

## ERATO 山元アトムハイブリッドプロジェクト事後評価（予備評価②）概要書

【研究総括】山元 公寿（東京工業大学 科学技術創成研究院／教授）

【評価委員】（敬称略、五十音順）

塩谷 光彦（東京大学 大学院理学系研究科化学専攻／教授）

鈴木 賢（旭化成株式会社 研究・開発本部 化学・プロセス研究所／上席理事・所長）

所 裕子（筑波大学 大学院数理物質科学研究科／教授）

三澤 弘明（委員長；北海道大学 電子科学研究所／特任教授）

森川 健志（株式会社豊田中央研究所／シニアフェロー）

ERATO 山元アトムハイブリッドプロジェクトの全体構想は、従来まで未開拓の物質群であったサブナノサイズの同種または異種元素の原子数が精密に制御されたサブナノ粒子を創製し、次世代の革新的機能材料を生み出すことを目指している。規則的な幾何学構造を持つ精密高分子構造体（ dendrimer ）を利用した独創的な創製アプローチとしてアトムハイブリッド科学を確立させるとともに、これらサブナノ粒子の新物質群ライブラリーを構築し、構造や触媒特性・電磁特性などを解析して新物質群の位置付けを明確にしている。これらの取組みは、原子の自在配列という化学の究極的な目標に通ずる、全く新しいサイエンスを切り拓く挑戦的かつ創造的なものである。

2021 年 4 月に開始した ERATO 追加支援期間（機関継承型）では、本期間で得られたサブナノ粒子の原子数・元素配合の自在制御法の確立、サブナノ粒子の設計指針に資する超原子周期表（サブナノ粒子の特性が周期的に変化すること）の構築、原子ダイナミクス観察、ホウ素原子層物質の合成と機能開拓などの研究成果を核とし、超原子のオンデマンド合成、物性計測、理論構築、原子ダイナミクス解析へ展開するとともに、引き続き異分野融合や社会実装を進め、研究機関におけるアトムサイエンスの拠点の構築を目指している。

本プロジェクトでは、サブナノ観測・サブナノ物性・サブナノ反応・社会実装の4つの研究グループを設定している。研究総括の強力なリーダーシップのもと、専門の異なる個々に優秀な若手研究者を配置したボトムアップ型のプロジェクト運営により、分野横断的でハイレベルな研究が実現している。前回の評価を踏まえて、グループ間の活発なコミュニケーションと連携の強化が図られたことにより、合成・機能開発、構造解析、理論アプローチが融合的に展開され、相乗効果を生み出し、顕著な成果に結実させることができた点は高く評価できる。また、本プロジェクトに関わった全ての若手研究者がすでに独立したアカデミックポストに就いており、人材育成という目的は十分達成されたといえる。比較的高額な初期投資として調達した極低加速原子分解能 STEM（走査透過型電子顕微鏡）は、サブナノ粒子の優れた触媒機能発現に寄与すると考えられる構成原子の動的挙動を直接観測することを可能にしていることから高い稼働率が維持され、有効に活用されている。プロジェクトヘッドクォーターによる研究支援としては、社会実装グループを中心として、将来を見据えた特許出願などの権利化のみならず、産学連携体制の構築により産業分野における活用を意識した dendrimer・粒子の試料提供や販売の段階にまで進展し、企業からの問い合わせも増えており、積極的な社会実装支援が機能している。

本プロジェクトの実施により、従来、物理化学的な手法を用い真空中で行われてきたサブナノ粒子の合成を、合成化学的に液相中で行うことが可能になり、それによってサブナノ粒子の大量合成に道が拓かれ、国際的にも高く評価されてきた。現在、サブナノ粒子のライブラリーはさらに増えて 300 種類以上となった。超原子周期表や超縮退状態の原子構造、アトムダイナミクスの発見は、基礎化学における新しい視点を提供することから、触媒の時間的・空間的な変化観察の実現や量子化学分野の開拓など、新しい研究領域を生み出すことも期待される。追加支援期間における特筆すべき新たな成果としては、57 元素を分散させた 2-3nm サイズ粒子合成の成功、原子元素識別 STEM 観測法による新物質

