. Kayano, R. Magaribuchi, K. Goto, *M. Hasegawa, Dalton Trans., **47**, 7135-7143 (2018). (Inside back cover)

▲7, "Europium amphiphilic naphthalene based complex for the enhancement of linearly polarized luminescence in Langmuir-Blodgett films" K. Yoshihara, *M. Yamanaka, S. Kanno, S. Mizushima, J. Tsuchiyagaito, K. Kondo, T. Kondo, D. Iwasawa, H. Komiya, A. Saso, S. Kawaguchi, K. Goto, S. Ogata, H. Takahashi, *A. Ishii, *M. Hasegawa, New J. Chem., **43**, 6472-6479 (2018). (プレスリリース、領域内共同研究 A03-02 分担 山中 (静岡大))

▲8, "Making graphene luminescent by adsorption of an amphiphilic europium complex" Y. Hara, K. Yoshihara, K. Kondo, S. Ogata, T. Watanabe, A. Ishii, *M. Hasegawa, *S. Koh, Appl. Phys. Lett., **112**, 173103/1-5 (2018).

▲9, "Enzymatic hydrolysis-induced degradation of a lactose-coupled supramolecular hydrogel" S. Akama, T. Maki, *M. Yamanaka, Chem. Commun., **54**, 8814-8817 (2018). (Inside Back Cover)

▲10, "Gabriel synthesis of hexakis(aminomethyl)benzene and its derivatization" J. Masuda, S. Kondo, Y. Matsumoto, *M. Yamanaka, ChemistrySelect, **3**, 6112-6115 (2018).

▲11, "Synthesis of a bis-urea dimer and its effects on the physical properties of an amphiphilic tris-urea supramolecular hydrogel" H. Sawada, M. Yamanaka, Chem. Asian J., **13**, 929-933 (2018). (Cover Feature)

▲12, "Scalable elasticoluminescent strain sensor for precise dynamic stress imaging and onsite infrastructure diagnosis" L. Liu, *C.-N. Xu, A. Yoshida, D. Tu, N. Ueno, S. Kainuma, Adv. Mat. Tech., **4**, 1800336 (1) - (10) (2019).

▲13, "Sustainable mechanoluminescence by designing a novel pinning trap in crystals" D. Tu, R. Hamabe, *C.-N. Xu, J. Phys. Chem. C, **122**, 23307-23311 (2018).

▲14, "Piezo-photronics: from fundamentals and materials to applications" H. Jianhua, *C.-N. Xu, MRS BULLETIN, **43**, 965-969 (2018).

▲15, "Sensitive Photodetection with Photomultiplication Effect in an Interfacial Eu^{2+/3+} Complex on a Mesoporous TiO₂ Film" *A. Ishii, T. Sakai, R. Takahashi, S. Oga5a, K. Kondo, T. Kondo, D. Iwasawa, S. Mizushima, K. Yoshihara, *M. Hasegawa, ACS Appl. Mater. Interfaces, **10**, 5706-5713 (2018).

◎▲16, "Synthesis of a C₃-symmetric tris-imine via dynamic covalent bond formation between a trialdehyde and a triamine" K. Nakada, S. Kondo, Y. Matsumoto, *M. Yamanaka, Tetrahedron Lett., **58**, 4612-4616 (2017).

A03-03 (計画・龔(代表)) 計 6 件 (査読有 6 件)

◎▲1, "Hydrophobic Hydrogels with Fruit-like Structure and Functions" H. Guo, T. Nakajima, D. Hourdet, A. Marcellan, C. Creton, W. Hong, *T. Kurokawa, *J. P. Gong, Adv. Mater., in press.

◎▲2, "Superior Fracture Resistance of Fiber Reinforced Polyampholyte Hydrogels Achieved by Extraordinarily Large Energy-dissipative Process Zones" Y. Huang, D. R. King, W. Cui, T. L. Sun, H. Guo, *T. Kurokawa, H. R. Brown, C.-Y. Hui and *J. P. Gong, J. Mat. Chem. A, **7**, 13431-13440 (2019). (Back Cover)

◎▲3, "Designing Responsive Photonic Crystal Patterns by Using Laser Engraving" *Y. Yue, *T. Kurokawa, ACS Appl. Mat. & Interfaces, **11**, 10841-10847 (2019).

◎▲4, "Shearing-induced contact pattern formation in hydrogels sliding in polymer solution" S. Yashma, S. Hirayama, *T. Kurokawa, T. Salez, H. Takefuji, W. Hong, *J. P. Gong, Soft Matter, **15**, 1953-1959 (2019). (Inner Back Cover)

▲5, "Tough and Variable-Band-Gap Photonic Hydrogel Displaying Programmable Angle-Dependent Color" M. Haque, K. Mito, *T. Kurokawa, T. Nakajima, T. Nonoyama, M. Ilyas, *J. P. Gong, ACS Omega, **3**, 55-62 (2018).

▲6, "Water-Triggered Ductile-Brittle Transition of Anisotropic Lamellar Hydrogels and Effect of Confinement on Polymer Dynamics" M. Ilyas, M. Haque, Y. Yue, *T. Kurokawa, T. Nakajima, T. Nonoyama, *J. P. Gong, Macromolecules, **50**, 8169-8177 (2017).

A03-04 (計画・小林(代表)) 計 6 件 (査読有 6 件)

▲1, "A multicolor electrochromic device having hybrid capacitor architecture with a porous carbon electrode", Z. Liang, K. Nakamura, *N. Kobayashi, Solar Energy Mat. Solar Cells, **200**, 109914 (2019).

▲2, "Enantioselective luminescence enhancement of chiral Ru(phen)₃²⁺ complexes by interaction with deoxyribonucleic acid" H. Minami, K. Nakamura, *N. Kobayashi, J. Nanophotonics, **12**, Art. No. 33005 (2018).

▲3, "Enhanced red emissions of europium(III) chelates in DNA-CTMA complexes" K. Nakamura, H. Minami, A. Sagara, N. Itamoto, *N. Kobayashi, J. Mat. Chem. C, **6**, 4516-4522 (2018).

▲4, "A Viologen-Eu(III)-Modified TiO₂ Electrode for Electroswitchable Luminescence and Coloration" K. Kanazawa, K. Nakamura, *N. Kobayashi, Chem. Select,

3, 9672-9680 (2018).

▲5, "Photonics of DNA/ruthenium(II) complexes" *N. Kobayashi, H. Minami, K. Nakamura, *Nanophotonics*, **7**, 1373-1385 (2018).

▲6, "Ultrafast Response in AC-Driven Electrochemiluminescent Cell Using Electrochemically Active DNA/Ru(bpy)₃²⁺ Hybrid Film with Mesoscopic Structures" S. Tsuneyasu, R. Takahashi, H. Minami, K. Nakamura, *N. Kobayashi, *Sci. Rep.*, **7**, 8525 (2017).

A03 (公募・長谷川靖哉(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件)

▲1, "Temperature-sensitive Luminescent lanthanide complexes" *Y. Hasegawa, Y. Kitagawa, *J. Mater. Chem. C*, in press.

