

領域略称名：ソフトクリスタル
領域番号：2903

令和4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）」
に係る研究成果報告書（研究領域）兼
事後評価報告書

「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4年6月

領域代表者 関西学院大学・生命環境学部・教授・加藤 昌子

目 次

研究組織

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	4

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額	10
4 研究領域の目的及び概要	11
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	13
6 研究目的の達成度及び主な成果	15
7 研究発表の状況	20
8 研究組織の連携体制	25
9 研究費の使用状況	26
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	28
11 若手研究者の育成に関する取組実績	29
12 総括班評価者による評価	30

研究組織

(令和4年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
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 ～ 令和3年度	加藤 昌子	関西学院大学・生命環境学部・教授	2
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 ～ 令和3年度	加藤 昌子	関西学院大学・生命環境学部・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 ～ 令和3年度	高見澤 聡	横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科(八景キャンパス)・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 ～ 令和3年度	山野井 慶徳	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・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 ～ 令和3年度	伊藤 肇	北海道大学・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 ～ 令和3年度	平野 誉	電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授	3
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 ～ 令和3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 ～ 令和3年度	後藤 仁志	豊橋技術科学大学・情報メディア基盤センター・教授	2
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 ～ 令和3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 ～ 令和3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 ～ 令和 3 年度	ゲン 剣萍	北海道大学・先端生命科学 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 ～ 令和 3 年度	小林 範久	千葉大学・大学院工学研 究院・教授	2
総括班・総括班以外の計画研究 計 12 件（廃止を含む）					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 晶転移機構の解明	平成 30 年度 ～ 令和元年度	植草 秀裕	東京工業大学・大学院理 工学研究科・准教授	1
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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 AFM 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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	嘉部 量太	沖縄科学技術大学院大 学・准教授	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	森川 淳子	東京工業大学・物質理工 学院・教授	1
A03 公	18H04507	平成 30 年度 ～ 令和元年度	平田 修造	電気通信大学・大学院情 報理工学研究科・助教	1

	ソフトキラル分子結晶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 ～ 令和元年度	岩村 崇高	富山大学・学術研究部理学系・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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	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 ～ 令和元年度	吉川 浩史	関西学院大学・理工学部・准教授	1
A03 公	18H04529 磁性・電気伝導性交差相関物性型ソフトクリスタル素子の創製と光物性制御	平成 30 年度 ～ 令和元年度	石川 立太	福岡大学・理学部・助教	1
A01 公	20H04651 外部刺激に応答する異方伸縮ソフトクリスタルを用いた結晶変形挙動の合理的設計	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	小門 憲太	北海道大学・電子科学研究所・准教授	1
A01 公	20H04659 金属酸化物ソフトクリスタルの精密設計と新展開	令和 2 年度 ～ 令和 3 年度	鈴木 康介	東京大学・大学院工学系研究科(工学部)・准教授	1

A01 公	20H04661 気相－結晶相反応による有機 ベイポクロミック結晶の創製 と粉末結晶解析による機構解 明	令和2年度 ～ 令和3年度	植草 秀裕	東京工業大学・理学院・ 准教授	1
A01 公	20H04666 固体NMRによる金属錯体の ベイポクロミズム現象の機構 解明	令和2年度 ～ 令和3年度	水野 元博	金沢大学・ナノマテリア ル研究所・教授	1
A01 公	20H04667 ベルト状金属錯体のイオン性 結晶を用いた格子欠陥誘起型 ソフトクリスタルの創製	令和2年度 ～ 令和3年度	酒田 陽子	金沢大学・物質化学系・ 准教授	1
A01 公	20H04668 曲面π共役分子の配座制御に 基づく発光性ソフトクリスタ ルの開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	三宅 由寛	名古屋大学・工学研究 科・准教授	1
A01 公	20H04670 柱型環状分子を基にした弱刺 激に選択応答を示す機能性ソ フトクリスタルの創成	令和2年度 ～ 令和3年度	生越 友樹	京都大学・工学研究科・ 教授	1
A01 公	20H04674 結晶相転移を利用したキラル 物性のコントロール	令和2年度 ～ 令和3年度	松本 有正	奈良女子大学・自然科学 系・助教	1
A01 公	20H04676 周期的QM/MM法によるソ フトクリスタルの構造と電子 状態制御に関する理論研究	令和2年度 ～ 令和3年度	中谷 直輝	東京都立大学・理学研 究科・准教授	1
A01 公	20H04677 光トリガー相転移によるメカ ニカルソフトクリスタルの創 製	令和2年度 ～ 令和3年度	谷口 卓也	早稲田大学・データ科学 センター・准教授	1
A01 公	20H04683 刺激応答性金属ソフトクリス タルの開発	令和2年度 ～ 令和3年度	楽 優鳳	国立研究開発法人産業技 術総合研究所・エレクト ロニクス・製造領域・主 任研究員	1
A01 公	20H04684 機械的に変形可能な機能性ソ フトクリスタルの創生と解析	令和2年度 ～ 令和3年度	林 正太郎	高知工科大学・環境理工 学群・講師	1
A02 公	20H04652 分子結晶の励起状態と発光機 構	令和2年度 ～ 令和3年度	岩佐 豪	北海道大学・理学研究 院・助教	1
A02 公	20H04656 ソフトクリスタルの放射光そ の場構造観測	令和2年度 ～ 令和3年度	西堀 英治	筑波大学・数理物質系・ 教授	1

A02 公	20H04660 時分割回折X線ブリッキング によるソフトクリスタル動的 特性観測	令和2年度 ～ 令和3年度	倉持 昌弘	茨城大学・理工学研究科 (工学野)・助教	1
A02 公	20H04662 発光性ネットワーク錯体の励 起構造の解明	令和2年度 ～ 令和3年度	河野 正規	東京工業大学・理学院・ 教授	1
A02 公	20H04665 機械的刺激応答性ソフトクリ スタルの合理的創製とその定 量解析法の高度化	令和2年度 ～ 令和3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	20H04669 高速AFMで可視化する外的 刺激により誘起される多孔性 結晶表面の構造ダイナミクス	令和2年度 ～ 令和3年度	内橋 貴之	名古屋大学・理学研究 科・教授	1
A02 公	20H04671 構造的電子的柔軟性をもつイ オン性化学種を用いた革新的 ソフトクリスタル	令和2年度 ～ 令和3年度	鈴木 修一	大阪大学・基礎工学研究 科・准教授	1
A02 公	20H04675 塩-共結晶連続体を利用した 有機準安定結晶の計画的創出 と機能開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	小野 利和	九州大学・工学研究院・ 准教授	1
A02 公	20H04682 ソフトクリスタルの超分子集 合体の刺激応答性と機械特性	令和2年度 ～ 令和3年度	杉安 和憲	京都大学・大学院工学研 究科・教授	1
A03 公	20H04653 希土類錯体から配位高分子へ のソフトクリスタル変形と光 機能評価	令和2年度 ～ 令和3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	20H04655 ダイナミックHOF：新しい ソフトクリスタルの創製と機 能開発	令和2年度 ～ 令和3年度	武田 貴志	東北大学・多元物質科学 研究所・助教	1
A03 公	20H04657 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 の構造ダイナミクスの動画撮 影	令和2年度 ～ 令和3年度	羽田 真毅	筑波大学・数理物質系・ 准教授	1
A03 公	20H04663 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 ングによる相転移の学理解明	令和2年度 ～ 令和3年度	森川 淳子	東京工業大学・物質理工 学院・教授	1

A03 公	20H04664 残光機能や散乱機能を可逆的に制御可能なソフトクリスタルの構築	令和2年度 ～ 令和3年度	平田 修造	電気通信大学・大学院情報理工学研究科・准教授	1
A03 公	20H04672 潜在的液晶性を活かした塗布型薄膜ソフトクリスタル電子デバイスの開発	令和2年度 ～ 令和3年度	尾崎 雅則	大阪大学・工学研究科・教授	1
A03 公	20H04673 ソフトクリスタルにおける刺激応答構造ダイナミクスの1粒子発光観測	令和2年度 ～ 令和3年度	立川 貴士	神戸大学・分子フォトサイエンス研究センター・准教授	1
A03 公	20H04678 固体刺激応答特性を有するエラストマーラッピングソフトCPL材料の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	今井 喜胤	近畿大学・理工学部・准教授	1
A03 公	20H04679 導電性ソフトクリスタルの創製と光電子デバイスへの応用	令和2年度 ～ 令和3年度	大久保 貴志	近畿大学・理工学部・教授	1
A03 公	20H04680 固体電気化学反応を利用したソフトクリスタルの新機能開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	吉川 浩史	関西学院大学・工学部・教授	1
公募研究 計 63 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 29 年度	266,760,000 円	205,200,000 円	61,560,000 円
平成 30 年度	273,910,000 円	210,700,000 円	63,210,000 円
令和元年度	266,110,000 円	204,700,000 円	61,410,000 円
令和 2 年度	265,460,000 円	204,200,000 円	61,260,000 円
令和 3 年度	262,080,000 円	201,600,000 円	60,480,000 円
合計	1,334,320,000 円	1,026,400,000 円	307,920,000 円

4 研究領域の目的及び概要

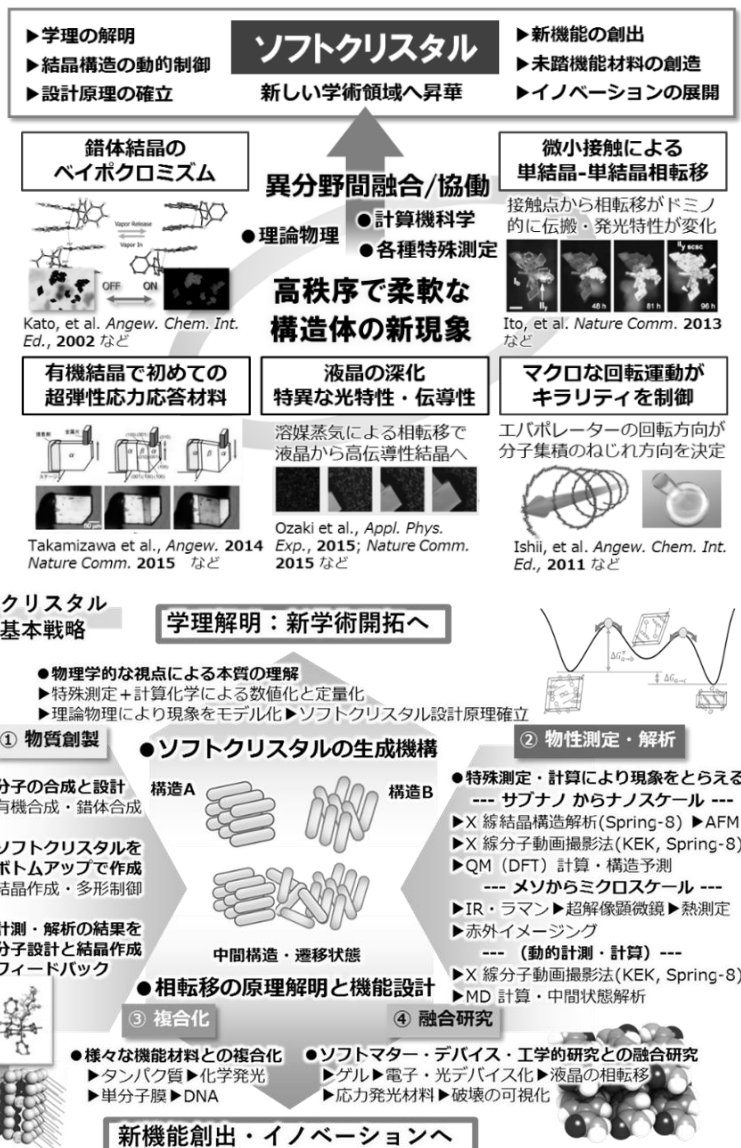
研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

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。本領域代表者らは、この新しい物質群を『ソフトクリスタル』と名づけた。

2) 研究目的

『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

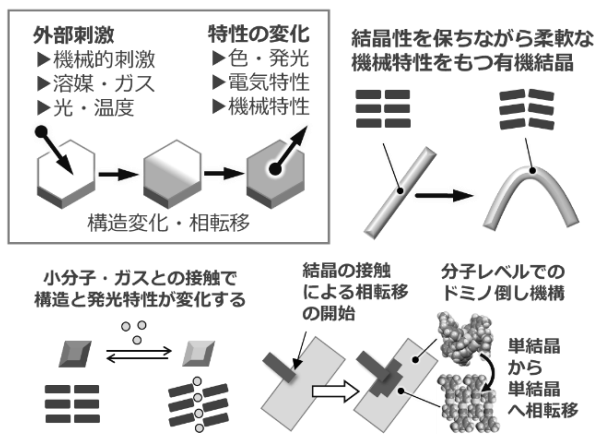


持つ。これにより、革新的・独創的な日本発の“ソフトクリスタルを基盤とするものづくり”に関する格段の発展が期待できる。本新学術領域では、ソフトクリスタルにおけるマクロな低刺激とナノ構造変化を繋ぐ学理を解明し、これまでに培われてきたナノテクノロジーを積極的かつ有効に利用しつつも、全く新しい機能性素材の開発指針を得ることで、高秩序で柔軟なナノアーキテクチャーをベースにした新領域を開拓することを目的とする。

3) 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

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。

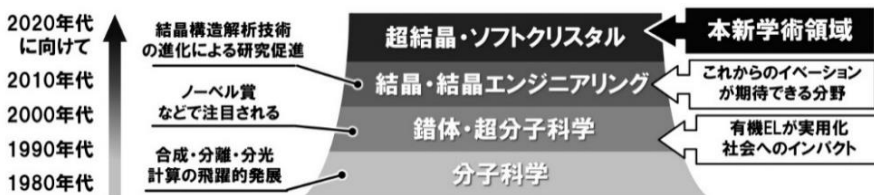
▶ソフトクリスタル：高秩序で柔軟な新物質の特徴と例



	通常は無機・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	○	○	△~X
相転移の ΔG^+	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	X	○	○
相転移の伝播・増幅	X	○	△~○
物質の発見	古くから知られている	2002年ごろ	1888年

