様 式 Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９ （共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　元 年　６ 月 １４ 日現在

機関番号：１２６０８

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2014～2018

課題番号：２６１０２００１

研究課題名（和文）π造形科学: 電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出

研究課題名（英文）Pi-System Figuration: Control of Electron and Structural Dynamism for Innovative Functions

研究代表者

福島　孝典（Fukushima, Takanori）

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

研究者番号：７０２８１９７０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　95,400,000円

研究成果の概要（和文）：本新学術領域において、総括班は、計画研究と公募研究を総括し、分野間をシームレスにつなぐ真の融合連携を支援するとともに、学術水準の強化、人材育成を牽引した。具体的には、企画・運営グループ、若手研究会グループ、広報・連携支援グループを設け、国内外シンポジウム、合宿形式での領域全体会議、若手研究会、コロキウムなどの多岐にわたる研究推進、支援活動を行った。評価グループを設け、学術水準向上や若手育成に関する評価と助言を運営に反映させた。アウトリーチ活動として、雑誌「現代化学」への記事掲載を毎月行った。「π造形スクール」を開設し、領域内外の研究グループからの学生・研究者との交流と若手育成の支援を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義
総括班の活動により、領域発足時に比べて領域内共同研究が爆発的に増大した。初の試みであったπ造形スクールを通じた共同研究も順調に遂行した。一般誌を通じた情報発信法は、学会関係者からもその斬新さ、インパクト、波及効果に対して非常に高い評判を得ることができた。これらの端的な事実からも、総括班が取り組んできた 5年間の成果は、有機エレクトロニクスといった将来の科学技術イノベーションに通じる物質科学の新学問領域創成につながるものとして、非常に意義深いといえる。

研究成果の概要（英文）：In this project, we summarized research groups, supported many collaboration works, and led the strengthening of academic level and human resource development. Particularly, a planning and management group, a young research group, and a collaboration support group had been established. We also performed various research promotion and support activities such as domestic and international symposia, meetings in the whole groups, young research group, and colloquium. As an outreach activity, we published articles in the magazine "Chemistry Today" every month. The “π-figuration school” was established to support exchanges with students and researchers from research groups inside and outside the group and to support the development of young people.

研究分野：π電子系科学

キーワード：　π電子系科学　有機化学　超分子科学　機能材料　物性理論

１．研究開始当初の背景

昨今、有機エレクトロニクスが隆盛を極め、実用化へ向けた研究が世界中で活発に繰り広げられている。「エレクトロニクスはシリコンを中心とする無機物質の世界」というかつての常識を覆し、この新しい研究領域を開いたのは、π電子系科学の発展である。例えば、有機導体研究の系譜から明らかなように、我が国の研究者が数々のブレークスルーを成し遂げ、この科学分野を先導するとともに、不連続的発展に貢献してきた。しかし、合成・分析技術、そして情報化が格段に進歩した現在、先端技術と強大なマンパワーを享受できる中国をはじめとするアジア各国は急速に研究の速度を向上させ、その結果、有機エレクトロニクスの分野も熾烈な競争にさらされている。この現状に鑑みると、将来の科学技術にとって極めて重要な学術領域であるπ電子系科学を、我が国が引き続き牽引するためには、「数ばかりではなく、質の高い研究」を迅速に推進するしか道はない。本新学術領域はその先駆けとして、「π造形」という、構造美により機能を追求する物質設計の新概念を基盤とし、「合成化学」、「物性科学」、「理論科学」の三学理を貫通させた研究手法により、他の追随を許さないスピードで新機能物質創製を推進することを目標に掲げた。さらに、本領域独自の若手人材育成策も推進することで、未来の科学技術イノベーションに通じる物質科学の新学問領域創成を目指すに至った。

２．研究の目的

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

総括班は、本領域研究を円滑に推進するために、計画・公募研究を総括し、分野間の真の融合連携を支援するとともに、学術水準強化、人材育成に取り組む。この目的のため、企画・運営グループ、若手研究会、広報・連携支援グループ、国際活動支援班、評価班を運営する。