▲2, "Spiral Eu(III) Coordination Polymers with Circularly Polarized Luminescence" *Y. Hasegawa, Y. Miura, Y. Kitagawa, S. Wada, T. Nakanishi, K. Fushimi, T. Seki, H. Ito, T. Iwasa, T. Taketsugu, M. Gon, K. Tanaka, Y. Chujo, S. Hattori, M. Karasawa, K. Ishii, *Chem. Comm.*, **54**, 10695-10697 (2018). (領域内共同研究 A02-01 伊藤、A02 岩佐、A03-01 石井)

▲3, "Ligand-assisted Back Energy Transfer in Luminescent Tb(III) Complexes for Thermo-sensing Properties" M. Yamamoto, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, K. Fushimi, *Y. Hasegawa, *Chem. Eur. J.*, **24**, 17719-17726 (2018). (Cover Feature)

▲4, "Electronic chirality inversion of lanthanide complex" S. Wada, Y. Kitagawa, T. Nakanishi, M. Gon, K. Tanaka, K. Fushimi, Y. Chujo, *Y. Hasegawa, *Sci. Rep.*, **8**, 16395 (2018).

A03 (公募・森川(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件、未記載 1 件)

◎▲1, "Infrared polariscope imaging of linear polymeric patterns with focal plane array", R. Honda, M. Ryu, M. Moritake, A. Balcytis, V. Mizeikis, J. Vongsivut, M. J. Tobin, D. Appadoo, J. L. Li, S. H. Ng, *S. Juodkazis and *I. Morikawa, *Nanomaterials*, **9**, 732, (2019).

◎▲2, "Nanoscale optical and structural characterisation of silk", M. Ryu, R. Honda, A. Cernescu, A. Vailionis, A. Balcytis, J. Vongsivut, J. L. Li, D. P. Linklater, E. P. Ivanova, V. Mizeikis, M. J. Tobin, *I. Morikawa, *S. Juodkazis, *Beilstein J. Nanotechnol.*, **10**, 922-929 (2019).

◎▲3, "Simple multi-wavelength imaging of birefringence: case study of silk" R. Honda, M. Ryu, J. Li, V. Mizeikis, S. Juodkazis, *I. Morikawa, *Sci. Rep.*, **8**, 17652 (2018).

A03 (公募・平田(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件)

▲1, "Roles of Localized Electronic Structures caused by π Degeneracy due to Highly Symmetric Heavy Atom-Free Conjugated Molecular Crystals Leading to Efficient Persistent Room-Temperature Phosphorescence" S. Hirata, *Adv. Sci.*, DOI: 10.1002/adv.201900410.

▲2, "Suppressed Triplet Exciton Diffusion Due to Small Orbital Overlap as a Key Design Factor for Ultralong-Lived Room-Temperature Phosphorescence in Molecular Crystals" K. Narushima, Y. Kiyota, T. Mori, *S. Hirata, *M. Vacha, *Adv. Mat.*, **31**, 1807268 (2019).

▲3, "Intrinsic Analysis of Radiative and Room-Temperature Nonradiative Processes Based on Triplet State Intramolecular Vibrations of Heavy Atom-Free Conjugated Molecules toward Efficient Persistent Room-Temperature Phosphorescence" *S. Hirata, *J. Phys. Chem. Lett.*, **9**, 4251-4259 (2018).

▲4, "Ultralong-Lived Room Temperature Triplet Excitons: Molecular Persistent Room Temperature Phosphorescence and Nonlinear Optical Characteristics with Continuous Irradiation" *S. Hirata, *J. Mat. Chem. C*, **6**, 11785-11794 (2018).

A03 (公募・岩村(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件、内 2 件は領域内共同研究先 A01-03 山野井に記載)

◎▲1, "Chiral Sensing Using Circularly Polarized Luminescence of Bis (phenanthroline dicarboxylic acid) Eu(III) Complex Induced by Allosteric-type Interaction with Amino Acid Molecules" *M. Iwamura, M. Fujii, A. Yamada, H. Koike, K. Nozaki, *Chem. Asian J.*, **14**, 561-567 (2019).

◎▲2, "Metal-Metal Bond Formations in [Au(CN)₂]_n (n = 3, 4, 5) Oligomers in Water Identified by Coherent Nuclear Wavepacket Motions" *M. Iwamura, K. Kimoto, K. Nozaki, H. Kuramochi, S. Takeuchi, T. Tahara, *J. Phys. Chem. Lett.*, **9**, 7085-7089 (2018).

A03 (公募・尾崎(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

▲1, "Homo/hetero-epitaxial growth in tetrabenzotriazaporphyrin derivative thin film fabricated by contact freezing method with seed crystal", T. Kitagawa, M. Fujisaki, S. Nagano, N. Tohnai, *A. Fujii, *M. Ozaki, *Appl. Phys. Exp.*, **12**, 051011 (2019).

▲2, "Uniaxial orientation of poly(3-hexylthiophene) thin films fabricated by the bar-coating method" Y. Yabuuchi, G. Uzurano, M. Nakatani, *A. Fujii, *M. Ozaki, *Jap. J. Appl. Phys.*, **58**, SBBG04-1-5 (2019).

▲3, "Carrier transport and device applications of the organic semiconductor based on liquid crystalline non-peripheral octaalkyl phthalocyanine" *M. Ozaki, M. Yoneya, Y. Shimizu, A. Fujii, *Liq. Cryst.*, **45**, 2376-2389 (2018).

A03 (公募・中嶋(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件)

◎▲1, "Terahertz Radiation from Combined Metallic Slit Arrays" *D. Li, *M. Nakajima, M. Tani, J. Yang, H. Kitahara, M. Hashida, M. Asakawa, W. Liu, Y. Wei and Z. Yang, *Sci. Rep.*, **9**, 6804 (2019).

◎▲2, "Terahertz generation measurements of multilayered GeTe-Sb₂Te₃ phase change materials" *K. Makino, K. Kato, Y. Saito, P. Fons, A. V. Kolobov, J. Tominaga, T. Nakano, *M. Nakajima, *Opt. Lett.*, **44**, 1355-1358 (2019).

◎▲3, "Magnetically and electrically polarization-tunable THz emitter with the integrated ferromagnetic heterostructure and large birefringence liquid crystal" H. Qiu, L. Wang, Z. Shen, K. Kato, N. N. Sarukura, M. Yoshimura, W. Hu, Y. Lu, *M. Nakajima, *Appl. Phys. Exp.*, **11**, 092101-1-4 (2018).

A03 (公募・立川(代表)) 計 4 件 (査読有 4 件、内 1 件は領域内共同研究先 A02 公募 伊藤に記載)

◎▲1, "Several Orders of Magnitude Difference in Charge-Transfer Kinetics Induced by Localized Trapped Charges on Mixed-Halide Perovskites" I. Karimata, K. Ohta, Y. Kobori, *T. Tachikawa, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **10**, 37057-37066 (2018).

◎▲2, "Mechanistic Insights into Photochemical Reactions on CH₃NH₃PbBr₃ Perovskite Nanoparticles from Single-Particle Photoluminescence Spectroscopy" Y. Kimura, I. Karimata, Y. Kobori, *T. Tachikawa, *ChemNanoMat*, **5**, 340-345 (2019).

