

平成 26 年 6 月 9 日現在

機関番号：14401

研究種目：新学術領域研究(研究領域提案型)

研究期間：2008～2013

課題番号：20111001

研究課題名(和文)分子ナノシステムの創発化学

研究課題名(英文)Emergence Chemistry of Nano-scale Molecular system

研究代表者

川合 知二(KAWAI, Tomoji)

大阪大学・産業科学研究所・特任教授(常勤)

研究者番号：20092546

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 52,800,000円、(間接経費) 15,840,000円

研究成果の概要(和文)：本領域では、非平衡開放系における時間・空間の自己組織化の原理を取り入れ、分子の個性が現れる高次な組織体や機能の創発を目指した研究を展開してきた。動的な非平衡プロセスによる酸化物ナノワイヤー成長や排他的経路選択による巨大高次構造を持つ多成分構造体の一義的生成など、分子間隣接相互作用のスケールを遥に超えた自己組織化の原理に迫る成果を得た。さらに、非線形性や雑音など、これまで化学には馴染みの薄い概念に基づいて、閾値型の応答を示す自己組織化、分子の酸化還元ネットワークにおける確率共鳴現象の発現など創発的な機能探索を行った。これらの成果を通して「創発化学」という新しい学術領域の存在と重要性を示した。

研究成果の概要(英文)：In this project, emergence of higher-order structure and function based on molecules has been developed by self-organization in non-equilibrium system. The achievements, such as the growth of oxide nanowire using dynamic non-equilibrium processes and the unique synthesis of huge-multi-component complexes by exclusive channel selection, indicate the significance of self-organization beyond the scale of interactions between molecules. Furthermore, the role of nonlinear properties and noise in chemical system has been demonstrated by threshold response in self-organization and stochastic resonance in redox network system. These achievements indicate that the significance of innovative area of "emergence in chemistry".

研究分野：複合新領域

科研費の分科・細目：ナノ・マイクロ化学

キーワード：創発 自己組織化 自己階層化 自己機能化 トップダウン・ボトムアップ 融合

1. 研究開始当初の背景

本領域では、高度な分子プログラミングや非平衡科学に基づいた分子レベルの創発を探求し、それを基盤とした新規な物質・機能・ナノシステムの創成を「創発化学」と位置づけて、その学理の追求と応用技術への展開を推進することを目的とする。このような分野融合的研究を推進するためには、領域内の研究者がお互いの研究について議論を交わす機会を持つことが重要である。また、少し離れた分野の高い立場からの講演を聞き、学問分野を俯瞰して新しい連関を見出す機会を持つことが必要である。

2. 研究の目的

本領域では、主に化学の領域で行われてきた平衡系分子構造の高度化による高次構造と高次機能の発現と、主に物理の領域で行われてきた非平衡開放系の散逸構造が導く階層形成を結び付ける研究を実施する。このような分野融合的研究を推進し、「創発化学」の概念を確立するために、領域内で行われている研究を広く概観して、概念を共有するための仕組みや機会を設定することが総括班の目的である。

3. 研究の方法

平成20年度は初年度であるので、領域研究を進めるための体制を構築した。領域のホームページを立ち上げ、創造化学の概念を明確に記載し、領域の基本的な考え方を発信した。領域研究を効果的に推進するため、Webサイトを通じた情報交換や国際的な情報発信を重視している。このため、Webページのデザイン、コーディングと英語によるコミュニケーションが可能な事務担当者を採用し、機動的かつ国際的な運営を行う体制を確立した。Webページには、A01-04の各研究項目の目標と関連分野・キーワードを明示し、平成21年度からスタートする公募研究の応募者が具体的な研究内容を的確に把握できるようにした。領域内研究者が「創発化学」の概念を共有し、既存の研究分野との違いや個別の計画研究の位置づけを明確にすることを目的とした領域発足会議を開催した。会議では、理論とモデルに関する講演を軸に創発化学の概念構築を図り、平成21年度の公募研究を加えた第一回全体会議で、具体的な研究戦略を策定するための準備を行った。

平成21年度は、領域関係者全員が集まる2回の会議を設定した。会議の際には班会議を組み合わせ、班内部の共通認識形成と、全体を通じた概観の両方を得られるように工夫を行った。全体会議は、公募研究者決定後の最初の領域全員が集まる機会であったので、全員が5分程度のショートトークを行うとともに、研究分担者、連携研究者、研究室の学生の多数のポスター発表を組み合わせ、領域内の研究者相互が十分に知り合う機会とした。公開シンポジウムでは、領域を貫く

いくつかの論点を意識したプログラム構成を行った。それぞれの論点に関連した研究を行っている領域外研究者の招待講演を組み合わせ、ストーリーとして、厚みのある深い議論を行うようにした。また、領域研究を発信するために、特に領域外からの一般参加を重視し、外部参加者にもポスター発表を奨励することにより、議論の拡がりを目指した。

