

ERATO 磯部縮退 π 集積プロジェクト事後評価（最終評価）報告書

【研究総括】 磯部 寛之（東京大学大学院 理学系研究科／教授）

【評価委員】（敬称略、五十音順）

大須賀 篤弘（委員長；京都大学大学院 理学研究科／教授）

岡崎* 俊也（産業技術総合研究所 ナノチューブ実用化研究センター
／副研究センター長）

久保 孝史（大阪大学大学院 理学研究科／教授）

佐藤 信太郎（株式会社富士通研究所 デバイス&マテリアル研究センター
／プロジェクトディレクター）

忍久保 洋（名古屋大学大学院 工学研究科／教授）

唯 美津木（名古屋大学大学院 理学研究科／教授）

※（崎の字は山へんに奇）

評価の概要

ERATO 磯部縮退 π 集積プロジェクトは、「ポスト・ナノカーボン科学」のさきがけとして、多環芳香族分子を環状化した分子の創製、精密集積による環状芳香族分子の集積体の創製により、材料創製の可能性を大幅に広げ、そしてそれら材料（縮退 π 電子系分子）からもたらされる新現象の発見や応用を目指している。明確な構造をもつ大環状 π 電子化合物を用いて「ポスト・ナノカーボン」の科学・技術を切り開こうとする本プロジェクトは時宜を得たものである。

環状化合物の新たな機能を電子物性の観点から探るといふ目標を実現するために、有機化学、物性物理、デバイス開発のグループに加え、理論物理のグループにより構成されている。専門が全く異なる研究者が集まっているにもかかわらず、研究総括の優れたリーダーシップの下、各グループ間の交流が積極的になされており、分野横断的な研究の推進と連携のとれた運営が行われたと認められる。

代表的な成果としては、筒状分子内に包接されたフラーレン分子のユニークな回転挙動の解明や世界記録を大幅に更新した大きな円偏光発光特性を持つ有機分子の発見、メッシュ構造をもちかつ長さが明確に規定された周期孔ナノチューブの合成、単層で発光する OLED 用分子の発見とデバイスの作成、有機小分子のリチウムイオンバッテリーの負極材料としての利用などが挙げられる。これらの成果の中には発光デバイスやリチウムイオンバッテリーに関連するものがあり、既存の研究の延長線上にある研究ではあるものの、社会実装の可能性もある重要かつ意義深い成果もある。中でも、発光デバイスの成果については、JST の研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) 「産学共同フェーズ」シーズ育成タイプにおいて研究が進行中であり、今後の展開に期待したい。合成された一連の環状パネル型分子の機能を広範に開発し、これらの分子群が様々な新物性や新機能を秘めていることを見事に実証した。

今後は、創製した分子の構造と、それに起因する電子構造、さらには、集積構造を制御することによる物性発現を利用した「分子技術」を確立し、それを駆使した材料を実用化することが期待される。

以上を総合すると、ERATO の目的に適い、十分に優れた研究成果が得られたと判断する。戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」の達成に資する十分な成果が得られたと評価する。

1. 研究プロジェクトの設定および運営

1-1. プロジェクトの全体構想

本プロジェクトは、「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」という戦略目標の下、「ポスト・ナノカーボン科学」のさきがけとして、多環芳香族炭化水素からなるパネル型分子を環状に配置した大環状化合物における縮退した電子構造に

基づく物性発現を目指すものである。多環芳香族分子を環状化した分子の創製、精密集積による環状芳香族分子の集積体の創製により、材料創製の可能性を大幅に広げ、そしてそれら材料（縮退 π 電子系分子）からもたらされる新現象の発見や応用を目指している。そのような材料設計思想は、まさにナノテクノロジーの王道であり、磯部研究総括の強みである有機合成技術を最大限に生かしながら、さらに材料開発にまで踏み込むことを目指した意欲的な内容となっている。カーボンナノチューブやグラフェンなどのナノカーボンが次世代の材料として注目されるが、いずれも同一種分子からなる分子種ではなく様々な分子性物質の混合物である化学種であるため、構造と物性の制御が困難である。本プロジェクトでは、これらの問題点を分子化学のアプローチによって解決し、多様な分子構造の分子を合成してナノカーボンの新たな学問領域を開拓する挑戦的な研究である。明確な構造をもつ大環状 π 電子化合物を用いて「ポスト・ナノカーボン」の化学・科学・技術を切り開こうとする本プロジェクトは時宜を得たものであり、本研究の進展により逆にナノカーボンの意味も明確になるという展開も期待できる。

