

日本化学会第 99 春季年会 (2019) コラボレーション企画

CREST & さきがけ「超空間制御」領域
公開シンポジウム・研究成果報告会

超空間が拓く 革新的機能と新素材

日時

2019年3月18日(月)10時～16時45分

会場

甲南大学 岡本キャンパス
会場:S3会場(1号館4階142)

参加費

無料(定員100名) 事前登録不要
※日本化学会春季年会への参加登録も不要です。

CRESTさきがけ「超空間制御」研究領域がスタートしてから、公開シンポジウムも5回目を迎えます。本年度は、CREST一期採択課題、さきがけ三期採択課題が最終年度を迎えます。より現実的になってきた革新的機能、素材を中心に分かり易く説明いたします。いずれも挑戦的でキラリと光る独創的な課題であり、重要な成果が生まれたものと思います。

【研究領域 URL】

http://www.jst.go.jp/kisoken/presto/research_area/ongoing/1112062.html

http://www.jst.go.jp/kisoken/crest/research_area/ongoing/bunyah25-3.html

【問 合わせ】

JST戦略研究推進部「超空間」研究領域担当 Tel:03-3512-3525

mail: presto[at]jst.go.jp ([at]を@に置き換えてください)

主催：



国立研究開発法人
科学技術振興機構



超空間が拓く革新的機能と新素材



CREST「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」研究領域

研究総括
瀬戸山 亨

三菱ケミカル(株) 執行役員
横浜研究所瀬戸山研究室
室長

さきがけ「超空間制御と革新的機能創成」研究領域

研究総括
黒田 一幸

早稲田大学
理工学術院
教授



CREST(一期) 研究成果報告

【10:00 ~ 11:55】



CREST趣旨説明

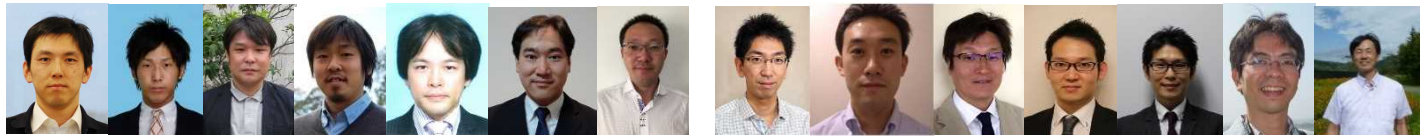
テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製
超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン
極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計
精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製

三菱ケミカル(株) 瀬戸山 亨

東京大学 植村 卓史
信州大学 手嶋 勝弥
東京大学 野崎 京子
早稲田大学 松方 正彦

さきがけ(三期) 研究成果報告

【13:00 ~ 14:50】



さきがけ趣旨説明

デンドリマー超空間によるクラスター形状誘導と機能創出
ゼオライト場を利用した既存金属の新奇電子状態の創出
金属ナノ粒子と多孔性金属錯体のハイブリット化による革新的機能の創出
ナノ空間内でのトポケミカル反応による構造制御と単分散高分子への展開
液液界面・気液界面を利用した機能性低次元空間物質「ナノシート」の創製
結晶ナノ空間の複合的な空間変換に基づく機能創成
超巨大蛋白質会合体の内部空間を利用した結晶化デバイスの創出

早稲田大学 黒田 一幸

東京工業大学 今岡 享稔
名古屋大学 織田 晃
京都大学 小林 浩和
Monash大学 齋藤 敬
東京大学 坂本 良太
お茶の水女子大学 三宅 亮介
東北大学 田中 良和

【15:00 ~ 16:45】

自己集合が導き出す新規多面体群：物質合成と数学的考察
がん転移メカニズム解明にむけた人工超空間の創製
トンネル空間制御による革新的金属間化合物系熱電材料の創製
分子インプラントーションによる超分子エレクトロニクスの創成
外場応答性トポロジカル欠陥ネットワークの構築と多安定性デバイスへの応用
ナノ空間制御によるキラルナノテンプレート創製と光メタマテリアルへの展開
補空間次元を介した物質系のトポロジカル制御

