

ERATO「腰原非平衡ダイナミクスプロジェクト」

追跡評価報告書

総合所見

本プロジェクトは、平衡状態の下に潜在する非平衡状態を積極的に用いることにより、平衡状態では得られないような新しい物性・機能を示す材料の探索を目指して行われた。プロジェクトの大きな成果として、従来の超短パルスレーザーによる時間分解ポンププローブ測定に加え、PF-AR に建設した 100ps 程度の時間分解能を有する X 線時間分解専用ビームライン NW14A から得られるパルス X 線をプローブとして用いることにより、強い非平衡状態における結晶構造のダイナミクスを直接観測したことが挙げられる。NW14A を用いて、強相関物質における光誘起相転移の構造解析や温度による相転移では到達することができない物質相である「隠れた相 (hidden phase)」の発見、タンパク質の構造変化や結晶の破壊過程など、多様な成果が得られた。

NW14A は、プロジェクト終了後、国内外の多数のユーザーに使用されており、本プロジェクトは、SACLA などの新世代超高速 X 線光源やパルス電子線回折など、現在の非平衡科学の最先端技術の開発・利用への基盤を築いた。

プロジェクト終了後は、以下のように多様な物質群を対象とした研究が発展している。マンガン酸化物薄膜における「隠れた相」の発見とその構造の解明は、光誘起現象が「低温相→高温相」の変化である、という従来の暗黙の認識を覆す重要なものである。また、それを皮切りに、コバルト酸化物や複数の分子性導体でも普遍的に「隠れた相」が存在することが明らかになりつつある。これらの対象物質や現象への興味が、現在における多数の新しい計測手法の開発へのモチベーションにもつながっており、本プロジェクトの意義はこのような分野を先駆的に拓いたことにもあると考えられる。このことが世界的に評価されていることは、2014 年の研究総括のフンボルト賞の受賞からも明らかである。

また、本プロジェクトに参加したほとんどの研究者がプロジェクト参加後にキャリアアップを果たした。その中の半数以上がプロジェクト終了後にさらにキャリアアップし、多くの研究者がテニユアポストを獲得していることは、若手研究者の人材育成の観点からの意義は大きく、非常に高く評価できる。

1. 研究成果の発展状況や活用状況

本プロジェクトで超高速光誘起構造の時間変化を直接観測する目的で高エネルギー加速器研究機構 (KEK) の物質構造科学研究所放射光科学研究施設に建設された PF-AR の X 線時間分解専用ビームライン NW14A は、100ps の時間分解能を有し、時間分解測定のための専用ビームラインとしては世界唯一のものである。プロジェクト終了後も NW14A は、国内外の共同利用ユーザーに広く使用されている。このことは、研究総括の先見の明と、本プロジェクトの成功に基づくものであり、高く評価される。特に、光触媒やタンパク質のダイナミクスの研究利用が NW14A で継続的に行われている点は高く評価できる。

物質科学における各テーマの発展については、それぞれについて、先鞭を着けたという意味で大いに評価できる。マンガン酸化物薄膜における「隠れた相」の発見とその構造の解明は、光誘

起現象が「低温相→高温相」の変化である、という従来の暗黙の認識を覆す重要なものである。マンガン酸化物の時間分解測定は、今や世界各国の時分割X線散乱装置の標準物質になった感もあり、最先端X線科学の国際会議でも多くの発表がみられるようになった。また、それを皮切りに、コバルト酸化物やTTF-CAなど複数の分子性導体でも普遍的に「隠れた相」が存在することが明らかになりつつあり、この概念は、時間分解測定の分野に限らず幅広い分野で重要性が認識され、研究にも広がりが見られる。

本プロジェクト終了後すぐに、研究総括がCREST研究領域「先端光源を駆使した光科学・光技術の融合展開」の研究課題「光技術が先導する臨界的非平衡物質開拓」（2009～2014年度）の研究代表者として、またグループリーダーの足立がさがけ研究領域「光エネルギーと物質変換」の研究課題「時間分解X線構造解析法による光エネルギー変換機構の分子動画観測」（2009～2012年度）の研究者として研究テーマを発展させている。その研究の中で幅広い応用に繋がりつつある光電子顕微鏡など価値ある開発が続いていることから、研究成果の発展が継続的に行われていると評価できる。