環状炭化水素化合物の類似研究がある中で、環状化合物の研究を超分子科学、物性物理学、材料科学へと多面的に展開を図るところに本プロジェクトの大きな特徴がある。特に、同種の芳香環を環状に配置することによって分子軌道の縮退を生み出し、その縮退軌道の特徴を生かした機能を追求するというアイデアは独創性があり、環状化合物の科学に新たな道筋をつけるものになると期待できる。様々な新現象の解明や応用研究に発展させる構想は、プロジェクトチームの個々の強みを生かした融合研究であり、特徴あるプロジェクトになっている。研究総括らのグループが有機化学を専門とし新たな構造体の合成を目指すのに対し、物性物理や理論物理、デバイス開発に十分に力量ある研究者を配置することによって、分野融合的な研究体制を構築することに成功した。化学、物理、応用の各方面における研究のつながりと厚みが得られ、短期間で効率的な成果取得につながったと評価できる。縮退した電子構造を大環状構造から意図的に生み出そうという発想は、新たな視点をもつものであり、超伝導など新規物性を生み出すことを目指して分野横断的な研究が推進された。個々の分子を磁気化学やデバイス応用や理論的解明など多角的に追及することにより、秘められた高いポテンシャルを明らかにした。今後、環状化合物が革新的材料として様々な分野の研究者に認知され、利用される可能性がある。

1-2. プロジェクトの目標・計画

カーボンナノチューブやグラフェンなどのナノカーボンの目覚ましい発展を踏まえ、構造の明確な環状化合物をきちんと有機合成し、これらの分子のポテンシャルを引き出そうという目的は、明確であり、またタイムリーであった。いわゆる大環状分子について、具体的にどのような構造、物性のものを目指すのか明確でないようにも思えるが、基礎科学として「発見」を目指すとしたら、あいまいさはある程度許容できると思われる。環状化合物の新たな機能を電子物性の観点から探るという目標を実現するために、集積構造体グループ（グループ A）では集積体の構築とその構造制御（＝構造化学研究）、強相関機能グループ（グループ B）では強相関電子機能の探索（＝物理学研究）、デバイスグループ（グループ C）ではデバイス開発（＝応用研究）の三つのミッションが設定されており、新規大環状分子に対する電子注入の検討と新物性の発現、さらには薄膜デバイスの構築を進めるという計画であった。それぞれのミッションには具体的な目標が定められ、それに基づいた研究計画も合理的になされていた。さらに、これらの各グループで浮かび上がってきた問題点を理論的に解析するとともにグループ間の連携を促進するために、理論交差グループ（グループ X）が設けられており、理論に基づいてメッシュ状構造をもつカーボンナノチューブ状分子の半導体特性が予言されるなど、各グループの緊密な協力が成果として結実した。いずれのグループにおいても有機的な融合を基にした win-win の研究成果が挙がっており、研究成果を見込んだプロジェクト全体で統一感のあるよく練られたチーム構成であった。

多くの興味ある新規大環状分子およびその集積体が着実に合成され、新分子に基づくデバイス構築でも顕著な成果が得られており、概して良好に計画が推進されたと評価する。強相関縮退電子系のテーマでは、当初計画からの変更が見られるが、研究の進展に伴って新たな課題が生じて研究計画を臨機応変に修正することは必要なことである。プロジェクトの多くのグループの人材が、ERATO 期間中にプロモーションに伴う移動をしており、実験環境の整備、実施を含めて多くの困難が発生したであろう状況で、一定期間内に多くの成果を挙げられた点は評価したい。

本プロジェクトでは、環状芳香族化合物群の合成研究を軸に、それらの集積状態および電子状態を精密制御することによって、機能材料、特に強相関係ならびに有機 EL の開発を目指した。つまり、材料やデバイス側のニーズに沿った分子ならびに集積構造設計をおこなうというよりは、合成した分子についてキラアPLICATIONを探索するという、シーズ先行の形態である。だとすると、強相関係および有機 EL 開発などと並立して、合成した分子や、それらからなる基本材料について、幅広く物性探索をおこなった結果もあると今後の既存材料との差別化に役立つと思われる。

1-3. プロジェクトの運営

有機化学、物性物理、理論物理、デバイス開発と専門が全く異なる研究者が集って各グループが結成されているにもかかわらず、各グループ間の連携のとれた運営が行われた。これは、しっかりとしたマネジメントと密なコミュニケーションによるものと思われ、この点で研究総括の強いリーダーシップを評価したい。また、国内企業との共同研究も積極的に展開された。各グループが相互に研究内容を理解しあい、新しい領域の発展につなげていた。プロジェクトのグループ構成は、多面的展開を行うのに適切で、それぞれの実験グループを理論グループがサポートし、かつ指針を与えるような構造になっていた。各グループの研究進捗を確認するための会議も定期的に行われていた。