京都大学 藤田 大士
名古屋大学 安井 隆雄
東北大学 山田 高広
東京大学 渡邊峻一郎
大阪大学 吉田 浩之
NIMS 久保 祥一
東北大学 藤田 伸尚



日本化学会第 99 春季年会(2019)コラボレーション企画

CREST&さきがけ「超空間制御」領域

公開シンポジウム・研究成果報告会

超空間が拓く 革新的機能と新素材

講演要旨集

2019 年 3 月 18 日(月) 10 時~16 時 45 分

甲南大学 岡本キャンパス

S3 会場 (1 号館 4 階 142)



プログラム（午前） CREST

10:00- CREST 趣旨説明

瀬戸山 亨（三菱ケミカル（株）執行役員／横浜研究所瀬戸山研究室 室長）

10:15- C1 テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製

植村 卓史（東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授）

10:40- C2 超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン

手嶋 勝弥（信州大学環境・エネルギー材料科学研究所 研究所長／教授）

11:05- C3 極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計

野崎 京子（東京大学大学院工学系研究科 教授）

11:30- C4 精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製

松方 正彦（早稲田大学理工学術院 教授）

プログラム（午後） さきがけ

- 13:00- さきがけ主旨説明
黒田 一幸（早稲田大学理工学術院 教授）
- 13:05- P1 デンドリマー超空間によるクラスター形状誘導と機能創出
今岡 享稔（東京工業大学科学技術創成研究院 准教授）
- 13:20- P2 ゼオライト場を利用した既存金属の新奇電子状態の創出
織田 晃（名古屋大学大学院工学研究科 助教）
- 13:35- P3 金属ナノ粒子と多孔性金属錯体のハイブリッド化による革新的機能の創出
小林 浩和（科学技術振興機構 さきがけ研究者）
- 13:50- P4 ナノ空間内でのトポケミカル反応による構造制御と単分散高分子への展開
齋藤 敬（Monash University School of Chemistry Senior Lecturer）
- 14:05- P5 液液界面・気液界面を利用した機能性低次元空間物質「ナノシート」の創製
坂本 良太（東京大学大学院理学系研究科 助教）
- 14:20- P6 結晶ナノ空間の複合的な空間変換に基づく機能創成
三宅 亮介（お茶の水女子大学基幹研究院 講師）
- 14:35- P7 超巨大蛋白質会合体の内部空間を利用した結晶化デバイスの創出
田中 良和（東北大学大学院生命科学研究科 教授）
- 15:00- P8 自己集合が導き出す新規多面体群：物質合成と数学的考察
藤田 大士（京都大学物質-細胞統合システム拠点 准教授）
- 15:15- P9 がん転移メカニズム解明にむけた人工超空間の創製
安井 隆雄（名古屋大学大学院工学研究科 准教授）
- 15:30- P10 トンネル空間制御による革新的金属間化合物系熱電材料の創製
山田 高広（東北大学多元物質科学研究所 准教授）
- 15:45- P11 分子インプランテーションによる超分子エレクトロニクスの創成
渡邊 峻一郎（東京大学大学院新領域創成科学研究科 特任准教授）
- 16:00- P12 外場応答性トポロジカル欠陥ネットワークの構築と多安定性デバイスへの応用
吉田 浩之（大阪大学大学院工学研究科 助教）
- 16:15- P13 ナノ空間制御によるキラルナノテンプレート創製と光メタマテリアルへの展開
久保 祥一（物質・材料研究機構機能性材料研究拠点 主任研究員）
- 16:30- P14 補空間次元を介した物質系のトポロジカル制御
藤田 伸尚（東北大学多元物質科学研究所 助教）

研究領域紹介

文部科学省の選定した平成 25 年度の戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」のもとに、CREST、さきがけ 2 領域が発足いたしました。現在 CREST では 12 課題、さきがけでは 14 課題が進行しています。

