

【新学術領域研究（研究領域提案型）】

理工系



研究領域名 π 造形科学：電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出

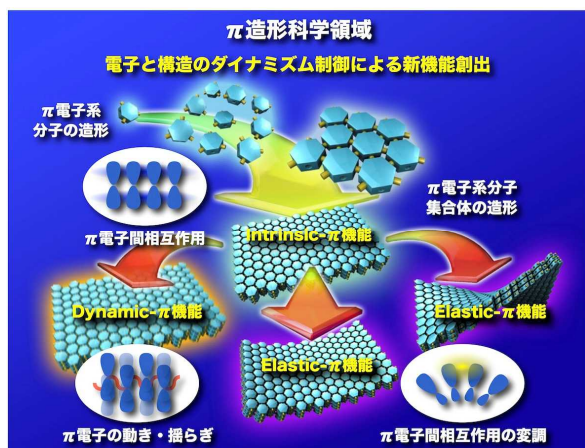
東京工業大学・資源化学研究所・教授 ふくしま たかのり
福島 孝典

研究課題番号：26102001 研究者番号：70281970

【本領域の目的】

電子・光物性、磁性などの根源となる π 電子をもつ分子は、基礎化学はもとより、物質科学から生命科学に至る広い分野において、極めて重要な役割を果たしてきました。最近では、 π 電子系物質に関する研究から、有機エレクトロニクスというイノベーションが起きました。その源流は1950年代の赤松・井口・松永らによる有機半導体の発見にあり、その後、白川らによる導電性高分子の発見など、数々の革新的研究を経て、1980年代に有機デバイスが初めて誕生しました。それから約30年が経った今、 π 電子系科学は次なるステージに立つべき時を迎えています。

歴史的にブレークスルーをもたらした機能分子には、シンプルで均整のとれた構造美があります。本領域では、 π 電子に固有な電子・光物性、磁性などの電子機能 (Intrinsic- π 機能) に加え、運動性 (Dynamic- π 機能) や摩擦・粘弾性などの機械的特性 (Elastic- π 機能) といった、分子・分子集合体のダイナミズムを含めた新たな視点から π 電子機能を捉えます。これら3つの機能について、構造美を物質設計の基本として、高い設計自由度をもつ分子性物質で具現化します。本領域では、「 π 造形」という言葉に込めた設計理念に基づき、新物質・新機能の創出と新現象発掘を目指します。



【本領域の内容】

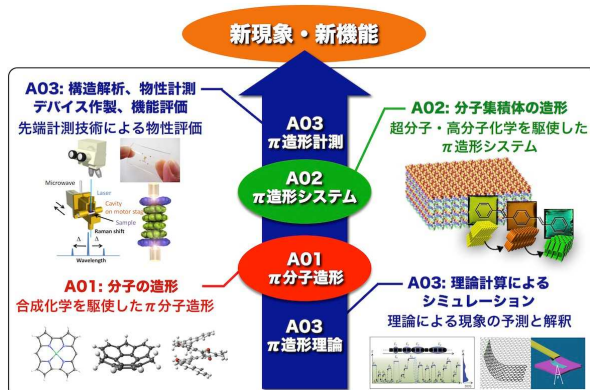
上記の目的を実現するため、本領域では3つの班を組織し、「理論シミュレーション・モデル化」⇄「物質創製」⇄「物性計測」の双方向ベクトル型協働研究により、以下の研究項目を実施します。

- (1) 研究項目 A01 (π 分子造形) 独創的有機合成技術を駆使した π 造形科学の基盤となる新分子骨格の構築
- (2) 研究項目 A02 (π システム造形) 機能分子

の開発と独自の分子集積化技術を駆使した、ナノ～マクロの様々な長さスケールでの π 造形システムの構築

(3) 研究項目 A03 (π 造形理論・計測) 独自の計測、素子形成、シミュレーション技術を駆使した π 造形分子・分子集合体の機能予測・設計・解明

π 電子系物質に能動的または受動的に生じる動的 (Dynamic- π)、機械的 (Elastic- π) 変化は、電子機能 (Intrinsic- π) にも摂動を与えるため、これら3つの機能を調和させることで新現象・新機能の発現が期待されます。具体的な研究内容の一例として、造形した π 電子系分子や分子集合体に対し、電場・光・磁場などの物理的刺激に加え、圧力・ずりなどの機械的刺激を作用させることにより、熱力学的安定 (平衡) 状態から逸脱した π 電子系の機能を探求します。