全体として若いメンバーで構成される ERATO プロジェクトであるが、海外からの研究者も含めた若手人材の登用がなされ、各グループにバランスよく配置されていた。本プロジェクトでは、プロモーション、受賞などにつながっており、比較的短年で次のポストを見つける者が多く、人事の流動性が高い。多様な視点を有する人材育成の場としても十分に機能したと評価できる。特に集積構造体グループ（グループ A）、理論交差グループ（グループ X）において、若手人材が着実に育っており、研究総括をはじめとする各グループリーダーのリーダーシップが十分に発揮されたといえる。また、プロジェクトの主要な研究者の異動が多くあったが、それにも拘らず成果は順調に出ていた。積極的にプレスリリース等を活用した成果発信や多数のセミナー等を開催したが、これらは若手を巻き込んだ新しい研究の発展につながった。また、成果の一部は、科学雑誌 C&EN で取り上げられるなど高いレベルにあり評価できる。

集積構造体グループ（グループ A）とデバイスグループ（グループ C）の間には、とりわけ密接な連携が図られており、合成された新規化合物を用いたデバイス開発がスムーズに行えるように効果的なプロジェクト運営が行われていた。また、理論交差グループ（グループ X）は、各グループ間の「のり」として役割を期待されていたが、実際のその役割を果たしていたと評価できる。一方、強相関係機能グループ（グループ B）における研究は、当初計画の大幅な変更を余儀なくされたため、出遅れてしまった。研究において、状況は常に変わり得るのでむしろ柔軟にグループ構成と目標設定を変えたことは評価できるものの、本 ERATO 全体を通じて得られた多くの顕著な成果におけるグループ B の貢献は大きいとは言えず、プロジェクトの全体構成からすると一部物足りない面が存在すると見受けられる。

また本プロジェクトの運営において特筆すべきは、得られた成果をもとにした研究展開を着実に進めていることであり、その一例は、「正孔遅延効果を利用した Simple OLED の開発」であり、JST の A-STEP 「産学共同フェーズ」シーズ育成タイプに研究フェーズを進行させたことである。このような取り組みを積極的に行っている一方、欲を言えば、環状芳香族分子およびそれらからなる集積体がもつ構造、機械・電子などの物性に関する特異性探索を網羅的にこなうアプローチがあっても良かったと思われる。

知的財産権の取得に関しては、作製した分子並びに集合体に関する技術・ノウハウの知財化、さらに企業への技術移転が重要である。特許出願件数が国内 7 件、国外 3 件というのはやや少ないように思われるものの順調に伸びている。企業との共同研究を幅広く行い、さらなる特許取得に努めてほしい。

以上を総合すると、ERATO という大型研究プロジェクトの推進に相応しい構想や目標・計画が掲げられ、かつそれに適う運営がなされたものと判断する。

[研究プロジェクトの全体構想] [研究プロジェクトの目標・計画] [研究プロジェクトの運営]

a (的確かつ効果的である)

2. 研究の達成状況および得られた研究成果

2-1. 集積構造体グループ（グループ A）

本研究グループでは、(1)ナノカーボンの基本構造を模した各種環状芳香族分子（ナノカーボン分子）を合成し、さらなる構造多様化をすすめること、(2)構造多様化に基づくナノカーボン分子の集積構造の設計・構築を行うことを目標とした。研究総括の明確な意図が反映されており、最も大きな成果が得られたと評価される。信頼できる確実な有機合成手法を用いて様々な新規大環状 π 電子化合物を比較的大スケールで合成する手法を開発し、他の研究グループに供給できる体制が確立されたことにより、研究期間を通じて本プロジェクトを支える屋台骨となった。研究予算を充当し集中的に研究を推進したものと思われる。

(1)については、「原子欠損型グラフェン」および「カーボンナノチューブ」のモデル分子を芳香族分子の大環状化という手法を用いることで多種多様な環状芳香族化合物群の合成、さらに周期孔ナノチューブの合成に成功しており、大いに評価できる。様々なパネル部品を環状化して、多彩な環状パネル型有機分子の合成を達成した。幾何異性体の分離や光学活性異性体の分離も行われており、総体的に高いレベルにあると言える。ポスト・ナノカーボンに向けて、芳香族分子を大環状化した分子群を合成、単離し、多様なナノカーボン分子を得ることは、ナノカーボンの応用研究の状況を鑑みても、この先多くの分野で合成した分子が必要とされ、その供給先として機能することが期待される。実際に、かなりの数の原子欠損型グラフェンやカーボンナノチューブのモデル分子となる分子が合成された。特に、グラムスケールでの合成を確立した点は評価に値する。しかし、有機合成の観点からみると鍵となる環化反応としては、ニッケル触媒による還元的カップリングと白金錯体の還元的脱離によるカップリングが利用されており、いずれも既知の方法であることを指摘したい。また、環状パネル型有機分子には、パネルの連結部に炭素-炭素単結合があるため、環状共役の程度が低いことが欠点として挙げられる。このため、取り上げられている環状パネル型有機分子は、カーボンナノチューブやグラフェンとの距離が遠い。従来を超えて、パネルを多重の炭素-炭素結合により連結するような新規性の高い環状共役分子を試みる、といったことが基礎研究では大事である。