CREST

「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」

研究総括



瀬戸山 亨（三菱ケミカル株式会社 執行役員／横浜研究所瀬戸山研究室 室長）

領域概要

本研究領域は、21 世紀の人類社会が直面する環境・資源・エネルギー・医療・健康等の諸課題を解決するために、空間空隙を有する物質の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性、および界面を高度設計する超空間制御技術を構築し、既存材料・技術では到達困難な革新的機能素材等の創製を目的とします。

具体的には、エネルギー(原料)や化学資源の貯蔵、輸送、分離、(触媒的)物質変換、エネルギーの高効率利用、環境汚染物質の低減・除去、生活水の獲得、さらに医療・健康に関わる素材において、実現されていない“あらまほしき高度の機能・物性”の発現を目的として、物質を構成する原子・分子の配置と結合によって生じる空間空隙構造を高度設計・制御すること、すなわち、超空間制御により、十分に差異化された革新的機能素材等の創製を目指した研究開発を推進します。

ポーラス材料、メソポーラス材料、層状構造物質、かご状構造物質、ナノチューブ、高分子、超分子、生体分子、構造材料などの一般的な空間空隙材料に限らず、空間空隙が機能発現の場となりうる物質・材料を研究対象とします。化学、物理、生物学、工学、計算科学、計測技術等の異分野間の知見を融合したチーム体制のもと、単なる基礎研究ではなく、世界でダントツの素材・製品につながる機能・物性が発現し産業化の端緒となる研究課題を推奨します。

領域アドバイザー

猪俣 誠	日揮(株)プロセステクノロジー本部 特別理事
上田 涉	神奈川大学工学部物質生命化学科 教授
北川 宏	京都大学大学院理学研究科 教授／理事補(研究担当)
黒田 一幸	早稲田大学理工学術院 教授
佐々木 高義	物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 フェロー
多辺 由佳	早稲田大学理工学術院 教授
千葉 雅俊	田辺三菱製薬(株)サプライチェーン本部 本部長
土井 正男	北京航空航天大学 ディレクター／教授
堂免 一成	信州大学環境・エネルギー材料科学研究所 特別特任教授 ／東京大学大学院工学系研究科 教授
駒谷 隆志	三菱エンジニアリングプラスチックス(株) 常務執行役員
中山 智弘	科学技術振興機構研究開発戦略センター企画運営室 室長
原田 宏昭	(公財)日産財団 常務理事／事務局長
平野 愛弓	東北大学材料科学高等研究所 主任研究者／電気通信研究所 教授

採択課題

平成 25 年度採択分

植村 卓史 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

「テラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製」

手嶋 勝弥 (信州大学環境・エネルギー材料科学研究所 所長／教授)

「超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン」

野崎 京子 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

「極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計」

松方正彦 (早稲田大学理工学術院 教授)

「精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製」

平成 26 年度採択分

陰山 洋 (京都大学大学院工学研究科 教授)

「アニオン超空間を活かした無機化合物の創製と機能開拓」

加藤 隆史 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

「ソフトナノ空間を形成する自己組織化液晶高分子を基盤とする革新的輸送材料の創製」

関根 泰 (早稲田大学先進理工学部 教授)

「超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換」

山本 潤 (京都大学大学院理学研究科 教授)

「空間局在・分子超潤滑に基づく時空間空隙設計と高機能表示材料創生」

平成 27 年度採択分

一杉 太郎 (東京工業大学物質理工学院 教授)

「界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製」

水口 将輝 (東北大学金属材料研究所 准教授)

「ナノ超空間を利用した熱・スピン・電界交差相関による高効率エネルギー変換材料の創製」

櫻井 和朗 (北九州市立大学環境技術研究所 教授)

「単分散プラトニックミセルを利用した細胞標的型DDSの基盤構築」

高田 十志和 (東京工業大学物質理工学院 教授)

「緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化」

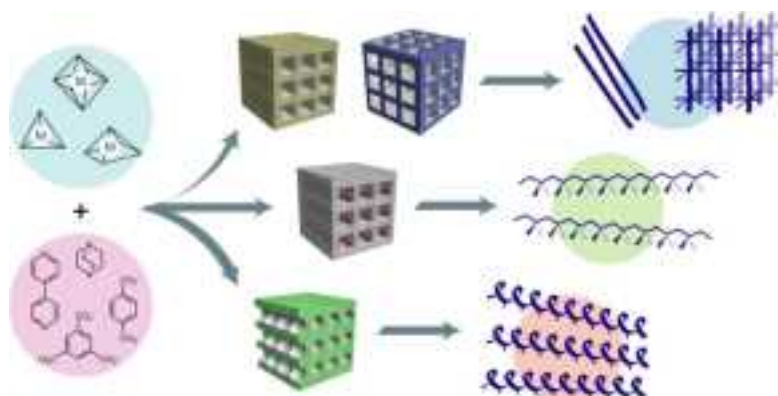
C1 テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製

植村 卓史 (東京大学大学院新領域創成科学研究科 教授)

核酸やタンパク質などの生体高分子は厳密に制御された一次構造（配列、分子量、立体構造など）を有し、明確に規定された高次集積構造を形成することで、生体内において高度な機能を発現している。これは現在の高分子化学の水準からするとまさに究極のシステムと言える。このような精巧な高分子構造・集積を産み出す鍵となるのは、細胞という組織化されたナノ空間内でDNAが持つ分子情報を正確に翻訳・複製・転写しているところにある。つまり、ナノスケールの空間に情報を組み込み、それを的確に表現することができれば、究極に構造が制御された高分子材料を創出できることを自然が示している。

このような背景の元、我々は分子が規則的に配列した結晶性ナノ空間が新しい高分子制御場として機能するのではと考えた。特に金属イオンと有機配位子との自己集合により構築される多孔性金属錯体(MOF)を用いれば、これまでの多孔性材料とは異なり、ナノ細孔のサイズ、形状、周期性、表面機能を合理的に設計することができる。このようなナノ構造情報を有する結晶性空間を鋳型とすることで、その空孔内で高分子の合成を行えば、ホストの持つ構造情報が翻訳・転写され、得られる高分子の一次構造（分子量、立体規則性、反応位置、シーケンスなど）や集積構造（粒子化、配向、アロイ化など）を精密に制御することが可能になることを明らかにした（図）¹⁾。

本手法により、最も身近な高分子材料であるビニル高分子²⁾、共役系高分子をはじめとした光・電子機能性高分子³⁾、無機高分子⁴⁾や生体高分子⁵⁾に至るまで、これまで望まれていたにも関わらず、通常法では全く不可能だった構造・集積・分離を達成し、潜在的に有していた機能性を発現する超構造高分子集積体の構築を可能にした。



参考文献

- [1] Review articles: (a) *Chem. Soc. Rev.* **2017**, *46*, 3108. (b) *Chem. Commun.* **2018**, *54*, 11843.
- [2] (a) *Nature Commun.* **2015**, *6*, 7473. (b) *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 6443. (c) *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 7886. (d) *Nature Commun.* **2018**, *9*, 329.
- [3] (a) *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 708. (b) *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 10088. (c) *Nature Commun.* **2018**, *9*, 1660.
- [4] (a) *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 5231. (b) *Chem. Commun.* **2017**, *53*, 6945.
- [5] (a) *Adv. Mater.* **2015**, *27*, 288. (b) *Nano Lett.* **2015**, *15*, 4019. (c) *Nature Commun.* **2018**, *9*, 3635.

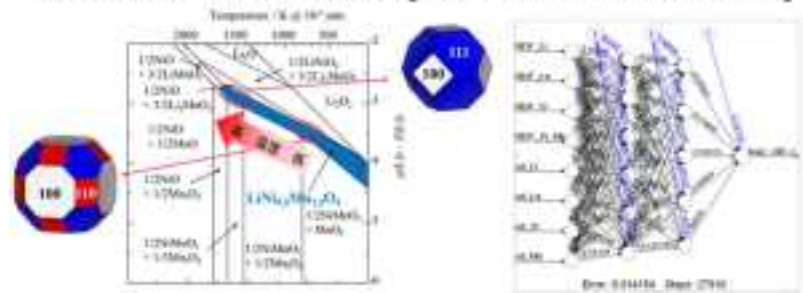
C2 超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン ～全結晶型リチウムイオン二次電池への挑戦～