【期待される成果と意義】

本領域研究は、既存の有機デバイスにおける特定の物性値の向上よりもむしろ、 π 電子系に潜在する未知の能力を引き出すための基礎科学にフォーカスしています。この取組は、新たな作動原理に基づく有機エレクトロニクスの基盤技術の創出につながります。新たな物質観に基づいた、合成化学、物性科学、理論化学による分野貫通型研究を通じて、 π 電子系物質科学の新しいパラダイムの創成が期待できます。

【キーワード】

π 電子系科学、有機化学、高分子化学、超分子化学、材料科学、先端計測・デバイス、物性理論

【研究期間と研究経費】

平成26年度～30年度
1,143,000千円



Title of Project : π -System Figuration: Control of Electron and Structural Dynamism for Innovative Functions

Takanori Fukushima
(Tokyo Institute of Technology, Chemical Resources
Laboratory, Professor)

Research Project Number : 26102001 Researcher Number : 70281970

【Purpose of the Research Project】

π -Electronic molecules, displaying electronic, optical, and magnetic functions, have played critical roles not only in fundamental chemistry but also in diverse research areas from materials to life sciences. A recent innovation of organic electronics stems from the studies on π -electronic materials, originating from the discovery of organic semiconductors in 1954 by Akamatsu, Inokuchi, and Matsunaga. After years of research, including the finding of conducting polyacetylene by Shirakawa, the first organic device was developed in the 1980s. Now, the time has come for the science of π -electron systems to advance to the next stage.

Functional molecules that have realized historic breakthroughs are always structurally simple and beautiful. With this fact in mind, we will elaborate new π -electronic molecules and assemblies that hold “beautility”. Our research area aims to create superb π -electronic materials and functions as well as discover new phenomena based on our design concept of “ π -figuration”.

【Content of the Research Project】

To achieve the above objectives through interactive cooperative research, we have devised the following groups:

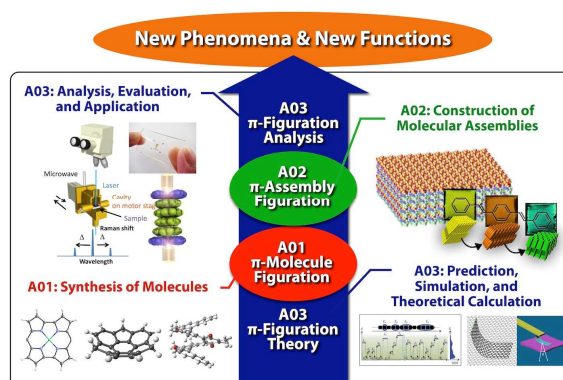
Group A01 (π -molecule figuration) develops novel molecular frameworks that provide the basis for the π -figuration concept by utilizing state-of-the-art organic synthesis.

Group A02 (π -assembly figuration) develops functional π -electronic molecular assemblies at many length scales by utilizing state-of-the-art supramolecular and polymer chemistry.

Group A03 (π -figuration theory and analysis) predicts, designs, and unveils the functions of the new π -electronic materials by utilizing state-of-the-art theory, computational, and measurement techniques.

The dynamic motion and mechanical stimulus generated in π -electronic materials can perturb the electronic function. Harmonizing π -electronic functions with molecular dynamism should result in new phenomena and functions. As an

example, we will explore the functions of π -electron systems deviated from their thermodynamically stable states by applying multiple physical stimuli (e.g., an electric field, light, and magnetic field) and mechanical stimuli (e.g., pressure and shear) to π -electronic molecules and their assemblies.



【Expected Research Achievements and Scientific Significance】

Our research focuses on pursuing fundamental science to unlock the potential of π -electron systems rather than improving a specific material property of existing organic devices. For instance, our research would realize fundamental technologies of organic electronics based on novel operating principles. A paradigm shift in the research field of π -electronic materials should be achieved by interdisciplinary research in synthetic chemistry, materials science, and theoretical chemistry.

【Key Words】

π -electronic materials, organic chemistry, physical chemistry, polymer chemistry, supramolecular chemistry, materials science, theoretical chemistry, organic device.

【Term of Project】 FY2014–2018

【Budget Allocation】 1,143,000 Thousand Yen