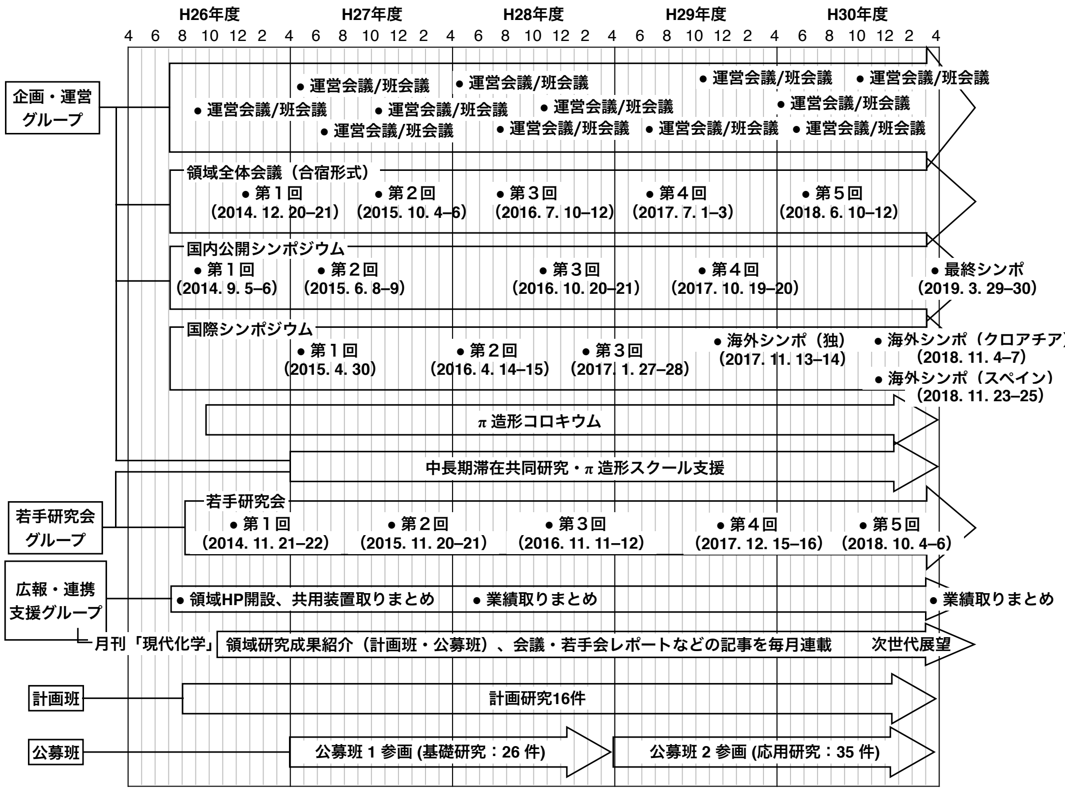
３．研究の方法

総括班は、領域運営のための全体的な方針策定、企画、予算措置、共同研究支援、国際活動支援にあたった。本領域研究における総括班の役割と活動を以下の表に示す。

企画・運営	・領域運営のための全体的な方針策定、企画、予算措置、共同研究支援 ・総括班会議（運営会議)、国内・国際シンポジウム開催 ・若手研究会を支援 ・「π造形スクール」の開設と運営
若手研究会	・若手研究会の組織運営、若手研究会開催 ・企画・運営グループと連携し「π造形スクール」を運営
広報・連携支援	・広報活動と領域内情報共有のためのウェブサイト運営 ・東京化学同人「現代化学」誌上への研究成果発信 ・「語り部」の筆による領域研究内容紹介を含むアウトリーチ活動 ・プレスリリース等による研究成果発信の支援 ・中長期滞在型共同研究による領域内研究者間の連携支援 ・領域内の共有機器情報の収集と情報配信
国際活動支援班（H27 以降）	・計画研究者により構成され、国際共同研究の加速化を目的とした国際共同研究ネットワーク「π-HUB」の構築
評価班	・学術水準向上に向けた評価・助言および領域運営に対する評価・助言 ・若手研究会への助言

上記の施策には、本領域独自の取り組みが多数含まれる。「π造形スクール」は、本領域が創設した重要な若手育成・研究者交流システムの一つであり、領域外を含む異なる研究グループ間や異分野間の価値観の共有を触発する場としての中長期滞在型共同研究（インターンシップ）を推進するもので、主として大学院生や学位取得前後の若手研究者を対象としている。また、本領域独自の広報支援策として、サイエンスライターを「語り部」として領域の研究者や最新の研究成果を紹介するニュースレターを月刊誌「現代化学」に毎月掲載した。会議開催に関する独自の施策としては、2017 年より国際シンポジウムのあり方を見直し、新たな取り組みとして、本領域の研究者集団と、海外の研究所または研究プロジェクトグループの集団とが合同シンポジウムを開催するという「海外遠征型シンポジウム」を実施した。これら「若手育成・人材交流」、「国際活動」「社会発信」の取り組みに加え、合宿形式の領域全体会議を通じて、「π造形」の物質設計概念を領域内研究者全員に浸透させ、研究者間の融合連携の強化を図った。

