

【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	分子ナノシステムの創発化学
領域代表者名	川合 知二（大阪大学・産業科学研究所・教授）
領域代表者からの応募総額	14億1870万円
研究期間	平成20年度～24年度

分子を集めて、分子を超える機能・システムをつくる

1. 本領域の目的

物質・デバイス創成において今まで多く行われてきた平衡系自己組織化の枠を超えて、非平衡過程を取り入れた自己階層化・自己機能化により新しい超分子の創成、新機能の発現、分子素子・ナノシステムの創成研究を展開する。“創発現象”すなわち、部分の単純な総和にとどまらない性質が全体として現れる現象を有機及び無機分子システムを問わず実現することを大きな目的とする。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。

2. 本領域の内容

創発的なナノシステムの構築を目指した新しい領域を開拓するには、狭義の化学分野のみならず、分子レベルの創発に関わる広い分野の研究者による融合的研究が必要。散逸構造や非平衡統計力学、確率共鳴などの理論・モデル実験研究に分子論的なアプローチを取り入れて、非平衡科学と分子化学の融合を試みる。これらを基礎として、超分子、錯体など、自由度に富む結合を駆使した巨大分子系の構造創発に関する研究、高分子やタンパクなど巨大な分子を構成要素とする機能創発に関する研究を展開する。さらに、微細加工などトップダウン手法により形成したナノ構造を利用した表面・界面に関わる分子集団の構造・機能創発とデバイスを見据えたシステム応用に関する研究を推進する。

3. 期待される成果

分子ナノシステムの構造形成や機能発現における、揺らぎやノイズの重要性が明らかになる。このような創発現象に着目した化学を展開することで、膨大な自由度の中から、ファイバー、螺旋、リング、カプセルなどの目指す構造が一気にできあがる、創発的な物質合成の方法が明らかになります。また、分子のサイズをはるかに超えたスケールで多数の分子が同期して働く共同効果、アロステリズムなど、分子機械を指向した創発的機能の発現が期待される。さらに、これら分子系に適合したソフトナノリソグラフィーの技術を組み合わせることで、分子が本質的に持つ揺らぎや雑音を利用した電子・光・力学素子の実現が期待される。

【キーワード】

創発：部分の単純な総和にとどまらない性質が全体として現れること（一般的用語）

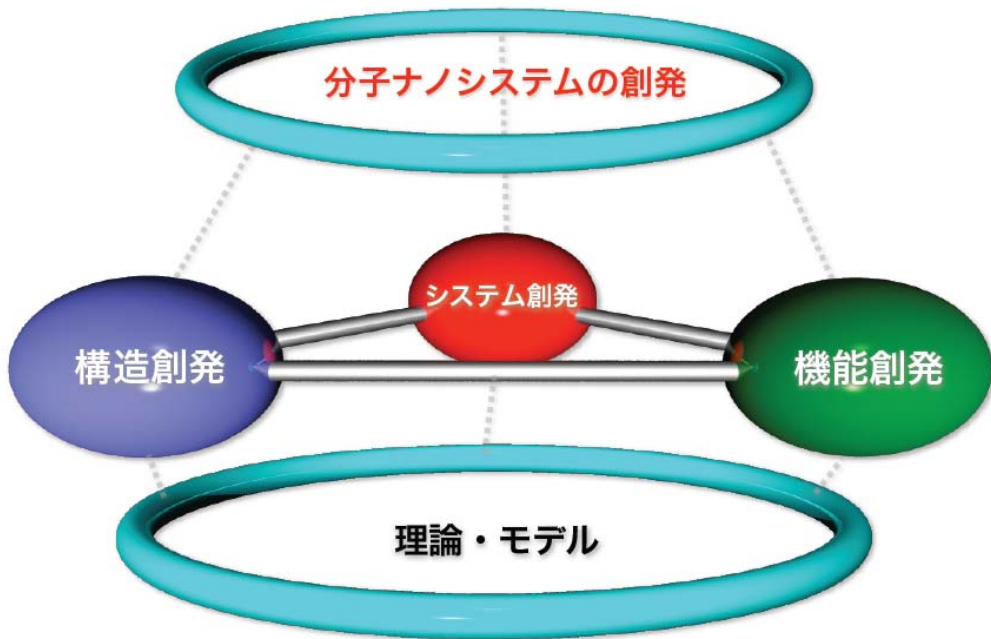
創発化学：分子レベルの創発を探求し、それを基盤に新規な物質・機能・ナノシステムを創成する化学（本領域の定義）

【科学研究費補助金審査部会における所見】

本研究領域は、分子の新規集積化手法の開発、新規化合物の創製およびそれによる協同現象の探索を「創発化学」なる新分野ととらえ、推進するものである。ビルドアップ型ナノサイエンスにおいて我が国が世界を先導する上で本研究領域の必要性は高く、研究目的およびそれを実現する研究計画は十分妥当であると判断する。本領域には力量ある研究者が数多く参画していることから、個々の計画研究の成果については十分に期待できる。プロジェクト研究を実施する観点から、領域全体の共通戦略の明確化と研究項目間あるいは計画研究構成員間の有機的連携についても期待したい。領域代表者のマネジメント能力は十分であると判断するが、本研究組織には他の大型プロジェクト研究を実施する研究者が多数参画していることから、領域代表者が特段のリーダーシップを発揮することが期待される。公募研究の設定に当たっては、散逸構造に関する非平衡統計力学分野を含め様々な理論・計算シミュレーション研究者の参画を促すとともに、当該分野における若手研究者育成にも十分に配慮することが望ましい。計上された研究経費について問題は認められないが、研究費の集中と他の大型プロジェクト研究が平行して実施されることを懸念する意見が少なからずあった。



新規な物質群・機能・システムを創成



複雑系科学・非平衡熱力学・散逸構造・確率共鳴

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

Title of project	Emergent chemistry of nano-scale molecular systems
Head Investigator Name	Tomoji Kawai
Abstract of Research Project Term of Project: 2008-2012	“Emergence in chemistry”, which is the central issue of this project, means the appearance of structural hierarchy and highly functionalized properties of molecular systems beyond individual molecule. The purpose of the project is investigations of method and principle for the formation of nano-scale materials and systems under the fusion of molecular design and utilization of nonequilibrium processes including fluctuation and dissipation. It is obvious that such approach is promising and fruitful route to realization of nano-scale molecular systems because life adopts self-organization based on the molecular information and nonequilibrium open system. Prospective achievements are spontaneous formation of huge supramolecules consisting of numerous molecular components, creation of stimulus-sensitive nanomolecular systems and nanomaterials responding to circumstances. Furthermore, device-oriented researches using lithography technique are planned.