

ERATO「中村活性炭素クラスタープロジェクト」

追跡評価報告書

総合所見

フラーレンやナノチューブなどの炭素クラスターは、その構造の理論的予言や存在自体が我が国の研究者によってなされ、本プロジェクトにおいて対象物質とされた C_{60} に代表されるフラーレンは、プロジェクト発足当時、多くの化学特性が未知のまま残された基礎研究の対象物質であった。本プロジェクトは、こうした新規性の高い巨大 π 共役系炭素クラスターについて、基礎的物性、反応性を系統的に明らかにしたうえで、具体的な応用を視野に入れ、実用化に至る産業技術まで高めることを目的として実施された。機能素子グループ、デバイス創製グループ、ナノ構造解析グループの3グループの相補的な協力がなされ、プロジェクト中に示された高い目的完遂能力は、以下に述べるように、終了後も更に発揮され続けており、非常に高く評価する。

プロジェクト終了後の特筆すべき成果として、まず、塗布型有機薄膜太陽電池において、世界最高である11.7%まで変換効率を高めた技術革新の実現と、ロール・ツー・ロールプロセスを可能とした製造工程の高効率化の整備から、商品化一歩手前まで展開した研究成果の実用化が挙げられ、プロジェクト発足時からの主要共同研究者であった三菱化学(株)により、“曲がる太陽電池”として、窓用シースルー型太陽電池が本年度中にも商品化が予定されている。ナノ炭素物質利用の実用化例として、注目すべき成果である。この例では、プロジェクト遂行中に機能素子グループにより700を超えるフラーレン誘導体の組織的かつ系統的な合成実験により実現された C_{60} 誘導体を、塗布型太陽電池の高効率実現の“鍵物質”として用い、原理実証研究段階において変換効率5.4%に達していた材料をベースに、その後、更なる技術的改良により、11.7%の高効率が達成された。この間、この有機太陽電池の研究は、資金的にはERATOに続く大型予算として、JSTの戦略的イノベーション創出推進プログラム(S-イノベ)やNEDO助成金を得、 C_{60} の大量製造・分離、高純度フラーレン誘導体製造の量産化から太陽電池商品化に至る一貫体制が築き上げられている。本プロジェクト終了後5年を経た段階におけるこうした研究開発の進展は、初期段階でERATO資金により支援された大学発の基礎研究が大規模な実用化まで至った成功事例として、特筆に値すると評価する。

研究成果の2例目として、機能素子グループによる炭素クラスターの基礎的研究が、プロジェクト終了後、フラーレン化学をさらに発展させるとともに、フラーレンとは異なった高次 π 空間化学という新分野開拓にも挑戦し、継続して高い研究ポテンシャルを維持している点が挙げられる。具体例として、研究開発したsiRNA複合体としてフラーレン誘導体を利用するドラッグ・デリバリー・システムは、既に臨床レベルの水準に達しており、高く評価できる。また、新たな高次 π 空間利用化学においては、有機色素増感太陽電池への取り組みも進めており、既に変換効率7.4%を実現した。フラーレン誘導体による有機太

陽電池とは異なる発電機構に着目した優れた研究成果である。

本プロジェクトのもうひとつの柱であったナノ構造解析グループによる単一有機分子観測手法の開発は、物質開発とは一線を画し、非常に挑戦的な課題であり、プロジェクト終了後その手法がさらにブラッシュアップされ、ナノ空間における結晶成長の直接観測とその制御の成功という成果が挙げられた。開発された SMRT-TEM Imaging (単分子実時間電子顕微鏡イメージング) という新たな手法を駆使し、2013 年度から東京大学 COI プログラムのもと、結晶成長制御によるジェネリック医薬品の探索と開発研究が進められていることは、非常に高く評価できる。

また、人材育成の面では、本プロジェクトに参画した若手人材の多くが、プロジェクト終了後、めぐまれた研究環境で、新たな研究ポストの獲得、昇任を遂げており、この面においても高く評価できる。