手嶋 勝弥 (信州大学環境・エネルギー材料科学研究所 所長/教授)

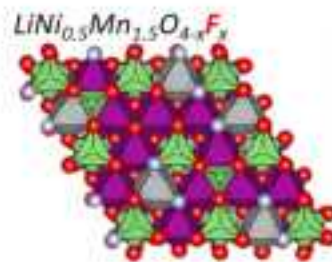
酸化物系全固体(全結晶)リチウムイオン二次電池(LIB)は、車載用途をはじめ、さまざまな分野で大きな期待を集めているものの、社会実装に向けてはサイエンス・イノベーションギャップを越えなければならない。このような環境のなか、我々は、フラックス結晶育成技術を指導原理とした独自アプローチの全固体(結晶)LIBの創成に注力している。本研究では、超空間制御をキーワードとし、比容量(作動電圧抑制、可動 Li^+ 貯蔵サイト数)、負荷特性(電子伝導性、 Li^+ 伝導性)およびサイクル特性などの電池主要性能において、すべてに優れた性能を備える新規材料研究に取り組んだ。特に、平均作動電圧 4.7 V、理論容量 137 mA/g のスピネル型 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ を基本物質に据え(実材料としては層状化合物も研究対象とし)、 $P4_332$ 空間群における 4a と 12d サイトを占有する $\text{Ni}^{2+}/\text{Mn}^{4+}$ の規則配列化、8c や 24e サイトの酸素空孔の一部のアニオン置換およびこのときに形成されるアニオン-遷移金属クラスターの幾何異性体構造、さらに酸素空孔のカチオン&アニオン空間制御のアプローチにより、8a-16c-8a($Fd-3m$)または 8c-4a/12d-8c($P4_332$)経路を拡散する Li^+ 伝導効率、4a/12d:8c サイトへの過剰 Li 貯蔵、電解液界面の電荷移動抵抗、固体電解質界面での異相反応抑制を検討した。さらに、フラックス結晶育成プロセスを活用し、高性能活物質・固体電解質結晶やそれらの複合界面のデザインにも注力した。

図は、Scientific な観点での発展の可能性を示している。例えば、DFT や MD 計算で作成した晶癖発達面データベースを機械学習と掛け合わせ、任意の組成・形状をもつ結晶のフラックス育成場の予測『原子論的フラックス法』を提案している(図:上段)。また、最適電池動作や界面形成時の反応制御などを可能にする各種結晶材料の最適表面デザイン『表面原子制御』(図:下段左)を評価している。さらに、全固体電池の核心となる清浄表面を、フラックスプロセスを駆使して作製し、完全界面接合の実現『完全表面創成』(図:下段右)を目指している。当日は表題に係る我々の研究について、電池デザインを例示しながら、フラックスサイエンスと超空間制御の視点から詳述する。

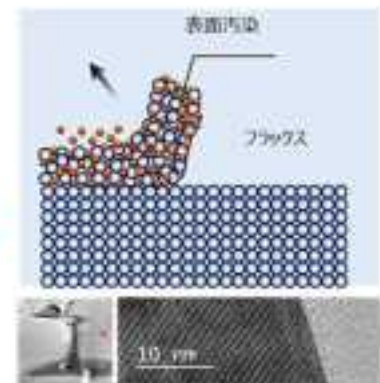
原子論的フラックス法(量子計算+機械学習)