平成22年度は、全員がそろって議論するために、都心から離れて河口湖において合宿形式で全体会議(8月)を開催した。あえてポスター発表を行わず、全領域メンバーが全ての計画研究、公募研究者の15分以上の講演を聞いて、全員で議論することを行った。プログラムは単純な班別構成を避けて、共通の視点や方法のあるものを集めて、班を越えたプログラム編成を行い、お互いの関連が浮き彫りになるよう工夫を行った。第二回公開シンポジウム(2月、東京)では、3名の招待講演者を迎え、創発に関する高い立場からの講演のあと、領域内研究者の講演が続くように工夫したプログラムを編成した。また、プログラムは、若手やこれまでの研究会で長時間の講演を行っていないメンバーを中心に選び、新鮮さが出るように工夫を行った。

平成23年度は、新しい公募研究者を迎えた。そこで、8月の全体会議(別府、非公開)では、初日にポスターセッションを中心に領域全体を俯瞰できるように配慮した。合宿形式で会議を行い、十分な議論を行った。新しいメンバーとも充分な懇親の時間を取れるようにし、各研究者間の議論と交流を促した。また、昼食時に班会議も行い、新しい公募研究者が各班のメンバーに入っていくやすいよう配慮した。2月の公開シンポジウムでは、前年同様に領域を貫くいくつかの論点を意識したプログラム構成を行った。それぞれの論点に関連した研究を行っている領域外研究者の招待講演を組み合わせ、深い議論を導くように会議を構成した。領域研究を発信し、広く領域外の研究者と議論を行うために、一般からの参加を重視し、外部参加者にもポスター発表を奨励した。

平成24年度は最終年度にあたるので、領域のこれまでの成果を概観し、領域設定時の目的に照らして、どのような成果が得られたかを明らかにする目的で領域会議、公開シンポジウムを設定した。領域を貫く創発化学の概念を導く要因は何か、また、新しい分野形成の芽となる研究は何かについて、領域全体で考えることを目的に総括班を運営した。8月の全体会議(志賀高原、非公開)は、濃密な議論が行えるように、あえて都市部から離れたアクセスにある程度の時間を要する場所を選び、いわゆる缶詰状態での会議を開催した。これまで、全体会議では、単純な班別発表形式を避けて、班を越えた意味付けや軸を中心に講演を配置してきた。しかし、今回は最終の全体会議であるので、改めて全体を俯瞰し、創発の要因を整理していくために、

あえて班別の順序で全員が講演を行った。その後、各研究課題から最低1件以上のポスター発表を行い、詳細な議論を深めた。領域の総仕上げとして、領域終了シンポジウムを開催した。シンポジウムは成果発信の場として相応しく、交通至便かつな場所として、東京国際フォーラムで開催した。1日目は公開講座を開催し、領域を代表する成果の講演を行った。さらに、1日目夕刻にポスターセッション、2日目には研究代表者全員による5年間の研究総まとめのショートプレゼンテーションを行った。

平成25年度は、5年間の研究の総まとめをおこなうとともに、事後評価報告書作成および成果概要集の作成を行った。事後評価報告書では、領域全体の5年間の研究成果を収集し、原著論文総数、招待講演・依頼講演総数を把握した。さらに、ハイインパクトジャーナルに掲載された論文数の調査を行い、結果を記載した。また、学術誌の表紙を飾った研究や新聞発表、Web記事などを集め、その縮小画像をまとめて掲載した。成果概要集では、計画研究2ページ、公募研究1ページのフォーマットを設定し、領域内で行われた各研究課題の概要、領域内での位置づけ、成果、論文をコンパクトにまとめて概観できるように編集作業を行った。報告書、概要集は上質紙を用いてカラーで印刷され、領域外への情報発信媒体として魅力的かつ長期の使用に耐えるものに仕上げた。

4. 研究成果

「創発」という言葉には、生命を強く意識した含みがある。本領域を構成する多くの研究にも、生命に学び、あるいは生命を模倣するという方向がある。本領域では、生命科学ではないが、生物に近づくような柔軟かつ高次の構造や機能を目指し、システムとして構成され、働く物質科学を目指した研究を展開した。それは、従来の静的な化学から非平衡開放系を積極的に取り入れた、より動的な化学へ向かう新しい学術領域への挑戦であった。本領域の特色は、「創発」という高い普遍性を持った概念により、非常に幅広い研究分野の研究者が関わったことにある。この新学術領域が無ければ出会うこともなかった研究者同士が、「創発」という概念を共有することで共同研究が可能になり、そこから事前には予想できなかった新しい成果の萌芽を得ることができた。

本領域では、非平衡開放系における時間・空間の自己組織化の原理を取り入れ、分子の個性が現れる高次な組織体や機能の創発を目指した研究を展開してきた。動的な非平衡プロセスによる酸化物ナノワイヤー成長の分子論的理解を進め、理論に基づく設計が可能になった。また、初期条件の設定により、排他的経路選択が起こり、巨大高次構造を持つ多成分構造体が一義的に生成することが分かった。いずれも、分子間隣接相互作用のス