2. 研究成果から生み出された科学技術的、社会的及び経済的な効果・効用及び波及効果

2.1 科学技術の進歩への貢献

本プロジェクトで発見された「隠れた相」は、物質科学分野に新たな概念を提案しており、固体物理・固体化学分野に新たな潮流を創出することに成功し、科学技術の進歩に貢献した。この「隠れた相」は、その後、本研究グループの様々な研究で有機分子性物質、遷移金属酸化物で発見され、他の遷移金属化合物などでも同様の現象の発見が続いていること、多くの理論家がその機構解明について様々な研究を開始したことなど、我が国発の新概念として、確固たる地位を占めていると思われる。本プロジェクトは、このような概念的な発見が我が国の大型プロジェクト研究から発せられた希有な成功例である。研究総括のフンボルト賞受賞は、本プロジェクトで推進した「光誘起相転移研究」に対する客観的な評価の一つとして挙げられ、世界トップレベルの研究であると高く評価できる。

また、時間分解測定専用の放射光ビームラインNW14Aの建設・共用を始めとした時間分解X線解析技術の確立は、様々な分野の研究者の参入を促し、多くの研究分野に対して広く貢献してきた。NW14Aは施設の制限から100 psの時間分解能の実験が限界であるが、本プロジェクトの成果を基に、X線自由電子レーザー（XFEL）施設SACLAを利用したより高速な時間分解X線解析技術へ繋げて100 fsの時間分解能測定技術へと発展させる可能性が期待できる。さらに、十分なビームタイムを確保することが困難なSACLAでの実験を効率良く行うための予備実験を行う拠点としてNW14Aが活用されていることは、本プロジェクトの成果を非平衡科学の最先端技術の開発・利用への基盤を築いた意味でも大きな意義を持っている。

2.2 応用に向けての発展

本プロジェクトは、物質が平衡状態から大きく引き離されたときに、その構成要素（電子、スピン、結晶構造など）がどのように振る舞うのか、を新しい計測手法の開発により観測するという、それ自体がいまだ未解明で最先端な基礎研究である。直接的に成果が応用へ結び付いたもの

はまだないが、超高速・動的構造解析の重要性を示した本プロジェクトの成果は、今後、人工光合成触媒の開発や超高速光スイッチの開発など、光誘起相転移を伴う現象を利用した幅広い分野に対して影響を与えるものと考えられる。これらの応用研究を進めるためには、材料形態など技術的な挑戦を必要とするので、技術開発を継続的に行うことが必要である。また、抗がん剤の作用機構解明と創薬評価手法への応用も考えられるが、これらの応用へのハードルは高く、今後の展開に期待したい。

本プロジェクト終了後に採択された CREST 研究課題で開発した時間分解光電子顕微鏡は、デバイス評価・開発に適した新手法であり、広範な応用研究に繋がっている。昨今、エネルギー再生利用の手段として研究競争が激化している有機太陽電池の光キャリアの生成・消滅・拡散などの計測に利用されはじめており、デバイス開発に欠かすことのできない重要な手法となりつつあることは高く評価できる。

2.3 参加研究者の活動状況

本プロジェクトに参加した研究者の半数以上が昇任しており、若手研究者の多くが、国内で、大学等の教授・准教授や准教授クラスの職に就いている。さらに、海外の大学でも教授、准教授の職に就いている研究者もいる。このことから本プロジェクトは、人材のキャリアアップに大きく貢献したと評価できる。若手研究者の多くは、プロジェクト終了時から現在までの5年間にさらにキャリアアップを果たしてテニユア職を得ている。このことは、大型プロジェクトを経験することで培った経験がその後の研究者人生に大きく役立っていることを示していると考えられる。ただし、若手研究者らの成果や活動については、研究総括の研究ほどに広く周知されているとは必ずしも言えない。今後、積極的に成果発信をすることで各若手の研究が様々な分野に広がっていくことを期待する。

3. その他

放射光ビームラインの建設といった大型予算が必要なプロジェクトを進める上で、ERATO プロジェクトのような研究戦略に基づいたトップダウン式のシステムは有効である。その成功のためには、どのような研究戦略を立てるかということが非常に重要である。本プロジェクトは、新しい研究領域を開拓したという意味において、成功例の一つと考えられる。

以上