

【新学術領域研究（研究領域提案型）】  
理工系



研究領域名 元素ブロック高分子材料の創出

京都大学・大学院工学研究科・教授

ちゅうじょうよしき  
中條 善樹

【本領域の目的】

多様な材料が求められている中で、現在、有機物と無機物のそれぞれの特徴を複合的に活かした有機-無機ハイブリッド材料や、分子構造のレベルで有機高分子材料に種々の無機元素を組み込んだハイブリッド高分子の考え方に基づく材料が開発され、電子材料を含めた様々な分野で利用されている。

本領域では、このようなハイブリッド化による材料開発を各種の元素のブロックに対して適用する新しい試みを提案している（図1）。まず、有機化学の手法と無機元素ブロック作製技術を巧みに利用した革新的合成プロセスにより、多彩な元素群で構成される“元素ブロック”を開拓し、その精密結合法の開発によって“元素ブロック高分子”を開拓する。さらに、非共有結合による相互作用や異種高分子成分のナノ相分離などを利用した固体状態での材料の高次構造の制御を行う。このようにして、革新的なアイデアに基づく“元素ブロック高分子材料”を創出し、その学理の確立を目的とする。

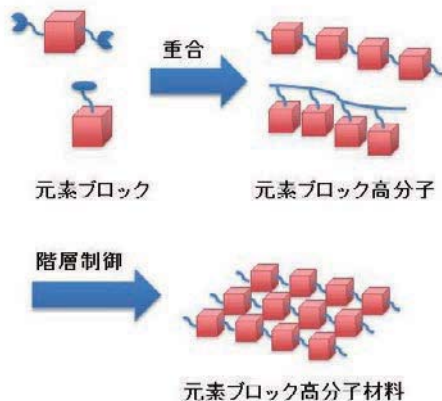


図1. 元素ブロック高分子材料の創出過程

【本領域の内容】

上記の目的を達成するため、有機高分子化学・無機材料化学・材料設計合成などの分野でアクティブに活躍している研究者をA01-A04の4つの班に配置し、それらの綿密な連携のもとに、本領域研究を強力に推進する（図2）。すなわち、A01班（元素ブロック設計）で、従来の材料では達成できない高機能・高性能を追究できる可能性のある多彩な元素ブロックの設計・合成を図り、A02班（高分子化制御）では、元素ブロックの高分子

化を行う。さらに、元素ブロック高分子の界面および階層制御に関する研究を A03班（界面階層制御）が担当する。A04班（シーズ包括育成）では、A01班からA03班の分類にこだわらず、従来の有機、無機、又はハイブリッド材料を超える未来材料の創出を考えたシーズ志向の研究、あるいは理論的研究を含めて、領域内での積極的な相互交流及び共同研究により本領域の発展に大きく貢献する挑戦的研究を広く対象とする。

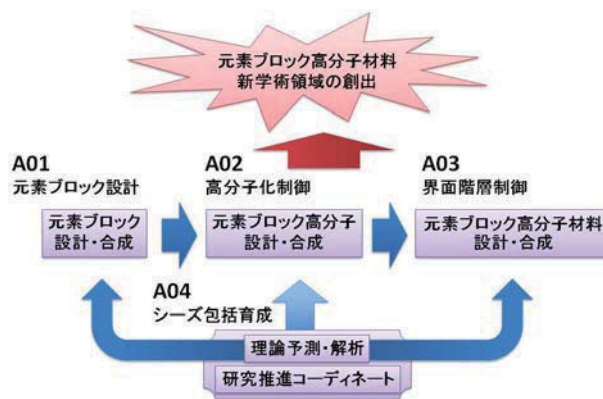


図2. 領域の研究体制

【期待される成果と意義】

“元素ブロック高分子材料”という新しい概念に基づく領域を立ち上げ発展させることにより、従来の有機高分子材料・無機材料および有機-無機ハイブリッド材料などでは達成できないような機能を有する材料の合成が可能になる。例えば、電子・光学・磁気機能などを有する新奇な材料合成の設計指針・合成手法を提供し、材料開発の分野に新展開をもたらす。