４．研究成果
本領域で実施した取り組みを、実施時期とともに以下にまとめた。



（１）領域会議・シンポジウム開催および国際会議との連携

【領域全体会議（合宿形式）】

領域内研究者間の相互理解と融合連携を強化する目的で、合宿形式で全員参加型の領域全体会議を年１回開催し、密接かつ開かれた議論の場を提供した。本会議をきっかけとして、多くの領域内共同研究が立ち上がった。また推進中の共同研究においても、本会議が一層の加速化を促す要因となった。本領域の取り組みの中でも最も重要な施策の一つと位置付けられる。

【シンポジウム開催】

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

【国際会議との連携】

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

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

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

（２）若手育成支援
若手研究者の豊かな探求心と感性を基盤として、異分野間での人材・価値観・知見の共有により、複数の学理を身につけた研究者育成を目指した。以下に具体的な活動を示す。
【π造形若手会（合宿形式）の開催】
合宿形式で若手研究者（若手スタッフ・ポスドク・大学院生）のみが参加するクローズドな研究会を年１回開催した。秘密保持契約書を交わした上で未公開の研究内容についても発表を行い、現場を知る研究者間での積極的な情報共有を図るとともに、共同研究の可能性を議論した。
【π造形スクールの運営】
領域外を含む異なる研究グループ間や異分野間の価値観の共有を触発する場として、中長期滞在型共同研究を行うπ造形スクールを開設した。研究期間全体を通じて、計 28 名（国内 12 名；海外 16 名）が本制度を利用して研鑽を積み、分野貫通型研究を実践して成果を挙げた。
【若手研究者のビジビリティー向上の施策】
領域若手研究者の活動内容と実績の外部発信を目的として、π造形若手会 web ページ（http://pi-figuration.jp/foryoung/index.php）を運営した。π造形若手会に参加した学生によるニュースレター（No.1～16）、π造形スクールの体験レポート「国内留学訪問記」、「国外留学訪問記」、および顕著な研究成果をあげた大学院生のインタビュー記事、領域内若手研究者の受賞ニュース等を掲載し、いずれもモチベーション向上に寄与した。また、当該分野における若手のアクティビティを示すべく、日本化学会年会の特別企画、CSJ 化学フェスタ企画など、各種シンポジウムにおける招待講演者としての発表を通して、若手研究者のビジビリティーの向上を積極的に図った。

（３）広報・連携支援
【ニュースレター発信】
総括班付きの広報担当特任研究員として、有機化学美術館をはじめ数多くの著作で知られるサイエンスライター 佐藤健太郎氏を「語り部」として招き、一般市民にもわかりやすい情報発信に努めた。具体的には、佐藤氏が執筆者となり、一般誌「現代化学（東京化学同人者）」に毎月２ページ分、広告記事の形でπ造形科学のニュースレターを発信した（No. 1～56）。「ニュースレターを限られた対象に配布する」という従来の方法ではなく、一般誌に研究成果をわかりやすく連載するこの試みは、アカデミアのみならず多方面から多くの反響があった。
【領域ウェブサイト運営】
本領域の研究成果と活動を広く発信するために、和文と英文の両方で記載したウェブサイト（http://pi-figuration.jp/）を作成し、域の趣旨と目的、領域研究概要、メンバー、研究業績、トピックス一覧、イベント、研究業績、公募研究を公開してきた。シンポジウムの開催に際しては、特設サイトを開設して参加申込み受付を行い、開催後にも詳細が閲覧できるようになっている。研究業績は月に一度更新を行い、論文業績等の最新情報を常時公開している。また、「現代化学」に毎月掲載している佐藤健太郎氏による領域紹介は、ニュースレターとしてウェブサイト上で公開している（http://pi-figuration.jp/newsletter/index.php）。
また、領域ウェブサイト内には、共用装置の詳細と使用時受付担当者を掲載し、設備・装置の円滑な共有化を支援した。その結果、多数の設備・装置が領域内研究者間で共同利用されることとなり、効率的な領域研究推進において重要な役割を果たした。
【アウトリーチ活動】
上記の施策に加え、ソーシャルネットワーキングサービスを通じたリアルタイムでの情報発信、さらに数多くのアウトリーチ活動を行なった。現在までに、①大学・研究所の広告誌・パンフレットへの寄稿 9 件、②一般向けセミナー17 件、③オープンキャンパスを含む小中高生向けセミナーや実験演習 83 件、④サイエンスカフェへの出展 2 件、⑤イベント参加・出展 19 件の活動実績がある。加えて、テレビ報道 16 件、プレスリリース 50 件、新聞報道 80 件、一般雑誌による研究紹介 13 件など、幅広いメディアで領域研究成果を発信した。