一方、これらの環状パネル型有機分子を研究することで、多くの重要な発見がなされ、プロジェクト全体の成果に大きな貢献をした。具体的には、まずは周期孔ナノチューブ pNT の合成に世界で初めて成功した。これは研究期間の後半の極めて高い成果といえる。実際、カーボンナノチューブは数十年に渡りその優れた特性が注目されているものの、その構造を合成時に制御できないことから、電子デバイスなどへの応用がなかなか進んでいない。今回、純粋な有機合成反応で合成された周期孔ナノチューブは、C70 を 3 個も包摂することができる。周期孔ナノカーボン分子は構造的に合成が非常に困難と予想されるが、効率の良い合成法の開発に成功し、単離および構造決定にも至っている。メッシュ状の構造をもちかつ長さが明確に規定されたカーボンナノチューブ状分子の創成は、合成を得意とするグループ A の持ち味を生かした最大の成果であり、今後の展開が楽しみである。更に、大きさのフィットした環状パネル分子（クリセン環状 4 量体）がフラーレンと非常に大きな会合定数で錯体を生成することを明らかにしたことや、錯体内においてフラーレンが高速で回転していることを実証した成果も、素晴らしい。この回転運動が慣性回転になっていることを明らかにした。よく似た系であるが、同じ環状パネル分子型有機分子が環状分子であるコランニユレンを CH- π 相互作用で包摂したホスト-ゲストでは、単軸回転型分子ベアリングが実現されているが、筒状構造ならではの特徴があらわれており、これも素晴らしい成果である。CH- π 相互作用は結晶構造を支配する要因となる普遍的な相互作用であるが、分子の配向が完全に固定されるのではなく、回転運動の自由度も残せる程度の相互作用であることが明確になり、CH- π 相互作用の新たな使い方を示唆する結果となった。更に、C₆₀ の慣性運動については、この独特の分子の動きを、何らかのアプリケーションにつなげる検討を早急に始めてほしい。将来的には分子マシンのようなものにも結び付く可能性があり、是非実証してほしい。また、異性化によるラセミ化のない光学活性な環状パネル型分子からの一桁高い円偏光発光を発見し、この原因が大きな磁気遷移双極子モーメントのためであることを明らかにした。大環状構造の縮退した電子構造に由来する円偏光発光の異方性因子 g 値が半世紀ぶりに更新された。これは、環状構造ならではの長足をうまく引き出した結果で

あり、高く評価できる。この発見に基づき、さらに大きな異方性を持つ円偏光発光分子のデザインや実現が大いに期待できる。

(2)については、原子欠損グラフェンモデル分子の集積構造を制御することにより、黒鉛の2倍の容量を持つ全固体リチウム電池の負極電極材料の開発に成功した。ただ、競争の激しい分野でもあり、製品化へ向けた展開については参画企業とのコミュニケーションを十分に図ることを期待したい。

研究成果としては、分子構造、分子運動、分子物性の解明が精力的に進められ質の高い論文として発表しており、評価できる。また、特許出願に関しては大学、関連企業知財部と議論を深め、広範な関連物質を網羅した内容での出願であり戦略的に進められている。

2-2. 強相関機能グループ（グループ B）

本研究グループでは、当初国内の他の研究グループが発表した「多環芳香族化合物の金属ドーピングが超伝導を示す」という Nature の論文にヒントを得て、ナノカーボン分子にドーピングをおこなうことによる超伝導相の発現など、新たな物性の発見を目指した。「縮退 π 集積」の真の意義は、このグループと集積構造体グループ（グループ A）との緊密な連携のもとで明らかにされると期待されていた。結果的に電子注入された芳香族炭化水素の熱安定性に疑問があることがわかり、アルカリ金属ドーピングから、FETによる電荷注入へと大幅な方向転換を余儀なくされた。この Nature の論文を含め、理論的にも可能性が低くなったため、途中で研究グループの再編と共に計画を変更した。縮退した電子構造をもつ大環状化合物に電子注入した場合にどのような物性が発現するか非常に興味を持たれるが、縮退した電子状態に基づく新物性が明確かつ十分に提示されたと言い難く残念である。しかしながら、この変更に関しては理論グループによるドーピングされた環状パネル分子が超伝導を示すとの予測に基づいたものであり、「縮退 π 」分子にこだわる姿勢は評価できる。また、このような困難な状況にあっても特異な磁気状態であるスピン液体を見いだしたことは評価できる。それが集積構造体グループ（グループ A）で合成されたオリジナルなナノカーボン分子であったなら、より素晴らしいものとなったであろう。