【キーワード】

元素ブロック：様々な元素群で構成される構造単位のこと

【研究期間と研究経費】

平成24年度-28年度  
1,161,100千円

【ホームページ等】

<http://element-block.org>

（新学術領域研究）  
研究領域提案型

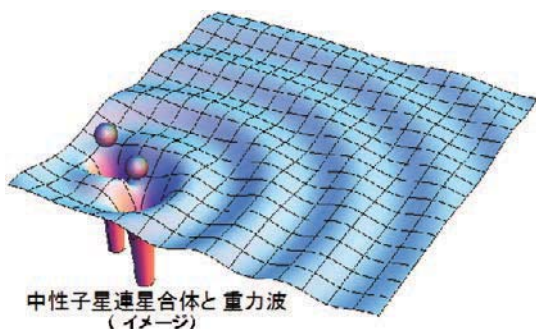


研究領域名 重力波天体の多様な観測による宇宙物理学の新展開

京都大学・大学院理学研究科・教授 なかむら たかし  
中村 卓史

【本領域の目的】

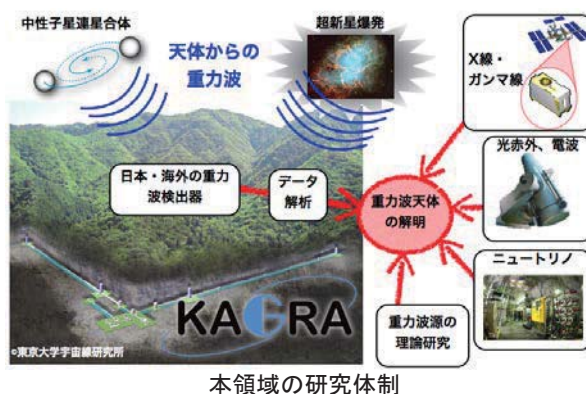
100 年程前にアインシュタインは一般相対性理論に基づいて重力波の存在を予言したが、まだ直接には検出されていない。米国、欧州と日本は重力波を直接検出するために、各国で大型干渉計型重力波検出器を建設し、その高感度化を進めており、2016 年にも重力波の初検出がなされる情勢である。強い重力波は星が重力崩壊してブラックホールになる現象や 2 つの中性子星が衝突合体する現象等の高密度で重力が極めて強い場合に発生し、強い重力場の未知の情報を人類に初めてもたらすと考えられる。重力波源は必然的に高密度であり、温度も極めて高いことが期待されるので、強い重力波を放出する重力波天体は必然的に強いガンマ線・X 線・光学・電波ならびにニュートリノの源でもある。重力波源からのガンマ線・X 線・光学・電波・ニュートリノ放射を日本の総力を挙げて同時検出する体制を確立し、①アインシュタインの 100 年程前の予言は正しかったのか？②我々人類・地球の起源となる物質は如何にして生まれたのか？等の長年の人類の大きな疑問に答えるのが本領域の主な目的である。



【本領域の内容】

重力波天体の観測を確立するために、重力波そのものの観測と、補い合う関係にある天体観測が必要である。これらに、重力波天体の理論的な研究をあわせたものが本領域を成している。多様な観測として、A01 ガンマ線・X 線観測、A02 可視・赤外線・電波観測、A03 ニュートリノ観測の 3 つの計画研究が、重力波には A04 重力波観測データ解析、A05 重力波源の理論研究の 2 つ計画研究が対応する。これらの計画研究は、相互の追観測や同時観測で連携し、重力波天体の正体やその仔細なメカニズムの解明を研究する。

【期待される成果と意義】



日本の KAGRA や海外の重力波検出器が重力波を捉えるとき、同時に、その他の観測にも信号が期待される。例えばコンパクト連星合体の場合、重力波観測から重力波の到来方向がおおまかに推定できる。これをガンマ線・X 線でフォローアップすることで、より狭い範囲に絞ることができる。さらに光学観測で観測し、母銀河を特定する。あるいは銀河系内での超新星爆発では、ニュートリノによるイベント検出に対応する時間帯の重力波情報を確認する。同時観測がなされれば、こうした天体の解明に重要な情報をもたらす。また追観測や同時観測は、「重力波」の観測に確信を与えてくれるという大きな意義も持っている。

【キーワード】

一般相対性理論：アインシュタインが 1915 年に提唱したニュートン重力を内包した重力の一般理論。現在この理論に基づいてブラックホール等の強い重力場の現象が研究されているが、強い重力場での一般相対性理論の実験・観測による検証は未達成であり、21 世紀科学で最後に残された重力を含む統一理論の完成にとっても極めて重要である。

重力波：アインシュタインが一般相対性理論に基づいて存在を予言した重力の波。重力波は電磁波のように真空中を光速で伝搬し、重力波の周りの時間と空間に歪みをもたらす。間接的な存在証明は 1989 年になされたが、その伝搬と直接検出は未達成で 21 世紀科学の大きな課題である。

