

平成28年度 新学術領域研究（研究領域提案型）中間評価結果（所見）

領域番号	2601	領域略称名	π 造形科学
研究領域名	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		
研究期間	平成26年度～平成30年度		
領域代表者名 (所属等)	福島 孝典 (東京工業大学・科学技術創成研究院・教授)		
領域代表者 からの報告	<p>(1) 研究領域の目的及び意義</p> <p>電子・光物性、磁性などの根源となるπ電子をもつ分子は、基礎化学はもとより、物質科学から生命科学に至る広い分野において極めて重要な役割を果たしている。なかでも、歴史的にブレークスルーをもたらしたπ電子系分子にはシンプルで均整のとれた構造美がある。本領域では、「構造美」を物質設計の基本とし(=π造形)、π電子機能を、π電子に固有な電子・光物性、磁性などの電子機能(Intrinsic-π機能)、運動性(Dynamic-π機能)や摩擦・粘弾性などの機械的特性(Elastic-π機能)という独自の視点から捉え、新物質・新機能の探求と新現象の発掘を目指す。本領域では、合成化学を駆使したπ造形科学の基盤となる新分子骨格の構築(A01)、機能分子の開発と分子集積化技術を駆使した様々な長さスケールでのπ造形システムの構築(A02)、先端計測、素子作製、シミュレーション技術を駆使したπ造形分子・分子集合体の機能予測・設計・解明(A03)を行う三つの班を組織し、「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研究者協働を推進する。本領域研究は、既存の有機デバイスにおける物性値の向上よりむしろ、π電子系に内在する未知の能力を引き出すための基礎学理の創成に焦点を当てている。π造形の物質設計概念に基づく分野貫通型研究により、新たな作動原理に基づく有機エレクトロニクスなど、π電子系物質科学の新しいパラダイムの創出が期待できる。</p>		
	<p>(2) 研究成果の概要</p> <p>研究項目 A01 では、独自の有機合成技術を駆使し、既存の手法では合成できなかったπ分子造形の基盤となる新規分子骨格として、湾曲構造、らせん構造、反芳香族性、三次元芳香族性などの特徴をもつ様々なπ電子系分子ライブラリを構築した。A02 では、溶液～薄膜～単結晶に至る多様な分子集合体におけるナノ～メゾ～マクロスケールのキャリア輸送、発光特性、光応答、強誘電応答などの機能制御に関する研究を進めてきた。A03 は独自の計測評価、素子形成、シミュレーション技術の開発を通じて、π造形分子・システムが示す新現象・新機能を捉えるべく、複合電磁波分光法、電界効果素子法、単分子非弾性トンネル電子分光法、時間分解放射光 X 線回折などの実験手法の開発と平行して、π造形分子・システムの電子状態・構造の解析ならびにシミュレーション法の開発に着手している。「π造形」の物質設計概念はすべての領域研究者に浸透し、合成-計測-理論の分野貫通型研究も当初の予想を大きく上回る進展を見せている。事実、領域発足前の共同研究数はわずか34件であったものが、平成28年6月時点で155件にまで大幅に増大し、計画・公募研究を合わせた総発表論文数は393報、このうち共同研究成果が34報、共同での学会発表103件の成果を挙げている。三つのπ電子機能のうち、Intrinsic-π、Dynamic-πに関しては、新しい現象や機能を示す物質群も多数発掘されるに至っている。π電子機能において新しい概念である Elastic-πについては、それを明確に定義し、世界に認知させるための取り組みを今後も継続的に行う。</p>		

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