以上を総括し、本プロジェクト終了後の研究状況は総合的に特に優れていると評価できる。

1. 研究成果の発展状況や活用状況

本プロジェクトは、

- (1) フラーレン化学をベースとする精密有機合成化学 (機能素子グループ)
- (2) 機能素子グループによって合成された高機能性有機分子を利用する有機エレクトロニクスの創製 (デバイス創製グループ)
- (3) 独自開発した高性能透過電子顕微鏡による単分子計測法の開発 (ナノ構造解析グループ)

の 3 グループによって構成され、各研究グループは本プロジェクト終了後においても、それぞれの研究テーマの特徴を活かしながら、下記のように、更なる発展を遂げている。

機能素子グループは、機能性に重点を置いて数々の新規フルラーレン誘導体や高次 π 電子化合物の合成等の研究を展開している。例えば、有機溶媒に可溶性 Li^+C_{60} 誘導体合成と電気化学特性の解明、低製造コストの C_{60} 誘導体合成経路の確立、蛍光量子収率 100% の炭素架橋オリゴ (フェニレンビニレン)、赤外応用が期待されるトリキノジメタン骨格安定化ピラジカル、固体発光のアントラジフラン、特異な界面構造を有する化学修飾 C_{60} 二重膜ベシクル 3 次元構造体等の合成である。これらは合目的な分子設計のもと、電子物性・光物性等に関して明確な機能を有し、将来、有機エレクトロニクス・オプトエレクトロニクスにおける応用製品として活用されることが期待される。

デバイス創製グループは、本プロジェクト終了後、「塗布型長寿命有機太陽電池の創出と実用化に向けた基盤技術開発」/JST 戦略的イノベーション創出推進プログラム(2010-2019) および、「有機系太陽電池実用化先導技術開発・有機薄膜太陽電池の生産プロセス技術開発および実用化検討」/NEDO 助成金(2012-2014)を申請・採択されている。これらのプロジェクトでの研究開発の推進により有機太陽電池の実用化は急速に進展し、2012 年に世界最高

の光電変換効率 11.7%を達成したことは非常に高く評価できる。現在は更なる光電変換効率向上に向け、近赤外光吸収キノイド型ドナー材料の開発を進めている。また、有機太陽電池の鍵物質である高純度 (99.9%) フラーレン誘導体を 2.4 g/日程度の規模で製造可能とし、1kg スケールの量産化も可能になっている。セル製造技術としては、タンデム素子の開発と並行して 3 成分系ブレンド型太陽電池の開発も進め、スプレー塗布、パターン印刷、連続印刷、ロール・ツー・ロール塗布のプロセス製造技術の開発も著しく進捗している。

ナノ構造解析グループは、本プロジェクトで開発・育成された独自の TEM 観察技術をさらに発展させ、現在では単一鉄原子が触媒として働き、 C_{60} 骨格からさらにサイズの増大したフルーレンが形成される過程を実時間・実空間で観察できる程度にまで観察技術を進展させている。こうした分子変換の直接観察はきわめて興味深いのが、一方で、分子変換後の構造を電子顕微鏡以外の手法により確認するなど、課題も残されている。本グループは、更に、SMRT-TEM Imaging という新たな手法を編み出した。これにより、結晶のタネとなる単一分子に分子がさらに多数累積していく過程において、ごく一部の分子だけが結晶へと成長していくという機構を実験的に証明した。従来の結晶成長機構説を覆す結果であり、今後の更なる進展に期待したい。本グループにより開発が進められている単分子直接観察による化学反応過程の研究は、電子顕微鏡の観察像が反応素過程の何を反映しているか等、物理・化学的根拠の詳細をさらに明らかにし、本手法をより一般的な化学反応場におけるその場観測の実験手段として高めると、将来、科学史上に残るきわめて重要なマイルストーンとなることは間違いなく、今後の更なる発展を大いに期待したい。