4) 終了後に期待される成果

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発光を利用した有機 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関連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、これまでになく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。

5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価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、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

(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)

(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变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では、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) 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をソフトクリスタルの特徴として整理した。

(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) 申請時の4班構成から、3班構成に変更し、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、6回のソフトクリスタル物性解明研究グループ会議を開催した(毎回50名程度参加)。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た。また、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、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た。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、⁽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きた。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、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た。

(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) 理論計算を専門とする研究者として、A01公募 榊 茂好シニアリサーチフェロー(京大福井センター)、中谷 直輝 准教授(都立大理)、A02公募 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た。

(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) 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) 学理として構築するための明確な道筋を作るための方策を、以下のように行った。

・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」を共有した。

・トップダウン的な共同研究推奨を、幾つかの研究対象に対して行った。

・ソフトクリスタルにおける“刺激と応答の分類”と“特徴や現象の体系化”を行い、共有することで、研究の焦点を明確化した（「10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況」に記述）。

(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。

(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

(中間評価結果の所見)

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) 本研究領域は、秩序ある結晶構造をとる物質が、種々の力学的刺激や環境の変化に対してどのように応答するかという側面から研究し、これらをソフトクリスタルという概念のもと多様な物質の挙動を解明し、その原理を理解し、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。新たな概念の創出と確立を目的とした研究であることから、ソフトクリスタルとみなされる新しい現象・事例の発見・蓄積・分類・整理を進め、これらを本研究領域の研究成果として取りまとめ、どのように学理として展開していくかが重要であるが、本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、今後のより一層の進展が期待される。これまでの研究で新たな現象を見出す、あるいは事象発現の理論的な解明なども進められており、順調に研究が展開されているように見受けられる。一方、⁽⁸⁾従来の非晶質科学に分類される研究で興味深い現象を見出したとしても、ソフトクリスタルという新たな概念の確立を目指している本研究領域の目指す方向性と合致している内容かどうか慎重な判断が必要であり、それらの分類・整理を行うとともに学理として確立することが望まれる。

・ソフトクリスタルと称すべき研究成果は徐々に発見・蓄積されてきているが、総花的研究という側面が払拭できていないと感じられる。「ソフトクリスタルでないといけない機能は何か」など、⁽⁹⁾ソフトクリスタルの学理に対する基本的な概念が不明瞭である。分類・整理を行い、学理として確立することが望まれる。

・個別の刺激の種類（力・熱・光等）と物性・機能の関係だけではなく、⁽¹⁰⁾ソフトクリスタル全体を体系的普遍的に理解でき、かつそれが新機能材料の創出につながるように研究が進展することが望まれる。

(8) 従来の非晶質科学に分類される研究で興味深い現象を見出したとしても、ソフトクリスタルという新たな概念の確立を目指している本研究領域の目指す方向性と合致している内容かどうか慎重な判断が必要であり、それらの分類・整理を行うとともに学理として確立することが望まれる。

(対応) 離散的な X 線回折を示す結晶に関連した現象・物質全般を「ソフトクリスタル」として定義し、従来の非晶質科学から明確に分類した。非晶質であっても、「ソフトクリスタル」の学理解明や機能性材料創出に資する現象については、「ソフトクリスタル関連現象」と位置付けて活用した。

(9)+(10) ソフトクリスタルの学理に対する基本的な概念が不明瞭である。分類・整理を行い、学理として確立することが望まれる。ソフトクリスタル全体を体系的普遍的に理解でき、かつそれが新機能材料の創出につながるように研究が進展することが望まれる。

(対応) ・「構造・エネルギーからの熱力学的考察」、「結晶多形現象」、「ハードクリスタル・ソフトマテリアルとの比較」、「液晶・柔粘性結晶との比較」、「分子性結晶の機械的な柔らかさ」を考察し、「ソフトクリスタル」は、通常は安定な結晶であるが、特定の低強度の刺激存在下で ΔG^\ddagger が小さくなり構造変化を起こすことができる結晶と定義した（「10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況」に記述）。

・ソフトクリスタルの特徴として挙げられてきた様々なキーワードを関連づけてまとめることで体系化した。また、ベイポクロミズム、メカノクロミム等のソフトクリスタルに関する現象を、外部刺激、結晶・アモルファス等の状態、形状変化の有無、柔軟性の大小などの観点から体系化した（「10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況」に記述）。

・ソフトクリスタルの機能に関して、2点を明示した。①「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」、「結晶でありながらある程度の自由度で分子が動くことができ、化学反応も起こし得ること」等の特性を生かし、これまで未解明であった化学反応現象を精密に追跡できる。②「非常に高い柔軟性や機械的特性は応用において有益であること」、「金属やセラミクス等に対して軽量化できること」、「ポリマーでは達成できない長距離の構造秩序と異方性を有すること」等から、大量生産しづらいという欠点を凌駕し得る付加価値を有している。

(11) 「ソフトクリスタル」の概念が定着するよう、国際的な情報発信も含めて、さらなる幅広い展開を目指すことが望まれる。

(対応) 以下の国際的アウトリーチ活動を推進した：①ヨーロッパ化学協会の主要雑誌にコンセプト論文を発表（*Chem. Eur. J.*, 2019, 25, 5105–5112）、②高インパクトファクター（～13）の雑誌に総説を特集（*J. Photchem. Photobiol. C*, 2022, 51）、③国際シンポジウム3回、国際会議セッション等3回を開催、④「ソフトクリスタル」の広報動画を英語版で作成し公開。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか

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・計画研究ごとに目的と達成度を記述する。なお、主な研究成果の詳細は、「得られた成果」に詳述する。

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た。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た。査読付き学術論文を61報発表している。特に、「**発光性白金(II)錯体の集積発光超微細制御 (Angew. Chem. Int. Ed., 2020, 59, 18723.)**」、「**有機超弾性結晶の発光クロミズム (Nature Commun., 2020, 11, 1824.)**」において発光性スマートソフトクリスタルの構築、「**段階的ベイポクロミック挙動の構造解析 (Chem. Eur. J., 2022, 28, e202200703.)**」においてソフトクリスタルの現象の原理探究、「**引っかき刺激を発光で「見える化」する材料開発 (Adv. Opt. Mater., 2022, 2102614.)**」において新機能性素材の開発を行った。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。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た。査読付き学術論文を30報発表している。特に、「**分子構造変化を媒介とする強弾性誘起結晶の創出 (Angew. Chem. Int. Ed. 2017, 56, 15882.)**」、「**大変形性を示す有機超弾性体の発見による“有機超塑性”の概念提唱 (Nature Commun., 2018, 9, 3984.)**」、「**機械特性評価による結晶変形応力やエネルギー散逸特性制御因子の解明 (Angew. Chem. Int. Ed., 2018, 57, 11888.)**」、「**強弾性を利用した有機結晶の形状変換 (Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 4340.)**」に成果を挙げた。また多くの積極的な領域内共同研究により、ソフトクリスタルの機械特性評価法を様々な系に適用するとともに、新たな物性測定法開発や計算手法の開発に尽力した。以上のことから、当初設定した目的は十分に達成されたと判断される。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ことを目的とした。査読付き学術論文を16報発表しており、特に、「**ジシラン架橋テトラシクロファン類結晶の光機能 (J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 11214; ibid, 2020, 142, 12651.)**」、「**D-A-D 分子結晶のメカノクロミズム (Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 22871.)**」において、構造と物性が連動するソフトクリスタルを創製した。特に、「**ジシラン架橋シクロファン類結晶の光機能と相転移 (J. Am. Chem. Soc. 2017, 139, 11214; ibid, 2020, 142, 12651.)**」、「**D-A-D 分子結晶のメカノクロミズム (Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 22871.)**」において、構造と物性が連動するソフトクリスタルを創製した。以上のことから、目的はおおむね達成されたと判断される。

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た。査読付き学術論文を52報発表している。特に、「**リバーシブルな分子ドミノ型相転移の発見及びドミノ型相転移のバリエーション作成 (J. Am. Chem. Soc., 2018, 140, 2875.)**」、「**分子内回転運動をもつアンフィダイナミック結晶 (Angew. Chem. Int. Ed., 2019, 58, 18003; J. Am. Chem. Soc., 2021, 143, 1144.)**」、「**強弾性を示す発光性有機金属結晶の発見 (Angew. Chem., Int. Ed., 2020, 59, 8839.)**」を行った。また多くの積極的な領域内共同研究により、開発してきたソフトクリスタル評価方法を他の系に適用するとともに、新たな計算手法の開発や物性測定法開発に尽力した。さらに、結晶内で分子が比較的容易に「動く」という着想を基に「**メカノケミカル有機合成 (Nature Commun. 2019, 10, 111; Science, 2019, 366, 1500.)**」も発展させている。以上のことから、当初設定した目的は達成され、予想を超えた成果も得られている。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た。査読付き学術論文を27報発表している。特に、結晶内化学発光反応をリアルタイムで追跡可能とすることで、「**結晶化学発光特性と反応性の結晶構造依存性 (Chem. Commun., 2020, 56, 3369.)**」、「**結晶内反応初期での0次速度論 (Bull. Chem. Soc. Jpn., 2022, 95, 413.)**」、「**反応進行度と結晶相変化の相関 (CrystEngComm,**

2022, 24, 3332.)」を見出しており、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。計画研究 A02-03 では、「X 線分子動画像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 線分子動画像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た。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。査読付き学術論文を 15 報発表しており、超弾性結晶、長寿命発光結晶、ベイポクロミズム錯体 (*Dalton Trans.*, **2021**, *50*, 8696.)、化学発光分子、生体高分子について、放射光を用いた X 線プローブ実験の論文を報告してきており、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。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ことを目的とした。領域内で得られたソフトクリスタルに関して多くの共同研究を行っており、査読付き学術論文を 11 報発表している。特に、「金錯体の結晶ポテンシャルの開発 (*J. Comput. Chem., Jpn.*, **2018**, *17*, 155.)」、「ランタニド錯体の結晶ポテンシャルの開発 (*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2021**, *94*, 2973.)」を行うとともに、有機金属用力場ポテンシャルや外部ストレス印加下での結晶構造を最適化するシミュレーターを開発した。現在、配座空間探索プログラム **CONFLEX-9** への実装を進めている (Conflex Corporation, 2022, Tokyo)。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。

研究項目 A03 ソフトクリスタルの機能物性開拓 本研究項目の目的は、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・機能を開拓することにある。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た。査読付き学術論文を 64 報発表している。特に、「マクロな機械的回転刺激によるキラル集合構造制御 (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 18454.)」によりソフトクリスタル準安定状態の創製技術を開発するとともに、「ベイポクロミズムの超解像顕微鏡観察 (*J. Phys. Chem. C*, **2021**, *125*, 21055.)」も行った。また理論計算では、「モデル化による相転移の原理解明 (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2018**, *115*, 9917. *ibid.*, **2022**, *119*, e2118492119.)」にも成功した。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。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た。積極的に共同研究を遂行し、査読付き学術論文を 47 報発表している。特に、「希土類錯体の界面偏光発光 (*New J. Chem.*, **2019**, *43*, 6472.)」、「希土類錯体結晶界面からのトリボルミネッセンス」などの界面制御による新規光物性を開拓するとともに、系統的な錯体の結晶化により、ランタニド錯体の結晶ポテンシャルも決定した (*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2021**, *94*, 2973.)。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。計画研究 A03-03 では、「ソフトフォトリ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た。査読付き学術論文を 27 報発表している。「動的記憶能を有するハイドロゲル (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2020**, *117*, 18962.)」、「電気駆動するソフトフォトリックゲル (*Adv. Optical Mater.* **2021**, *9*, 2002198.)」などの様々な機能性材料を開発するとともに、ソフトクリスタル概念の拡張性を提案し、ソフトマター機能をソフトクリスタルに取り込むことに成功した。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。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した。査読付き学術論文を 18 報発表している。特に、「DNA/Ru(bpy)₃²⁺複合膜における超高速電気化学発光応答 (*Sci. Rep.*, **2017**, *7*, 8525.)」、「電気化学発光アップコンバージョン (*J. Mater. Chem. C*, **2021**, *9*, 2252.)」を達成するとともに、相転移を活かしたデバイスの開発も行った。また、企業が集う画像学会でソフトクリスタルの活用について議論を深めた。以上のことから、当初の目的はおおむね達成されたと判断される。

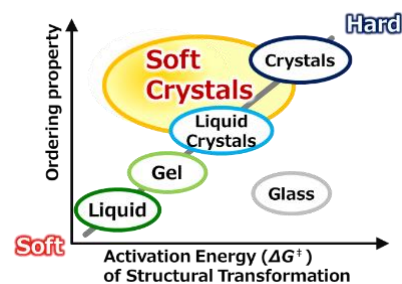
(2) 本研究領域により得られた成果

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))

ソフトクリスタルコンセプト コンセプト論文の発表 (A02-01 伊藤、A03-01 石井、A03-02 長谷川^{美貴}との共著) 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、ソフトクリスタルの新しい概念を世界に先駆けて発信した (*Chem. Eur. J.*, **2019**, *25*, 5105-5112)。

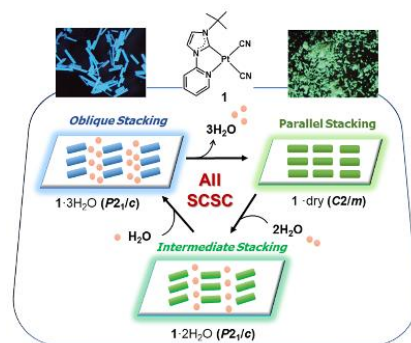
ベイポクロミズム創製 発光性白金(II)錯体のベイポクロミック応答制御 強配位子場を与える N-ヘテロ環状カルベン (NHC) を用いて、一連の集積発光性白金(II)錯体結晶 [Pt(CN)₂(NHC)] を合成した。置換基による積層構造の微細制御により、金属-金属-配位子電荷移動 (³MMLCT) 状態由来の強発光を示す系の構築に成功し、初めて青色 ³MMLCT を実現した (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 18723-18730.)。



