

【領域番号】 2010

【領域略称名】 分子ナノ創発化学

【領域代表者（所属）】 川合知二（領域代表者 大阪大学・産業科学研究所・特任教授）

## ① 研究背景

### 「創発化学」の重要性

自然を展望し、その自立性、階層性、柔軟性に一步でも近づこうとする努力は、化学の大きな使命のひとつである。生命では、現在の技術では遥かに及ばない高度な構造が自律的に形成され、分子論的な揺らぎも組み入れた機能が発現している。このようなシステムを構築するためには、局所的な複数の相互作用が複雑に組織化することにより、部分の単純な総和にとどまらない高次の構造と機能が全体として発現する「創発」の考え方が重要である。巨大かつ複雑な構造を有するナノシステムの構築と機能化を目指すビルドアップ型ナノサイエンスにおいて、従来の隣接分子間相互作用による自己集合や準平衡状態での結晶成長を超えた、分子システムの自己階層化や自己機能化を導く方法論の確立が求められている。

### 「創発化学」の学術的位置づけ

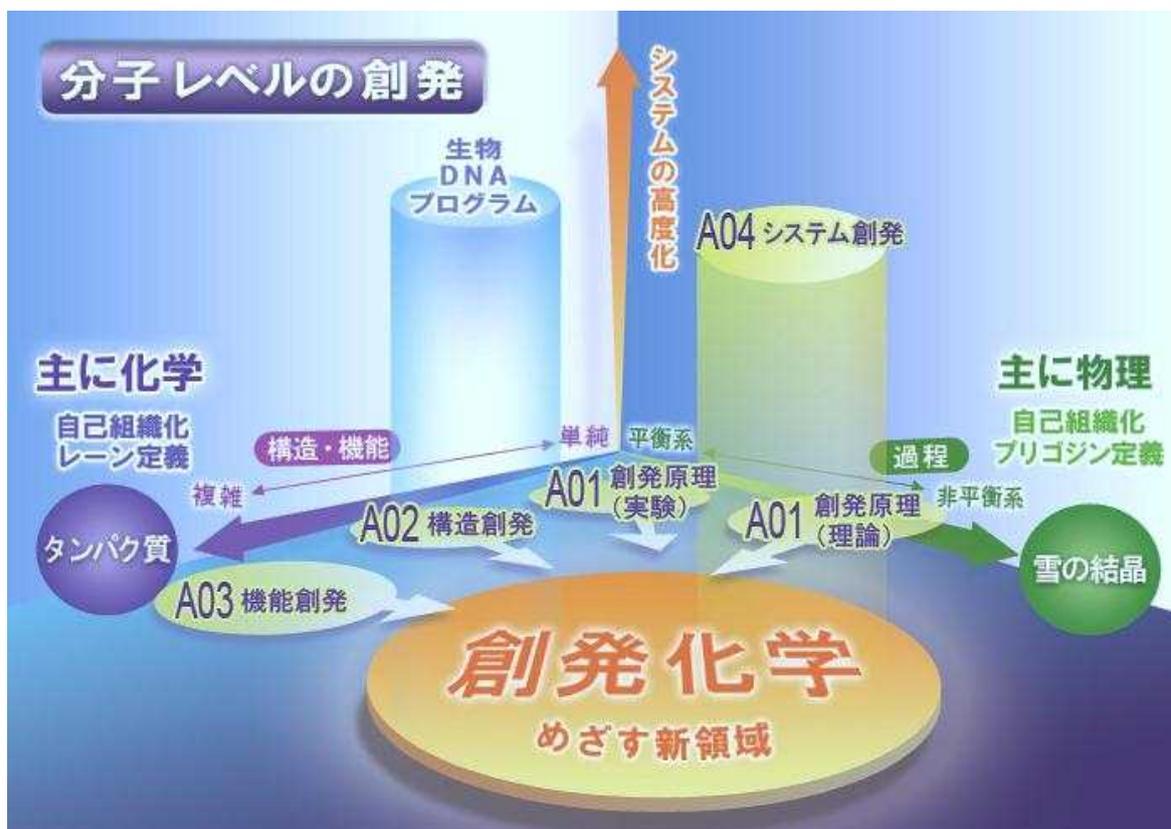
近年の微細加工技術は精緻を極め、製造設備には莫大な投資とエネルギーが必要である。一方、生命では、微細加工技術をも超える高度なナノスケール構造が溢れ、しかも極めて低いエネルギーで、大量かつ迅速に、いたるところで生成されている。生命に学び、自己組織的なマスマイクロプロダクションを実現する必要性が強く認識され、自己集合に情報を組み入れた「プログラム自己組織化」の研究が精力的に展開されてきた。プログラム自己組織化の研究は、分子設計プログラムによる自己集合的なボトムアップ構造の形成を第1ステージ、反応シーケンスなど外的プログラムによる自己集合体の階層形成を第2ステージとして進んできた。これまでのプログラム自己組織化の成果に非平衡科学、バイオ、微細加工を融合し、個別分子を超えた高い次元の構造と機能が創発する第3ステージを目指すものとして「分子ナノシステムの創発化学」を組織した。

