

○戦略目標「自在配列と機能」の下の研究領域

## 原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能

研究総括：君塚 信夫（九州大学 大学院工学研究院 主幹教授）

### 研究領域の概要

本研究領域は、原子・分子の配列や配向を合理的に制御した原子・分子組織構造を自在構築し、そのエネルギーランドスケープを制御するとともに、その組織構造に独自の化学的、物理的、あるいは生物科学的な機能を発揮させるための基盤技術の創出を目指すものです。

研究分野としては、原子・分子から成る有機分子、生命分子、高分子、金属イオン、金属錯体、無機化合物や金属クラスター、ナノカーボンをはじめとする分子・ナノ物質群を研究する分野を広く対象とします。例えば、(1)同種・異種原子の配列と結合が自在に制御された機能性分子やナノマテリアル、単位(ユニット)分子の定序配列(シークエンス)構造が共有結合あるいは非共有結合的に合理的に制御されたオリゴマー、高分子などを対象に、それらの溶液中、表面・界面、あるいは固体状態における高次構造や組織化構造を、一次元、二次元、三次元配列や順序を制御しつつ、かつナノ～メゾ～マクロスコピックに至る任意の次元・スケールで制御する技術、(2)得られた原子・分子組織系において、各々の構造単位や着目する元素・官能基、機能団の配列・配向を、有機化学的な精密さを持って自在制御するための技術を開発するとともに、(3)得られた配列構造の電子状態やエネルギーランドスケープを原子・1分子レベルの精度で解析・計測する技術や理論・計算科学的手法の開発を進めます。さらに、(4)原子・分子の定序配列・配向構造を自在制御することによって、はじめて生み出される電子的、磁氣的、光学的機能や化学的機能などの“分子システム機能”を、配列・配向・組織化・階層構造との相関において明らかにし、これらの科学的知見を体系化して、分子システム科学における基盤学理の創成をはかります。

### 募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

#### 1. 背景と基本方針

自己組織化現象は、生命科学のみならず化学、物理学、工学をはじめ、分子の関わる様々な研究分野における基本的現象であり、デザインされた分子要素の自己組織化を利用して集積構造を作り、その構造的特徴（形、ナノ空間など）を活かした研究が国内外で活発に推進されています。JSTにおいても「組織化と機能」、「構造制御」、「ナノシステム」、「分子技術」、「超空間」、「二次元」など、これまで自己組織化に関連する多くの領域が展開されてきました。一方、自己組織化を、現在ならびに将来における地球環境や人類の健康・安全にかかわる社会的課題を解決する科学技術とするためには、自己組織化の持つポテンシャルを、

従来の技術・方法論の枠を超えて次のステージに発展させることが必要不可欠です。

そこで本研究領域においては、新たに展開すべき重要課題として、原子・分子の配列や配向などの分子配列情報を、有機化学的な精密さをもって制御する新手法や、さらにその組織化をはかって電子状態などのエネルギーランドスケープを分子レベル制御した原子・分子組織系(=分子システム)を構築すること、さらに原子・分子の配列・配向情報(分子配列情報)、分子組織化情報に依存して発現が制御される新たな機能(=分子システム機能)との相関を解明することを目指します。分子システムに独自の高次機能の発見や、その発現に関するデザイン手法の創出を通して、「分子システム」の科学における新しい基盤学理を創成します。

本研究領域では戦略的創造戦略研究の原点に立ち返り、独創的な「学術的問い」に発し、研究課題ならびに手法の学術的意義と創造性が明確であり、国際的に高く評価される卓越した基礎研究であって、今後の科学技術イノベーションに大きく寄与する成果が期待される挑戦的な提案を募集します。人類が直面する重要な課題を克服するための「究極の分子システム機能」は何かという新しい問い(目的意識)から出発(逆算)して、創造的かつ卓越した原子・分子システムを設計・構築するための技術(シーズ)、ならびにそれを基盤として革新的な分子システム機能との相関を明らかにし、分子システム科学における基盤学理の創成をはかろうとする意欲的な提案を期待します。

## 2. 想定する研究分野

(1)本研究領域では、原子・分子から成る有機分子、生命分子、高分子、金属イオン、金属錯体、無機化合物や無機クラスター、ナノカーボンをはじめとする分子・ナノ物質群に関連する分野を広く対象とします。また物質として、結晶などの堅い構造に限らず、柔軟性を有するソフトマテリアルも対象に含みます。有機分子の自己組織化は歴史のある分野ですが、新しい切り口の自在配列・配向技術開発を基盤とするユニークな分子組織の設計、ならびにその特徴が最大限に活かされた分子システム機能の創成を期待します。