（４）国際活動支援
本領域は、π電子系分子機能材料の設計から物性展開までを包括的に、網羅的に進めることのできる世界的にも有数の研究者集団である。そこで、本領域の研究成果を世界に発信するとともに、関連分野の最新情報や知見を集約することを目的に、本領域では平成 27 年度から、計画研究者を支援対象とする国際活動支援班を設けた。本国際活動支援班の活動により、世界に先駆けて知の集積を進め、領域内、領域外の協働研究を通じた国際共同研究ネットワーク（「π-HUB」と呼ぶ）の形成を促進した。結果として、世界 17 カ国、40 機関との国際共同研究が推進され、国際共同研究論文 58 報の成果が生まれた。また、国際活動支援活動は、「π造形」の研究理念を国際的に浸透させるための重要な基盤となった。

（５）学術雑誌における特集号および一般図書
　最新の研究成果とともに、本領域独自の「構造美」を「機能美」と捉える物質設計概念を世界に発信するために、英国王立化学協会（RSC）のオープンアクセス誌「Materials Chemistry Frontiers」で特集号（Themed collection: Pi conjugated system bricolage (figuration) toward functional organic molecular systems）を企画し、総説 3 報と 38 報の論文を発表した。
　また、本新学術領域に関連した一般図書として、佐藤健太郎氏による「すごい分子　世界は六角形でできている（ブルーバックス）」が出版された。当該書籍には、一般向けのπ電子系科学の解説とともに、π造形科学領域で生まれた研究成果が多く紹介されている。

　以上に記載した、総括班による 5 年間の継続的な取り組みにより、領域内の全研究者に融合連携体制が強固なものとなり、理論・合成・計測による分野貫通型研究が極めて円滑に推進された。その証左として、初年度の終了時点で計 37 件であった領域内共同研究は、領域終了時には 170 件にまで大幅に増大した。また、理論研究者から合成研究者への研究提案に基づく共同研究も多く実施され、顕著な成果を挙げている。研究期間を通じ、領域研究者間で「構造美」を「機能美」と考える物質設計概念や三つのπ電子機能の捉え方は浸透しており、これらを基盤として多くの顕著な「新機能」・「新現象」が見出された。結果として、領域内研究者による総発表論文 1271 報（うち領域内共同研究論文 130 報、および国際共同研究加速基金 π-HUB による計画研究者の国際共同研究論文 58 報）の実績を挙げることができた。これらの研究成果に加え、本領域が初めて導入したインターンシップ制度を通じた充実した若手育成、実用化されたまたはその途上の物質系の創出など、いずれも、当初の予想を大きく超えて円滑に領域研究を推進できたと考えている。

５．主な発表論文等
　総括班としての論文発表、学会発表、産業財産権取得は行なっていない。
〔雑誌論文〕（計 0 件）
〔学会発表〕（計 0 件）
〔図書〕（計 0 件）
〔産業財産権〕
○出願状況（計 0 件）
○取得状況（計 0 件）

〔その他〕
　ホームページ等
・新学術領域「π造形科学」ウェブサイト　http://pi-figuration.jp
・新学術領域「π造形科学」若手会ウェブサイト http://pi-figuration.jp/foryoung/index.php
・新学術領域「π造形スクール」「中長期滞在型共同研究」募集サイト
　http://pi-figuration.jp/school/index.php

６．研究組織
(1) 研究分担者
研究分担者氏名：櫻井 英博
ローマ字氏名：Hidehiro Sakurai
所属研究機関名：大阪大学
部局名：工学研究科
職名：教授
研究者番号：00262147

研究分担者氏名：芥川 智行
ローマ字氏名：Tomoyuki Akutagawa
所属研究機関名：東北大学
部局名：多元物質科学研究所
職名：教授
研究者番号：60271631

研究分担者氏名：矢貝 史樹
ローマ字氏名：Shiki Yagai
所属研究機関名：千葉大学
部局名：大学院工学研究科
職名：教授
研究者番号：80344969

(2) 研究協力者
なし