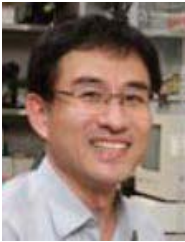
【研究期間と研究経費】

平成 24 年度－28 年度  
910,500 千円

【ホームページ等】

<http://www.gw.hep.osaka-cu.ac.jp/gwastro>





研究領域名 感覚と知能を備えた分子ロボットの創成

東京大学・大学院情報理工学系研究科・教授

はぎや まさみ  
萩谷 昌己

【本領域の目的】

従来のものづくりの方法論は、外部から与えた情報に従って材料の塊を加工することで望みの形状を得るトップダウンのアプローチによっている。最近、これとは全く逆の方法論、つまり、物質を構成する分子そのものの性質をプログラムすることにより、その物質自身が望みのものに「なる」ボトムアップのアプローチが注目を集めている。分子そのものを設計し、分子の自己集合によって、原子分解能をもつ人工物を作り上げるこの方法論の出現は、ものづくりの歴史的転換点となることは間違いない。これにより、あらゆる人工物が分子レベルの精度を持つようになれば、生体機能を人工的に再構成できるだけでなく、分子レベルの自己修復、自己改変といったことが可能となり、医療、食料、エネルギーをはじめ、さまざまな分野への波及効果は計り知れないものとなるだろう。

本学術領域では、化学とDNAナノテクノロジーの学術的・技術的成果をシステム工学・情報工学の方法論によって統合することで、分子システム構築の方法論を一段上の階層に引き上げ、分子レベルでの設計原理に基づいて自己集合した分子システムにより望みの動的挙動を実現する「分子ロボティクス（分子ロボット工学）」を創成することを目的とする。

【本領域の内容】

ロボットとは、「センサにより外部環境から情報を獲得し、情報処理回路によりその情報を判断し、その結果に応じてモータを動かして環境に対して働きかけるもの」である。「分子ロボット」はこれらの構成要素がすべて分子レベルのデバイスで実現されたシステムである（図1）。そのために、感覚、知能、運動、構造といった分子ロボットに必要な要素技術を開発するだけでなく、これらを連関、統合させる技術の開発が必要になる。通常サイズのロボットとは異なり、部品の組み立てはすべてボトムアップな自己集合・自己組織化により行われる必要があり、また動作のプログラムや制御はすべて化学反応系を基盤としたプログラムと制御により実現しなければならない。

このため、本領域の計画研究においては、分子ロボットのための（A01）感覚および（B01）知能に関する基盤技術を開発するとともに、2つのモデル分子ロボット開発プロジェクト（C01）アメーバ型分子ロボット、（D01）スライム型分子ロボットを実施する。公募研究においては、分子ロボット開発のために必要となる要素技術の研究開発や、応用展開のための探索研究を行う。

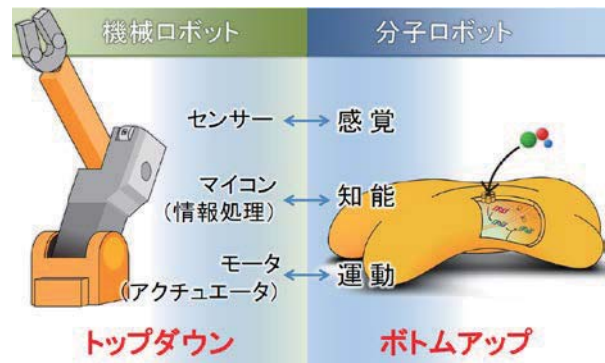


図1 分子ロボットのアーキテクチャ

【期待される成果と意義】

分子ロボットの表現は、一朝一夕にできるものではなく、さまざまな学術的・技術的ハードルを乗り越えながら段階的に達成されるものである。我々の構想する分子ロボティクスの発展プロセスは、生物の進化と相似な幾世代かを経て、最終的には電子技術と融合するというものである（図2）。本学術領域により、このような分子ロボティクスの発展ビジョンへ道筋をつけ、ボトムアップ的なものづくりへ向かう技術革新を加速・先導することを目指す。

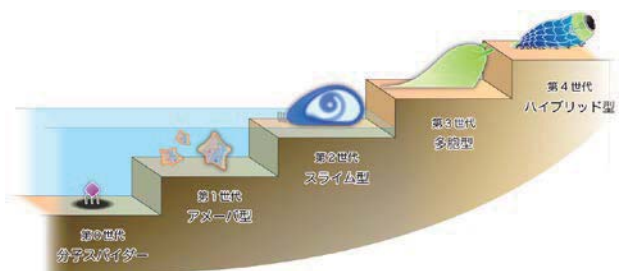


図2 分子ロボットの進化

【キーワード】

分子ロボティクス：分子デバイスを統合してプログラマブルなシステムを構築する方法論

【研究期間と研究経費】

平成24年度～28年度  
1,038,800千円

【ホームページ等】

<http://www.molbot.org/shin-gaku/>



研究領域名 実験と観測で解き明かす中性子星の核物質

東北大学・大学院理学研究科・教授

たむら ひろかず  
田村 裕和

【本領域の目的】

中性子星は、恒星が超新星爆発を起こした後に残る極めて高密度の巨大原子核のような天体で、中心付近は電子がなく中性子等のバリオン（重粒子）のみからなる核物質でできていると考えられる。本新学術領域では、地上実験、天体観測、理論を組み合わせ、この未知の物質の解明を目指す。

