

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><u>(1) 研究領域の目的及び意義</u></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。本研究領域では、「構造美」を物質設計の基本とし（=π造形）、π電子機能を、π電子に固有な電子・光物性、磁性などの電子機能（Intrinsic-π機能）とともに、運動性（Dynamic-π機能）や摩擦・粘弾性などの機械的特性（Elastic-π機能）という独自の視点から捉え、新物質・新機能の探求と新現象の発掘を目指す。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3つの班を組織し、「理論シミュレーション・モデル化」\Leftrightarrow「物質創製」\Leftrightarrow「物性計測」の双方向ベクトル型の研究者協働を推進する。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た研究を推進する。π造形の物質設計概念に基づく分野貫通型研究により、新機能・新現象の発掘と、それらを活かした新たな作動原理に基づく有機デバイスなど、π電子系物質科学の新しいパラダイムの創出が期待できる。</p>		
	<p><u>(2) 研究成果の概要</u></p> <p>研究項目 A01 では、先端有機合成技術を駆使し、既存の手法では合成できなかった湾曲、らせん、ベルト、結び目状など様々な造形美を有する独自のπ電子系分子ライブラリの構築、ならびに反芳香族性、三次元芳香族性、二重芳香族性など、芳香族性という有機化学の基本概念を更新する発見を成し遂げ、さらに発光材料として実用化された分子も生まれた。A02 では、ナノ～メゾ構造体や単結晶～薄膜に至る多様な分子集合体の造形を通じ、超長距離構造秩序形成、単結晶様物質における流動性の発現、超分子リビング重合などの新現象の発見に加え、分子運動に基づく新しい強誘電応答機能や、優れたキャリア輸送、発光特性、光応答性を示す数々の新システムが構築された。A03 では、複合電磁波分光法、電界効果素子法、単分子非弾性トンネル電子分光法、時間分解放射光 X 線回折などの独自の計測手法、および電子状態・構造の解析やシミュレーション法の開発により、π造形分子・システムが示す新機能、新現象の発掘に大きく寄与した。「π造形」の物質設計概念はすべての領域研究者に浸透し、「理論シミュレーション・モデル化」\Leftrightarrow「物質創製」\Leftrightarrow「物性計測」の双方向ベクトル型の分野貫通型共同研究も円滑に進行し、結果として、卓越した個人研究と相乗し、豊富で優れた領域内・国際共同研究の実績を挙げた。また、本領域が設定した独自の若手育成プログラムにより、若手研究者や大学院生の躍進が見られた。学理構築に繋がる基礎科学的に重要な知見の集積から社会実装も実現した本領域の取り組みと成果は、当該学問分野を越え、広く関連分野にも多大な貢献をするものと考え</p>		

	られる。
--	------

科学研究費補助金審査部会 における所見	A+ (研究領域の設定目的に照らして、期待以上の成果があった)
	<p> 本研究領域は、π電子系分子・分子集合体におけるπ電子間の相互作用 (Intrinsic-π) を超え、動的特性 (Dynamic-π) と力学・機械的特性 (Elastic-π) といった新たな切り口でπ電子機能を探求することを目的としており、理論と実験の連携により新機能と新物質に関する探索がなされ、数多くの重要な成果が上げられた。特に、分子不斉を持つメビウスの輪構造やお椀型構造等新たなπ電子系分子の創製を実現した成果は、次世代の新しいπ電子系科学創成への手掛かりを与えた点で特筆すべきであり、期待以上の成果があったと言える。 </p> <p> 領域代表者の強いリーダーシップにより、多数の国内外における共同研究を推進することで、研究期間を通じて数多くの学術論文が発表された点も高く評価できる。また、それらの研究成果は研究領域のホームページや広報誌を通じて積極的に公開された。さらには、若手研究者のネットワーク形成を目的とした「若手研究会」や研究領域内・外の研究者を対象としたインターンシッププログラム「π造形スクール」を開設するなど、異分野との価値観共有を推進することで若手人材育成に貢献した点は評価に値する。 </p> <p> 今後は、実験と理論の融合によって新しい学術領域の創成に大きく成功した本研究領域の知見を活用し、当該分野の更なる発展を期待したい。特に、強調された「美しい分子」が、なぜ・どのように際立った特性をもつのかに関する追究に期待したい。 </p>