

○戦略目標「自在配列と機能」の下の研究領域

## 原子・分子の自在配列と特性・機能

研究総括：西原 寛（東京理科大学 研究推進機構総合研究院 教授）

### 研究領域の概要

本研究領域では、原子や分子を自在に結合、配列、集合する手法を駆使して、次元性、階層性、均一・不均一性、等方・異方性、対称・非対称性、複雑性などの観点からユニークな構造をつくり出し、その構造がもたらす新しい化学的、物理的、生物学的ならびに力学的に新奇な特性や機能を引き出すことによって、基礎科学のイノベーションを起こすとともに、社会インフラや生活を豊かにする革新的な物質科学のパラダイムを構築することを目的とします。

具体的には、近年、飛躍的に進歩してきた化学合成、原子操作、分子集合技術を基盤として、新しい発想や戦略のもとに、独創性に溢れた新物質、新構造体を生み出します。そのユニークな物質・構造体を、進化が著しい化学構造解析、結晶構造解析、ナノ配列構造解析や原子レベルの精密分析技術、さらに、大規模計算による精密な構造や化学的性質・物性の予測・解析法などと組み合わせることによって、類のない特性や機能の発現へ展開します。原子・分子を要素とする物質や構造体の合成・変換・組合・配列とそれらの分析・解析を対象とする化学に加えて、理論に基づいて物質の特性を予測、解析する物理学、生体物質や生物機能の仕組みの分子レベルでの解析やそれらに作用する物質の開発を行う生物学、デバイス作製を行う工学などが連携して、未来社会に有用な俯瞰的な新しいモノづくりを行うことによって、社会が抱えている持続可能な開発目標、SDGs の達成に貢献する科学技術を切り開きます。

### 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

天然にない新物質を創造することは人類にしかできません。古代からこの技は経験によって蓄積されてきました。18世紀末の近代科学が始まると、この技は科学的に進化し、有機化学、無機化学、錯体化学、有機金属化学、高分子化学、超分子化学などにおいて様々な物質合成法が編み出され、発明された新物質は豊かな社会づくりに貢献してきました。近年開発された革新的な物質群には dendrimer、金属ナノ粒子・クラスター、多孔性配位高分子 (MOF・PCP)、超分子 (カテナン、ロタキサン、分子ケージ、人工 DNA など)、新炭素 (フラーレン、カーボンナノチューブ、グラフェンなど)、二次元物質などがあります。これらの新物質の面白さは形状だけに留まりません。次元

性、階層性、均一・不均一性、等方・異方性、対称・非対称性、複雑性などの特徴が、ユニークな化学的、物理的、生物学的、力学的性質や機能を導きます。さらに異なる物質を精密に組み合わせた超構造体も電場、光、磁場などの外場の印加による信号出力や化学現象の連動などの高次機能を発現します。化学構造解析、結晶構造解析、ナノ配列構造解析や原子レベルの精密分析技術、大規模計算による精密な構造や化学的性質・物性の予測・解析法なども、物質・構造体開発と連携して著しい発展を遂げています。

したがって、どのような新物質・構造体をつくと優れた特性や機能を発現するのか、逆に、意図する特性や機能を発現するには、どのような新物質・構造体が適合しているのかについての独創的な研究が、物質科学の未来を切り開く時期が訪れています。本研究領域では、色々な方向や角度から物質科学の未来にチャレンジする独創的研究を行う研究者が集い、相互交流することで魅力的なサイエンスが生まれる場をつくります。

## **2. 想定する研究分野と募集選考の方針**

本研究領域では、物質科学およびそれに関連する様々な分野が含まれると想定しています。一般的な分類から言えば、化学、物理学、生物学、電子工学、材料工学などですが、特に限定されません。研究提案には、独創的な原子・分子配列に基づく新物質・構造体の合成とそれらの特性・機能の発現の両方を視野に入れることを求めますが、さきがけ研究は個人型研究ですので、すべての研究内容を一人でカバーする必要はありません。ただし、提案者が得意とする研究項目・内容とさきがけ内外での出会いによる共同研究者の協力が必要な項目・内容とを明確に分けてください。また、共同研究については、これからスタートする研究ですので、具体的に研究者が確定されているかは問いません。提案内容は、他分野の研究者にも研究内容の独創性や実現性、科学のおよび社会的インパクトが理解できるように記述してください。選考にあたっては、さきがけ研究期間内だけでなく、その後の研究の発展や新しい研究領域の創成の可能性などを考慮します。今回が本領域の最終(三期目)の募集となります。一期、二期のさきがけ研究者の研究テーマと異なる独創的な研究の提案を期待しています。

## **3. 研究期間と研究費**

当初研究費は1課題あたり、総額4,000万円(直接経費)を上限とします。また、研究期間は採択年度から3年半以内とします。

## **4. 運営方針**

本研究領域では、広範囲の物質科学に関わる研究者が、各自の得意技や持ち味を生かしながら独創的で魅力ある研究を遂行できるような環境をつくります。研究は、目標や内容によって、成果が得られるまでの時間が異なります。さきがけ研究期間での到達目標の設定とその遂行は必要ですが、その先にどのような展開があり、どのような新しいサイエンスを導くのかを追求することも重要です。そのために本研究領域では、研究総括、アドバイザー、採択研究者間の自由で忌憚のない

意見交換を十分に行います。各研究者の研究の魅力が最大限に引き出され、研究者間での相互作用により新しい観点や発想での研究が生み出されるよう、研究領域全体でサポートします。ワークショップやシンポジウム等の開催を通じて、同じ戦略目標の下で実施する CREST「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」との連携や外部との学术交流を進めます。本研究領域での研究が、色々な分野へ波及しながら、さらに高いステージの研究につながることを期待しています。