図1に示すように、大強度陽子加速器 J-PARC を用いたストレンジネス核物理の実験研究、理研 RIBF（不安定核ビーム工場）での中性子過剰核の実験研究、極低温に冷却した原子ガスの実験研究、ASTRO-H 等の X 線天文衛星による中性子星の観測研究を行い、これらの成果を理論研究によって結びつけて、幅広い密度と粒子種をカバーする「核物質の状態方程式」を決定し、そこから中性子星内部の核物質の正体と中性子星の構造を解明する。



図1: 本新学術領域のイメージ

【本領域の内容】

(A 班) 中性子星中心部の高密度領域では、ストレンジクォーク（核子（陽子・中性子）の中に存在しない寿命の短いクォーク）が安定に存在すると予想されている。そこで J-PARC でハイペロン（ストレンジクォークを含むバリオン）を含む原子核であるハイパー核などの研究を行い、核物質状態方程式のインプットとして不可欠な、さまざまなハイペロンと核子の間の力を確定する。

(B 班) 中性子星の外側の中低密度領域は、ほぼ中性子だけからなる物質でできていると考えられる。そこで RIBF で中性子過剰核（中性子が極端に多い原子核）を用いて、中性子過剰な核物質の物性や希薄な中性子物質の性質を調べる。さらに、

中性子星外殻にある希薄な中性子物質は、極低温のフェルミ原子集団の性質と類似した性質をもつため、レーザー冷却によって極低温原子ガスを生成しその物性を調べる。

(C 班) 中性子星の質量と半径のデータから内部の核物質の状態方程式に強い制限を与えることができるが、半径の直接測定例はまだない。そこで、新型検出器を搭載した X 線天文衛星による中性子星の観測によって世界初の半径の直接測定を行う。

(D 班) 上記の A,B,C 班の研究に関連した原子核・ハドロン、冷却原子系、天体物理などの理論研究を進め、各班の実験・観測結果を理論的に分析・解釈するとともにこれらの結果を結びつけて核物質の状態方程式を決定する。さらに中性子星内部に存在が予想される超流動やパスタ相などの様々な特異な物質の姿を理論的に調べる。

【期待される成果と意義】

A,B 班の実験の成果と理論研究によって、核物質の状態方程式が狭い範囲に絞られる。そこに C 班の半径の観測結果をあてはめることで、状態方程式をさらに選択し検証する。こうして、原子核物理学の長年の夢でもあった「核物質状態方程式」が実験と観測に裏打ちされた形で決定できると期待される。決定した状態方程式からは、中性子星内部の構造とその各領域に存在する物質の姿が理解される。特に、中心部にハイペロンを含むストレンジ核物質が本当に存在するのかどうか、外殻部の中性子物質の超流動の性質はどうか、といった長年の疑問に答えることができる。中性子星の生成や冷却の機構の理解も進展する。さらに、これらの成果は、原子分子物理、物性物理、化学、プラズマ物理といった従来の物質科学の範疇を越えた新しいタイプの物質の科学の創始につながる。

【キーワード】

中性子星: 恒星が進化の末に超新星爆発を起こし、そのあとに残る超高密度の天体。  
核物質: 原子核内部の物質のこと。電子がなく、中性子などのバリオン（重粒子）のみからなる物質。

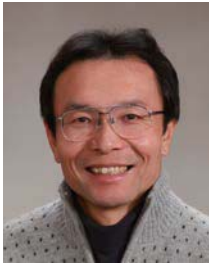
【研究期間と研究経費】

平成 24 年度－28 年度  
1,079,300 千円

【ホームページ等】

<http://lambda.phys.tohoku.ac.jp/nstar/>  
tamura@lambda.phys.toboku.ac.jp





研究領域名 多面的アプローチの統合による計算限界の解明

東京工業大学・大学院情報理工学研究所・教授

わたなべ おさむ  
渡辺 治

【本領域の目的】

本領域では、計算の限界を解明する強力な解析理論の構築を目指す。P≠NP 予想への新たなステップとなる理論を作り出していく。

計算限界の研究：計算の理解のために

「数学」は科学の言葉と言われてきた。さらに現代では、それが「計算」に汎化し、生活や社会に関する記述も含め、広い意味で「計算」が科学の言葉の役割を担っている。

しかし、我々は計算とは何かがよくわかってはいない。計算限界はその最も顕著な例である。たとえばアルゴリズム（計算方法）の計算効率の限界である。同じ問題を処理するにも、様々なアルゴリズムが設計可能であり、より計算効率のよい、すなわち、計算速度の速いアルゴリズム設計が望まれる。しかし、アルゴリズムの効率化にも限度があるはずだ。それが（処理したい問題に対する）計算限界である。残念ながら今のところ、ほとんどの問題に対し、このような計算限界を明らかにできていない。その顕著な例が P≠NP 予想である。こうした計算限界を部分的にでも明らかにすること、それにより、人類の計算への理解を前進させることが、本領域の目標である。