◎▲3, "Rapid Formation of Small Mixed-Valence Luminescent Silver Clusters via Cation-Coupled Electron-Transfer in Redox-Active Porous Ionic Crystal Based on Dodecamolybdo-phosphate" *S. Uchida, T. Okunaga, Y. Harada, S. Magira, Y. Noda, T. Mizuno, *T. Tachikawa, *Nanoscale*, **11**, 5460-5466 (2019).

A03 (公募・田所(代表)) 計 2 件 (査読有 2 件)

▲1, "Evidence of Proton-Coupled Mixed-Valency by Electrochemical Behavior on Transition Metal Complex Dimers Bridged by two Ag⁺ Ions" *M. Tadokoro, K. Isogai, S. Harada, T. Kouchi, T. Yamane, T. Sugaya, H. Kamebuchi, *Dalton Trans.*, **48**, 535-548 (2018).

▲2, "Dynamic Water Nanotube Cluster Stabilized in Molecule-Based Hydrophilic Nanoporous Crystal with New Organic Spacers" Y. Ohata, K. Takaya, T. Sugaya, H. Kamebuchi, *M. Tadokoro, *Bull. Chem. Soc. Jap.*, **92**, 655-660 (2019).

A03 (公募・石川(代表)) 計 3 件 (査読有 3 件、未記載 2 件)

▲1, "Versatile Coordination Architectures of Products Generated by In Situ Reaction of Doubly Bis(2-pyridyl)pyrazolate Bridged Dinuclear Copper(II) Complex with Tetracyanoethylene" *R. Ishikawa, S. Ueno, Y. Hamatake, Y. Horii, Y. Miyazaki, M. Nakano, T. Noda, M. Uematsu, S. Kawata, *CrystalEngComm*, **21**, 1886-1894, (2019).

A03 (公募・木下 (代表)) 計 1 件 (査読有 1 件)

▲1, "Solid-state dye-sensitized solar cells using (CH₃NH₃)₂SnI₆ perovskite with wideband sensitizer" *T. Kinoshita, R. Kakeno, H. Segawa, *Chem. Lett.*, in press.

<ホームページ・新聞等>

- ・2017 年 9 月に HP (<https://www.softcrystal.org/>) 開設。ニュース・トピックス等を随時配信。
- ・第 4 回公開シンポジウムにおいてプレスリリース、共同通信社「科学スコープ」に「ソフトクリスタル」が掲載予定。
- ・A01 高見澤聡「有機超塑性現象を発見」をプレスリリース、「毎日新聞」等 4 誌 WEB 版に掲載 (2018.10.12)
- ・A02 伊藤肇「固体状態で進行するクロスカップリング反応を開発」が NHK、日経産業新聞、日刊工業新聞で報道 (2019.1.11)。
- ・A03 長谷川美貴、山中正道「レアアースの直線偏光発光の仕組み解明」が「讀賣新聞」等オンラインニュースに掲載 (2019.2.1)。
- ・A03 内橋貴之「分子の自己組織化リアルタイム観察」が「化学工業日報」「日本経済新聞」に掲載 (2018.11.7-25)。
- ・A03 石井和之「蛍光バイオイメージング技術開発」が「日経新聞」及び多数の WEB ニュースに掲載 (2018.1.24-25)。

<主催シンポジウム等>

- ・公開シンポジウム (第 1 回 2017.9.25、第 2 回 2018.5.25、第 3 回 2019.2.1、第 4 回 2019.4.26)
- ・国際シンポジウム (第 1 回 2018.7.30、第 2 回 2019.7.12-14(準備中))、その他、共催、協賛 6 件

<アウトリーチ活動>

- ・ニュースレター (年 3 回) No.1~6 (上記 WEB ページおよび冊子体各 200 部発行)
- ・A01 加藤昌子「結晶なのにやわらかい、光るソフトクリスタルの七変化」出前授業 (2019.2.22) 等 3 件。班員による出前授業等 30 件以上。
- ・A02 平野誉「光化学応用講座 2018—光機能性結晶材料の新展開：基礎と応用の先端科学」を一般向けに開催 (2018.11.5)。
- ・A03 長谷川靖哉「相転移を示す希土類錯体」を北海道放送アグリ王国北海道 NEXT にテレビ出演 (2019.4.13)。

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。

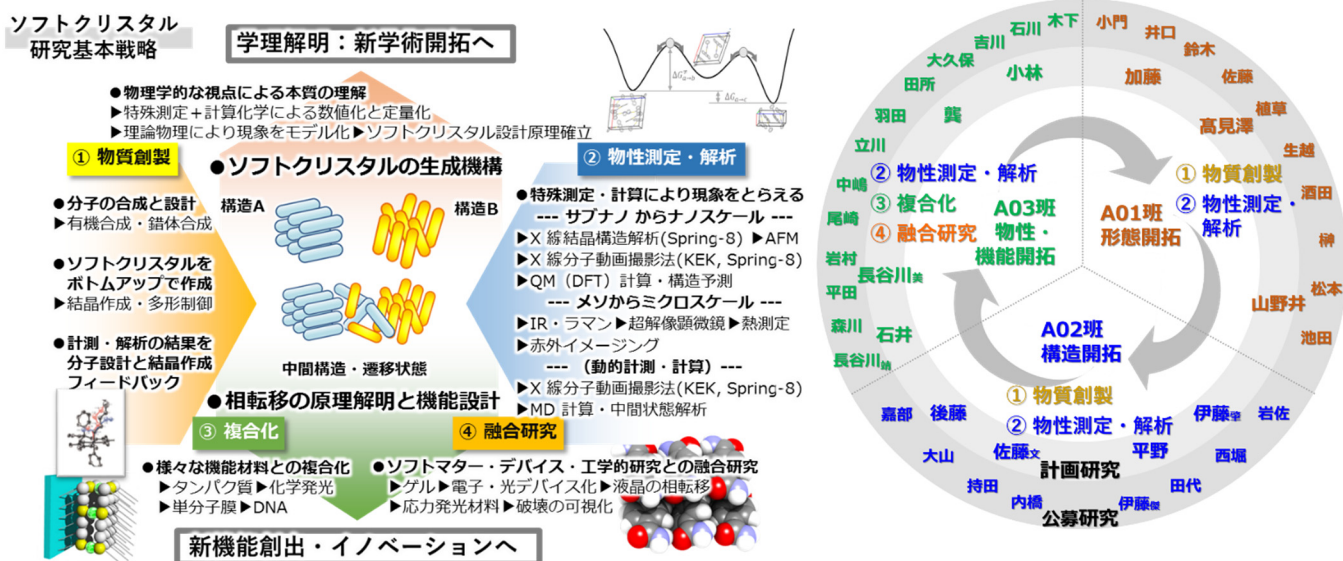
領域内の計画研究及び公募研究を含んだ研究組織と領域において設定している各研究項目との関係

本領域の研究目的は、ソフトクリスタルの学理を解明し、その機能を開拓することにある。参画する研究者が連携して、①物質創製、②物性測定・解析、③複合化、④融合研究の観点から戦略的に取り組んでいる（下図）。