Au-Ag-Cu 合金粒子合成の成功、AI 技術を活用した高度な分析手法の確立による金属間結合のライブラリー作成、ホウ素原子層物質の選別捕獲の発見などが挙げられ、新たな方向性の研究につながっている。当初は想定していなかった新たな展開として、サブナノ粒子を構成する原子の動的挙動の可視化による異種原子の特定、ポロフェン誘導体の発見とそのサーモトロピック液晶性の発現などが挙げられ、サブナノ粒子の科学をより深化させる新たな知見が得られたことは評価に値する。また、若手研究者による論文化が極めて順調に進められており、多くの成果が影響力の大きい論文誌に掲載された点も高く評価でき、全体として学術的に非常に高いレベルの成果を生み出している。今後はアトムハイブリッドの科学・技術をベースに、追従ではない新たなコンセプトの研究にも挑戦するとともに、引き続き積極的な情報発信に取り組んでほしい。

追加支援期間による研究体制の定着・発展については、ERATO 本期間から研究機関に「アトムハイブリッドマテリアル研究ユニット」が設置され、将来的には「研究センター」として研究拠点を発展させるべく、研究機関内の附置研、国際研究拠点などの各組織とのネットワーク強化を図っている。研究拠点を維持・発展させるための人的・物的体制を整えるために、WPI や科研費などの大型研究費の獲得を目指しており、研究機関からは研究スペースや他のリソースに関して支援を受けている。研究成果の展開について、例えばホウ素原子層物質の研究ではコンソーシアムを形成し、物質の機能別に多くの企業と共同研究を推進している点は高く評価でき、他の研究への展開が望まれる。本プロジェクトで創成された、原子の機能・反応・動力学に関する新しい学理の構築を核として、ここでしかできない研究が世界から注目され、国内外から優秀な研究者が集まる研究拠点として発展すべく、研究体制の定着・発展のための活動と、研究機関からの継続的な更なる支援を期待する。

今後の課題としては、サブナノ粒子の触媒への応用を想定した場合に様々な測定を可能にするための化学的安定性の評価、サブナノ粒子の合成技術のノウハウを適切に保護しながら普及するための戦略立案、物質の大量合成や試薬販売などが挙げられる。より多くの研究者・技術者が、本プロジェクトで見出された物質の特性を評価・検討するために必要なこととして今後の達成が期待される。ただし、すべての取組を大学の研究者が行うには限界があることから、応用側の企業との連携構築が重要なポイントとなる。産業への展開にあたっては計画性をもって取り組んでほしい。また、海外からの研究フォロワーに対する対応の整理の必要があると思われ、競争するのか協調するのか、十分な検討が必要と思われる。海外特許の取得とその活用方法に関する戦略や、重要性が高い技術を優先して確保する戦略が必要と思われる。

社会・経済への貢献について、サブナノ粒子は、従来は高温高圧が必要であった化学反応を室温常圧で行える、極めて活性の高い触媒として利用できると考えられる。エネルギー消費を極限まで抑制できるため、コストを抑えた環境に優しい化学物質の合成プロセスの実現により大きな社会的・経済的インパクトが期待できる。触媒特性がサブナノスケールの金属集積体の原子数に依存するなどの、産業技術に有意義な新しい知見を得ていることも心強い。他分野の研究者との連携による化学・光学・電磁特性の詳細な検討・解明により、電極触媒や電子材料、医療、バイオなどへの展開も期待したい。新たなサイエンスの開拓だけでなく、従来よりも飛躍的に高い活性の触媒や発光・電子デバイスなど、社会実装を目指すべき研究成果の創出が期待できる。

以上を総合すると、本プロジェクトは全体的に順調な進捗にあり、戦略目標「二次元機能性原子・分子薄膜による革新的部素材・デバイスの創製と応用展開」の達成に資する十分な成果が得られていると評価できる。

〔総合評価〕A+(十分な成果が得られている)

以上