【本領域の内容】

1990年代には計算限界に関する画期的な結果がかなりの数得られた。それらは、2000年代に入って個々に非常に磨きをかけられ究極まで洗練されてきている。こうした状況は歴史的な新展開が見出される夜明け前とみなせる。その新展開を導き出すため、本領域では、個々に深められた技法を特徴付け、その関連を説明し、その先の展開を示唆するような理論を構築していく。それにより大展開への道筋を開こうという計画である。この研究のため、計算の様々な側面の研究で世界をリードする研究者たちが、緊密で組織的な連携のもと、各種の計算限界解析技法の多面的な解析と統合を目指す。つまり、(i) 様々な解析技法を各研究者の視点で分析し、背後にある仕組みや特徴を多面的に理解する研究を進め、(ii) 有力な解析技法間の複合的適法や新たな適用法を導く理論を築き、さらに (iii) 得られた強力な統合解析技法を適用し、計算限界のフロンティアを開拓する成果を数多く生み出す。それにより計算限界の研究に新たな大展開をもたらす。これが本領域の研究

戦略である。

より具体的には、(A) 計算限界を示すための最先端の解析手法を分析し関連性を見出す研究、(B) 計算効率化の技法から逆に新たな計算限界を見出す手法を開発する研究、(C) 境界領域（統計力学、量子計算、機械学習）の分野から計算限界の解析手法の新たな解釈や関連性を示す研究、の3つのアプローチを各々3つ、全体で9つの計画研究で推進する。その中で、各班の研究を深めるとともに、それらの連携の中から計算限界を明らかにするための新たな基盤となる手法を見出していく。

【期待される成果と意義】

以上の研究の中から、計算限界に対する革新的な解析手法や重要な未解決問題への足掛かりとなる結果を得られると期待している。とくに P≠NP 予想に関しては、その解決へ向けての新たなステップを踏み出すことを目指したい。こうした不可能性の解析が物事の本質を見抜く重要な研究につながり、それが新しい学術分野を切り拓いた例は少なくない。NP 問題という基本的な計算の特徴を明らかにすることで、本領域の目指すような理論的な成果からも、革新的なアルゴリズムへつながる基本的な原理や理論の創出、さらには新たな計算の枠組みや計算に関する新たな研究分野の創出も期待できる。

【キーワード】

計算量：アルゴリズムの計算効率（例：計算時間）を表わすために用いる測度。正確には問題例のサイズからアルゴリズムの（最悪入力時の）計算コスト（例：計算時間）への関数として表現される。  
NP 問題：解の検証が比較的容易に可能な計算問題のこと。答えを言われれば「そうか」と比較的簡単に納得できるような問題である。こうした問題は非常に多くの分野に現れる。

P ≠ NP 予想：「NP 問題の中には解を得る計算を比較的短時間で行うのが不可能なものが存在する」という予想。

【研究期間と研究経費】

平成 24 年度－28 年度  
536,500 千円

【ホームページ等】

<http://www.al.ics.saitama-u.ac.jp/elc/>  
[elc-office@is.titech.ac.jp](mailto:elc-office@is.titech.ac.jp)



研究領域名 人工光合成による太陽光エネルギーの物質変換：  
実用化に向けての異分野融合

首都大学東京・大学院都市環境科学研究科・特任教授 いのうえ はるお  
井上 晴夫

【本領域の目的】

地球規模でのエネルギー危機が到来するのは確実視されており、約60年後には採掘可能な石油が枯渇するとされています。太陽光エネルギーを電気エネルギーではなく、化学エネルギー(物質)として貯蔵し、必要な時に必要なエネルギーを取り出せる新エネルギー系、人工光合成系を構築することが喫緊の課題となっています。人工光合成はかつて「人類の夢」でしたが、今や必ず実現しなくてはならない「人類の存続を賭けた課題」となったのです。しかし、その実現には多くのブレークスルー科学技術を得なければなりません。さらにはそれらのブレークスルー科学技術を統合しシステム化した科学技術を用いて新エネルギー獲得を実現しなければなりません。これまで我が国では人工光合成に関わる光生物学、錯体化学、半導体光触媒化学、物理化学、光化学、有機化学、無機個体化学、電気化学、等々の多くの領域でそれぞれ個々に先端的な研究実績を挙げてきました。本新学術領域では、これまでの各領域の先端的研究実績を基礎に、思い切った複合化異分野連携・融合(Multiple cross-fertilization)による新学術領域の創設により総合科学技術としての人工光合成の実現に挑みます。