以上により、本プロジェクト後の研究成果の発展状況、活用状況は特に優れているものと評価する。

2. 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

(1) 研究成果の科学技術の進歩への貢献

本プロジェクトの科学技術の進歩への主要な貢献の一つは、デバイス応用の目標を明確にし、分子設計のアウトラインを描いた上で、合成した 700 を超えるフルーレン誘導体から、太陽電池や医薬品に有望な機能を持つ高次 π 電子系物質を探り当てた実績であろう。これにより、合成化学分野におけるデバイスオリエンティッドな手法の有効性が明らかとなり、この分野における一つの潮流を作り出している。 C_{60} フルーレンの化学反応性について、これだけ徹底的かつ系統的に研究した例は世界的にも例が無く、一連の研究によって得られた、高次 π 電子系の化学反応性と電子状態の解明の知見は、科学技術の進歩に大きく貢献した。つまり、本プロジェクトは、フルーレン化学や高次 π 空間化学という新分野を、機能という切り口から開拓し、ひいては未来の新産業創出へと繋がる一つの大きな科学技術上の潮流を生み出しつつある。こうした新しい発想は、次節で詳しく述べる有機薄膜太陽電池の実用化を可能にしたフルーレン誘導体材料の発見に、決定的な役割を果たしている。本手法の有効性は、プロジェクト終了後、医薬品開発分野にも展開され、新たに

カチオン性テトラアミノフラレンを利用するドラッグ・デリバリー・システムへ発展し、近い将来医薬臨床分野への波及が十分望める段階までできていることからもうかがえる。

本プロジェクトが創出したもう一つの大きな貢献は、単一原子・分子の挙動を観察可能にした高性能透過電子顕微鏡開発から生まれた新しい潮流である。この技術は世界トップレベルの空間・時間分解能と低損傷性を有し、今まで観察が困難であった有機分子について、その構成原子の組み換えさえも実時間・実空間で追跡できる可能性を有している。本プロジェクト遂行中になされ、実験結果からその有効性が示唆された新技術は、その後、有機分子の結晶成長機構を単一分子観察から解明し、その知見に基づいた医薬品の製造に用いられている。こうした一連の流れは、本プロジェクトで開発された新たな基礎的科学技術の進歩への貢献が、その後、新産業創出に至る可能性を示した良い例であり、非常に高く評価できる。

その他の学術面における貢献としては、「高次 π 空間の創発と機能開発 (CMC 出版、2013 年)」や「フラレン誘導體・内包技術の最前線 (CMC 出版、2014 年)」の出版、文部科学省の新学術領域研究「高次 π 空間の創発と機能開発 (2008-2012)」の立ち上げ等が挙げられ、科学技術上の新知見普及や新研究領域の形成に寄与している。

(2) 研究成果の応用に向けての発展

応用に向けた研究成果の展開について、まず最初に特筆すべきは、デバイス創製グループによる有機薄膜太陽電池の開発の成功が挙げられる。本課題については、本プロジェクト終了後も、公開されているだけで 8 件の特許出願があり、実用化に向けた研究が着実に遂行されている。また、プロジェクト終了後、本プロジェクトの成果を基に、東京大学に光電変換化学講座を設置したことは、社会還元事業の成果として高く評価する。現在、有機薄膜太陽電池の技術開発は、大型競争的資金である JST 戦略的イノベーション創出推進プログラム「有機材料を基礎とした新規エレクトロニクス技術の開発」の研究開発テーマの一つとして発展的に引き継がれている。この研究開発テーマでは本プロジェクトで培われた世界最高レベルの有機半導体の設計・合成技術ならびにナノからマイクロメートルスケールでの分子組織体の階層構造制御技術がコア技術として利用されている。これは本プロジェクトが長期的で高度の技術的波及効果をもつことの表れでもある。持続可能社会に向けたエネルギー・環境問題の解決が世界共通の喫緊の課題である今日、塗布型有機太陽電池の製造技術を確立し、「曲がる太陽電池」として商品化間近まで進展させた成果は高く評価できる。また、多くの日本企業がシリコン太陽電池事業や有機エレクトロニクスの研究開発から撤退する中、潜在的に非常に高い特性を有するナノ炭素材料という新物質を製品のコア物質として利用し、実用化まで進めた共同研究者である三菱化学の役割も非常に高く評価される。

