

【平成20年度 新学術領域研究（研究領域提案型）研究概要及び審査結果の所見】
理工系

研究領域名	高次 π 空間の創発と機能開発
領域代表者名	赤阪 健（筑波大学・大学院数理物質科学研究科・教授）
領域代表者からの応募総額	8億7200万円
研究期間	平成20年度～24年度

活性化された π 電子による高次 π 空間の創発

1. 本領域の目的

フラーレンやポルフィリンに代表される π 電子系化合物の合成、物性解明、さらには機能発現に関する研究は、着実な進展を見せており、さらなる展開を図ろうとする機運が高まっている。本新学術領域研究では、分子に多様な機能や構造をもたらす π 電子に焦点を当て、これまでにない超分子的集積化ならびに光・電子・磁場の影響など様々な相互作用の研究を展開する。この π 電子を軸とした相互作用により、高度で複雑な秩序やシステムまでもが生じる場を高次 π 空間と定義し、1) はっきりとした目的や方向性をもった研究、いわゆるストラテジックリサーチ、及び、2) 自立的な要素が多数集まる事で始めて起きる創発的研究を推進する。この2つの研究を同時にかつ並行して行い、サイエンスの確実な進歩と予測不可能性に根ざしたイノベーションを実現していくことで、次世代の新しい化学の学術創成に貢献することを目的としている。

2. 本領域の内容

本領域では以下の四つの研究項目を設定し、項目間での緊密な連携のもとに研究を推進する。研究項目A01は「非平面」を切り口に新しい π 電子系の創製を行い、A02では π 電子系の集積化による機能性「高次 π 空間」の開発を行う。研究項目A03は高次 π 空間にはたらく電子、光、磁氣的相互作用を明らかにしながら革新的機能の開発を行う。研究項目A04では高次 π 空間を有する生体分子とタンパク質あるいは他の化合物との相互作用を研究することで新現象の発見や新概念の構築を図る。

3. 期待される成果

本領域によって新しい π 電子系分子を創製し、これらに基づいた高次 π 空間系の創発を図り、これまで十分な試みがなされてこなかった機能開発をも実践することで化学の発展に寄与する。領域内での有機的な繋がりのある連携により共同研究を推進すれば、新物質創製、新材料創製、機能開拓を展開できると共に、新現象の発見や新概念の創出に繋がるものと期待される。

【キーワード】

π 電子：結合方向とは垂直の方向を向いた、隣り合ったp軌道同士の重なりによってできる π 軌道上の電子。 π 電子によって構成される π 結合は σ 結合より弱く、反応性に富んでいる。

【科学研究費補助金審査部会における所見】

本研究領域は、分子に多様な構造と機能をもたらす特異な π 電子の特性に着目し、活性化された曲がった π 電子系でできる空間「高次 π 空間」を切り口とすることで、より高度で複雑な秩序やシステムの発現を目指すという挑戦的かつ独創性の高い課題である。世界をリードしている中核研究者達を中心として実績のある研究者を複数の分野から集めて研究組織を構成し、若手研究者などにも配慮するなど、非常に良く練られた研究組織が提案されており、分子科学の発展にとどまらず、集積化への挑戦、さらには生物化学への貢献が期待できる。我が国が優位性を持つ研究領域であり世界的な競争が激しさを増す中で当該研究領域の格段の研究発展が見込まれると考える。

高次π空間の創発と機能開発

特異なπ電子の特性

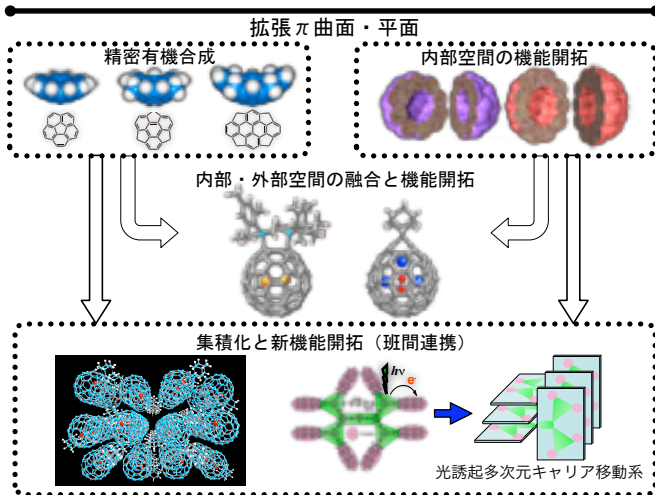
- ・電子の自在な動き
- ・他の電子との相互作用
- ・分子との相互作用
- ・光、磁場との相互作用
- ・生体内での重要な役割

