

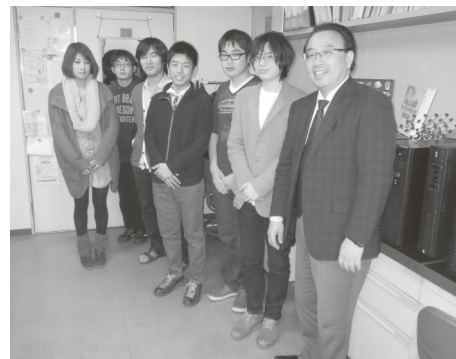
文部科学省科学研究費補助金「新学術領域研究(研究領域提案型)」  
 $\pi$ 造形科学: 電子と構造のダイナミズム制御による新機能創出領域略称名「 $\pi$ 造形」  
 領域番号2601(平成26~30年度)



## $\pi$ 造形科学 NEWS Vol. 09

# 電子状態の視点から $\pi$ 造形科学を極める

## 杉本 学 博士(熊本大学)



杉本研究室のみなさん

——杉本先生は、計算化学をベースにいろいろな研究をされていますね。

**杉本** 基本としては、電子状態の理論計算から、構造・物性・反応との関連を調べるという仕事をしています。理論を使った解析は現象の本質に迫る重要な手法ですし、分野、物質の違いを超えた共通性も発見でき、ワクワクして研究を行っています。データベースや類似性探索などのインフォマティクス手法や分子動力学計算なども組み合わせたさまざまなアプローチも可能ですので、とてもチャレンジングで面白いです。

——電子状態計算から、どのようなことがわかるのですか？

**杉本** 例えば、分子同士の類似度を数値化し、評価することができます。一例として、カロテノイドには多様な構造のものが知られていますが、その類似性を数値化してみると、それを作っている生物の進化系統樹とよく一致することがわかりました。

——分子の進化が、類似性の数値化でわかるのですね。

**杉本** その他、特定の分子に関するテキスト情報などもデータベースに取り入れ、たとえばどういう電子状態を持つ分子が抗がん剤になり、どんな分子が発がん物質になるか判別するといった取り組みも行なっています。

——私のような者は、分子を見ても原子の種類やつながりしか見ていませんが、先生は電子を見ているのですね。

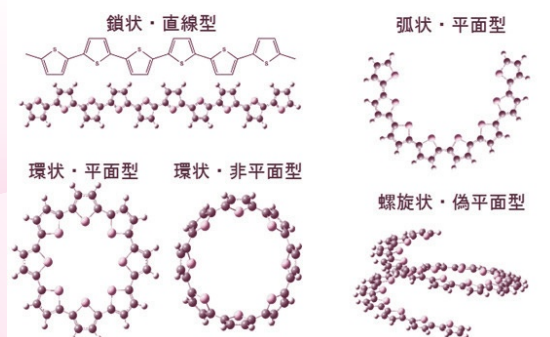
**杉本** こうした研究から、起きた現象を単に理解するだけでなく、新たなものを発見できるところを目指しています。こういうスペックのものがほしいとなった時、モチーフをデータベースから探してきて、こう組み合わせればよいなどと、方向性を示すことをしたいと思っています。

—— $\pi$ 造形ではどのような研究を？

**杉本** 新しい分子を作る「分子設計」と並んで、既知の分子を組み合わせたリ集積したりして新たな機能を引き出す「分子造形」が重要と思っています。

——具体的には？

**杉本** 最近はプロジェクトの仲間のおかげでチオフェンのオリゴマーに興味を持っています。直線状と環状、チオフェン単位の数、シス・トランス、積層度など多くのファクターがあり、それぞれ全く異なった性質を示します。



——それらを組み合わせると、さらに多くの可能性が出てくる？

**杉本** たとえば、チオフェン単位の数が異なる環状オリゴチオフェンを同心円状に並べられれば、磁気メモリやキャパシタが作れるのではないかと？またオリゴチオフェンの環を圧縮することによって、超伝導や面発光レーザーが実現できるのではないかと、いろいろな夢を広げています。計算屋の立場でみても、 $\pi$ 造形は本当に面白いと思います。