応用に向けたもうひとつの取り組みとして、ナノ構造解析グループによるジェネリック医薬品の結晶多形制御技術の開発が挙げられる。有機分子の結晶化機構の解明という世界

的な科学的発見をもとに、2013年度から東京大学 COI プログラム「結晶成長制御によるジェネリック医薬品の探索と開発」というテーマで研究開発が推進されている。国民の関心の高い医薬・医療分野において発見、発明される新しい知見や技術は、社会的・経済的波及効果が非常に高いことは言うまでもなく、今後の更なる発展が大いに期待される。

(3) 参加研究者の活動状況

本プロジェクトのいずれのグループにおいても、参加研究者はプロジェクトの成果を基にして、基礎研究から応用開発まで幅広い科学技術分野でプロジェクト終了後も活躍していると認められる。各グループの人材キャリアアップ、活動状況に関する所見を具体的に以下に記す。

機能性素子グループのリーダーであった松尾特任教授は、プロジェクト終了後も、筆頭を含め 30 報以上の論文を発表し、40 件以上の招待講演を行い、4 件の学術賞を受賞、また、大型競争的資金も 1 件（最先端・次世代研究開発支援プログラム）獲得し、非常に活発な研究活動を継続していると判断される。同グループで活動した博士研究員も国内外でそれぞれ助教、准教授、教授へと順調に昇任しており、人材育成の観点からも本プロジェクトが成功であったことを裏付けている。

デバイス創製グループでは、プロジェクト終了後も有機薄膜太陽電池の実用化、商品化に向けて一層活発な研究開発が続けられている。同グループの研究者は博士研究員から助教へ昇任した一人を除き、すべてが企業研究者であるため企業内での動静は不明であるが、戦略的イノベーション創出推進プログラムや NEDO 助成金の獲得状況等から、本プロジェクトで得られた知見や経験が企業研究者へも大きなプラスになっているものと推測される。

ナノ構造解析グループの 2 名の研究者も順調に昇任している。また、CREST、科研費特定領域研究などの大型の競争的資金を獲得しており、この点からも本プロジェクト終了後の継続的かつ活発な研究活動が続けられていることは明らかである。

最後に、中村研究総括もプロジェクト終了後において、より一層の活発な研究活動を継続している。プロジェクト期間中の論文 74 報、累積被引用件数 2500 回以上、平均 5.49 件/年/報という高いレベルを維持しており、プロジェクト終了後の論文 62 報も平均 5.10 件/年/報とほぼ同じレベルを維持していることは特筆に値する。また、プロジェクト期間中から現在に至るまで、大型競争的資金を 4 件獲得しており、中村研究総括の提案課題に対する期待がきわめて高いことがうかがえる。

以上により、本プロジェクト後の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・効用及び波及効果は特に優れているものと評価する。

3. その他

最後に、本プロジェクトが追跡評価においても非常に高く評価された要因に触れたい。プロジェクトの成功要因が、中村研究総括の優れたリーダーシップに尽きるといえる点は評

価委員の一致した見解である。その一端が、有機薄膜太陽電池の研究開発に見てとれる。基礎研究段階から実用化までにいたる有機薄膜太陽電池の開発過程は、“成功するプロジェクト”のビジネスモデルとして非常に参考になる事例であるが、プロジェクト開始時には、n型半導体フラーレン誘導体である PCBM と呼ばれる分子が有力な有機太陽電池材料として主役の座を占めていた。そのような状況の中で、中村研究総括は、優れた洞察力により、開発すべき材料分子として、何故 C₆₀ を使うのか、開発される C₆₀ 誘導体はどのような特性を持つべきか、また、その分子は、実用化段階で使われる物質状態ではどのような構造や電子特性を持つのか、等の高効率太陽電池材料のあるべき姿を予知した上で、実用化、商品化まで見越し、必要な人材と組織づくりを行った。そして、見事に開花させ、果実になるまでチームを導いた。「人の可能性に賭けたい」とする ERATO の理念をそのままに具現化した成功事例と言える。人の可能性に賭けたい、とする「人」にはさまざまな個性や能力を持った研究者像をイメージできるが、本プロジェクトの成功は、プロジェクトリーダーの計画全体に対する洞察力とチームの統率力を持った「人」がその鍵になったと結論できる。