【本領域の内容】

人工光合成の実現には水を電子源とする酸化還元系の開発が必須です。そのために天然の光合成の「学理」と光合成に「学び」、「模倣し」、「それを超える」研究戦略として、具体的な解決すべき課題を設定した以下の4つの研究班構成とします。

- (1) 光捕集機能を有する人工光合成システムの開発(A01班):人工光合成系における光捕集デバイス作成への指針を得て有効なシステム作成を行います。
- (2) 水の酸化光触媒機能を有する人工光合成システムの開発(A02班):人工光合成の根幹の一つである「いかにして水を電子源に成し得るか？」に焦点を絞り、天然の光合成と同等さらにはそれを超える機能を有する太陽光による水の酸化活性化触媒サイトの開発を行います。
- (3) 水素発生光触媒機能を有する人工光合成システムの開発(A03班):水から取り出した電子により水を還元して貯蔵可能な水素発生系を確立します。
- (4) 二酸化炭素還元光触媒能を有する人工光合成システムの開発(A04班):水から取り出した電

子により太陽光による高効率二酸化炭素還元反応系を開発します。

更に、本総括班が主導してそれぞれのブレークスルー技術を集積・融合した水を電子源とする人工光合成システムの構築を行い、社会が新エネルギーの獲得方法を選択する「議論の土俵に載せる」ための複数の実証事例、科学的指針を提示します。

【期待される成果と意義】

本領域では、人工光合成による太陽光エネルギーの物質変換：実用化プロセスに向けての異分野融合を目指し、研究者が一堂に会する異分野融合のプラットフォームを基礎にオールジャパンの人工光合成フォーラムを形成します。世界各国と切磋琢磨し得る強力な光合成研究のオープン・イノベーションを実現します。人工光合成実現のための研究戦略として、明確な目的を志向する発展基礎研究を縦軸に置き、固有の方法論を基礎とする各領域の先端研究を横軸に据えてその交点に立つ各研究者が思い切った異分野連携・融合を実施・展開し得る共同研究体制を構築します。従来は連携が必ずしも容易ではなかった先端研究者の研究班を超えた有機的結合が可能になり、具体的な共同研究を推進することにより、水を電子源とする新たな研究創造が確実に期待できます。



本領域の研究体制

【キーワード】

人工光合成：太陽光と水を原料として、光エネルギーを物質（水素やアルコール）に貯蔵します。  
再生可能エネルギー：自然の力で枯渇することなく定期的に補給されるエネルギーを言います。

【研究期間と研究経費】

平成24年度～28年度  
750,700千円

【ホームページ等】

<http://artificial-photosynthesis.net/>





研究領域名 プラズマ医療科学の創成

名古屋大学・大学院工学研究科・教授 ほり まさる  
堀 勝

【本領域の目的】

プラズマは、高速電子との衝突に伴う気体分子の電離や解離により生じる反応性に富んだ粒子 [イオン、ラジカル、電子、光] から構成され、高い反応性を利用した材料の超微細加工や機能化が可能であることから、先端産業でモノづくりに不可欠なツールとして、今日の最先端科学を支える基盤技術となっている。一方、これまでの 10 年間で、大気圧や液中で低温のプラズマ（気体温度が室温程度であるプラズマ）を生成する技術が開発され、生体や生物組織に照射することにより、癌細胞の死滅や皮膚疾患治療をはじめとする画期的な効果が見いだされ、革新的医療技術としての展開が世界的に期待されている。

本領域は、プラズマと生体組織との相互作用に関する学術基盤の確立を通じて、新たな学問領域として『プラズマ医療科学』を創成し、新しい医療技術の開拓に資することを目的としている。

特に、本領域では、プラズマと生体および生体組織との相互作用を、「粒子パラメーター（活性粒子種の確定、エネルギー、照射束の定量値）」と「分子生物学」に基づいて、解明し体系化をはかる。



図1 本領域の概要：プラズマ科学を中核に分子生物学、細胞生物学、臨床医学にわたる新学際領域を創成する。

【本領域の内容】

プラズマ科学を中核に据え、医学・分子生物学と融合した未踏の新領域「プラズマ医療科学」の創成に向けて、世界を先導し国際標準化をもリードしうる永続的な学術基盤を構築するためには、長年にわたって世界を牽引し培ってきた「先進プラズマプロセス科学」を基盤とした独創的研究を医療に展開し、医学・分子生物学にプラズマ科

学を導入した新たな学問領域を構築するためのスキームの確立が必要不可欠である。

このため、本領域では、『プラズマ医療科学』の創成に向けた学術基盤を以下のように確立する。

1) 医療用の革新的な大気圧・液中プラズマ生成・制御技術とプラズマ-生体組織表界面計測技術を開発し、相互作用をプラズマ科学に基づき定量的に解明するための方法論を確立する。