ベイポクロミズム測定 段階的ベイポクロミック挙動の構造解析

(A02 公募 西堀との共同研究) 上記ベイポクロミズム系が、水蒸気によって可逆的かつ段階的な単結晶-単結晶転移を示すことを見出した。西堀が開発した蒸気圧を制御可能な X 線構造解析装置を用いて、ナノ構造変化過程を解明することに成功した (*Chem. Eur. J.*, 2022, e202200703.)。

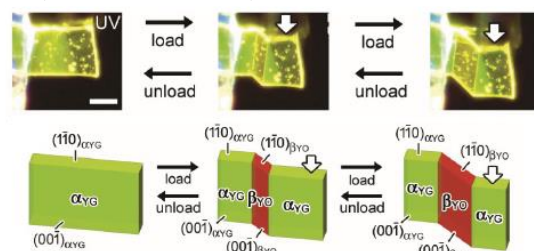
メカノクロミズム機能 引っかき刺激を発光で「見える化」する材料を開発 非発光性の過冷却液体から強発光性結晶への相転移が機械的刺激で誘起される刺激応答性白金(II)錯体を開発した。この錯体は、容易に薄膜化でき、引っかき刺激で発光し、ドライヤーの熱で元に戻る材料となる (*Adv. Opt. Mater.*, 2022, 2102614.)。



A01-01 (計画・務台(分担))

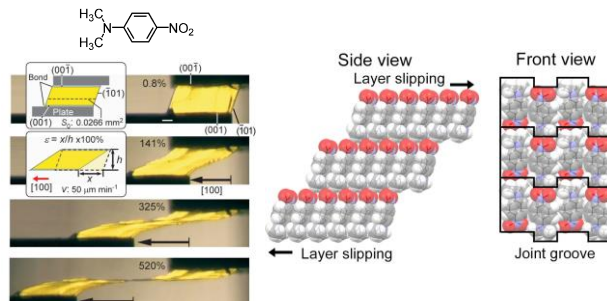
有機超弾性 創製 有機超弾性結晶の発光クロミズム (A01-02 高見澤との共同研究) 分子内水素結合

を有する 7-chloro-2-(2'-hydroxyphenyl)imidazo[1,2-a]pyridine は、結晶多形により黄緑色 (α_{YG} 相) と黄橙色 (β_{YO} 相) の発光を示す。 α_{YG} 相が機械的刺激的負荷/除荷による相転移に伴い、発光色の変化/自発回復を示すことを見出した (*Nature Commun.*, 2020, 11, 1824.)。このメカノクロミック発光の機構は超弾性に基いており、二色発光の比率をリアルタイムで可逆的かつ無段階に制御できる。



A01-02 (計画・高見澤(代表))

有機超塑性 発見 大変形性を示す有機超弾性体 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% 以上の大変形を示すのが明らかとなった (*Nature Commun.* 2018, 9, 3984.)。



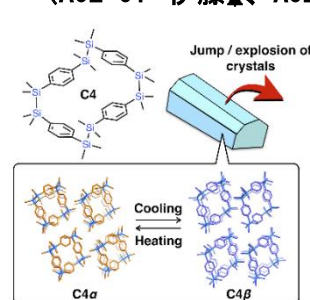
有機強弾性の創成 強弾性を利用した有機結晶の形状変換 せん断方向に応じて機械的雙晶による超弾性と強弾性を示す有機結晶を用い、S 字や U 字などの多様な形状変換を達成した。強弾性では結晶性を損なわずに一つの結晶内で複数の結晶配向を持った領域を共存させることで結晶形状を変換するため、結晶形状に応じて複数方向に超弾性を示すことに成功している (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 4340-4343.)。

A01-03 (計画・山野井(代表))

サーモサリエント・メカノクロミズム 創製 ジシラン架橋化合物結晶の光機能

(A02-01 伊藤、A02 公募 西堀、伊藤、A02-04 後藤、A03-04 小林との共同研究) ジシラン架橋型シクロファン類は、結晶状態で強い青緑色の蛍光を示し、電界発光 (EL) 材料への応用に成功した。また、面不斉分子へ展開し、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, 11214-11221.)。シクロファンを拡張した分子の単結晶を冷却すると Si-Si- π の二面角変化を伴った結晶相転移を起こし、開裂・ジャンプするサーモサリエント現象を見出した (*J. Am. Chem. Soc.*, 2020, 142, 12651-12657.)。また、フェノチアジン部位とチエノピラジン部位で構成されるジシラン架橋 D-A-D 分子について新規機構によるメカノフルオロクロミズムを見出した (*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 22871-22878)。

(A02-01 伊藤、A02



A01 (公募・生越(代表))

分子を取り込むソフトクリスタル 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

(A01 公募 酒田、水野との共同研究) ヘリンボーン構造の結晶よりもチャンネル構造を有する結晶の方が、低ゲスト分子圧で取り込み、安定に貯蔵できることを明らかとした。溶融した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取り込まれてポリ擬ロタキサン構造を形成すること、高分子量のもので選択的に取り込まれることを見出した (*Nature Commun.* 2019, 10, 479.)。

A01 (公募・谷口(代表))

ソフトクリスタル機械学習 相転移への分子設計 分子結晶の相転移およびヤング率のデータを論文から収集し、機械学習により分子構造と相転移の有無やヤング率の大小との関係性を分析した。また、格子エネルギーとの関係性を分析した (*ChemRxiv*, 2021.)。

研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓

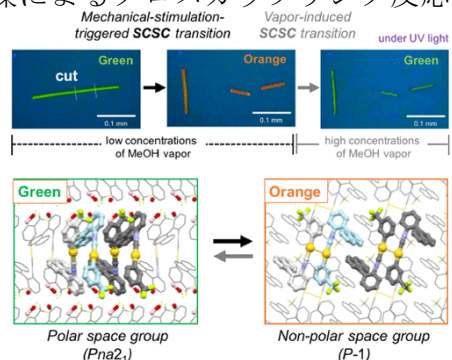
A02-01 (計画・伊藤(代表))

ソフトクリスタル化学反応 メカノケミストリーによる固体反応の開発 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、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 (*Nature Commun.*, **2019**, *10*, 111.) やメカノレドックス反応 (*Science*, **2019**, *366*, 1500-1504.) が実施可能であることを見出した。

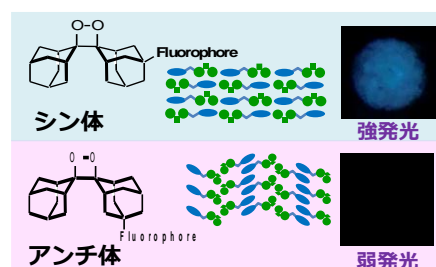
メカノクロミズムとベイボクロミズム リバーシブルな分子ドミノ型相転移の発見 金イソシアニド錯体誘導体は、メタノールから再結晶すると、メタノールを含んだ緑色発光の結晶を与える。この結晶に、ある一定のメタノール蒸気濃度下において機械的刺激を与えると、メタノール溶媒が追い出されながら単結晶-単結晶相転移が進行し、オレンジ色に発光する別の構造に変化することを見出した。メタノール蒸気濃度を上げるとメタノールが再び取り込まれ、相転移前の結晶が単結晶-単結晶相転移を経て再生されることがわかった (*J. Am. Chem. Soc.*, **2018**, *140*, 2875-2879.)。



強弾性と発光性 強弾性を示す発光性有機金属結晶 (A01-02 高見澤との共同研究) アリール金(I)複素環カルベン錯体の発光性結晶が、異方性の機械的応力により強弾性を示すことを発見した (*Angew. Chem., Int. Ed.*, **2020**, *59*, 8839-8843.)。これは最初の強弾性を示す発光有機金属結晶となる。結晶の X 線回折分析と応力-歪み測定により、強弾性挙動、機械的双晶、及び歪みの自発的な蓄積を確認した。

A02-02 (計画・平野(代表))

化学発光結晶 創製 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) 安定性が高く結晶化に適した 1,2-ジオキセタン誘導体とそれに 1~2 個の蛍光団を連結させた分子群の結晶を用いて、加熱による結晶内化学発光とその反応追跡に成功した。異性体結晶の比較により、結晶化学発光特性と速度論の結晶構造依存性 (*Chem. Commun.*, **2020**, *56*, 3369-3372.)、結晶内での反応初期は 0 次速度論に則ること (*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2022**, *95*, 413-420.)、反応進行度に伴う結晶相変化 (*CrstEngComm*, **2022**, *24*, 3332-3337.) を見出した。



A02-03 (計画・佐藤(代表))

ベイボクロミズム測定 水脱着に伴う配位環境の変化を X 線吸収分光測定 (A01-01 加藤との共同研究) 水蒸気等に反応して可逆的に色変化を起こす Ni 錯体結晶において、反応前後での XAFS 測定を行い、蒸気分子の脱着に伴ってスピン状態変化が起こる系と、蒸気分子が脱離した後、分子の再配置が起こり、スピン状態が変化しない系があることを明らかとした (*Dalton Trans.*, **2021**, *50*, 8696-8703.)。

A02-04 (計画・後藤(代表))

計算：結晶ポテンシャルの開発 イソシアニド金、ランタニド (Ln) 錯体の結晶ポテンシャルの開発 (A01-01 加藤、A02-01 伊藤、A03-02 長谷川美貴との共同研究) これまで構築することができなかった金錯体、Ln 錯体結晶を扱う結晶力場を決定した。得られた結晶力場を用い、フェニル(フェニルイソシアニド)金(I)錯体では、二つの結晶多形構造を再現できることを確認した (*J. Comput. Chem., Jpn.*, **2018**, *17*, 155-157.)。また、ピピリジン誘導体を配位子とする 10 種類の Ln 錯体の力場ポテンシャルを開発し、結晶構造を再現することに成功した (*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2021**, *94*, 2973-2981.)。

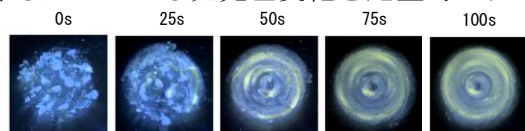
計算：外部刺激シミュレータの社会実装 外部刺激による結晶変形の計算法開発 (A01-02 高見澤との共同研究) 外部刺激による結晶変形の計算法開発 (A01-02 高見澤との共同研究) 有機超弾性を示すテフタルアミドの結晶 α 相と β 相を正しく再現する結晶力場を検討し、結晶ポテンシャルエネルギー面の相転移ランドスケープを明らかにした。また、摩擦やせん断といった異方的な外部ストレス印加時の様々な変形 (配座とパッキング) を考慮できるように、高精度第一原理計算で求めた Force を参照して分子内力場を最適化する Force Matching 法を開発し、結晶内における構造変形を正確に再現した。外部ストレス印加下で結晶構造を最適化するシミュレータを開発した。現在、CONFLEX-9 への実装を進めている (Conflex Corporation, 2022, Tokyo)。

A02 (公募・内橋(代表))

分子集積化 測定 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.)。

A02 (公募・伊藤(代表))

メカノクロミズム測定 メカノクロミズム測定装置開発 (A01-01 分担 務台、A01-03 山野井、A02-01 伊藤との共同研究) 金属荷重で重みをかけながら、回転で擦ることによる発光色変化を定量的にリアルタイムで観測できる装置を開発し、各種のソフトクリスタルの発光スペクトルの変化を定量的に比較することに成功し、荷重との間に良い相関を示すことを明らかとした。



A02 (公募・杉安(代表))

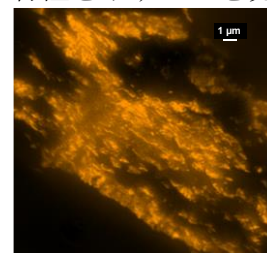
分子集積化 発見 スパイラル状高次構造 フルオロアルキル鎖を有するポルフィリン誘導体が自己集合し、アルキメデススパイラル状の高次構造を形成することを見出した (*Nature Commun.*, **2020**, *11*, 3578.)。

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))

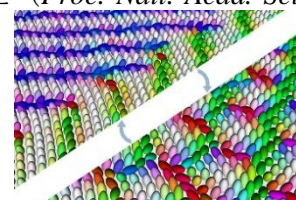
マクロな機械的刺激・メカノクロミズム解析 マクロな機械的回転刺激によるキラル集合構造制御 ロータリーエバポレーターで回転をかけながら、フタロシアニンの溶液を濃縮・乾固して作製した薄膜のキラリティが、回転方向に依存して反転することを発見した (*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, *58*, 18454-18459.)。これより、マクロなフラスコの回転方向と溶媒留去速度によって、分子配列キラリティを制御できることを実証した。得られたキラル薄膜が、サーモクロミックかつメカノクロミックな特性を示すことを見出し、自発的転移速度の解析に成功した。

超解像顕微鏡測定 **ベイポクロミズムの超解像顕微鏡観察 (A01-01 加藤との共同研究)** 構造化照明顕微鏡と共焦点レーザー顕微鏡に適切な閉鎖系を適用することで、Pt 錯体のベイポクロミック挙動を調査した。この Pt 錯体では、アモルファス固体粉末がアルコール蒸気に暴露されることにより結晶化される。その単一粒子のメゾ/マイクロ固体結晶化プロセスについて超解像顕微鏡観察を行い、三次元的ベイポクロミズム時間変化を解明した (*J. Phys. Chem. C*, **2021**, *125*, 21055-21061.)。



A03-01 (計画・高江(分担))