目標に沿った成果と少し方向性は異なると思われるが、環状パネル分子が全固体リチウム電池の高容量負極材料として使える可能性を示した点は、科学的にも社会的にも重要な結果であり、高く評価できる。質量当たりの容量として 624 mAh/g という値を得た点は大きく評価でき、分子内部に空間を有する環状分子ならではの特性から高容量を得るために分子を意図的に設計した点も素晴らしい。海外研究者との共同研究により、リチウムが内包された際の構造を実験的に確かめることも計画し、レベルの高い研究がなされた。また、結晶構造により、そのパフォーマンスが大きく異なることも示し、小分子有機物を利用したバッテリーへの道を開きつつあり興味深い。ある意味で「多環芳香族化合物の金属ドーピング」と見なすこともでき、研究総括の着眼点の良さを示すものと思われる。今後実用化のためには、耐久性や高速充電性をしっかり評価することが必要になる。企業との共同研究を通じて実用化に向けての取り組みがなされていることは高く評価できる。今後も企業と協力しながら進めてほしい。

大環状 π 集積分子の全固体リチウム電池への応用にはこのグループの貢献を見ることができ、大環状化合物への電子注入による強相関物性の発現は道半ばと言える。ただ、負極材料への応用の観点では、集積構造体グループが合成に成功した周期孔ナノチューブも大変魅力的に思える。その負極材料への適用可能性について、今後の検討に期待したい。研究総括の強いリーダーシップのもと、他のグループとの有機的な連携がなされ、単独のグループではなし得ない研究成果の創出につながっている。

2-3. デバイスグループ（グループ C）

本研究グループの目標は「大環状芳香族分子から新しい材料を開発すること」であり、特に有機 EL とスピントロニクスデバイス応用を目指した。

有機 EL 関連では、これまで何層もの薄膜を堆積することによって発光収率の向上が図られてきた。いろいろな試行錯誤の末に、正孔輸送層、電子輸送層などが不要な単層 OLED デバイスをシクロメタフェニレンを使って構築できたことは、素晴らしい成果である。今の OLED が抱える発光効率の悪さという課題に対して、ホスト分子で改善を試みるのは常套手段ではあるが、新規ホスト分子として環状芳香族分子を選択するという独自のアプローチは、OLED ホスト材料の新たな設計指針へとつながるか

もしれない。実際に単層で高効率な OLED デバイスの開発に成功していることから、その可能性は十分にあると思われる。シクロメタフェニレンのキャリアの励起エネルギーは十分に高いため、ほとんどすべての発光材料を増感できる可能性が高く、極めて有望である。このような ERATO で開発した分子材料を既存のデバイスに導入することで、既存材料の代替に向けた取り組みが JST の A-STEP 課題「正孔遅延効果を利用した Simple OLED の開発」で進行中である。本プロジェクトにおいて、集積構造体グループ（グループ A）で見いだされた新たな基礎物性に立脚したデバイス化への試みがなされ、なお一層充実したものとなっている。

本デバイスはこのような実用化をにらんだ開発フェーズに進んでいくことが期待されるが、企業の役割がこれまで以上に重要となるとと思われる。企業との共同研究により社会実装できる可能性もあるので、今後の検討に期待したい。

スピントロニクス関係では、大環状分子の磁気電界発光効果の観測に成功するとともに、明瞭なスピン注入の観測に成功した。一方で、OLED の磁気電界発光効果のメカニズムなど、詳細についてまだ当該研究分野の研究者の中でも議論になっているなど、不明な点も多い。OLED の磁気電界発光効果は、磁場変化で色が変わる可能性があることから、基礎および応用の両面において、重要な課題となりうる。またスピンバルブとしての特性に関しても、無機材料を使ったものと比較して良い結果とは言えない。今後研究を継続していくにあたっては、大環状芳香族分子ならではの良さを主張できないと難しいと思われる。機構を明らかにしたうえで、効果の増大を検討すべきである。

2-4. 理論交差グループ（グループ X）

本研究グループの目標は、「巨大周期構造や固体の電子状態を理論的解析により理解すること」であり、他のグループとの橋渡し役となり、状態密度を多く稼げる縮退電子系の特徴を、電子物性の観点からどのように引き出すかの指針を与えることが期待されていた。