本研究領域を円滑に推進するために、3つの研究項目を設けている。A01 班の計画研究では、ソフトクリスタル形態開拓を研究項目とし、d-d 相互作用、d- π 相互作用に基づいた低刺激応答性ソフトクリスタル研究に実績のある加藤を班長とし、有機結晶において初めて超弾性現象を発見した高見澤、及び溶媒処理により第二次高調波発生（SHG）に対する応答が変化する発光性有機ケイ素分子の創製研究に実績のある山野井により計画研究を構成した。また、計画研究のみではカバーできない斬新な化合物群を有する小門・井口・鈴木・佐藤弘志・植草・生越・酒田・松本・池田、理論的研究を行う榊が公募研究として加入し、独創的なソフトクリスタル形態開拓研究を行っている。

A02 班の計画研究では、ソフトクリスタルの構造開拓を研究項目とし、ドミノ型相転移を示すソフトクリスタル研究に実績のある伊藤を班長とし、化学発光研究に実績のある平野、X 線分光による動的挙動追跡に優れた技術を有する佐藤文菜と、結晶構造予測計算に実績のある後藤により計画研究を構成した。また、計画研究のみではカバーできない斬新なソフトクリスタル測定に関する研究を行う西堀・伊藤・内橋、独創的な生成機構・動的挙動解明を行う田代・大山・持田・嘉部、理論的研究を行う岩佐が公募研究として加入し、計算化学と連動した生成機構・動的挙動解明に基づくソフトクリスタルの構造開拓研究を行っている。

A03 班の計画研究では、ソフトクリスタルの物性・機能開拓を研究項目とし、錯体結晶—高分子複合体の応用研究に実績のある石井を班長とし、発光性希土類錯体と機能性物質群の複合化研究を行う長谷川美貴、ハイドロゲル研究の第一人である龔、像形成機能材料に実績を有する小林、さらに研究分担者として、相転移理論を専門とする高江、応力発光材料研究、赤外分光に実績のある徐、恩田等により計画研究を構成した。また、計画研究のみではカバーできない、光・電気・磁気等における機能性材料の応用研究に関して実績のある長谷川靖哉・平田・尾崎・田所・大久保・吉川・石川・木下、独創的な測定・実験手段を有する森川・岩村・中嶋・立川・羽田が公募研究として加入し、ソフトクリスタルの物性・機能開拓を行っている。



平成 29 年度：計画研究内共同研究の促進と公募研究を募るためのアウトリーチ活動

1. 領域発足直後に開催された領域全体会議（2017/9/25）では、共同研究を促進する項目（提供できるサンプル、行ってもらいたい測定、提供できる測定、測定したいサンプル、提供できる技術）を含めた研究内容紹介を行った。
2. 既に研究領域がある程度確立している発展領域とは異なり、全く新しい研究領域の立ち上げであったため、公募へ数多く応募してもらうために、第一回公開シンポジウム開催は、各種メーリングリスト（錯体化学会、光化学協会、分子科学会、日本物理学会領域 7 など）へのメール送付、各種討論会（光化学討論会、分子科学討論会、錯体化学会討論会など）へのフライヤー設置等により案内した。結果として、当初の予想を上回る 140 名強の参加者のもとシンポジウムは開催され、本領域の意義やミッションの説明と、多くの質問や意見に基づく活発な議論により、領域全体への理解を促進した。
3. 年度末に開催された領域全体会議（2018/3/5-7）では、班会議の議論とともに、研究分担者によるポスター発表、及び研究代表者による口頭発表による研究内容紹介を行い、共同研究の促進をはかった。

平成 30 年度以降：公募研究も含めた領域内共同研究の促進

・年度初めに開催された公開シンポジウム・領域全体会議（2018/5/25-26）では、計画研究の代表者が口頭発表で研究紹介することで、領域全体の方向性を共有するとともに、公募研究の研究代表者によるポスター発表、及びポスターをまとめた資料配布を行い、お互いの研究を理解する機会を設けた。

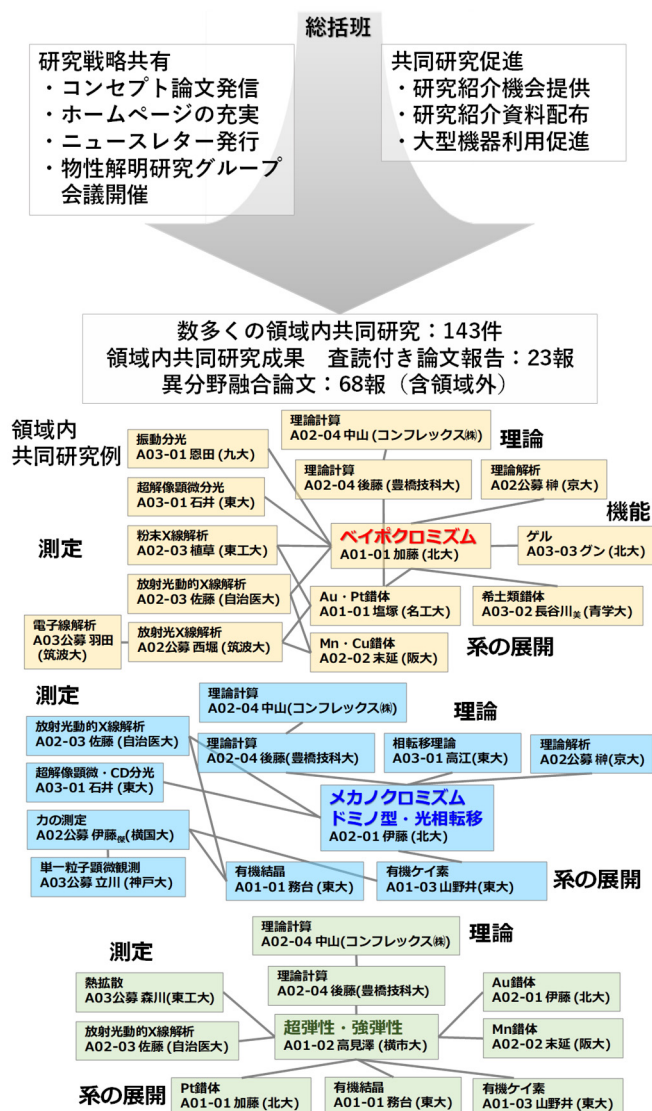
1. 領域内共同研究の促進を目的として、3 度の領域会議を開催した（2018/9/7、10/12、11/6）。本会議では、公募研究の代表者と計画研究の分担者、全員に口頭発表の機会を設け、お互いの研究内容の理解増進をはかった。また、直後に意見交換会を行うことで、共同研究について話し合う機会も設けた。

2. ソフトクリスタル物性解明研究グループ会議を 3 回開催（2018/5/25、2019/2/1、4/26）し、それぞれの研究が総花的にならないように、領域が目指すコンセプト、学理解明のための戦略、機能発現のための方策を共有した。

3. 公開シンポジウム・領域全体会議（2019/2/1-2、4/26-27）において、全ての研究代表者（2 回以上）、研究分担者に口頭発表の機会を設け、研究の進捗状況報告、及び意見を交換する機会を設けることで、更なる共同研究促進をはかった。