2) プラズマと生体との相互作用を原子・分子レベルで解明し、DNA損傷、細胞死、再生・蘇生といった生命現象を分子生物学に基づいて解析し、理論を構築して体系化する。

3) 細胞との相互作用から動物実験に亘る系統的な研究アプローチにより新たな領域を開拓し、同時に、プラズマが生体組織に及ぼす副作用（毒性等）を医学的に評価し、医療としての安全性に密着した学術基盤を構築する。

上記の1)と2)の連携により、効果を定量的に解明し、プラズマ医療科学として体系化する。加えて、3)の臨床応用に向けた系統的研究を通じて、革新的医療用プラズマ装置・診断システムの開発、さらには国際標準化への指針を確立する。

【期待される成果と意義】

本領域で目指しているプラズマと医学・分子生物学を融合した無類の学際領域の創成は、医療技術の革新に不可欠な礎として、従来に無い第三・第四の治療法の開拓による医療イノベーションと医療進化を通じて、ライフイノベーションと安心・安全イノベーションの推進に資すると共に、我が国の学術水準の向上・強化につながるものと期待される。

【キーワード】

プラズマ医療  
分子生物学  
プラズマ-生体相互作用  
ライフイノベーション

【研究期間と研究経費】

平成 24 年度－28 年度  
1,131,800 千円

【ホームページ等】

<http://plasmamed.jp>  
[secretariat@plasmamed.jp](mailto:secretariat@plasmamed.jp)



## 研究領域名 感応性化学種が拓く新物質科学

広島大学・大学院理学研究科・教授

やまもとようすけ  
山本 陽介

## 【本領域の目的】

元素の特性に着目した物質創製化学である「元素化学」の発展はめざましく、従来は不安定で合成が困難とされてきた分子性化合物が次々と単離され、それらの構造と性質が詳しく検討されるようになった。高周期元素は広がりが大きくエネルギー準位の高い原子価軌道をもつため、炭素や窒素などの第2周期元素と比べてHOMO/LUMOギャップのはるかに小さな化合物を形成する。そのため、それらの化合物は外場からの物理的・化学的刺激に鋭敏に応答して物質機能の要である高エネルギー化学種に容易に変化する「感応性化学種」であり、機能の宝庫と期待される化合物群である。しかし、その高い感応性に起因して一般に極めて不安定であるため、高機能性物質として利用するためには効果的な安定化手法の開発が必須の要件であった。近年の元素化学分野における最大の進展は、立体保護基による速度論的安定化や、配位子による複数原子の空間配列制御など、機能発現に関わる構造要素を高度に保持したまま分子を安定化する精緻な分子デザイン法が大幅に発展したことにある。その成果は分子機能の開拓をめざす他分野の研究者にとっても大変魅力的なものであり、周辺分野にも影響を及ぼしはじめているが、これらの高い潜在能力が物質創製化学全般に波及し、有効に活用されているとは言い難い。これは、従来の元素化学研究が、有機元素化学など基礎有機化学の一部の分野に限定的であったためである。

そこで本領域では、機能性物質の創製研究において共通性の高い「感応性化学種」を研究コンセプトとして、近年の元素化学の研究成果に、物理有機化学、有機金属化学、錯体化学、触媒化学、生物化学、機能物質化学、物性化学、理論化学などの先導的研究者がもつ多様な研究観点と研究知見を融合し、真に独創的な機能性物質群を創造するための新学術基盤を構築する。

## 【本領域の内容】

高周期典型元素は広がりが大きくエネルギー準位の高い原子価軌道をもつ。また、s軌道とp軌道のサイズ差が大きいため軌道混成を起しにくい。これらの元素特性は遷移元素との共通性が高く、両者の分子性化合物とそれらの複合型化合物について総合的観点から研究を展開することにより、個別研究では実現し得ない革新的な機能性物質を創出できる可能性がある。実際、高度な生命活動を担う酵素活性中心では、高周期典型元素と遷移元素が機能発現の根幹をなしている。以上の観点から、本領域では、高周期典型元素と遷移元素の分子性化合物を研究対象とし、それらの精密

制御法と機能の探究を通して、新反応・新物性・新触媒を開発するとともに、酵素反応機構の解明と人工酵素の開拓へと研究を展開する。そのため、標的とする感応性化学種の機能に基づき、本領域に以下の研究項目A01～A04を設けた。

A01 班 新反応開拓のための感応性化学種：高周期元素と酸素などの電気陰性度の高い元素との間に形成される分極率の高い結合を用いて、CO<sub>2</sub>などの不活性小分子の変換反応を開発する。高周期元素ラジカルの発生・制御法を開拓し、リビングラジカル重合などの有用反応に応用する。