強相関系材料の理論化学グループを配置したのは適切であった。本グループからは、金属ドーピングした環状パネル分子固体塩が超伝導を示す可能性が示されており、興味深い内容である。

実際に、 A_3C_{60} の超伝導相の理論的再現や、Cs ドープフェナントレンにおけるスピン液体挙動の起源がスピンのフラストレーションであることを解明するなど、その目標は達成された。また、分子の単軸回転に関係する $CH\cdots\pi$ 相互作用「水素結合」であることの実証、周期孔ナノチューブの電子状態の解明でも貢献した。実験グループとの共著も多く、本グループが ERATO プロジェクトにとって、なくてはならない存在となっていた。予算規模からしても、十分な成果であり、若手人材のプロモーションも非常に活発であり、その点も高く評価できる。

芳香族化合物への電子注入の結果生じる強相関機能の理解と物性理論の構築についても当初に想定された成果を挙げている。また、集積構造体グループ（グループ A）から生み出されたメッシュ構造をもつカーボンナノチューブ状分子の半導体特性の予想についても大きな役割を果たしたと評価できる。望むらくは、グループ X が主導するような研究展開、例えばグループ X 独自の研究が端緒となって、他の実験グループへの提案につながった例や、あるいは集積構造体グループ（グループ A）、強相関機能グループ（グループ B）が扱っている物性以外にも、グループ X が有用な物性を理論的に予測し、実験が試行された例があると、より充実したと思われる。

以上に基づき研究成果を俯瞰すると、構造の明確なナノカーボンを有機合成して、それらの物性や機能開拓を行い、諸物性の構造相関を明らかにするという本プロジェクトの目的は適切であり、結果として、多くの重要な物性や機能が発見された。本プロジェクトではおそらく研究対象を環状パネル型有機分子とも呼ぶべき分子群に限定したものであると思われるが、5年間という限られた研究期間の制約の中で、対象を明確にすることで研究を集中的に加速させる意図によるものと推察される。これは、ある意味で正しい選択であり、集中化の結果、非常に優れた研究成果が異なる分野で達成された。代表的な成果としては、筒状分子内に包接されたフラレン分子のユニークな慣性回転挙動の解明、単軸回転型分子ベアリングの開拓、周期孔ナノチューブの合成などが挙げられる。その他、世界記録を大幅に更新した大きな円偏光発光特性を持つ分子の発見、単層で発光する OLED 用分子の発見とデバイスの作成や有機小分子のリチウムイオンバッテリーの負極材料としての利用なども挙げられる。一方で「合成するター

ゲット分子を上記に限定せずに、従来の枠を超えたワクワクするような分子の合成に挑戦していたら、どのようになっていただろうか」との思いもある。研究総括や集積構造体グループ（グループ A）には、新しい分子を合成する能力が十分に備わっており、プロジェクト全体の印象が大きく変わっていたかもしれないため、少々残念な印象もある。今回研究対象となった環状パネル型有機分子だけでも、多くの新物性や新機能を秘めていることが見事に実証されたわけであり、研究総括の優れたリーダーシップの下、上記の研究成果が生み出されたと言える。

分子ベアリングの慣性回転、大環状構造の発光の巨大な異方性、穴あきカーボンナノチューブ状分子の半導体特性など興味深い発見を端緒として、今後は、本プロジェクト発の独自の基礎学術的に重要な物性・機能性に基づく真に革新的なブレークスルーを期待する。

デバイスへの応用研究については、集積構造体グループ（グループ A）とデバイスグループ（グループ C）の間にはとりわけ密接な連携が図られており、OLED や二次電池への展開が比較的進んでいる印象を受ける。インクジェットプリンタを用いた多色発光デバイスや全固体リチウム電池など今後の発展が期待される。しかしながら、これらの分野は多くの研究者が取り組んでいるため、差別化を図るには環状化合物であることの特徴づけが重要である。そのためには、構造－物性相関を詳細に明らかにする必要がある。

一方、縮退軌道と深いかかわりのある強相関係の研究については、チームの再編が研究の遅れに影響していると考えられ、やや不運な点もあるが、カルコゲンなどの重原子を含まない炭素系分子の超伝導は、C₆₀ 以外ではいまだ達成されておらず、仮に環状化合物で発現するとなれば、そのインパクトは非常に大きい。今後環状芳香族固体の物性を理解し、活かす道筋が得られることに期待したい。

論文業績については、数多くの論文が既に出されており、しかもインパクトファクターの高い雑誌に数多く掲載されていることから、良好であると判断できる。また発表業績も十分である。

知的財産については、本プロジェクトは、いわゆるシーズ型研究と言えるが、得られた研究成果を事業化する際に、知的財産権は重要である。周辺特許なども含め引き続き特許取得に努めていただきたい。