「創発」は、物質科学のみならず、生命科学、情報科学、人文科学など幅広い領域で用いられる言葉であるが、本領域では、物質の自己組織化について、高次の組織体と機能の創成を目指した未踏の段階を表す言葉として位置づけた。

化学における自己組織化研究では、主に分子構造の高度化による高次構造や機能の発現を目指した研究が展開されてきた（レーンの定義）。その極限的な形はタンパク質である。しかし、これまでの分子化学における自己組織化研究は平衡系に限られているので、分子サイズを超えるナノスケール構造を生み出すには、非平衡状態を含む方法論が必要である。

一方、物理の領域における自己組織化研究では、非平衡開放系の散逸構造が導く階層形成が主な主題である（プリゴジンの定義）。その自然における象徴の一つは雪の結晶である。しかし、これまでの研究は、単純な分子、粒子、あるいは粘性を持つ連続体に限られているので、分子の構造や物性を生かすには、微視的相互作用を組み込んだ研究が必要である。

本領域では、従来の化学と物理における自己組織化研究から大きく踏み出して、分子科学と非平衡科学の成果の融合をめざした。多数の分子間相互作用が共鳴あるいは組織化して、高度な構造や機能が顕れる“創発”の考え方をもとに、新しい物質、機能、ナノシステムの創成を目指した研究を展開した。



## ② 研究目的

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した。

自律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ために、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を実施した。研究項目 A01「階層を越えるプログラム自己創発化学の学理」では、分子論的なアプローチによる散逸構造、確率共鳴、非平衡統計力学など様々な理論・シミュレーション・モデル系実験研究、研究項目 A02「分子ナノシステムの高次構造創発」では超分子、錯体など、自由度に富む結合を駆使した巨大分子系の創発に関する研究、研究項目 A03「バイオモチーフによる動的機能創発」では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、研究項目 A04「ボトムアップ/トップダウンプロセス融合による機能創発」では、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・界面が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した。

## ③ 我が国の学術水準の向上・強化につながる点

生命に学び自己組織化現象を用いることの重要性は広く認識され、自己集合のレベルでは極めて精緻な研究が展開されている。しかし、複数の階層からなるシステムを構築するための方法はいまだ明らかではなく、ブレークスルーが必要である。非平衡科学が重要な役割を果たすことは、直感的には理解されているが、現状は典型的な系におけるメカニズム研究が中心である。本領域では、分子設計と非平衡科学を「創発」の概念のもとで融合した。現在の学術水準を超える階層的分子システムを構築し、その指導原理を導き出すことに成功した。さらに、分子ナノシステムの機能をデバイスとして引き出すために、ボトムアップ・トップダウン融合の専門家チームを組織して研究を進め、我が国の材料科学を先導する役割を果たしてきた。