4. 錯体化学国際会議（2019/7/31、ICCC2018 のセッション 09 New aspects of photofunctional metal complexes）、光化学応用講座 2018（2019/11/5、光機能性結晶材料の新展開：基礎と応用の先端科学）、日本化学会春季年会（2019/3/19、特別企画「機能性をもつ柔らかな分子結晶の新展開」）において研究成果を発表するとともに、意見交換の機会も設けることで共同研究を促進した。

現状における領域内共同研究は 143 件であり、例えば、主要な研究対象となるベイポクロミズム（オレンジ）、メカノクロミズム（青）、超弾性（緑）をキーワードに共同研究ネットワークが形成されていることが、右図からわかる。この他にも、各課題間および研究者間の多点的な共同研究が活発に進行している。領域内共同研究による査読付き英語論文は既に 23 報、分野融合研究論文は 68 報となっており（6/1 現在）、今後、加速的に成果が顕在化することが期待される。



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。

1. 新学術領域研究「ソフトクリスタル」若手会

三十代の助教クラスの研究者で構成された若手活性化推進委員会（関 朋宏（A02 班、北大院工）・村田 慧（A03 班、東大生研）・吉田将己（A01 班、北大院理））を中心に、領域会議の開催前日に若手会（インキュベーションミーティング）を実施している。若手研究者育成の観点から、若手の自主運営を基本として総括班が支援を行っている。具体的には、第1回（2018.3.7 静岡）は、配座空間探索プログラム“CONFLEX”を使用した結晶計算の基礎と方法に関する講習会を開催し、コンプレックス株式会社中山尚史博士、小畑繁昭博士にご講演いただいた。第2回（2018.5.24 札幌）は田代省平助教（東大）・関智弘助教（北大）、第3回（2019.1.31 大阪）は嘉部量太助教（九大）・井口弘章助教（東北大）・羽田真毅准教授（筑波大）を招き、自身の研究について、基礎的な内容を含めてご講演いただいた。その際、これまでの研究の軌跡や若手研究者・学生へのメッセージを出来るだけ含めるように依頼し、ソフトクリスタルへの理解を深めるとともに、若手研究者・学生が自身のキャリアパスを考えるきっかけとなるように会の運営を支援している。第4回は、2019年7月11日に東京にて開催予定である。

2. 海外派遣：本新学術領域ソフトクリスタルに所属する研究者、PD および学生（博士）を対象に、国際共同研究に関わる渡航に限った海外派遣を実施している。

① 尾形 周平（青学大院理工・長谷川美貴研・DC2）、渡航先：Prof. Mir Wais Hosseini, Université de Strasbourg Institut（フランス）、滞在期間：2017年12月7日～2018年3月9日、滞在目的あるいは共同研究課題等：Development of composite crystals using hetero lanthanide complexes as luminescent tectons

② 梁 磐儀（北海道大学総合化学院・加藤昌子研・DC3）、渡航先：Prof. Peter Ford, University of California, Santa Barbara（米国）、滞在期間：2018年1月28日～2018年3月28日、滞在目的あるいは共同研究課題等：光応答性銅（I）錯体結晶の合成と反応

③ 陳 旻究（北大総合化学院・伊藤肇研・DC2）、渡航先：Prof. Miguel A. Garcia-Garibay, University of California Los Angeles（米国）、滞在期間：2018年2月1日～2018年3月20日、滞在目的あるいは共同研究課題等：Development of Newly Designed Luminescent Solid-State Materials using Amphidynamic Crystals and Gold(I) Complex → 北大 特任助教に採用、Prof. Garcia-Garibay を国際シンポジウムに招待。

④ 服部 伸吾（東大生研・石井和之研・特任研究員）、渡航先：Prof. Thierry Verbiest, KU Leuven（ベルギー）、滞在期間：2018年9月30日～2018年12月23日、滞在目的あるいは共同研究課題等：キラル分子の分光学的研究 → 横浜市立大 助教に採用、*J. Phys. Chem. B* に成果掲載。

⑤ 劉 芽久哉（東工大院・森川淳子研・DC2）、渡航先：Dr. Vivek Pachauri, RWTH Aachen University（ドイツ）、滞在期間：2019年3月19日～3月30日、滞在目的あるいは共同研究課題等：Design and manufacture the nanoscale field effect transistors-type temperature sensor for the measurement of heat transfer properties of soft crystals

⑥ 南 晴貴（千葉大院工・小林範久研・DC2）、渡航先：Prof. Pierre-Henri Aubert, Cergy Pontise University（フランス）、滞在期間：2019年4月14日～2019年7月20日、滞在目的あるいは共同研究課題等：高分子電解質を用いた電気化学発光素子の構築及び特性評価

3. 若手研究者の受賞やステップアップなど

本新学術領域の研究代表者・分担者の研究室の学生・研究員・若手スタッフの受賞件数は、73件（内国際シンポジウムなど20件）である（6/1 現在）。ステップアップの例を以下に挙げる。

① 石井あゆみ（2017/11/1 青学大理工 助教、JST さきがけ採択 → 2018/4/1 桐蔭横浜大 特任講師）

② 佐藤文菜（2018/1/1 自治医大医 助教 → 講師）

③ 尾形周平（2018/4/1 青学大理工 助教採用）

④ 常安翔太（2018/4/1 東京工芸大工 助教採用）

⑤ 服部伸吾（2018/4/1 東大生研特任研究員採用、2019/4/1 横浜市大 助教採用）

⑥ 中西貴之（2018/4/1 北大 助教 → 東京理科大 講師）

⑦ 酒田陽子（2018/10/1 金沢大理工 助教 → 准教授）

⑧ 羽田真毅（2019/1/1 岡山大 助教 → 筑波大 准教授）

⑨ 尾本賢一郎（2019/2/1 東大 博士研究員 → 奈良先端科技大院 特任助教）

⑩ 重田泰宏（2019/3/1 北大院理 JSPS 研究員 → 金沢大ナノマテリアル研 特任助教）

⑪ 鈴木康介（2019/6/1 東大 講師 → 東大 准教授）

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. 大型設備の導入と活用状況（A01-01 研究費：6,069 万円、A03-01 研究費：2,993 万円）

平成 29 年度、当初の予定通り、共通性が高く、結晶構造や分子構造決定のために必要不可欠である単結晶 X 線構造解析装置、及び核磁気共鳴装置を新たに導入して配備した。最新鋭の単結晶 X 線構造解析装置の導入により、微少結晶（0.1 mm 程度の微少結晶）が得られれば数時間で構造を明らかにすることができるので、他の分光学的手段を待たずしてまず X 線測定を試してみることができるようになった。これより、合成した有機結晶や金属錯体結晶の三次元構造決定が格段に進み、効率的に研究を進めることができた。一方、試料全体の純度や異性体の混在を確認するためには、今回導入した核磁気共鳴装置が必要不可欠である。両装置は、物質合成において有効活用されている。これらの装置は領域全体で共用されており、他大学の領域研究者からの測定依頼にも応じている。