——実際に作るとなるとまた大変そうですが、実に面白い可能性を秘めているのですね。

**杉本** もちろんこれは一例です。電子状態に関する計算化学者の立場からでも、コンセプトを提案していくことが重要と思っています。錯体化学に関する研究も行ってきましたので、錯体化学の電子論的な知見を取り入れたり、逆に $\pi$ 造形科学の知見を錯体化学の分野にも提案してみたいです。実際に化合物を合成する人たちと組んで、是非何か面白いものを生み出し、社会のお役に立てれば最高ですね。

2015年4月30日、「 $\pi$ 造形科学」第1回国際シンポジウムが、大阪大学中之島センター10階・佐治敬三メモリアルホールにて開催されます。詳細・参加申込は、 $\pi$ 造形科学ウェブサイト (<http://pi-figuration.jp/>) をご参照下さい。

## $\pi$ 造形科学若手会の活動と インターンシップのお知らせ



若手会ロゴマーク

### ・若手会の活動

新学術領域「 $\pi$ 造形科学」では、若手育成のためにいくつかの仕組みを設けています。ひとつは、博士後期課程学生及び若手スタッフを対象とする「若手会」で、矢貝史樹博士(千葉大)が世話人代表を務めます。

若手会では、メンバーの交流を図るために定期的に研究会を開催し、若手スタッフによる教育的な講演と学生を中心とした成果発表会を行っています。第1回は2014年11月22日・23日に熱海にて開催され、52名の若手研究者が参加しました。



第1回若手研究会

本領域の特長は、 $\pi$ 電子化合物というキーワードを軸に、広範囲にわたる研究者が参画している点です。若手研究者にとってこうした交流会は、関連領域に目を向けるよいきっかけであり、それを通じてふだん取り組んでいる自分の専門領域を見つめ直す機会ともなります。また、高いレベルの志を持って研究に取り組む同世代の姿に大いに刺激を受けた、議論の中から新たなアイデアが生まれたとの声もありました。

$\pi$ 造形若手会には、専用のロゴマークもあります(頁右上)。色はライムグリーンで、柑橘類の果実から果汁が飛び出しているデザインになっています。若手が互いに刺激し合い、フレッシュなアイデアを次々に生み出すことをイメージしています。

若手会ホームページでは、際立った成果を出した学生へのインタビューやニュースレターが読めますので、ぜひ覗いてみてください (<http://pi-figuration.jp/foryoung/index.php>)。

### ・ $\pi$ 造形インターンシップ

$\pi$ 造形領域では、若手研究者の育成を目的に、3種類のインターンシップを用意しており、参加者を随時受け付けています。

#### (1) 中長期滞在型研究

研究分担者、ポスドク・大学院生などの領域内研究協力者が、他の領域研究者の研究室に中長期間(1ヶ月以上6ヶ月以内)滞在し、密接な協働研究を直接実施する体制を支援します。直接相手側の研究に参画することにより、単なるサンプル/測定データの送付にとどまらない、マルチリンガルな研究者の養成に寄与します。

#### (2) $\pi$ 造形スクール(招へい型)

本領域の理念に共鳴し協働を希望する、国内外を問わず領域外の学位取得前の若手研究者(大学院生など)を領域で受け入れ、希望の領域研究者の研究室に滞在してインターンシップを行います。

#### (3) $\pi$ 造形スクール(派遣型)

ポスドク・大学院生などの領域内の若手研究協力者が、海外の連携研究者との協働研究のために現地で滞在研究を行う費用をサポートします。

それぞれ、支援内容は以下の通りです。

#### (1) 往復旅費

#### (2) 宿泊費 (原則各研究機関のゲストハウス等を利用)

#### (3) 滞在経費(最大で日当1,700円まで)

滞在期間:最大で6ヶ月まで。

定員:毎年およそ30人月程度(ただし予算状況による)。

募集期間:随時。ただし予算状況によって受け入れられないことがあります。

成果発表:滞在時の成果や体験報告等については、 $\pi$ 造形若手会のHPや研究会において発表していただきます。興味のある方は、 $\pi$ 造形ウェブサイトよりお問い合わせ下さい。

もっと詳しく→ <http://pi-figuration.jp>