〔研究の達成状況および得られた研究成果〕 a+（十分に高い水準にある）

3. 研究成果の科学技術、社会・経済への貢献

3-1. 科学技術への貢献

本プロジェクトでは、環状パネル型有機分子に焦点を当て、これらの分子に秘められた物性や機能などの探索が行われた。これらの環状パネル型有機分子は、カーボンナノチューブやグラフェンなどのナノカーボン類似の分子ではあるが、環状共役の強さや分子サイズなどの点で、カーボンナノチューブやグラフェンからの距離は、かなり遠いと言わざるを得ない。しかしながら、バリエーションのある環状化合物が数多く創出されており、物質群の多様性の観点からは、先行あるいは競合研究と比較して、先導的な役割を果たしていると思われる。特に、環状構造から筒状構造への新展開は、合成化学的にも物質科学的にも科学技術への貢献度が大きい。また、合成された分子の構造的な新規性が十分に顕著であり、重要で興味深い発見がいくつも報告されている。環状構造に特有の現象も見つけられ始め新しい流れが生み出されつつある状況にあり、総体的に優れたプロジェクトとなった。これらの物性の発現は、研究題目にある「縮退」した電子系に由来する可能性が高く、この点でも、研究総括の着眼点は、素晴らしいと言える。今後、環状パネル型有機分子特有の縮退した電子系と諸物性との関連の解明を期待したい。環状パネル分子によるフラーレンの非常に大きな会合定数による包摂やフラーレンの慣性回転の解明や単軸回転型分子ベアリングの開発などを行ったが、これらの成果は非常に基礎的であり、且つ重要である。また、異性化によるラセミ化のない光学活性な環状パネル型分子からの大きな異方性因子を持つ円偏光発光特性を発見した成果も素晴らしい。更に、周期孔ナノチューブの世界初の合成も可能性溢れる成果であり、基礎科学に与えるインパクトは大きい。

とりわけ、大きな円偏光発光特性や、ホールや電子の両方に対して高い移動度を示す有機物など、これまでの枠を超えた物性を示している他、ピーポッド分子中の C₆₀ の回転運動や有機系スピントロニク

スの可能性の探求など本プロジェクトで作製された系でしか得られない科学的知識も多く、基礎科学に大きく貢献する成果と言える。また、合成と基礎物性の取得に限定されがちな分子化学を、ERATO の枠組みをうまく利用して具体的応用に結び付けており、新たな分子骨格を合成する手法の開発という点でも科学技術への貢献は大きい。今後は、様々な興味深い現象の理論的解明に期待したい。

集積構造体グループ（グループ A）とデバイスグループ（グループ C）の協力から得られた大環状 π 共役分子を用いたデバイス化手法も科学技術の進展に寄与するものであると評価される。

ただし、有機化学の強みは、これまでにない新しい有機化合物（新たな自然）を作り出すことのできる「合成力」にあると思われる。分子合成の手法としては信頼性の高い既存の方法を用いており、従来の枠を超えた分子群を創成していく点で、すこし物足りない感じが否めず、学術面での真に革新的なブレークスルーを求めたい。

3-2. 社会・経済への貢献

社会・経済に貢献するかどうかの議論は、今後の研究の進展を待って判断すべきであるが、社会・経済への大きな貢献をする可能性のある新材料を開発した点は高く評価できる。特に、シクロメタフェニレンが単層型 OLED において内部発光量子収率 100%で発光するという発見は、今後大きな社会的インパクトに繋がる可能性がある。また、環状パネル分子が全固体リチウム電池の負極材料として使える可能性を示した点は、社会的にインパクトが大きく、高く評価できる。

環状パネル分子の集積体を開発し、全固体リチウムイオン電池の負極材料への利用を試みており、これは、大きな受電容量を有しており、今の社会が抱えるエネルギー問題を解決する一助になる可能性がある。二次電池の市場規模は大きいと期待も高く、波及効果は大きい。ただ、圧倒的な特性を示している、というわけではないため、既存プロセスを入れ替えるだけのコストと生産性が得られない可能性もあり、社会的にインパクトを与えるかどうかは、今後の技術開発の進展による。より詳細な特性の解明や、ブレークスルーにつながる分子の創製などにより、応用展開に資する知見が得られることを期待したい。加えて、今後、本研究で示された可能性をもとに、実証化のための研究が企業等で展開されることを期待したい。