平成 30 年度には、主に生細胞研究に用いられている超解像蛍光顕微鏡を、ソフトクリスタル研究に適した仕様に変更して導入した。導入にあたっては、特別な色素を必要とせず、分子性結晶全体を同時測定できる 3D-SIM 技術に焦点を絞って、丁寧な検討（励起波長・検出波長・超解像化・マニピュレート等）を行った。ベイポクロミズム、温度変化測定に対応できるように改良を行い、①ベイポクロミズム微結晶の蒸気における構造変化、②マニピュレータ刺激によるメカノクロミズム、③温度変化によるゲル相分離等の測定を共同研究により行っている。

2. 領域全体会議・領域会議の開催による領域内共同研究の促進（総括班経費：211 万円）

領域全体の方向性の共有とともに、共同研究を推進するために、5 回の領域全体会議を開催した。更に、公募研究の代表者と計画研究の分担者、全員に口頭発表の機会を設けるために、平成 30 年度 9 月～11 月にかけて 3 回の領域会議を集中的に開催した。これらの会議では、直後に意見交換会を行うことで、共同研究について話し合う機会を設けた。これにより、領域内共同研究 143 件が既に遂行されており、領域内共同研究による査読付き英語論文も 23 報が報告されている。

3. 国際共同研究に関わる渡航に限った若手研究者の海外派遣を実施（総括班経費：173 万円）

本新学術領域ソフトクリスタルに所属する若手研究者、PD および博士課程学生を対象に、計 6 名の海外派遣（フランス、米国、ベルギー、ドイツ）を実施した（詳細は若手研究者の育成に係る取組状況に記載）。これらの活動は、国際共同研究論文や、国際的に著名な研究者の国際シンポジウム招待等の国際ネットワーク強化につながっている。

4. 公開シンポジウム・国際シンポジウムの開催（総括班経費：387 万円）

研究領域の説明、及び研究成果の公表を行うために、公開シンポジウムを 4 回、国際シンポジウムを 1 回開催した。これらシンポジウムでは、評価者も招聘し、適切に評価していただいた。

5. 各種アウトリーチ活動（総括班経費：325 万円）

ホームページの作成と定期的更新、ニュースレターの定期的な発行、広報グッズ（バナー、クリアファイル、リーフレットなど）の作成と配布、学会での展示等の各種アウトリーチ活動を行った。

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。

本領域に適切な助言・評価ができる国内外の研究者から構成される評価者を設置しており、公開シンポジウムとそれに連結した領域全体会議、国際シンポジウムに来ていただき、それぞれのシンポジウムや会議後に評価をいただく体制をとっている。各評価者による評価コメントは以下の通りである。

徳丸克己 筑波大学名誉教授：本研究は、結晶構造などの秩序のある物質が、種々の力学的刺激や環境の変化に対し、どのように応答するかという新しい観点から研究を進め、そこに潜在する学理を究明しようとするもので、その意義は極めて大きい。実質的に発足してから約2年を経過したところであるが、探索的な研究とともに、ソフトクリスタルの本性に迫るような、いつかの顕著な研究が進められている。本領域の運営については、代表のリーダーシップのもと、ソフトクリスタルという新しい観点での物質の多様な挙動を支配する原理を解明しつつあり、さらに、ここに結集している異なる分野間の研究者の研究交流が進められている印象である。今後の研究や活動の計画については、すでに確定している方針に沿って、研究者の自由な発想により、時として物質に潜在化しているポテンシャルを見える形にしながら、ソフトクリスタルという新概念の形成に向い進んでいるように見受けられる。全体として研究は着実に進みつつあると思われる。今後、ソフトクリスタルならではの特徴をさらに明らかにする事例に遭遇し、あるいは、それを発掘し、その学理を解明していくことを期待したい。

井上晴夫 首都大学東京特任教授：本領域では小分子（蒸気）の結晶格子空間への侵入を摂動として発光挙動の変化が誘起される興味深い現象を領域代表者などが見出したことを契機に、機械刺激、温度刺激などの摂動による発光などの物性変化、形態変化事例が次々に見出されている。また異分子侵入の逆過程としての溶媒分子の排出による結晶格子形成過程での異なる力学摂動による異なる結晶構造の発現と興味深い物性発現も見出されている。本領域発足後も固相状態でのクロスカップリング反応の発見など新しい事例の発見が相次いでいる。更なる新しい事例発見の蓄積と分類・整理により、従来見出されてきた相転移現象とどこが異なるのか等の学理解明への研究展開も大いに期待できる。領域運営としては、研究代表者・班長などによる柔軟なリーダーシップに触発されて、多くの班内、班間共同研究が実施されている。「ソフトクリスタルの概念」の国際学術発信（Chem. Eur. J. 2019）にも積極的に取り組んでいることも高く評価される。既に豊富な事例が蓄積された既存領域で単に多くの論文報告を重ねる発展領域とは異なり、本領域では新しい現象、事例の発見・蓄積・分類・整理と共にそれらをどの様に学理展開できるかに研究評価のポイントを置くべきであろう。これまでの領域展開を見る限り、本領域はまさに新しい学術領域を開拓しようとする取り組みとして高く評価できる。

北川 進 京都大学 特別教授：参画研究者それぞれが着実に成果をあげつつある。一方、インパクトを持つ成果という点、新しい概念を生み出す成果については2、3の研究者が進めつつあるが、領域全体としての勢いのある流れを望むところである。後半に向けて加速度的に創出されるものと期待したい。領域、国内外の協同研究活動、広報活動、等々考えられることは十分行われている。領域代表はじめ計画班員の努力の賜物と思われ鋭意努力されることを期待したい。努力目標として、加藤領域代表および班長が、新しいコンセプト、芽を見出し、自分の研究にとりいれていくことが重要と思われる。領域を代表するメンバーが、象徴的な仕事をするのが本領域の評価を上げる。これまででできない構造、機能など驚きの成果を誰かが進めてほしい。「Soft Crystal」を各自の論文にいれる。そのため、簡潔な定義を計画班が書き出し、班員につかってもらうことで、海外へ働きかけることも重要。各班員がそれぞれの学会、もしくは異分野の学会に参加して発表、ソフトクリスタルのコンセプト、代表的な物質群を発表していくことが有効な方法と考えられる。

西原寛 東京大学大学院理学系研究科 教授：結晶という高密度で秩序だった構造でありながら、刺激応答して構造の柔軟性を示すソフトクリスタルというコンセプトは斬新であり、いろいろな研究の構想を誘発させる。既に見出されている現象を集約するところから本領域はスタートしたが、それらを整理して学理を探究すること及びより高次の現象の発見と応用展開を構想していることが明確に領域として示され、わかりやすくかつ良く組み立てられた研究目標であると思う。計画班員が先導して、インパクトのある具体的なソフトクリスタルの例を示し、且つ積極的に共同研究をすすめることで、公募班員の研究が非常に活発になっていると思う。公募班にはバランス良く研究者が加わっていることによって、共同研究が極めて順調に進んでいることが見受けられる。領域代表を中心に、総括班を構成する計画班員が一体となって領域運営に努めて情報収集や発信を行っている。領域会議や国際会議におけるシンポジウムも適切な頻度で行われていて、会議におけるディスカッションが活発である。最近、Chem. Eur. J.に掲載されたコンセプト論文によって、国際的な認知度も大きく高まることが予想され、国内外への発信に積極的に努めている様子が伺える。領域発足当時は、どの方向に研究領域が向かうのかが見えにくいことがあったが、従来の結晶の概念を超えた基礎科学をつくることに焦点が絞られて、領域目標がクリアになってきた。国際的にインパクトのある領域に発展することが期待できる。