理論：外部応力による相転移 **モデル化による相転移の原理解明** 強誘電-反強誘電相転移を示す分子モデルを考案し、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、外部応力による相転移の制御機構を明らかにした (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2018**, *115*, 9917-9922.)。さらに、キラル分子からなる結晶において、隣り合った分子同士が振れた配置をとるモデルを考案し、振れの強さを制御することで、分子の向きが振れたらせん相と、分子が渦状に配向したハーフスキルミオン相との相転移が起こること、および、外部応力の印加によって相転移を制御できることを明らかにした (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2022**, *119*, e2118492119.)。



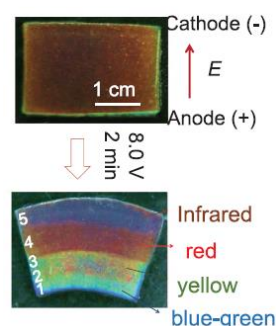
A03-02 (計画・長谷川美貴(代表))

偏光発光・トリボルミネッセンス創製 **希土類錯体の界面偏光発光・トリボルミネッセンス発現** 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層累積させた系を開発した。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.)。アミノ酸を配位子に導入したキラルでヘリカルな分子では、トリボルミネッセンスを示すことを見出し、改良型ドロップタワーシステムを用いて評価することで、瞬間的な衝撃による分子層界面の化学反応が寄与することを見出した。

A03-03 (計画・グン(代表))

デバイス機能 **ソフトフォトニックゲルの創製 (A01 公募 楽との共同研究)**

本ソフトフォトニックゲルは、従来のゲルにない多数の新奇な物性と機能を示す。例えば、二分子膜がエネルギーを散逸するため、従来のゲルより千倍も高い靱性を示す。圧力で柔らかいゲル層が変形するため、構造色が応力/歪によって敏感に変化する。またゲル層に環境応答性分子を用いた場合、熱、pH などによっても構造色が大きく変化する。水の電気分解を利用した電気駆動の構造色変化も実現した (*Adv. Opt. Mater.*, **2021**, *9*, 2002198.) このゲルは温度、pH、電場、および応力/歪の度合を視覚的に示すセンサーおよびディスプレイに適用されることが期待される。また、収縮過程で過渡的な相分離形成を示すゲルを発見し、動的な記憶素子を構築した (*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2020**, *117*, 18962-18968.)。

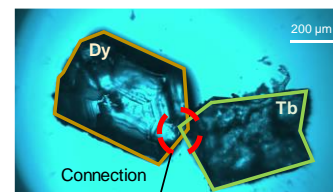


A03-04 (計画・小林(代表))

デバイス機能 **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(II)錯体 Ru(bpy)₃²⁺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て特異的なメゾスコピック構造を形成し、超高速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.)。さらに電解液に青色発光分子アントラセン誘導体を導入することで、Ru 錯体の低い発光駆動電圧で青色発光が可能となるフォトンアップコンバージョンを ECL 素子で初めて実現した (*J. Mater. Chem., C*, **2021**, *9*, 2252-2257.)。

A03 (公募・長谷川靖哉(代表))

結晶連結機能 **結晶連結技術の開発による結晶間エネルギー移動 (A01 公募 植草、A02-04 後藤との共同研究)** 七配位型二核 Tb(III)錯体から八配位型 Tb(III)配位高分子への変形を利用し、2つの異なる結晶の連結に成功した。この方法で連結した結晶間で光エネルギーを伝達できることを実証した (*Nature Commun.*, **2022**, in press.)。



A03 (公募・森川(代表))

マイクロ熱測定法開発 **ミクロスケール精密測定法による超弾性結晶の熱的特性評価 (A01-02 高見澤との共同研究)** 有機超弾性結晶において、ミクロスケールの光熱温度波分析を使用して応力誘起相転移中の熱拡散率を測定し、14%の熱拡散率変化が見出された (*Appl. Phys. Lett.*, **2021**, *119*, 251902.)。

7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和4年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

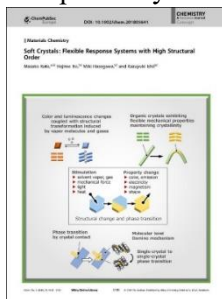
<発表論文> 謝辞に課題番号を記載した査読付き英語論文 718 報（内領域内共同研究 86 報）の中から、計画研究の代表的な論文を以下に示す。

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)) 査読付き英語論文 61 件、内 10 件をコンセプト論文・特集号とともに記載
コンセプト論文発表 "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

泰・A03-01 石井・A03-02 長谷川(共著)
光化学分野の高インパクトファクター (IF ~13) レビュー誌に総説論文特集号を刊行
"Special issue on Soft Crystals"
ed. M. Kato, K. Ishii, V. W.-W. Yam, R. Katoh, H. Miyasaka, *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.*, **51** (2022). (領域内共同研究 A03-01 石井)



- "Thermo- and Mechano-triggered Luminescence ON/OFF Switching by Supercooled Liquid/Crystal Transition of Platinum(II) Complex Thin Films", *M. Yoshida, V. Sääsk, D. Saito, N. Yoshimura, J. Takayama, S. Hiura, A. Murayama, K. Pöhako-Esko, A. Kobayashi, *M. Kato, *Adv. Opt. Mater.*, 2102614 (2022). (**Back Cover**、**プレスリリース**)
- "Reversible and stepwise single-crystal-to-single-crystal transformation of a platinum(II) complex with vapochromic luminescence", D. Saito, T. Galica, E. Nishibori, M. Yoshida, A. Kobayashi, *M. Kato, *Chem. Eur. J.*, **28**, e202200703 (2022). (**Cover Picture**、**領域内共同研究 A02 公募 西堀**)
- "Elastic deformability and luminescence of crystals of polyhalogenated platinum(II)-bipyridine complexes", *M. Yoshida, Y. Makino, T. Sasaki, S. Sakamoto, S. Takamizawa, A. Kobayashi, *M. Kato, *CrystEngComm*, **23**, 5891–5898 (2021). (**領域内共同研 A01-02 高見澤**)
- "Intense Red-Blue Luminescence Based on Superfine Control of Metal-Metal Interactions for Self-Assembled Platinum(II) Complexes" D. Saito, T. Ogawa, M. Yoshida, J. Takayama, S. Hiura, A. Murayama, A. Kobayashi, *M. Kato, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 18723–18730 (2020).
- "A superelastochromic crystal" *T. Mutai, T. Sasaki, S. Sakamoto, I. Yoshikawa, H. Houjou, *S. Takamizawa, *Nature Commun.* **11**, 1824 (2020). (**Editor's Highlights**、**プレスリリース**、**領域内共同研究 A01-02 高見澤**)
- "Fast and Stable Vapochromic Response Induced Through Nanocrystal Formation of a Luminescent Platinum(II) Complex on Periodic Mesoporous Organosilica", H. Matsukawa, M. Yoshida, T. Tsunenari, S. Nozawa, A. Sato-Tomita, Y. Maegawa, S. Inagaki, A. Kobayashi, *M. Kato, *Sci. Rep.*, **9**, 15151 (2019). (**領域内共同研究 A02-03 佐藤**)
- "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.*, **25**, 7669-7678 (2019). (**Hot paper**、**Inside Cover Art**)
- "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**)
- "Mechanochromic 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).
- "Luminescent ionic liquids based on cyclometalated platinum(II) complexes exhibiting thermochromic behaviour in different colour regions" T. Ogawa, W. M. C. Sameera, M. Yoshida, A. Kobayashi, *M. Kato, *Dalton Trans.*, **47**, 5589–5594 (2018). (**Back Cover**)

A01-02(計画・高見澤(代表)) 査読付き英語論文 30 件、内 6 件を記載

- "A Photoluminescent Organosuperelastic Crystal of 7-Amino-4-methylcoumarin" T. Sasaki, S. Ranjan, *S. Takamizawa, *CrystEngComm*, **23**, 5801–5804 (2021).
- "A Multidirectional Superelastic Organic Crystal by Versatile Ferroelastic Manipulation" T. Sasaki, S. Sakamoto, Y. Takasaki, *S. Takamizawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 4340–4343 (2020).
- "Shape Rememorization of an Organosuperelastic Crystal via Superelasticity-Ferroelasticity Interconversion" S. Sakamoto, T. Sasaki, A. Sato-Tomita, *S. Takamizawa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 13722–13726 (2019). (**領域内共同研究 A02-03 佐藤**)
- "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)

5. "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)

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)

A01-03(計画・山野井(代表)) 査読付き英語論文 16 件、内 6 件を記載

1. "Luminescent behavior elucidation of a disilane-bridged D–A–D triad composed of phenothiazine and thienopyrazine", T. Nakae, M. Nishio, T. Usuki, M. Ikeya, C. Nishimoto, S. Ito, H. Nishihara, M. Hattori, S. Hayashi, T. Yamada, *Y. Yamanoi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 22871–22878 (2021). (領域内共同研究 A02 公募 伊藤)

2. "Thermosaliency in macrocycle-based soft crystals via anisotropic deformation of disilanyl architecture" K. Omoto, T. Nakae, M. Nishio, *Y. Yamanoi, H. Kasai, E. Nishibori, T. Mashimo, T. Seki, H. Ito, K. Nakamura, N. Kobayashi, N. Nakayama, H. Goto, *H. Nishihara, *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 12651–12657 (2020). (領域内共同研究 A02-01 伊藤、A02-04 後藤、A02 公募 西堀、A03-04 小林)

3. "Selective Formation and SHG Intensity of Noncentrosymmetric and Centrosymmetric 1,1,2,2-Tetramethyl-1-(4-(N,N-dimethylamino)phenyl)-2-(2'-cyanophenyl)disilane Crystals under External Stimuli" M. Nishio, M. Shimada, K. Omoto, T. Nakae, H. Maeda, M. Miyachi, *Y. Yamanoi, E. Nishibori, N. Nakayama, H. Goto, T. Matsushita, T. Kondo, M. Hattori, K. Jimura, S. Hayashi, *H. Nishihara, *J. Phys. Chem. C*, **124**, 17450–17458 (2020). (領域内共同研究 A02 計画 後藤、A02 公募 西堀)

4. "Effect of Tris(trimethylsilyl)silyl Group on the Fluorescence and Triplet Yields of Oligothiophenes" *S. Hirata, M. Nishio, H. Uchida, T. Usuki, T. Nakae, M. Miyachi, *Y. Yamanoi, *H. Nishihara, *J. Phys. Chem. C*, **124**, 3277–3286 (2020). (領域内共同研究 A03 公募 平田)

5. "Aggregation-Induced Emission Enhancement from Disilane-Bridged Donor-Acceptor-Donor Luminogens Based on the Triarylamine Functionality" T. Usuki, M. Shimada, *Y. Yamanoi, 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)

6. "Multifunctional Octamethyltetrasilol[2.2]cyclophanes: Conformational Variations, Circularly Polarized Luminescence, and Organic Electroluminescence" M. Shimada, *Y. Yamanoi, 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)

研究項目 A02 ソフトクリスタルの構造開拓

A02-01(計画・伊藤肇(代表)) 査読付き英語論文 52 件、内 10 件を記載

1. "Mechanochemical synthesis of magnesium-based carbon nucleophiles in air and their use in organic synthesis" R. Takahashi, A. Q. Hu, P. Gao, Y. P. Gao, Y. D. Pang, T. Seo, J. L. Jiang, S. Maeda, H. Takaya, *K. Kubota, *H. Ito, *Nature Commun.*, **12**, 6691 (2021).

2. "Introduction of a Luminophore into Generic Polymers via Mechanoradical Coupling with a Prefluorescent Reagent" *K. Kubota, N. Toyoshima, D. Miura, J. L. Jiang, S. Maeda, *M. Jin, *H. Ito, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60**, 16003–16008 (2021). (プレスリリース)

3. "General Synthesis of Trialkyl- and Dialkylarylsilylboranes: Versatile Silicon Nucleophiles in Organic Synthesis" R. Shishido, M. Uesugi, R. Takahashi, T. Mita, T. Ishiyama, *K. Kubota, *H. Ito, *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 14125–14133 (2020).

4. "Selective Mechanochemical Monoarylation of Unbiased Dibromoarenes by in Situ Crystallization" T. Seo, K. Kubota, *H. Ito, *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 9884–9889 (2020). (JACS spotlight、Cover)

5. "Photoluminescent Ferroelastic Molecular Crystals" *T. Seki, C. Feng, K. Kashiyama, S. Sakamoto, Y. Takasaki, T. Sasaki, S. Takamizawa, *H. Ito, *Angew. Chem. Int. Ed.* **59**, 8839–8843 (2020). (領域内共同研究 A01-02 高見澤)

6. "Aurophilicity-mediated Construction of Emissive Porous Molecular Crystals as Versatile Hosts for Liquid and Solid Guests" *T. Seki, K. Ida, S. Aono, S. Sakaki, *H. Ito, *Chem. Eur. J.* **26**, 735–744 (2020). (領域内共同研究 A01 公募 榊)

7. "Redox Reactions of Small Organic Molecules Using Ball Milling and Piezoelectric Materials" *K. Kubota, Y. Pang, A. Miura, *H. Ito, *Science* **366**, 1500–1504 (2019).

8. "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)

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 Aurophilic 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.*, **139**, 18115–18121 (2017).

A02-02(計画・平野(代表)) 査読付き英語論文 27 件、内 6 件を記載

1. "Intracrystalline kinetics analyzed by real-time monitoring of a 1,2-dioxetane chemiluminescence reaction in a single crystal" C. Matsushashi, H. Fujisawa, M. Ryu, T. Tsujii, J. Morikawa, H. Oyama, H. Uekusa, S. Maki, *T. Hirano, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **95**, 413–420 (2022). (領域内共同研究 A01 公募 植草・A03 公募 森川、化学・結晶学・熱物理学の融合)

2. "Singlet-oxygen chemiluminescence from heated crystal samples of 9,10-diphenylanthracene endoperoxides" N.

Yamasaki, C. Matsushashi, S. Maki, *T. Hirano, *Chem. Lett.*, **50**, 1681–1683 (2021).