(2)原子・分子の定序配列ならびに配向が制御された分子システムの開発にあたり、共有結合の利用による定序配列分子の合成とその高次構造形成、配位結合や非共有結合に基づく自己組織化アプローチ(熱力学的平衡条件におけるボトムアップな自己組織化、非平衡条件における動的自己組織化現象の応用を含む)の利用、 $\mu$ コンタクトプリンティングやナノリソグラフィーなどのトップダウンアプローチ、これらの融合アプローチなどのアプローチが考えられます。一方、本研究領域では、従前の固相合成、ラングミュア・プロジェクト(LB)膜、蒸着膜(CVD)技術、交互吸着法(LbL)などの定序配列・分子配向制御技術を単に利用するに留まらず、従来技術における問題点を克服するための提案や、独創的かつ一般性(インパクト)のある新技術の開発を期待します。また、将来的な技術イノベーションに繋げるためには、特殊な素材や装置の利用に限定されず、例えば $\text{cm}^2$ 以上の面積スケールで均一に配列制御構造を作製するなどの分子組織作製技術も重要と考えられます。

(3) 近年の計測技術の進展は目覚ましく、サブÅの空間分解能、アト秒の時間分解能ならびに  $\mu\text{eV}$  のエネルギー分解能を実現しています。一方、本研究領域では原子・分子レベルで定序配列・配向制御された分子システムの構造、ならびにそれに含まれる(自明でない)階層構造を、原子・分子レベルで明らかにするための精密構造解析技術、ならびに理論・計算科学的手法の開発も対象とします。

(4) 近年、無機物、有機物、高分子やその複合材料などの分野で、望ましい物性を有する材料を、人工知能(AI)を用いて導出する試みが進められています。本研究領域における配列・配向制御された分子システムは、複雑な階層構造を含みうるため、データ駆動型の材料開発アプローチを展開するのは必ずしも容易ではないものと予想されます。一方、今後は物性・機能—分子組織構造の相関をはかる AI 支援システムの開発が重要と考えられるため、データ科学との融合アプローチに基づき、分子の自在配列・配向技術開発とそれに基づく機能の革新をはかろうとする意欲的な提案も歓迎します。

(5) 機能としては、導電性、磁性、光学的特性、熱的特性などの物理的特性、触媒反応、選択分離機能などの化学的特性などが考えられますが、定序配列・配向が制御された分子システムの機能としてはこれらに限定されず、科学的価値があることが重要と考えます。既存の枠にとらわれない柔軟な着想に基づく独創的な機能の提案を期待します。

本研究領域は、原子・分子の定序配列・配向制御や分子組織化における新技術の開発(ものづくりや測定技術)だけを目的とするものでなく、得られた配列・配向構造、分子組織化構造と物性・機能との相関を解明することを重要と考えており、これらが具体的に読み取れる提案を期待しています。独創的な構想を実現するためには学際的なアプローチが望ましいと考えられ、このために十分な連携に基づいて共同研究を推進することのできる、最適な研究チームを編成ください。精密配列・配向制御や自己組織化制御と高次機能のギャップを繋ぐインパクトのある研究が、情報通信分野、エネルギー・環境分野、医療・ナノバイオ分野などの様々な分野において解決が求められている問題の解決につながり、革新的な科学技術イノベーションへの展開と、将来的には新たな社会的・経済的価値の創造につながることを期待しています。

### 3. 研究実施体制

CREST はチーム型研究であり、国際的に高い水準にある研究代表者が自ら立案した挑戦的な研究構想の実現にむけ、産・学・官の枠を超えたベストな研究チームを編成していただきます。チーム構成は、構想実現のために必要不可欠であって、研究目的の達成に向けて大きく貢献できる十分な連携体制となるようご注意ください。他の研究分野との連携等が有用であると認められる場合、研究総括より共同研究の推進やチーム体制の見直しなど、研究計画の変更をお願いすることがあります。

### 4. 研究費と研究期間

当初研究費は1課題あたり、総額3億円(直接経費)を上限とします。また、研究期間は

採択年度から5年半以内とします。

## 5. 運営方針

本研究領域は、「原子・分子システム科学」ネットワークラボとして運営します。研究領域全体として研究成果の最大化につなげるべく、異なるチーム間の研究者同士（同一戦略目標下のさきがけ研究領域の個人研究者を含む）や産業界等、研究領域内外の研究者との情報交換や連携等のネットワーク形成をはかります。研究開始当初は、研究環境の確認の意味も含め、各研究課題へのサイトビジットを行います。また、年1、2回の領域内研究進捗報告会を開催し、研究開始後約3年経過時に中間評価、事業終了時に事後評価を行います。さらに研究領域における成果を発信するためのワークショップ、公開シンポジウムを開催する予定です。本研究領域における研究が、分子システム科学の最先端を切り拓くとともに、様々な研究分野の発展に資することを期待します。