橋本和仁 物質・材料研究機構 理事長：本新学術領域では、マクロな弱い刺激によって容易に結晶構造変化が起こり、目に見える物性変化を示す特徴を持つ物質群をソフトクリスタルと捉えて新しい学術領域の創成に取り組んでいる。論文成果としては新学術領域が期待すべきレベルにあると判断する。一方、領域目標として、学理の解明と新機能の創出の両面が並列的に設定されているが、方向性については十分に考慮することが肝要である。基礎研究においては、純粋な学術基礎研究と、応用を視野に入れた課題解決型の目的基礎研究がありうる。科研費は研究者個人の自由発想研究のための研究資金であり、そのテーマ設定は個人の自由裁量に任されるが、しかし、国民の税金が原資になっているのであるから、成果は国民に還元されるべき可能性のあるものでなければならない。すなわち、学術研究においては真に学術的に価値があり、人々の好奇心を満足させる可能性のある研究が求められる。一方、目的基礎研究は定められた目的（出口）を達成するために役立つ可能性のある研究であるべきである。本学術領域の研究テーマ、および研究成果をここに見てみると前述の点から中途半端なものが少なくないように思える。どちらの観点から自身の研究に価値がある（国民に還元できる）のか目指すのか、研究意義をより明確意識しながら参画研究者全員がさらに真剣に研究に取り組むことを期待する。

Peter C. Ford, Distinguishes Professor of Chemistry, UC Santa Barbara, USA: (1) Aim of the Project: It is clear that the Soft Crystals team of researchers has identified common interests for collaborative studies into the responses of the optical properties of ordered molecular and supramolecular systems to the subtle macroscopic effects that are often ignored. This is clearly a topic of great importance and, as I remarked during the symposium, one can draw some analogy to biochemistry where key biological functions are controlled, not simply by molecular structures, but also by much more subtle, tertiary properties and effects. Your team has identified an important scientific challenge that has the potential to offer valuable new paradigms for the design and function of new materials. (2) Present research activities: The talks and research presented at the “1st International Symposium on Soft Crystals” clearly demonstrate the impressive advances that the members of this consortium are already making. You have built an incredible team of researchers, and it is clear that you are taking the discovery of these soft crystal phenomena from serendipity to objective science. The number of individuals, both senior investigators and early career researchers (students etc.) is very large and thus it will be very difficult to manage the collaborative projects effectively from the top. This has been addressed by dividing the team into the groups led by Prof. Kato, by Prof. Ito and by Prof. Ishii. The challenge for these leaders is to keep the focus of the overall team on common goals and on the cross fertilization that occurs with true collaborative studies. I am very impressed by the discoveries already reported in the Symposium and look forward to seeing more exciting discoveries. (3) Future research plans: I’m reluctant to make strong suggestions in this regard because I sense that the team is already moving in the right directions. It was already mentioned in the symposium that it is important to have a strong theoretical component to the project, since theory and computational studies can help evaluate various proposed mechanisms. Furthermore, Theory can strengthen (or disprove) interpretations of key phenomena by providing more quantitative energy landscapes for meta-stable and stable states. In addition, kinetics studies, although difficult to do with such nonlinear processes can provide insight into the mechanisms of dynamic transformations. I think the Soft Crystals group is making great progress.

Vivian Wing-Wah Yam, Professor of Chemistry, The University of Hong Kong, China: The project brings together researchers of complementary expertise and synergy together to work towards a common goal of Soft Crystals. The project is highly original and innovative, working on frontiers area involving an understanding of intermolecular forces. The work also is expected to lead to innovative smart material that can respond to stimuli and charges in the environment. The coming together of metal complex coordination chemists, organic chemists, physical chemists and computational chemists is invaluable to the success of the project. Incorporation of young researchers also adds value to the project. The project has been progressing in excellent manner under the leadership of Prof. Masako Kato.

Mir Wais Hosseini, Professor of Chemistry, The University of Strasbourg, CNRS, France: The research project entitled Soft Crystals is an outstanding approach in chemistry and material sciences. Especially, the vapochromism and mechanochromism based on coordination compound are of high interest. There are many possibilities to be explored and exploited by combining experimental and theoretical approaches in this domain. The leader of Soft Crystals Project, Professor Masako Kato, is an outstanding researcher and one of the pioneers in the domain of vapochromic behavior of coordination compounds. She has attracted several other researchers in to the project with the aim of developing several collaborations between high standard research teams. Under her strong leadership, the project offers a great opportunity to advance the domain through high quality collaborative research bringing together researchers belonging to different fields. The undertaken research progresses well. This project lies the basis for the international recognition of the Soft Crystals as an innovative domain of research with great opportunities in combining structure-property-function. It is worth noting that, the project strongly supports the integration of young researchers with different backgrounds. The educational side as well as the management of the project are of high quality and interest and should lead to the training of upcoming leaders in this domain. In conclusion, results already obtained within the framework of this project are impressive and of high quality and pave the way to relevant applications.

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。

新しい学理の確立と新しい機能創出に向けた研究領域の推進方策

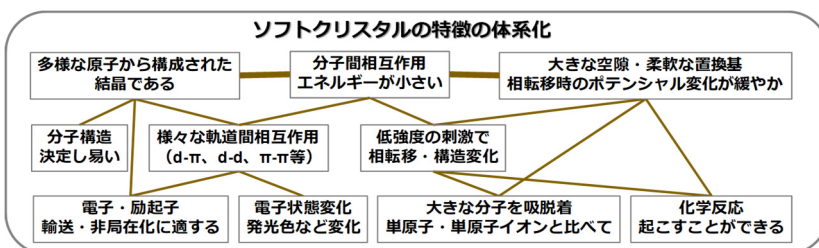
領域全体で目指すことは、ソフトクリスタルに関する新しい学理の確立と新しい機能創出である。これらの達成には分野融合が必須であるが、“ソフトクリスタル”をキーワードとした連携促進の入念な取り組みにより、既に 143 件の共同研究が進行しており、協同体制は築けている。

研究領域立ち上げの動機付けとなった計画研究 加藤・伊藤・高見澤などが見出してきたソフトクリスタルの現象に加え、研究領域立ち上げ後の研究により、ボトムアップ的に数多くの興味深い新現象が見つかってきた。現段階において低強度の刺激と応答の関係から、これらの現象は右表のように分類される。これらの現象は、他の物質群でも観測されることがあるが、ソフトクリスタルの特徴の観点から捉えることで、新しい学理への道筋が見えてくる。