3. "Isomeric difference in the crystalline-state chemiluminescence property of an adamantylideneadamantane 1,2-dioxetane with a phthalimide chromophore" C. Matsushashi, T. Ueno, H. Uekusa, A. Sato-Tomita, K. Ichianagi, S. Maki, *T. Hirano, *Chem. Commun.*, **56**, 3369–3372 (2020). (**Back Cover**、**領域内共同研究 A02-03 佐藤・A01 公募 植草**、**化学と結晶学の融合**)

4. "Halogen-substituent effect on the spectroscopic properties of 2-phenyl-6-dimethylaminobenzothiazoles" R. Misawa, C. Matsushashi, M. Yamaji, T. Mutai, I. Yoshikawa, H. Houjou, K. Noguchi, S. Maki, *T. Hirano, *Tetrahedron Lett.*, **60**, 1702–1705 (2019). (**Cover**、**領域内共同研究 A01-01 分担 務台**、**化学・結晶学の融合**)

5. "Spectroscopic properties of push-pull 2-(4-carboxyphenyl)-6-dimethylaminobenzothiazole derivatives in solution and the solid state" Y. Takahashi, T. Uehara, C. Matsushashi, 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**、**化学と結晶学の融合**)

6. "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). (**化学と結晶学の融合**)

A02-03(計画・佐藤(代表)) 査読付き英語論文 15 件、内 6 件を記載

1. "Vapochromic Behaviour of a Nickel(II)-quinonoid Complex with Dimensional Changes Between 1D and Higher", R. Yano, *M. Yoshida, T. Tsunenari, A. Sato-Tomita, S. Nozawa, Y. Iida, N. Matsunaga, A. Kobayashi, *M. Kato, *Dalton Trans.*, **50**, 8696–8703 (2021). (**Back Cover**、**領域内共同研究 A01-1 加藤**)

2. "Direct observation of ligand migration within human hemoglobin at work" *N. Shibayama, A. Sato-Tomita, M. Ohki, K. Ichianagi, S.-Y. Park, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, **117**, 4741–4748 (2020). (**生物学と物理学の融合**)

3. "X-ray fluorescence holography for soft matter" A. K. R. Ang, A. Sato-Tomita, N. Shibayama, Y. Umena, N. Happo, R. Marumi, K. Kimura, T. Matsushita, K. Akagi, T. Sasaki, Y. C. Sasaki, *K. Hayashi, *JJAP*, **59** (2020) 010505. (**物理学と化学と生物学の融合**)

4. "Exergonic Intramolecular Singlet Fission of an Adamantanelinked Tetracene Dyad via Twin Quintet Multiexcitons" Y. Matsui, S. Kawaoka, H. Nagashima, T. Nakagawa, N. Okamura, T. Ogaki, E. Ohta, S. Akimoto, A. Sato-Tomita, S. Yagi, Y. Kobori, *H. Ikeda, *J. Phys. Chem. C*, **123**, 18813–18823 (2019). (**領域内共同研究 総括班 池田**)

5. "Microstructural deformation process of shockcompressed polycrystalline aluminum" *K. Ichianagi, S. Takagi, N. Kawai, R. Fukaya, S. Nozawa, K. G. Nakamura, K.-D. Liss, M. Kimura, S. Adachi, *Sci. Rep.*, **9**, 7604 (2019).

6. "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)) 査読付き英語論文 10 件、内 5 件を記載

1. "Computational studies for crystal structures of helicate lanthanide complexes based on X-ray analyses", *N. Nakayama, M. Hijikata, H. Ohmagari, H. Tanaka, Y. Inazuka, D. Saito, S. Obata, K. Ohta, *M. Kato, *H. Goto, *M. Hasegawa, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **94**, 2973–2981 (2021). (**BCSJ Award Article**、**領域内共同研究 A01-01 加藤・A03-02 長谷川美貴**)

2. "Highly stereoselective spirocyclopropanation of various diazooxindoles with olefins catalyzed using Ru(II)-complex" M. Tone, Y. Nakagawa, S. Chanthamath, I. Fujisawa, N. Nakayama, H. Goto, K. Shibatomi, *S. Iwasa, *RSC Adv.*, **8**, 39865–39869 (2018). (**領域内共同研究 A02-04 分担 中山**)

3. "Photonic molecular trains: Soft-crystal polymerization of transformative lanthanide coordination centres", P. P. F. Rosa, Y. Kitagawa, S. Shoji, H. Oyama, K. Imaeda, N. Nakayama, K. Fushimi, H. Uekusa, K. Ueno, H. Goto, *Y. Hasegawa, *Nature Comm.* in press. (**プレスリリース**、**領域内共同研究 A01 公募 植草・A03 公募長谷川晴哉・北川**)

4. "Charge mobility calculation of organic semiconductors without use of experimental single-crystal data" *H. Ishii, *S. Obata, N. Niitsu, S. Watanabe, H. Goto, K. Hirose, N. Kobayashi, T. Okamoto, J. Takeya, *Sci. Rep.*, **10**, 2524 (2020). (**領域内共同研究 A02-04 協力 小畑**)

5. "Soft Crystal Force Field for Reproducing the Crystal Structures of Aryl 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**)

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)) 査読付き英語論文 64 件、内 10 件を記載

1. "Organic deliquescence: organic vapor-induced dissolution of molecular salts", *K. Ishii, K. Yokomori, K. Murata, S. Nakamura, K. Enomoto, *RSC Adv.*, accepted. (**プレスリリース**)

2. "Meso-/Microscopic Single Particle Analyses of Vapochromic Solid State Crystallization in [Pt(CN)₂(H₂dcbpy)]", *K. Ishii, S. Takanohashi, M. Karasawa, K. Enomoto, Y. Shigeta, *M. Kato, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 21055–21061 (2021). (**Supplementary Cover**、**領域内共同研究 A01-01 加藤**)

3. "Vortex-Induced Harmonic Light Scattering of Porphyrin J-Aggregates" S. Hattori, M. Moris, K. Shinozaki, *K. Ishii, *T. Verbiest, *J. Phys. Chem. B*, **125**, 2690–2695 (2021). (**領域内共同研究 A03-01 分担 篠崎**)

4. "Emergent elastic fields induced by topological phase transitions: Impact of molecular chirality and steric anisotropy" *K. Takae, *T. Kawasaki, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **119**, e2118492119. (**プレスリリース**、**物理学と工学**)

5. "Coordination geometrical effect on LMCT-dependent energy transfer processes of luminescent Eu(III) complexes" P. P. Fe. da Rosa, S. Miyazaki, H. Sakamoto, Y. Kitagawa, K. Miyata, T. Akama, M. Kobayashi, K. Fushimi, K. Onda,

T. Taketsugu, *Y. Hasegawa, *J. Phys. Chem. A*, **125**, 209–217 (2021). (Supplementary Cover、領域内共同研究領域内共同研究 A03 公募 長谷川 靖哉)

6. "Direct Observation of the $S_0 \rightarrow T_2$ Transition in Phosphorescent Platinum(II) Octaethylporphyrin, Evidenced by Magnetic Circular Dichroism" *K. Ishii, J. Wada, K. Murata, *J. Phys. Chem. Lett.*, **11**, 9828–9833 (2020). (Supplementary Cover)

7. "Chiral Supramolecular Nanoarchitectures from Macroscopic Mechanical Rotations: Effects on Enantioselective Aggregation Behavior of Phthalocyanines" M. Kuroha, S. Nambu, S. Hattori, Y. Kitagawa, K. Niimura, Y. Mizuno, F. Hamba, *K. Ishii, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58**, 18454–18459 (2019). (プレスリリース)

8. "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)

9. "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、物理学と工学の融合)

10. "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、化学と生物学の融合)

A03-02(計画・長谷川美貴(代表)) 査読付き英語論文 47 件、内 6 件を記載計件

1. "Solvent-Dependent Bending Ability of Salen-Derived Organic Crystals" *M. Hasegawa, D. Iwasawa, T. Kawaguchi, H. Koike, A. Saso, S. Ogata, A. Ishii, M. Iwamura, K. Nozaki, *ChemPlusChem*, **85**, 1692–1696 (2020). (領域内共同研究 A03 公募 岩村)

2. "Electrofluorochromic Device Based on a Redox-Active Europium(III) Complex", *Y. Kim, H. Ohmagari, A. Saso, N. Tamaoki, *M. Hasegawa, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **12**, 46390–46396 (2020). (プレスリリース)

3. "Lanthanide Luminescence Enhancement of Core–Shell Magnetite–SiO₂ Nanoparticles Covered with Chain-Structured Helical Eu/Tb Complexes" S. Goderski, S. Kanno, K. Yoshihara, H. Komiya, K. Goto, T. Tanaka, S. Kawaguchi, A. Ishii, J. Shimoyama, *M. Hasegawa, *S. Lis, *ACS Omega*, **5**, 32930–32938 (2020). (Cover feature)

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

5. "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, S. Sakurai, 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)

6. "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 (2019). (Cover Feature、プレスリリース、領域内共同研究 A03-02 分担 山中)

A03-03(計画・龔(代表)) 査読付き英語論文 27 件、内 6 件を記載

1. "Structure and Unique Functions of Anisotropic Hydrogels Comprising Uniaxially Aligned Lamellar Bilayers" *Y. Yue, *J. P. Gong, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **94**, 2221–2234 (2021). (領域内共同研究 A01 公募 楽、材料学と光学の融合)

2. "Molecular Mechanism of Abnormally Large Non-softening Deformation in a Tough Hydrogel" Y. N. Ye, K. Cui, W. Hong, X. Li, C. Yu, D. Hourdet, T. Nakajima, T. Kurokawa, *J. P. Gong, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **118**, e2014694118 (2021). (材料学と物理学の融合)

3. "Ultra-high-Water-Content Photonic Hydrogels with Large Electro-optic Responses in Visible to Near-infrared Region" *Y. Yue, Y. Norikane, J. P. Gong, *Adv. Opt. Mater.*, **9**, 2002198 (2021). (領域内共同研究 A01 公募 楽、材料学と電気化学の融合)

4. "Hydrogels as Dynamic Memory with Forgetting Ability" C. Yu, H. Guo, *K. Cui, X. Li, Y. N. Ye, T. Kurokawa, *J. P. Gong, *Proc. Natl Acad. Sci. U.S.A.*, **117**, 18962–18968 (2020). (材料学と物理学の融合)

5. "Instant Thermal Switching from Soft Hydrogel to Rigid Plastics Inspired by Thermophile Proteins" *T. Nonoyama, Y. W. Lee, K. Ota, K. Fujioka, W. Hong, *J. P. Gong, *Adv. Mater.*, **32**, 1905878 (2020). (Back Cover、材料学と熱力学の融合)

6. "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). (材料学と物理学の融合)

A03-04(計画・小林(代表)) 査読付き英語論文 18 件、内 6 件を記載

1. "Upconverted blue electrochemiluminescence of 9,10-diphenylanthracene with ultrafast response on photo-electro functional DNA/Ru(bpy)₃²⁺ hybrid electrode" R. Ozawa, H. Minami, K. Nakamura, *N. Kobayashi, *J. Mater. Chem. C*, **9**, 2252–2257 (2021). (Inside front cover、化学とデバイス科学の融合)

2. "Alkyl ammonium ion-induced drastic emission enhancement of Eu(D-facam)₃ in 1-butanol" H. Minami, M. Miyazato, Z. Li, K. Nakamura, N. Kobayashi, *Chem. Commun.*, **56**, 13532–13535, (2020). (Inside Back Cover、化学と材料科学の融合)

3. "Chiroptical property enhancement of chiral Eu(III) complex upon association with DNA-CTMA" H. Minami, N. Itamoto, W. Watanabe, Z. Li, K. Nakamura, N. Kobayashi, *Sci. Rep.*, **10**, 18917 (2020). (化学と材料科学の融合)

4. "An improvement in the coloration properties of Ag deposition-based plasmonic EC devices by precise control of shape and density of deposited Ag nanoparticles" S. Kimura, T. Sugita, K. Nakamura, N. Kobayashi, *Nanoscale*, **12**,

23975–23983 (2020). (**Front Cover**、**化学とデバイス科学の融合**)

5. "Electrochemically Triggered Upconverted Luminescence for Light-Emitting Devices" H. Minmi, T. Ichikawa, K. Nakamura, *N. Kobayashi, *Chem. Commun.*, **55**, 12611–12614 (2019). (**Back Cover**、**化学とデバイス科学の融合**)

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).