A02 班 新物性創出のための感応性化学種：熱や光励起に鋭敏で優れた酸化還元特性をもつ高周期元素化合物やπ単結合化合物の精密デザイン法を探究し、磁性材料、電子輸送材料、発光材料、電池材料などへの応用を念頭に置いた機能性物質群を創出する。

A03 班 新触媒開発のための感応性化学種：高周期典型元素の低配位化合物がもつ反応基質との効果的な会合を担保する不飽和性と、反応基質との電子授受を容易にする電子的柔軟性を活かし、既存の概念にとらわれない新触媒を開発する。

A04 班 生体反応解明のための感応性化学種：高周期典型元素と遷移元素を活性中心にもつ酵素反応系を対象とし、最先端の構造生物化学と大規模量子化学計算を駆使して実在系に生成する感応性化学種の発見とそれらが受ける摂動メカニズムの解明に取り組む。

## 【期待される成果と意義】

機能に優れた分子性化合物の創製は、化学が果たすべき最重要課題の一つである。本領域では、「感応性化学種」という明確な研究コンセプトと、先導的研究者の有機的連携がもたらす多様な研究観点を車の両輪として、緊迫するエネルギー・環境問題の解決に資する新反応・新物性・新機能を開拓し、豊かな人類社会の発展に貢献する。

## 【キーワード】

感応性化学種：外場からの物理的・化学的刺激に鋭敏に応答して物質機能の要である高エネルギー化学種に容易に変化する化合物群

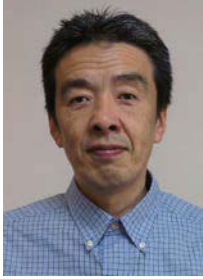
## 【研究期間と研究経費】

平成24年度～28年度  
1,118,200千円

## 【ホームページ等】

<http://www.strecs.jp>





研究領域名 福島原発事故により放出された放射性核種の環境動態に関する学際的研究

筑波大学・生命環境系・教授

おんだ ゆういち  
恩田 裕一

【本領域の目的】

2011年3月11日の大地震および津波の発生を契機として、東京電力福島第一原子力発電所の事故が併発した。原子炉施設から放射性核種が福島県周辺地域に飛散し、大気の大規模輸送過程により全球に拡散した。沈着した放射性核種は、事故発生後1年以上を経て、短期予測や除染などの対策基盤策定のための調査から、長期予測を視野に入れた学術研究の必要性が高まっている。今後は、地表面に降り積もった放射性物質の再飛散や、海洋や河川湖沼の放射性物質の吸着した土砂の移動、森林・農作物、陸・海洋生物への移行が問題となり、さまざまな循環・相互作用が介在するからである。

この放射能汚染は、各学問分野の単独的取組では解決できない複合的で未曾有の問題であり、地球環境科学の多くの分野に、放射化学や放射線計測技術の分野などを加えた分野横断的で新しい学問領域を創設して取り組むことが必須である。こうした長期的な環境中の放射性物質の移行、環境動態予測に研究者が英知を結集させて取り組み、世界をリードする新たな研究領域の形成を目指す。

【本領域の内容】

本領域研究では、研究項目を大まかに4項目（研究項目A01～A04）に区分したうえで、協働で各研究を深化させるとともに、相互にフィードバックを図れるように設定する。[研究項目A01]では、放射性物質の大気への影響に着目し、放射性降下物大気循環モデリングと移行過程の理解、および大気沈着・拡散過程、陸面相互作用の理解を目指す。

[研究項目A02]では、放射性物質の海洋への影響に着目し、海洋、海洋底における放射性物質の分布状況要因把握、および海洋生態系における放射性物質の移行・濃縮状況の把握を目指す。[研究項目A03]では、放射性物質の陸域での移行に着目し、水・土砂移動に伴う放射性物質の移行過程の理解、および、陸域植生、生態系の放射性物質の移行過程の理解を目指す。[研究項目A04]では、移行に伴う放射性物質の存在形態の解明および測定技術の開発に着目し、A01-A03班と協力しながら、さまざまな化学形態における放射性物質測定技術の開発を目指す。

【期待される成果と意義】

本研究では、このような横断的なチームを立ち上げ、地球環境科学の関連分野の連合体を核として複数の関連異分野を取り込む構成によって、汚染状況の実態把握と放射性物質の移行・拡散過程のモデル化を図る。そして、さまざまな学際研究を通して、長期対策を要する科学的知見とモデル基盤を確立する。このように福島原発事故に伴う放射性核種の環境動態に関する学際研究を通じて、わが国の地球環境科学の学術水準を強化するとともに、社会への貢献を図る。

【キーワード】

福島第一原子力発電所事故、Cs-137、陸域、海洋、生物、大気循環、巻き上げ

【研究期間と研究経費】

平成24年度～28年度  
923,800千円

【ホームページ等】

<http://isetr.suiri.tsukuba.ac.jp/>