ソフトクリスタルで観測されている刺激と応答の分類

低強度の刺激	カ・擦り	熱	光	小分子
色(発光色)の変化	・メカノクロミズム ・ドミノ型 カ→結晶構造変化→色・発光色変化	・サーモクロミズム カ→結晶構造変化→色・発光色変化	参考 ・フォトクロミズム 光→結晶構造変化→色・発光色変化	・ヘイボクロミズム 分子→結晶構造変化→色・発光色変化
発光	・トリポルミネッセンス(摩擦発光) カ→電子状態変化→発光	・ケミルミネッセンス(化学発光) 熱→化学反応→電子状態変化→発光	参考 ・フォトルミネッセンス 光→発光	—
結晶の大きな動き	・超弾性 ・超塑性 カ→結晶構造変化→結晶動き	・サーモザリエント ・形状記憶 熱→結晶構造変化→結晶動き	・フォトザリエント 光→結晶構造変化→結晶動き	—

現段階におけるソフトクリスタルの特徴は、右図のように体系化される。ソフトクリスタルの利点としては、(1) 結晶であるため、結晶構造解析により、nm オーダーの分子構造変化が精密に追跡しやすいこと、(2)



様々な軌道間相互作用を反映して、 μm オーダーの色変化を顕微鏡観察しやすいこと、(3) 高秩序を利用して、電子・励起子の輸送・非局在化が可能となること等が挙げられる。

一方、機械的刺激による小分子の脱着や化学反応などの通常の結晶では達成できない性質も見つかっている。(1) 結晶でありながらある程度の自由度で分子が動けること、(2) ある程度の大きさを持った分子の吸脱着が可能であること、(3) 結晶内化学反応も起こし得ること等である。これらを、nm オーダー、 μm オーダーの変化を追跡しやすいソフトクリスタルの利点と組み合わせ、理論・計算科学と融合すれば、新しい学理の確立と新機能創出に向けて大きく前進できると考えられる。

新しい学理の確立に関しては、上述したようにソフトクリスタルにおける“様々な現象の分類”と“特徴の体系化”ができつつあるので、これらを大局的に捉え、概念の融合・手法の共有・現象の複合化を行うことで、包括的に新しい学理を構築していく。特に、①様々な観点から物性を評価することで、エネルギーポテンシャルに関する構造・エネルギーに関する知見を求めること、②測定結果を分子動力学や量子化学による計算と対応させること、③理論的アプローチで現象全体を俯瞰すること等を重点的に掘り下げるにより、新しい学理を確立する。

この際、当初計画していた計画研究（時間分解 X 線解析：A02-03 佐藤、赤外分光：恩田、超解像顕微鏡：石井）の測定手段に、公募研究の多様な測定手段（熱測定：森川、摩擦刺激定量法：伊藤潔、XRD：西堀、超高速 AFM：内橋、電子線回折：羽田、一粒子計測：立川、粉末 X 線：植草、時間分解測定：岩村など）を交え、物性の解明を進める。これらの実験結果は、計画研究の分子動力学（後藤）、相転移計算（高江）に、公募研究の電子状態-量子化学計算（榊・岩佐）を加えた理論と照らし合わせる。すなわち、興味深い現象→各種測定→理論的アプローチを行うことより、学理解明に邁進する。現

段階においても、総括班からの共同研究推奨に基づき、A01-02 高見澤が見出した超弾性現象において、A02-04 後藤の分子動力学計算による相転移機構（ポテンシャルエネルギー及び分子構造変化）が解明されている。このような総括班からの共同研究推奨は、既に他の研究対象に対しても積極的に行われている。今後は、ソフトクリスタル物性解明研究グループ会議等において、協同して研究すべき対象を更に明確化するとともに、総括班からのトップダウン的な共同研究推奨を強化しながら、協同による学理解明を試みる。

学理解明とは対照的に、ソフトクリスタルの新しい機能の提案には、多岐にわたるアプローチ、及び Try&Error による最適化が必須である。昨年度から、計画班（電気化学発光：小林、ゲル：グン、繊維：石井）に加え、公募研究（伝導性：井口・大久保、磁性：石川・鈴木、液晶：尾崎、高分子：長谷川靖哉、電気化学：吉川・田所、有機電界発光：嘉部、蓄光：平田、太陽電池：木下など）が加わり、物性測定・機能化の多様性は充実した。今回、ソフトクリスタルにおける“現象の分類”と“特徴の体系化”ができつつあるので、これらをそれぞれの機能化研究と結びつけることで、“低刺激による相転移と相転移の伝染”及び“揺らぎが少ない固体であるため、電子制御に必要である緻密な制御が可能である”等の利点に基づいたイノベーション創出に資する次世代機能性素材の開拓を行う。

領域発足 3 年目となる今年度には、A01～A03 班の各計画研究ではカバーしきれない分野からの独創的・挑戦的な研究を、30 件程度、平成 32～33 年度分として公募する。1 年目の公募では、領域全体をある程度カバーすることができ、領域内共同研究に理解がある研究提案が採択されているが、3 年目の公募においても、本領域の加速度的促進に資する研究提案を適切な審査に基づいて採択する。

国際的ネットワーク構築とイニチアチブ獲得に向けた研究領域の推進方策

国内においては、これまでのアウトリーチ活動全般を通して浸透しつつあると言えるが、今後は、国際的ネットワーク構築とイニチアチブ獲得が重要となってくる。平成 30 年 7 月、関連分野で最大級の国際会議である錯体化学・配位化学の国際会議 International Conference on Coordination Chemistry (43rd ICC, 仙台) が開催されたが、その直前に同じ会場にて第 1 回ソフトクリスタル国際シンポジウムを主催した。参加者は 80 名を超え、立ち見が出るほど盛況であり手応えがあったが、未だ目標達成には十分ではないと言えよう。今年、ヨーロッパ化学協会 ChemPubSoc Europe の主要雑誌 *Chemistry: A European Journal* にコンセプト論文を発表し、ソフトクリスタルの概念を伝えやすい状況となったので、今後は、国際的アウトリーチ活動をより強力に推進していく予定である。

具体的には、歴史ある金属錯体の光化学に関する国際学会 International Symposium on the Photophysics and Photochemistry of Coordination Compounds (ISPPCC2019、令和元年 7 月、香港) の直前に第 2 回ソフトクリスタル国際シンポジウムを成田にて開催し、国内外の光物性と光機能の研究に従事する研究者との融合をはかる。令和二年 12 月には、5 年毎にハワイで開催され、世界中の化学者が集う世界最大規模の環太平洋国際化学会議 (The 2020 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2020)) が開催予定である。この Pacifichem 2020 において、特別セッションを企画(申請中)するとともに、その直前にソフトクリスタルの国際シンポジウム(第 3 回)をハワイで開催し、本新学術領域 3 年半の成果をアピールする予定である。研究期間最終年となる令和三年には、大規模なソフトクリスタルの国際シンポジウムを国内で開催する予定である。この時期までに構築してきた国際的ネットワークを基に、本新学術領域に関わる世界中の研究者をこの国際シンポジウムに結集し、成果をアピールすることで、コミュニティにおけるイニチアチブの獲得、優位性をもった継続的な学際領域の発展に努める。

また、研究成果を広く周知するために、国際的な学術誌におけるソフトクリスタル特集号の執筆・発行を企画し、研究成果を広く周知・拡充する。また、既に Springer から企画依頼が来ている英語書籍の出版も行うことで、国際的なイニチアチブを具現化する。