<ホームページ等>

- ・2017年9月にHP (<https://www.softcrystal.org/>) 開設し、ニュース・トピックス等を随時配信
- ・ニュースレターNo.1~18 を上記HP ページに掲載 (別途冊子体も発行)
- ・YouTube にてソフトクリスタルのビデオを公開

日本語版：<https://www.youtube.com/watch?v=1eOmNQyCzPY&t=12s> 英語版：<https://www.youtube.com/watch?v=LXE3LeAk3N0>

<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、第5回 2020.1.31、第6回 2021.1.22、第7回 2021.6.11、第8回 2022.3.11)、第7回、第8回はSNSでLIVE発信 (視聴数は第7回 5,708、第8回 8,464)
- ・国際シンポジウム (サテライト 2018.7.5 ストラスブール、第1回 2018.7.30 仙台、第2回 2019.7.12-14 成田、第3回 2021.12.11-15 ハワイ Hybrid)
- ・国際会議セッション (ICCC2018 July 31, 2018 仙台、239th ECS Meeting June 3, 2021 Online、Pacifichem2021 Dec. 19-20, 2021 Online)

<アウトリーチ活動> プレスリリースなど

- ・第4回公開シンポジウムで記者会見、EE Times Japan (2019.5.10)、中部経済新聞 (2019.9.24)、熊本日日新聞 (2019.9.27) に掲載
- ・第7回公開シンポジウムで記者会見、日刊工業新聞 (2021.6.18)、化学工業日報 (2021.7.16) に掲載
- ・第8回公開シンポジウムにおいてプレスリリース (2022.3.4)
- ・A01 加藤昌子、吉田将己「凍ったり融けたりする発光スイッチ材料を開発～引っかき刺激を発光で「見える化」する～」が「日本経済新聞」、「日経産業新聞」等に掲載 (2022.5.27)
- ・A02 伊藤肇「圧電材料を利用した新しい有機合成手法の開発」が「日本経済新聞」(2020.01.06)、「化学工業新聞」(2019.12.23)、「日刊工業新聞」(2019.12.23)、「財経新聞」(2019.12.23) で報道
- ・A03 石井和之「ロータリーエバポレーターのマクロな回転でねじれたキラル分子を合成することに成功」が「日本経済新聞」及び多数のWEB ニュースに掲載 (2019.11.5-12.20)
- ・A03 長谷川美貴「ハセミキ先生の科学やってみよう、見てみよう」朝日小学生新聞隔週火曜、4面、2021年4月から2022年3月(全24回)
- ・A01 高見澤聡、務台俊樹(領域内共同研究)「有機超弾性結晶の発光クロミズム～小さな力で分子配列を変換し発光色の可逆制御を有機結晶で実現～」プレスリリース、「毎日新聞」(2020.4.15)、「日本経済新聞」(2020.4.27) 及び多数のWEB ニュースに掲載
- ・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「読売新聞」等に掲載(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「日本経済新聞」等に掲載 (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「日本経済新聞」等に掲載 (2018.1.24-25)
- ・A03 長谷川靖哉「相転移を示す希土類錯体」で北海道放送にてテレビ出演 (2019.4.13)

企業向け活動

- ・電子ペーパー/フレキシブル技術研究会にて”新しい光機能性結晶素材「ソフトクリスタル」”を企業向けに講演 (2021.11.16)
- ・ソフトクリスタル企業向けデジタルパンフレットを公開 (2021.6)
- ・日刊工業新聞社グループ小冊子「新製品情報」(毎月1回発行)と合わせて、ソフトクリスタル企業向けパンフレット(A3判)14,000部を企業などの登録会員に送付 (2021.12)

https://www.k-ishiilab.iis.u-tokyo.ac.jp/digitalbook_softcrystal/html5.html#page=1



一般向け活動

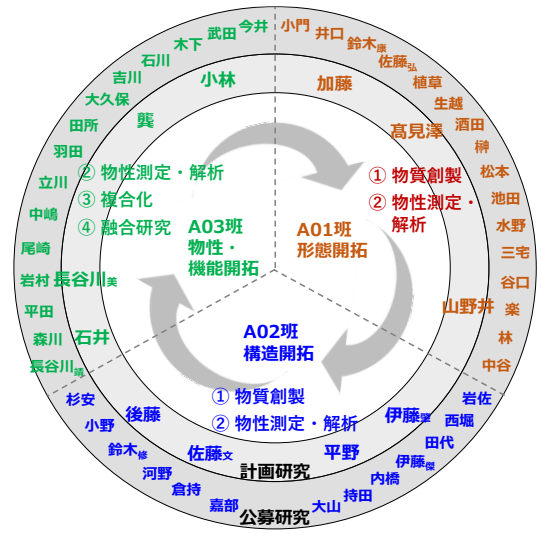
- ・A01 加藤昌子, 国民との科学・技術対話 ACADEMIC FANTASISTA 2018「結晶なのに柔らかい、光るソフトクリスタルの七変化」講演と実験 (2018.8.10. 2019.2.22)
- ・「光化学応用講座 2018—光機能性結晶材料の新展開：基礎と応用の先端科学」を開催 (2018.11.5)
- ・A01 加藤昌子, 第18回新芳香族化学国際会議 市民公開講座「結晶なのに柔らかい、光るソフトクリスタルの七変化」を講演 (2019.7.21)
- ・A01 加藤昌子, 錯体化学会第69回討論会 市民公開講座 国際周期表年「ソフトクリスタル：高秩序で柔軟な応答系の元素たち」を講演 (2019.9.21)
- ・A01 加藤昌子, 第33回三省堂サイエンスカフェ in 札幌、CoSTEP シリーズ 17、「色から始まる変化のいろは ～ソフトクリスタルに見る化学の新潮流～」講師 (2021.1.29)

8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

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。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た(右図)。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、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、独創的なソフトクリスタル形態開拓研究を行ってきた。A02 班の計画研究では、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、ソフトクリスタルの構造開拓研究を行ってきた。A03 班の計画研究では、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、ソフトクリスタルの物性・機能開拓を行ってきた。公募研究を加え、70を超える研究グループ(右図)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きた。



総括班が主導して①研究の進捗を報告する領域全体会議(8回)、②学理構築への明確な道筋を作ることや共同研究体制を強化することを目的とした物性解明研究グループ会議(6回)、③領域内共同研究の促進を目的とした共同研究推進会議(8回)を開催し、連携の強化と共同研究の活発化を積極的に行ってきた。特に**発表の際には、共同研究を促進する項目(提供できるサンプル、行ってほしい測定、提供できる測定、測定したいサンプル、提供できる技術)、共同研究の進捗状況も含める**ことで、共同研究を促進した。また、**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**した。これら会議の開催などを経て、領域内共同研究は250件超となった。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た。**全体の査読付き英語論文718報に対し、領域内共同研究による査読付き英語論文は86報(10%強、典型例を右図内に赤字)、分野融合研究論文は225報(30%強)となった。**これらより、本新学術領域内で、効果的に共同研究や分野融合が促進されたと言えることができる。この繋がりは、本領域終了後も継続していくと考えられ、本新学術領域の大きな成果の一つと考えられる。

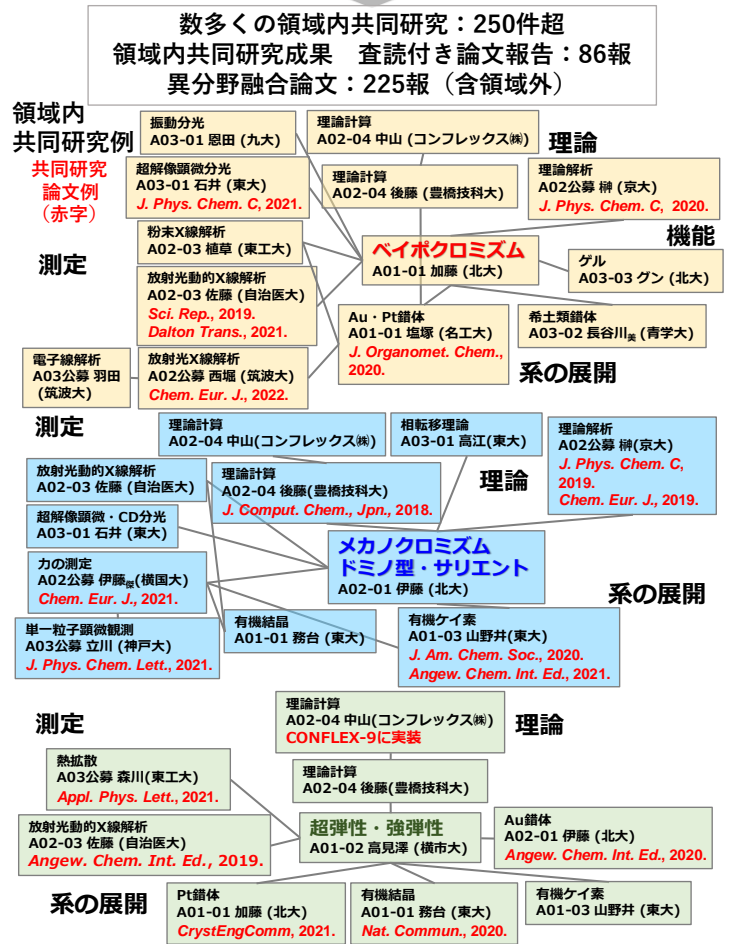
研究戦略共有

- ・物性解明研究グループ会議開催
- ・コンセプト論文発信
- ・ホームページの充実
- ・ニュースレター発行

総括班

共同研究促進

- ・共同研究推進会議開催
- ・研究紹介機会提供
- ・研究紹介資料配布
- ・大型機器利用促進



9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

研究費の使用状況や効果的使用の工夫

1. 各種会議の開催

本新学術領域では、独立に考えたのでは到達できない創造的な着想・共同研究を推奨している。総括班として、公開シンポジウムに合わせて総括班会議、領域全体会議、物性解明研究グループ会議、さらに別日程で共同研究推進会議を開催することで、領域全体の方向性を共有するとともに、会議直後に意見交換会を行うことで領域内共同研究を推進した。これにより、250件以上の領域内共同研究が遂行され、領域内共同研究による査読付き英語論文が86報報告された。

総括班会議：各研究班に領域の実施計画に関する情報を提供し、各研究班あるいはグループから研究計画・進捗状況・成果に関わる情報を集約することで、領域全体の計画が適切に実施できるよう支援した。

領域全体会議：年度の初めと終わりの時期に、計画班、公募班の研究代表者に研究の進捗を報告し、領域全体としてお互いの研究の理解を促進した。また発表には、共同研究を促進する項目（提供できるサンプル、行ってほしい測定、提供できる測定、測定したいサンプル、提供できる技術）、共同研究の進捗状況も含めることで、共同研究を促進した。

物性解明研究グループ会議：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、本会議を計6回開催した。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た。

共同研究推進会議：領域内共同研究の促進を目的として共同研究推進会議を計8回開催した。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、意見交換する時間を設けることで共同研究について話し合う機会を設けた。

2. 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

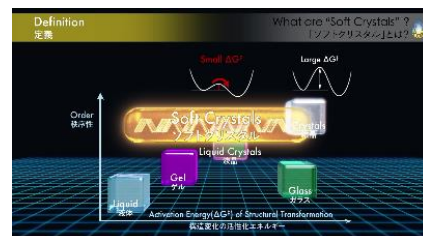
本新学術領域ソフトクリスタルに所属する若手研究者、PDおよび博士課程学生を対象に、計6名の海外派遣（フランス、米国、ベルギー、ドイツ）を実施した（詳細は若手研究者の育成に係る取組状況に記載）。これらの活動は、国際共同研究論文（例：*J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, *139*, 18115; *J. Phys. Chem. B*, **2021**, *125*, 2690.）や国際的に著名な研究者の国際シンポジウム招待等の国際ネットワーク強化に繋がった。

3. 公開シンポジウムの開催

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8回開催した（第1回2017年9月25日@東京、第2回2018年5月25日@札幌、第3回2019年2月1日@京都、第4回2019年4月26日@東京、第5回2020年1月31日@千葉、第6回2021年1月22日@オンライン、第7回2021年6月11日@相模原 ハイブリッド、第8回2022年3月11日、西宮 ハイブリッド）。特にコロナ禍の公開シンポジウムは、SNSでLIVE発信し、第7回は5708名、第8回の8464名の視聴者数となった。これらシンポジウムでは、国内の評価者も招聘し、適切に評価していただいた。

4. 国際シンポジウム等の開催

研究領域の説明、及び研究成果の公表を行うために、国際シンポジウム International Symposium on Soft Crystals を3回開催した（第1回2018年7月30日@仙台、第2回2019年7月12-14日@成田、第3回2021年12月11-15日@ハワイ米国 ハイブリッド）。また、サテライトシンポジウム（2018年7月5日@ストラスブール フランス）と国際会議セッションを3回開催した（ICCC2018 (S09) New aspects of photofunctional metal complexes 2018年7月30日@仙台、239th ECS Meeting (B07) Soft Crystals 2021年6月3日@オンライン、Pacifichem2021 (#254) Photofunctions of Soft Crystals Constructed with Coordination Compounds, 2021年12月19-20日@オンライン）。これらシンポジウムでは、海外から講演者を招待して有意義な議論を行うとともに、評価者も招聘して適切に評価していただいた。



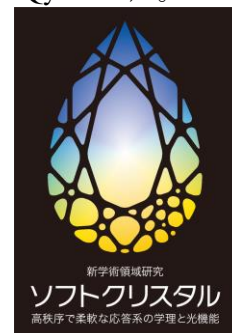
5. 「ソフトクリスタル」ビデオの作成

コロナ禍のため2020年に国際シンポジウムを開催する機会を失った。国際的に「ソフトクリスタル」の概念が定着するよう、「ソフトクリスタル」ビデオを作成した。本ビデオは、2021年12月の第3回国際

シンポジウム、Pacifichem2021(#254)、2022年3月の第8回公開シンポジウムにて放映するとともに、現在、YouTubeにて公開されている（日本語版：<https://www.youtube.com/watch?v=1eOmNQyCzPY>）。

6. 各種アウトリーチ活動

ロゴの作成（右図）、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、4度の国際会議やシンポジウム（43rd International Conference on Coordination Chemistry, 13rd International Meeting of Electrochromism, 5th Japan-Taiwan-Singapore-Hong Kong Quadrilateral Symposium on Coordination Chemistry 2019, Cooperative phenomena in framework materials: Faraday Discussion）や3度の国内討論会（光化学討論会、錯体化学討論会、配位化合物の光化学討論会）におけるブース展示・広告等の各種アウトリーチ活動を行った。



上述した総括班事業を潤滑に運営するために、領域代表（北大・関学大）・事務局（東大）に事務補佐員を採用するとともに、資料の編集作業、学会運営補助やHP作成・運営補助を外部委託した。

設備等（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

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た。これらの装置は領域全体で共用され、他大学の領域研究者からの測定依頼に応じた。単結晶X線構造解析については、幾つかの共同研究が遂行され、代表的には、10種類のLn（=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm）錯体結晶の系統的な構造解析（*Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2021**, *94*, 2973. BCSJ Award Article）、新規光機能性フタロシアニン錯体の構造解析（*Chem. Eur. J.*, under revision.）等の成果が得られている。