表面原子制御



完全表面創成



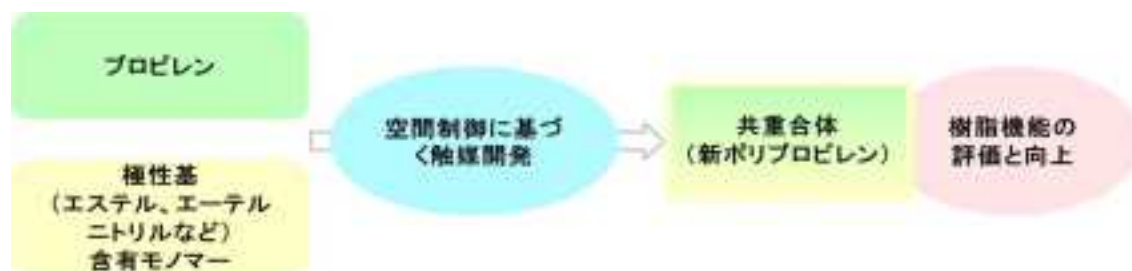
C3 極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計

野崎 京子（東京大学大学院工学系研究科 教授）

ポリプロピレンは構造材料から、包装材料、繊維、身近なプラスチック製品に至るまで広く一般に用いられている汎用樹脂で、世界で年間 5,000 万トン以上生産されている。安価で強度・耐熱性・耐薬品性に優れ、ポリエチレンに次ぐ巨大市場をもつ合成高分子である。一方で、接着性、相溶性、着色性に劣るなどの欠点がある。これらの欠点を補うために現在は、プロピレンの重合によってポリプロピレンを合成した後、無水マレイン酸のグラフト化や、塩素化によって改質している。

これに対し本研究は、プロピレンと、アクリル酸エステル、酢酸ビニル、アクリロニトリルなどの極性モノマーをランダムに共重合させて、ポリプロピレン主鎖に直接極性官能基を導入した「新ポリプロピレン」を創製することを目的とした。主な研究成果は以下の通りである。

- (1) 新規パラジウム触媒ならびにニッケル触媒を開発し、当初目的としたプロピレンと極性モノマーの共重合を達成した。
- (2) パラジウム触媒ならびにニッケル触媒を用いて、微イソタクチックなポリプロピレンの合成に成功し、結晶性を観測するに至った。
- (3) 計算機を活用して極性 PP の分子設計を進め、各期待用途にあるべき構造を予測し、その一部はサンプル合成を通じて材料設計の妥当性を実証した。



本研究は、従来、ラジカル機構による重合後修飾に頼っていた極性基含有ポリプロピレン合成に、触媒の共重合という全く新しい方法論を確立した。本法によって、様々な官能基を、主鎖からの距離を調整しつつ導入できるようになった。これまで決して得られなかった新しい物質群である。得られた極性基含有ポリプロピレンについては、理論と実験の双方から、相溶化剤として、またフィラーを使いこなす樹脂改質剤あるいはベースポリマーなどとして多彩な用途の可能性を確認できた。以上のように、本研究の成功はポリプロピレンの用途を飛躍的に広げ、高分子化学に新たな未踏の研究領域を拓いた。

参考文献

1. "Copolymerization of Propylene and Polar Monomers Using Pd/IzQO Catalysts" Nakano, R.; Nozaki, K., *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 10934–10937.
2. "Crystalline Isotactic Polar Polypropylene from the Palladium-Catalyzed Copolymerization of Propylene and Polar Monomers" Ota, Y.; Ito, S.; Kobayashi, M.; Kitade, S.; Sakata, K.; Tayano, T.; Nozaki, K., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 7505–7509.
3. "Nickel-Catalyzed Propylene/Polar Monomer Copolymerization" Konishi, Y.; Tao, W.; Yasuda, H.; Ito, S.; Oishi, Y.; Ohtaki, H.; Tanna, Q.; Tayano, T.; Nozaki, K., *ACS Macro Lett.* **2018**, *7*, 213–217.