高次π空間: 活性化された曲がったπ電子系でできる空間

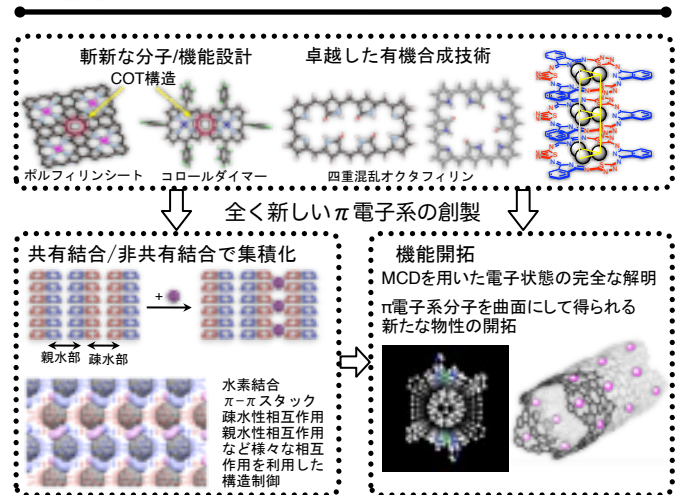
→ 特異なπ電子系の特性がさらに強まる

→ より高度で複雑な秩序やシステムを構築

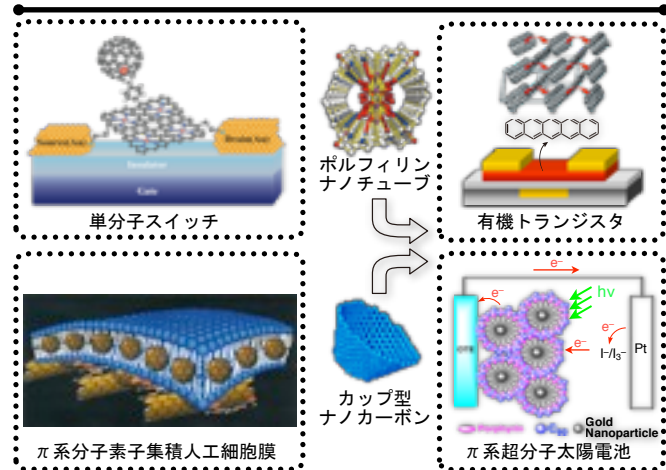
A01: 新しいπ電子化合物の創製



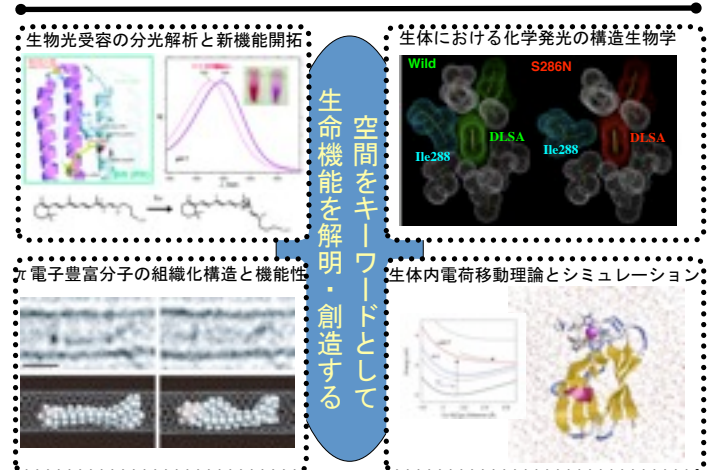
A02: π電子化合物の集積化による高次π空間の開発



A03: 高次π空間を利用した革新的機能開拓



A04: 生体π空間の制御機構解明と新機能開発



**【Abstract of 2008 Grant-in-Aid for Scientific Research on Innovative Area
(Research in a proposed research area)】
Science and Engineering**

Title of project	Emergence of highly elaborated π -space and its function
Head Investigator Name	Takeshi Akasaka
Abstract of Research Project Term of Project: 2008-2012	In this joint project, we focus on π -electrons and wish to create hitherto unavailable molecular assemblies while examining various interactions, including optical, electronic, and magnetic interactions. We define highly elaborated π -spaces as the sites where we create highly complex orders/systems that stem out from the π -electron-based interactions. We will pursue 1) research with clearly defined objectives, i.e., strategic research, and 2) emergent research that comes out from the combination of several independent elements. By conducting these two types of research in parallel, we wish to progress science unwaveringly and create innovation of unpredicted discovery and hope to contribute to the creation of next-generation advances in chemistry.