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、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）を行い、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構造化照明顕微鏡（SIM）と共焦点レーザー顕微鏡を併設した装置を初めて導入した。有機溶媒蒸気下での測定を行うためのアタッチメントを作製し、本装置でベイポクロミズムを測定できる環境を整えた。幾つかの共同研究を遂行しており、代表的には、単一粒子の三次元的ベイポクロミズム時間変化について超解像顕微鏡観察を行い、メゾ/マイクロ固体結晶化プロセスを解明した（*J. Phys. Chem. C*, **2021**, *125*, 21055.）。

2. 実験資料・資材の提供

「8 研究組織の連携体制」で詳述した様々な施策により、積極的な実験資料の提供を、現象に合わせた測定技術開発と組み合わせることで、250件超の領域内共同研究が行われた（共同研究論文86報）。

具体的な例を幾つか紹介すると、A01-01 加藤は、様々なベイポクロミズムを示す白金錯体を提供した。これにより、上述したベイポクロミズムを適合させた超解像顕微鏡によるメゾ/マイクロ固体結晶化プロセス観察や、A02 公募 西堀が本補助金で開発した蒸気圧を制御可能なX線構造解析装置によるナノ構造変化過程の解明（*Chem. Eur. J.*, **2022**, *28*, e202200703.）が達成された。A02-01 伊藤^豊は、様々なメカノクロミズムを示す金錯体、その結晶構造やサリエント現象測定技術などを提供した。これにより、A02 公募 伊藤^隼によるメカノクロミズム測定装置開発、A02-04 後藤によるイソシアニド金錯体の結晶ポテンシャル開発（*J. Comput. Chem., Jpn.*, **2018**, *17*, 155.）、A01-03 山野井によるジシラン架橋化合物結晶のサーモサリエント現象発見（*J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, *142*, 12651.）が達成された。A01-02 高見澤は、有機超弾性結晶、その結晶構造やソフトクリスタルの機械特性評価技術などを提供した。これにより、A01-01 加藤による発光性白金錯体の変形（*CrystEngComm*, **2021**, *23*, 5891.）、A01-01 務台(分担)による有機超弾性結晶の発光クロミズム（*Nature Commun.*, **2020**, *11*, 1824.）、A02-01 伊藤による発光性強弾性分子性結晶（*Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, *59*, 8839.）が達成された。

なお、計画研究 A01-01 加藤は、令和3年度のコロナ禍における世界的な半導体不足のため納入予定であった試料観察型熱分析装置の年度内調達が困難となったため繰越しが承認された。令和4年度に最終データを測定し、論文にまとめて発表予定である。また、研究成果を英文成書として令和4年度内に発行予定であり、繰越し金にはオープンアクセス料や英文校閲料も含まれる。計画研究 A01-03 山野井は、コロナ禍のために合成原料に用いる試薬の納入が大幅に遅延したため繰越しが承認された。研究成果は2022年夏を目処に論文にまとめる予定である。

10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

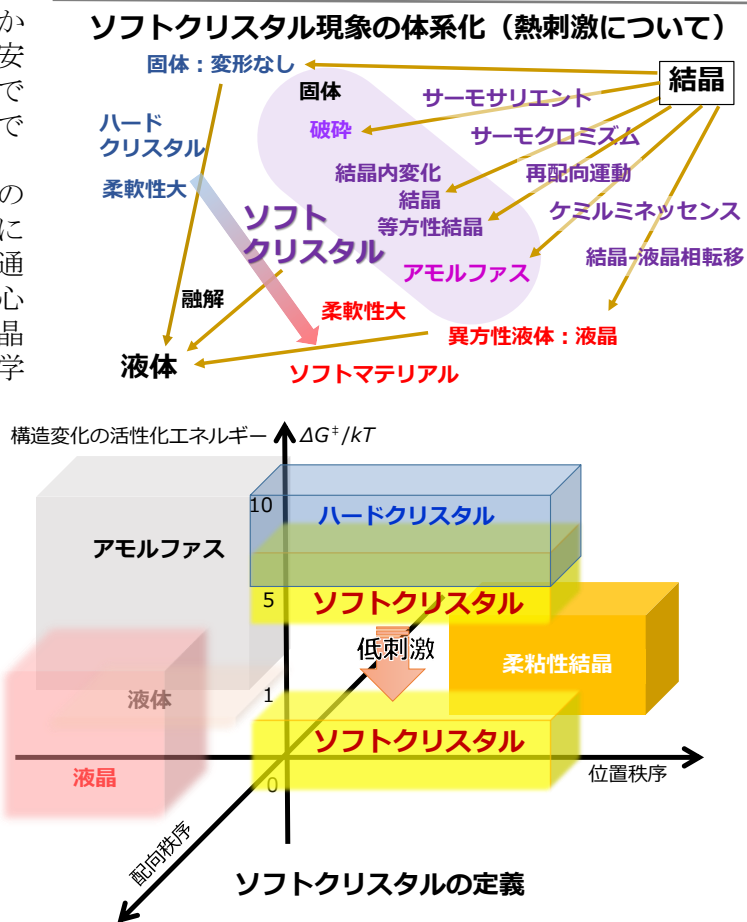
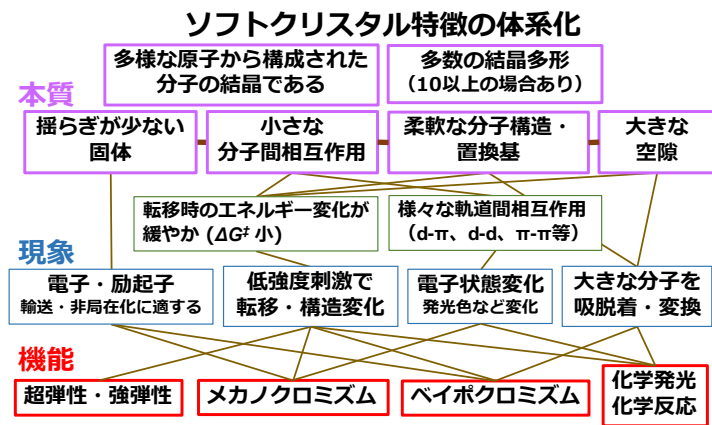
本新学術領域は、新規物質群「ソフトクリスタル」の学理を確立し、その機能を開拓するものであり、「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」に相当する。

ソフトクリスタルの体系化:ソフトクリスタルの特徴として挙げられてきた様々なキーワードを関連づけて整理することで体系化した(右図上)。その発展として、ソフトクリスタルの現象(バイポクロミズム、メカノクロミズム等)を、外部刺激(力・蒸気分子・熱・光)、状態(結晶・アモルファス等)、形状変化の有無、柔軟性の大小などの観点から体系化した(右図下は熱刺激の例)。

ソフトクリスタル学理の確立:ソフトクリスタル「コンセプト論文発表時から、「ハードクリスタルやソフトマターとの比較」、「構造変化と熱力学的エネルギー」、「結晶多形現象」、「液晶や柔粘性結晶との比較」、「分子性結晶の機械的な柔らかさ」を考察し、「ソフトクリスタル」は、通常は安定な結晶であるが、特定の低強度の刺激存在下では ΔG^\ddagger が小さくなり構造変化を起こすことができる結晶と定義することができた。

本領域が発足後、領域代表の加藤は、国内外の関連分野の会議に招待され、ソフトクリスタルに関する講演を行った。関連研究者との議論を通じ、ソフトクリスタルの新しい概念に対する関心の高さを実感した。また、日本化学会、日本結晶学会、日本画像学会、高分子学会等の機関紙や学術雑誌でソフトクリスタルの特集号が組まれ、新しい融合領域として周辺分野や学会に大きなインパクトを与えた。コンセプト論文は、被引用数 160 回を超え (Chem. Eur. J. 誌 2019 年の論文中で 10 位の被引用数)、Soft Crystal の学術用語を記載した論文数も着実に増大している。上述したように、これまで個別に見出されていた現象や物質が整理され、体系的な理解を示し、「ソフトクリスタル」を定義することで学理解明に成功した。これらは学術的に高い意義を持つ。ソフトクリスタルの成果をまとめた英文書籍として令和 4 年度出版を目指して作成中であり、今後のさらなる発展に資するものとなることが期待される。

新規機能性材料の創出に向けて:①化学反応現象を精密に追跡できること、②金属やセラミクス等に対して軽量化でき、柔軟でありながらポリマーでは達成できない長距離の構造秩序と異方性を有すること等、ソフトクリスタルの機能を明示した。光機能を中心に種々の機能導出にも成功した(右表)。今後さらなる研究の展開により、精密材料として活用が期待される。



ソフトクリスタルの刺激と応答の分類

弱い刺激	カ・擦り	熱	光	小分子
応答				
色(発光色)の変化	メカノクロミズム ドミノ型	サーモ クロミズム	フォト クロミズム	バイポ クロミズム
発光	トリボルミネッセ ンス (摩擦発光)	ケミルミネッセ ンス (化学発光)	フォト ルミネッセンス	-
結晶の 大きな動き	超弾性 超塑性	サーモ サリエント 形状記憶	フォト サリエント	-

11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和4年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

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）を実施した。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た。第1回（2018.3.7 静岡）は中山尚史博士（コンフレックス(株)）、小畑繁昭博士（同）、第2回（2018.5.24 札幌）は田代省平助教（東大）・関朋宏助教（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）、第4回は（2019.7.11 東京）は長谷川美貴教授（青学大）・佐藤文菜講師（自治医大）・恩田健教授（九大）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た。また、共同研究推進会議（2021.11.5～7）において、若手の会主催のポスター発表を実施した。若手研究者・学生から29件の発表、領域研究者の投票によりポスター賞を選出し、山本侑貴奈（青学大理工）、石井義記（名大院理）の2名が受賞した。

2. 国際会議における発表機会：①第2回ソフトクリスタル国際シンポジウム（2019.7.12～14 成田）では、80名程度の研究者が一堂に会し、その中で6名の若手研究者も講演した。国外からの研究者による講演も相まって、多様な課題について深い議論が展開された中での発表は良い経験となった。②Pacifichem2021（2021.12.16～21 オンライン）では、31件の講演の中で8名の若手研究者も講演した。若手研究者にとって自身の研究を推進させるものであり、貴重な機会を与えることができた。

3. 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た。

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）、2017/12/7～2018/3/9

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）、2018/1/28～2018/3/28

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）、2018/2/1～2018/3/20

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：2018/9/30～2018/12/23

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：2019/3/19～2019/3/30

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：2019/4/14～2019/7/20

4. 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142件（内国際シンポジウムなど34件）であり、ステップアップは47件（含DC企業就職7件）である（以下例）。

- ① 常安翔太（2018/4 東京工芸大助教採用）
- ② 服部伸吾（2018/4 東大特任研究員採用、2019/4 東大特任研究員→横浜市大助教）
- ③ 酒田陽子（2018/10 金沢大理工助教→准教授）
- ④ 羽田真毅（2019/1 岡山大助教→筑波大准教授）
- ⑤ 尾本賢一郎（2019/2 東大博士研究員→奈良先端科技大院特任助教）
- ⑥ 重田泰宏（2019/3 北大院理 JSPS 研究員→金沢大特任助教）
- ⑦ 北川 裕一（2019/4 北大特任助教→北大特任講師、2021/10 北大特任講師→北大准教授）
- ⑧ 陳 旻究（2019/4 北大特任助教採用、2022/2 北大特任助教→北大准教授）
- ⑨ 鈴木康介（2019/6 東大講師→東大准教授）
- ⑩ 嘉部量太（2019/8 九大助教→沖縄科学技術大学院大学准教授）
- ⑪ 野々山貴行（2020/4 北大特任助教→北大特任准教授、2021/6 北大特任准教授→北大准教授）
- ⑫ 関 朋宏（2020/10 北大助教→静岡大講師）
- ⑬ 小野利和（2021/1 九大助教→九大准教授）
- ⑭ 谷口卓也（2021/4 早大講師→早大准教授）
- ⑮ 久保田浩司（2021/5 北大特任助教→北大准教授）
- ⑯ 中江豊崇（2021/10 東大博士研究員→東京都立大特任助教）
- ⑰ 小門憲太（2020/4 北大助教→北大准教授、2022/4 北大准教授→豊田工業大 教授）
- ⑱ 井口弘章（2022/4 東北大助教→名古屋大准教授）
- ⑲ 松本有正（2022/4 奈良女大助教→奈良女大准教授）
- ⑳ 松橋千尋（2022/6 電通大特任研究員→電通大特任助教）

12 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

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、領域全体会議、国際シンポジウム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（フォントを小さくし、全文掲載）。

井上晴夫 東京都立大学 都市環境科学研究科 特別先導教授：気相、液相、ゲル状態、液晶状態に比較して固相、結晶状態へと周期的構造秩序が発現するに従ってその構造の柔軟性は低下し、結晶相転移のような大きい構造変化などには極めて大きい活性化エネルギーを要するとされてきた。例えば結晶系への光刺激が磁気特性変化を誘起するなどの個別事例はこれまでも散見されながらも、それぞれの系における特殊な事例として扱われ、一般には結晶状態は安定不動とされその動的構造変化は等閑視されてきたと言える。しかしながら、本ソフトクリスタル領域では、研究代表者や各班長などの先駆的発見事例により、その固定観念は大きく覆された。結晶状態で結晶格子内への有機分子の侵襲による結晶単位分子の構造変化とそれともなう結晶構造変化、機械刺激による結晶構造の相転移、固相中の無溶媒化学反応の誘起などを始め、結晶系への種々の摂動が不安定要因となって自己無撞着的緩和、構成分子の構造変化、結晶構造変化、相転移などを誘起するというこれまでの常識を覆す新事例が本領域で次々と発見されている。固相、結晶状態にある物質系も、適切な摂動を受けると柔軟にその規則構造を変化させ、相転移や物性変化を発現することが本領域の研究展開で普遍化されつつある。まさに、新しい学術領域の発見、創成と言えるであろう。この学術的意義は極めて高い。本新学術領域に命名された「ソフトクリスタル」は、当該の学術領域が包含すると予測される研究領域、研究展開の方向性を多面的に俯瞰する内容を簡潔に表現した象徴的、秀逸なキーワードとして高く評価される。この絶妙なネーミングからも領域代表、各班長等が明確に本領域の展開方向を俯瞰し、新領域の創設に十分な先導性を有していることが窺える。領域代表などによる Conceptual paper (Chem. Eur. J. (2019).) や Special issue (Photochem. Rev. (2022).) の執筆による領域全体の方向性の提示により班員が呼応する形で続々と新事例が発見されていることや、物質系の開発/計測/理論による検証と予測など、班員間の極めて活発な共同研究が展開されていることを見ても、5年間を通しての領域運営が奏功したことを理解、評価できる。発見事例の分類と整理、摂動を受けた後の動的変化の観測、摂動による自己無撞着型緩和と動的構造変化などの各過程時定数の評価などを足掛かりに、学理の一層の解明への大きい期待がある。「ソフトクリスタル」は真に新しい学術領域として今後の発展性が大いに期待できるものと高く評価する。