ケールを遥に超えた自己組織化の原理に迫る成果であり、物質科学、材料科学に大きなインパクトを与えた。さらに、非線形性や雑音など、これまで化学には馴染みの薄い概念に基づいた研究も多く行われた。たとえば、閾値型の応答を示す分子集積過程を持つ自己組織化を利用したセンサーの開発や、分子の酸化還元ネットワークを用いた確率共鳴現象の発現など、個別分子の物性の総和を超えた、創発的な機能の探索が行われた。これらの成果は、静的な高次構造を追求する従来の化学と、粒子や連体を対象とした散逸構造を導く非平衡開放系の物理の間に、新しく豊かな科学の領域が広がっていることを意味している。

研究期間中に4回開催した公開シンポジウムでは、毎回、約50名の一般参加者を集め、ポスター発表も約15%が領域外からの参加であった。成果発信ならびに領域外研究者を巻き込んだ議論を活発に行い、「創発化学」という新しい学術領域の存在と重要性を示すことに成功し、物質科学の領域に大きなインパクトを与えた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[学会発表](計5件)

Takuji Ogawa, Tomohiko Yamaguchi,
Physics and Chemistry of Self-organization
in an Emergent Process、

Asia Conference on Nanoscience and
Nanotechnology 2012、2012年9月7
10日、(Lijiang, Yunnan, China)

藤田誠、相田卓三、君塚信夫、中西尚志、
分子ナノシステムの創発化学、第5回大
環状および超分子化学国際会議
(ISMSC2010)、2010年6月6-10日、奈
良県新公会堂(奈良県)

小川琢治、松井真二、赤井恵、石田敬雄、
松本卓也、高次階層性を持つ表面分子ナ
ノシステム、第29回表面科学学術講演
会、2009年10月27日、タワーホール船
堀(東京都)

川合知二、イントロダクリートーク:創
発に基づく材料科学、第56回応用物理
学関係連合講演会、2009年3月31日、
筑波大学(茨城県)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川合 知二 (KAWAI, Tomoji)

大阪大学・産業科学研究所・特任教授(常勤)

研究者番号: 200092546

(2) 研究分担者

相田 卓三 (AIDA, Takuzo)

東京大学・工学研究科・教授

研究者番号: 00167769

松井 真二 (MATSUI, Shinji)
兵庫県立大学・付置研究所・教授
研究者番号：00312306

浅井 哲也 (ASAI, Tetsuya)
北海道大学・情報科学研究科・准教授
研究者番号：00312380

新海 征治 (SINKAI, Seiji)
崇城大学・工学部・教授
研究者番号：20038045

甲斐 昌一 (KAI, Shoichi)
九州大学・工学研究院・特命教授
研究者番号：20112295

田中 裕行 (TANAKA, Hiroyuki)
大阪大学・産業科学研究所・助教
研究者番号：20314429

坂口 浩司 (SAKAGUCHI, Hiroshi)
京都大学・エネルギー理工学研究所・教授
研究者番号：30211931

石田 敬雄 (ISHIDA, Takao)
独立行政法人産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門・研究グループ長
研究者番号：40281646

松本 卓也 (MATSUMOTO, Takuya)
大阪大学・理学研究科・教授
研究者番号：50229556

赤井 恵 (AKAI, Megumi)
大阪大学・工学研究科・助教
研究者番号：50437373

山口 智彦 (YAMAGUCHI, Tomohiko)
独立行政法人産業技術総合研究所・ナノシステム研究部門・副部門長
研究者番号：70358232

小川 琢治 (OGAWA, Takuji)
大阪大学・理学研究科・教授
研究者番号：80169185

小西 克明 (KONISHI, Katsuaki)
北海道大学・地球環境科学研究所・教授
研究者番号：80234798

君塚 信夫 (KIMIZUKA, Nobuo)
九州大学・工学研究院・教授
研究者番号：90186304

藤田 誠 (FUJITA, Makoto)
(平成24年5月から研究協力者)
東京大学・工学研究科・教授
研究者番号：90209065

(3)連携研究者
該当無し

(4)研究協力者
茅 幸二 (KAYA, Koji)
独立行政法人理化学研究所・次世代スーパーコンピュータ開発実施本部・副本部長
研究者番号：10004425

松重 和美 (MATSUSIGE, Kazumi)
四国大学・学長
研究者番号：80091362

岡本 佳男 (OKAMOTO, Yoshio)
名古屋大学・名誉教授
研究者番号：60029501

吉川 研一 (YOSHIKAWA, Kenichi)
同志社大学・生命医科学科医情報学科
・教授
研究者番号：80110823

北川 禎三 (KITAGAWA, Teizo)
兵庫県立大学・理学部・特任教授
研究者番号：40029955