C4 精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製

松方 正彦 (早稲田大学理工学術院 教授)

エネルギー・化学にかかわる産業は我が国全体の 10% 近くの CO₂ を排出しており、これらの産業の省エネルギー化は極めて重要な課題である。そこで我々は、マイクロ多孔性材料を用いた新規な膜あるいは吸着分離技術の分離工程への実装による、化学産業・医療分野における有用な分子の分離精製工程の省エネルギー化を達成するために、8 研究機関の共同研究によって、ゼオライト、炭素材料の有するサブナノレベルの細孔に基づく分子ふるい機能を精密に制御・集積した材料を創製することを目的とした。

なかでも、銀カチオンをマイクロ細孔内に保持したゼオライト膜が、オレフィン/パラフィン分離膜として極めて高い透過選択性を有することを見出すとともに、その透過分離機構について一部明らかにした¹⁾。この成果は、自動車や半導体製造等多くの産業に利用される基礎化学品であるエチレン・プロピレンを、省エネルギーかつ安価に生産するプロセスの構築に繋がると期待できる。この Ag 型 FAU ゼオライトについて、収差補正型走査電子顕微鏡 (STEM) を用いた原子分解能観察を行い、Ag イオンそのものを、より明るいコントラストとして直接観察することが可能となった (図 1)²⁾。

酸素同位体 ¹⁸O₂ と ¹⁶O₂ の分離については、既存の分離において、¹⁸O₂ の選択分離係数が 1.003 であるのに対して 112K 近傍で選択分離係数が 2-3 以上、つまり約 1000 倍という驚異的な選択分離の可能性がナノ細孔体で見いだされた。さらに、ゼオライトやカーボン系材料およびゼオライト-カー

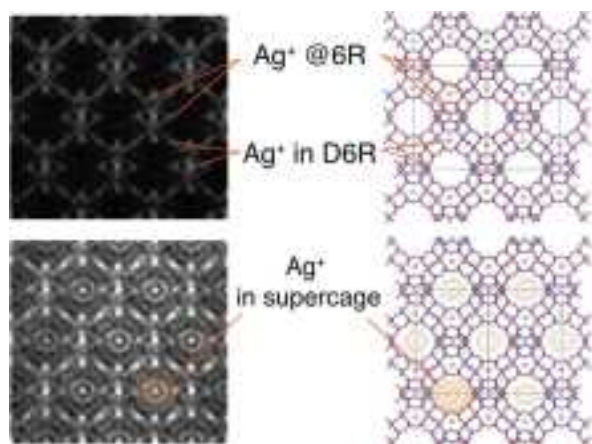


図 1 電子顕微鏡を用いた Ag-FAU ゼオライト中の Ag 直接観察。

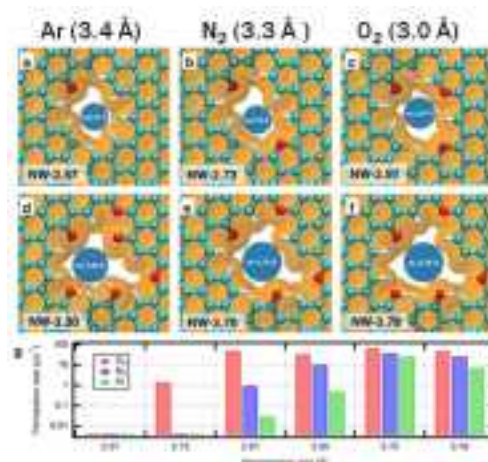


図 2 グラフェンのナノスケール窓による選択的気体透過性。

ボン複合材料を用いた、水素同位体の吸着分離について、その分離原理を実験的手法と計算機シミュレーションから明らかにするとともに、これら材料の分離特性を活かした分離プロセスの提案を行った。これらは、医療分野等で利用させる水素同位体の、省エネルギーかつ安価な分離プロセスの構築につながる成果として期待される。

参考文献

1. M. Sakai, M. Matsukata, et al., ACS Appl. Mater. Interfaces. 11(4) (2019) 4145-4151.
2. K. Yoshida, Y. Sasaki, et al., Microporous Mesoporous Mater. 259 (2019) 195-202.
3. F. Vallejos-Burgos, F.X. Coudert, K. Kaneko, Nature Commun. 9, Article number: 1812 (2018)

CREST&さきがけ「超空間制御」領域 公開シンポジウム・研究成果報告会要旨集
2019年3月

国立研究開発法人科学技術振興機構
戦略研究推進部

Department of Innovation Research
Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7番地

電話 03-3512-3531 (代表)

<http://www.jst.go.jp/kisoken/>

©2019 JST

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to crest@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.