北川 進 京都大学 高等研究院 特別教授：これまでの「結晶を扱う化学」は static が主となる視点であったが、本領域では dynamic な視点にフォーカスして新しい融合領域を開拓発展させようとする挑戦的な試みをおこなってきた。そして、光、熱、圧力などの外部刺激に対して応答する新規な機能が、様々な解析手法や、理論的取扱いにより生き生きと語れる成果が得られており、これまでにない展開、発展が見られた。特に、本領域は観測を行う専門家が多く参画しており、熱力学平衡系から過渡的な状態を捉えること、新しい物性の検出などができ、これまでわからなかったことが解明され、理解されるようになってきた。本領域はある意味では分子、イオン集積系の集合効果、協同効果にフォーカスしたサイエンスとも言える。分子設計、合成、結晶合成、構造解析、物性観測、化学反応実現、理論及び計算機科学による理解、説明など多岐の分野にわたる研究者が集っている、まさに集団で学術創製を行う本科学研究費の趣旨に合致する取り組みである。本領域では何よりも共同研究が重要である。加藤領域代表及び総括班が大変工夫し、「共同研究推進会議」の組織立ち上げによる積極的な共同研究促進が行われるよう尽力された。発足当初より当領域の定期的な会議やこの領域主催のシンポジウムに出席して研究成果を注視してきた。本領域の班の構成はバランスが良く、一方参画研究者は意欲的である。メンバーについては固定することなく入れ替えを行い、若手を率先して採択するなど本領域の継承的発展性に留意した取り組みを高く評価したい。総説を通して、ソフトクリスタル (Soft Crystal) という分野名を国際的に発信することも努力している。以下箇条書きにて評価及び今後の研究活動に留意すべき点を示す。1) 評価委員はこの5年間シンポジウムや領域の発表会に参加して新しい成果を聞くと同時に、その成果や考え方を一般の方々や海外への発信を行っているかに注目してきた。この領域は「一体何か?」、「Soft Crystal とは?」に関しては本年3月11日の公開シンポジウムにおいて加藤領域代表が披露したプロモーションビデオは大変視覚的にわかりやすく、public engagement の努力も十分なされていると感じた。また、前述のように領域代表が指導的立場に立って欧文の総説を発表した。5年経過してより「Soft Crystal」が明確になったことを踏まえ、さらに高いレベルの総説が出せるのではないかと期待する。2) 各班員については、本領域の終了に向けた個々の研究の益々の発展、体系化などを期待したい。もちろん、本領域で萌芽的発見をした班員は、とどまることなくさらなる展開が期待される。3) 数理及び計算科学的な分野との関連 多くの成果が得られてくると、分子、イオンなど多様なコンポーネントの組み合わせによりデータサイエンス、マシンラーニング、AI 予測などが重要なステップとなる。構成員が一致団結してこのような構造、機能予測が合理的にできるスタートに立てきたと考える。今後計算機科学の分野とますます緊密につながれる展開が期待される。4) ソフトクリスタルの学術分野は今後大きく発展するであろう。マクロスコピックサイズ (すなわちバルク) からメソスコピックドメインの現象、すなわち集合系の取り扱いがかるうじてもしくは取り扱えないようなドメインの引き起こす現象が面白く、今後、さらなる“ソフト概念”の拡張や理解が深まるのではないかと考える。参画した研究者の大いなる活躍を期待したい。最後に本領域を発展的にまとめ上げた、加藤領域代表をはじめとした計画班の班長、班員の方々の指導力、ご努力に敬意を表したい。

西原寛 東京理科大学 研究推進機構総合研究院 教授：1) 研究目標・構想：液晶と(硬い)結晶の境界領域に位置付けられ、単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新しい物質領域に焦点を当てた本研究領域は、単結晶の動的挙動というコンセプトから生み出される物質開拓や熱力学・速度論解析、測定技術の進化、理論解析などの独創的な研究テーマを通して様々な研究領域・分野へ波及する。本領域はソフトクリスタルに関連する成果を整理して発展させるとともに新現象を発見して学理を探索することと色々な光デバイス、メモリなどへ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、バランスよく構成された研究目標である。2) これまでの研究成果：計画班員が先導して、ソルバトクロミズムやドミノ型相転移などの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、かつ積極的に共同研究をすすめることで本領域の進むべき方向を示してきたことで、公募班員の研究が非常に活発になり、発展した。公募班には物質合成に加えて、X線構造解析、走査型プローブ顕微鏡解析、先端分光測定、理論計算などの研究者がバランスよく加わっていることによって、共同研究が加速され、インパクトの高い成果へ結びついた。3) 領域運営・活動状況：領域代表の加藤先生と班長を中心に、総括班を構成する計画班員が一体となって領域の運営に努めて情報収集や発信を行っており、定期的な冊子体およびWEBページにて発行されるニュースレターにてその活動状況が詳しく報告された。コロナ禍の中においても、オンライン会議やハイブリッド会議を巧みに活用して領域会議や国際会議におけるシンポジウムも活発に行われた。Chem. Eur. J. に掲載された本領域のコンセプトを示す論文や分かり易かつ魅力的にソフトクリスタルを紹介したビデオなどによって、国際的な認知度も大きく高まる

ことが期待される。4) 今後の発展性：班員間の共同研究や領域内における活発な研究交流の成果が今後、ソフトクリスタルの次のステージの大型研究プロジェクトへつながることを強く期待したい。5) その他（領域関連事項、総評など）：本領域の発足当時よりソフトクリスタルの概念が極めて明確になり、日本発の研究領域として国際的に認知されつつあると思う。この概念を継続・発展させる試みを、領域終了後も是非続けていただきたい。

徳丸克己 筑波大学 名誉教授：物質はさまざまな外からの刺激に対して応答する。本研究は、ことに、蒸気や力学的刺激に対して応答し、さまざまな挙動を示す固体系物質をソフトクリスタルと命名し、その実態の解明を進めたものである。その研究の顕著な成果としては、まず、蒸気に対しては、一群の白金錯体がそれを包摂した状態を形成し、特有の色や発光を示し、その機構が解明された。また、外からの力学的刺激に関しては、多様な現象が研究された。例えば、ある針状の結晶は、折るような向きに力を加えられると、切断されずに、屈曲し、その力を除くと、元の形態に復帰する超弾性を示す。ある種の高分子ゲルは、強靱な粘弾性を示し、センサーや医療材料としての利用の可能性が高い。いろいろな物質は擦ることにより、その分子の化学結合が切断をされ、化学反応を起こす。とりわけ、ボールミルで物質を擦ると起こる化学反応が研究され、なかでも、有機合成で頻用されるグリニャール試薬をペースト状に生成させ、簡便に反応を起こさせる手法は、高い関心を集めている。また、溶液の濃縮について、キラル置換基を持つポリチオフェン溶液の濃縮を速やかに行くと、速度論的に有利な P 型会合体を、他方、遅く行くと、熱力学論的に安定な M 型会合体を形成する。さらに、回転濃縮に関して、その向きにより、フタロシアニン溶液から生成する薄膜のキラリティが反転する。磁気回転子の回転による渦運動で、ポルフィリン J 会合体は捩れたキラル超分子構造を形成し、回転による渦が誘起する非線形光散乱が初めて観測され、マクロな機械的回転による分子配列を計測する方法論が提示された。これら各種の現象について、計測と計算の手法も発展してきた。本研究では、研究者が相互に情報を交換し、共同研究を促進する運営が進められ、多くの成果が得られた。多数の研究論文とともに、総説も多く発表され、このソフトクリスタル研究の特集号が *Photochemistry Review* で、結晶関係では、日本結晶学会誌で発刊された。本研究により、多くの物質が蒸気や力学的刺激に対して示す多数の興味ある挙動を明らかにすることができたが、さらに、化学の基本的課題として、分子の構造とそのソフトクリスタル的な挙動を相関づけられると素晴らしいことである。今後の更なる展開を期待している。

橋本和仁 国立研究開発法人 科学技術振興機構理事長：本領域は、高秩序で柔軟な応答系「ソフトクリスタル」の学理と光機能に関する新しい分野融合的学術領域の確立をめざすことを目標に研究が実施された。当初から共同研究推進会議等を通じて領域内共同研究が積極的に奨励され領域研究体制が構築された。その効果は後半になって顕在化し、中間評価の時点ではそれほど多くはなかった論文数が、現時点で飛躍的に増大していることは評価できる。また、コロナ禍の状況でも、SNS や動画による広報活動を積極的に展開し、国内外に「ソフトクリスタル」の学術領域の重要性と研究成果が認知されるようになったことも特筆されよう。したがって学術的な成果についてはこの 5 年間で一定の成功をおさめたと言えよう。しかし現段階においてはソフトクリスタルが現れる（合成する）ための条件が必ずしも十分に解明されたとはいえない。しかし現段階においてはソフトクリスタルが現れる（合成する）ための条件が必ずしも十分に解明されたとはいえないのではないだろうか。「新学術領域の確立と学理の解明」を掲げているのであるから、「ソフトクリスタル」を「結晶」および「ソフトマター」と比較し、定量的なレベルにまで踏み込んだ解析を行うことにより「学問分野」としてさらに発展させてほしい。一方で、当初の領域目標として、学理の解明とともに新機能の創出が設定されているが、機能については基礎概念の提案段階であり、実材料に発展するかどうかは現段階では不明である。実材料を目指すのであれば、当初より目標を見定める必要があることを指摘していたが、将来的な社会還元への視点を保持しつつ、本気で（たんに枕詞で何かの役に立つというだけではなく）次の研究段階に進むことを期待したい。なお、若手育成にも考慮した領域運営がなされており、後半の公募研究では約半数を入れ替えて、若手研究者の積極採用と課題の絞り込みがはかられてきたことは高く評価したい。

Peter C. Ford, FRSC, Distinguished Professor of Chemistry University of California, Santa Barbara : (1) Aim of the Project: The team of researchers that initiated the Soft Crystals Project identified a novel area of materials chemistry that had previously received only fragmentary attention. This topic is concerned with highly ordered, stable molecular and supramolecular solids for which the properties and structures can be affected by relatively gentle macroscopic perturbations, that is, “soft crystals”. By focusing the collaborative efforts of researchers with complementary talents, the Soft Crystal Project has codified this scientific area in a manner that will have a long-term impact on the fundamental understanding of such soft crystals and on the development of new functional materials. As I remarked at the 1st ISSC, there are analogies here both to biochemistry and to nanoscience, where functions are controlled, not simply by molecular structure, but also by much more subtle tertiary properties and effects. The excellent movie that was prepared to illustrate these points to an international audience was very convincing. (2) Present research activities: The talks and research presented at the 3rd ISSC clearly demonstrated the remarkable success of the Soft Crystals Project as an incubator of exciting new collaborative research. It also has drawn the attention of other investigators world-wide to this novel area of science. The project has engaged a very large number of senior investigators and early career researchers. The group leaders have managed this team very effectively by keeping attention on the project’s common goals. They have also included the important theoretical and computational methods among the team’s collective techniques to evaluate quantitative energy landscapes of unique structures and mechanisms as well as of key physical and photophysical phenomena. The lengthy list of excellent publications resulting from this project (as listed in the Soft Crystals website) and the very high quality of the research talks presented to the 3rd ISSC testify to the impressive accomplishments made by consortium members. Reported at the latter were numerous exciting developments, selected examples being: (i) Induced chirality in supramolecular structures dependent on the rotation direction of the material in a rotary evaporator; (ii) Intense luminescence from self-assembled crystals of new platinum(II) complexes that display remarkable sensitivity to temperature, applied pressure and organic vapors; (iii) Luminescence mechanochromism of gold complex solids; and (iv) Triboluminescence and thermo-sensitive luminescence mechanisms of rare earth complexes in soft crystals. (3) Future research plans: Although it is ending, the Soft Crystals Project has stimulated considerable on-going research by individual and collaborative groups. While it is difficult to predict what new directions these efforts will now take, we can look forward to very interesting and surprising new discoveries as the field of soft crystals further develops. (4) Other points: The Soft Crystals Project has succeeded in defining and demonstrating a novel area of materials chemistry, the importance of which has previously been underappreciated. The Project has developed the field of soft crystal materials chemistry into an objective science, and it will have a lasting effect on this field.

Vivian Wing-Wah Yam, Professor of Chemistry, The University of Hong Kong, China: The project “Soft Crystals: Science and Photofunctions of Flexible Response Systems with High Structural Order”, which was first launched in 2017 as one of projects in Scientific Research on Innovative Areas supported by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) KAKENHI, has flourished and has been completed with great success under the leadership of Prof. Masako Kato. The project has brought together metal complex coordination chemists, organic chemists, physical chemists, materials chemists, polymer scientists, solid-state chemists, crystallographers, condensed matter physicists, electronics engineers, theoretical physicists, and theoretical and computational chemists to work on frontier areas involving an understanding of intermolecular forces and structural order in soft crystals. The project has nurtured outstanding young talents and has led to innovative and unique functional materials that can respond to stimuli and changes in the environment with far-reaching applications.