有機 EL デバイスにおける単層 OLED の発見は、企業の研究所単独ではなしえないと思われる成果であり、次世代デバイスの礎となる知見が得られつつある。格段に単純な構造をもつため製造プロセスの大幅な簡略化、ひいてはコスト削減につながると期待される。今回開発された分子がそのまま実用化されているかは不明であるが、有機 EL に必ずしも積層構造が必要ではないことを実証した意義は大きく、今後この方向での研究探索が加速され、安価な有機 EL デバイスの実用化につながると期待される。また、この単層構造の有機 EL が、インクジェットプリンタを用いた新たなデバイスに発展する可能性もある。ただし、良い性能が出ているものの、実際の実用化には課題が多く存在するはずであり、その検討にも期待したい。

〔科学技術への貢献〕〔社会・経済への貢献〕 a+（十分に貢献が期待できる）

4. その他特記すべき事項

4-1. 若手研究者支援

ERATO の特性を生かして、多くの若手研究者が参画し、ここでの研究成果を基に受賞やプロモーションにつながっており、ERATO を起点とした人材育成が実現されている。また、化学だけでなく、物性物理、理論物理、企業における応用研究の様々な側面から研究を討議できる環境が整えられ、多様な価値観、経験を積んだ若手研究者の育成の場となった点は評価に値する。特に集積構造体グループ（グループ A）や理論交差グループ（グループ X）において、アカデミックポジション獲得、並びに昇進などの活躍がされており、また、研究員の受賞も多く、育成に成功していると評価する。

4-2. アウトリーチ活動

国際的なアウトリーチ活動として、関連分野の国際会議「CURO- π 」を立ち上げ隔年で開催しているほか、出張授業などの高校生への啓発活動や、多くの見学者対応をおこなっており、高く評価できる。

5. 総合評価

プロジェクトの目標は、「縮退 π 電子系をもつ新分子構造およびそれらを空間配置した集積構造を設計することで、新しい機能をもつ有機材料の開発」である。電子材料として優れた性質を示すカーボンナノチューブやグラフェンなどとの関連から、構造の明確なナノカーボンへの期待が高まる中、環状パネル型有機分子に焦点を当てて取り組み、十分な成果を挙げた。実に多彩なパネル分子からなる環状分子の合成、多様な環状化合物を創出し、しかも斬新な筒状化合物の合成に成功したことで、有機合成化学の分野に大きな進展をもたらした。個々の分子を磁気化学やデバイス応用や理論的解明なども多角的に追及し、単層型の薄膜有機発光デバイスや二次電池の材料として有望であることなど秘められた高いポテンシャルを明らかにした。特に、環状パネル型有機分子と球状分子との相互作用（摩擦なし分子回転や単軸回転型分子ベアリング）の解明は分子化学や分子機械化学に新たな知見を与えるとともに、将来の分子マシンへの期待を抱かせるものとなった。また、メッシュ構造をもちかつ長さが明確に規定された周期孔ナノチューブの合成は、新規性が高く、本プロジェクトの強みを活かした有機化学・構造科学的に非常にインパクトの高い研究成果であり、国際的に高い評価を受けていることも特筆に値する。デバイス展開として、シンプルな環状炭化水素が単層型 OLED の発光色素として機能することを見つけたのも材料科学へも大きく貢献しており、素晴らしい成果である。一方で、物性を探るという研究は、まだ十分な成果につながってはいないが、分子群の独創性が豊かであることから今後の展開に期待が持てる。

発光デバイスやリチウム電池などにおける成果は、既知の延長線上にある研究ではあるものの、社会実装の可能性もある重要かつ意義深いものであることは間違いない。カーボンナノチューブやグラフェンなどのナノカーボンの目覚ましい発展を踏まえ、構造の明確な環状パネル型有機分子を着実に有機合成し、これらの分子のポテンシャルを引き出そうという目的は、明確であり、またタイムリーであった。有機分子の分子間相互作用のみならず、電子材料や有機発光材料への展開も素晴らしい。この目的に沿って、研究のチーム構成もよく練られていた。合成された一連の環状パネル型有機分子の機能をこれだけ広範に多彩に開発し、将来性あふれる成果となった。

特徴ある構造、物性を示す縮退 π 集積分子を新しく合成し、それを活用した新機能材料の創出へとつなげる戦略は、新たな研究分野の創出につながる。異分野の研究者が ERATO の枠組みを通じて集まり、多様な視点で議論を重ねながら、新分野の創出と若手の醸成が ERATO を通じて推進された点は大変評価できる。今後は、創製した分子の構造と、それに起因する電子構造、さらには、集積構造を制御することによる物性発現を利用した本 ERATO プロジェクトで創出した縮退 π 分子群ならではの「分子技術」を継続的に研究し、それらを利用した機能材料が世の中に当たり前に使われるようになることを期待する。

以上を総合すると、ERATO の目的に適い、十分に優れた研究成果が得られたと判断する。戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」の達成に資する十分な成果が得られたと評価する。

〔総合評価〕 A+（十分な成果が得られた）

以上