

ERATO 磯部縮退 π 集積プロジェクト事後評価（予備評価）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&マテリアル研究所／主管研究員）

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 物質科学国際研究センター／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う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、理論解析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って一つのチームが結成され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も積極的になされており、連携のとれた運営が行われていると認められる。

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（CPL）特性を持つ有機分子の発見、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が挙げられる。対象とした環状パネル型有機分子だけでも、これだけ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、このような興味深い発見を端緒として、縮退 π 集積系の特異性をさらに探求していくことが期待される。理論に基づく現象の詳細な理解が求められるとともに、理論グループ発の設計に基づいたさらに巨大な円偏光発光をもつ新物質創成に期待したい。

しかし、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と、それらの相関、因果関係について、現時点では十分には明らかになっていない。今後は、各グループの緊密な協力のもと、新規材料の創製と新規物性の発見や大環状構造の縮退した電子構造の特異性の探求とその理論的解明により、「縮退 π 集積」の意義を明らかにし、基礎科学として世界オンリーワンの成果を期待したい。

以上を総合すると、ERATO の目的に適い、優れた研究成果が得られていると判断する。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」の達成に資する成果が得られていると評価する。

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状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は次世代の材料をして注目されるが、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得てナノカーボンの新たな学問領域を提供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充分に起こりうるものと期待される。

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、デバイス開発に充分に力量ある研究者を配置することによって、分野融合的な構成が実現され、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る。ここから超伝導など新規物性が生みだされることが期待される。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ようとする試みは、多くのレベルの高い研究成果を得つつある。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、構造の明確なナノカーボン分子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理解できる。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であろう。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る。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る。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）が設けられている。プロジェクト全体で統一感のある研究成果が見込まれる体制となっている。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 の研究成果が挙げられている。

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ていると評価する。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の臨機応変に修正することは必要なことである。今後、各グループの連携を一層強めて積極的に新しい物性の発現を目指してほしい。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 の開発を目指している。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、はじめからターゲットを限定せずに、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い、既存材料と最も差別化できる物性を探し当てるといった取り組みが、強相関係および有機 EL 開発などと比べると、若干少ない印象がある。

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一つのチームが結成され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も積極的になされており、連携のとれた運営が行われていると認められる。また、国内企業との共同研究も積極的に展開されている。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る。プロジェクトのグループ構成は、多面的展開を行うにふさわしいものになっており、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る。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る。

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、海外からの研究員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るようである。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ている。また、プロジェクトの主要な研究者の異動が多くあつ

たが、それにも関わらず成果は順調に出ている。

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る。一方、強相関機能グループ（グループ B）からの目に見える成果は、当該グループリーダーのこれまでの研究の延長上にあるもので、研究総括の強い思いが明確に反映されたものとはなっていないように見える。今後は、集積構造体グループ（グループ A）と強相関機能グループ（グループ B）との緊密な連携のもと、縮退した電子状態に基づく新物性の発見を通して、「縮退 π 集積」の意義が明確になることに期待したい。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おり、実際のその役割を果たしていると言える。今後は、見いだされた現象の理解にとどまらない、起こりうる新現象の提案や新たな分子構造の設計など今以上のより積極的な関与を期待したい。

一方、前述のように、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おこなうグループが存在しても良かったと思われる。

また、分子合成と他グループへの材料提供部分を集積構造体グループ（グループ A）が担っている状況ではあるが、特筆すべき成果として挙げられた内容の多くはデバイスへの応用の部分であり、集積構造体グループ（グループ A）の分子化学における特筆すべき成果を残りの研究期間でもっと期待したい。

知的財産権の取得に関しては、ヘッドクォーター主導で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を見据えて取得に取り組んでいる。しかし、物質特許を押さえている点は評価できるが、研究費の規模から考えると、特許出願件数が国内 7 件、国外 2 件というのは少ないように思われる。

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)それら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ている。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ている。合成手法としての新規性にはやや欠けるものの、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している。本プロジェクトを支える屋台骨となっており、研究予算を充当し集中的に研究を推進しているものと思われる。

(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に成功しており、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ていることは評価できる。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を合成されており、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り、オリジナリティは高くない。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。また、構造有機化学の観点から、これらの環状パネル型有機分子の新規性は、それほど高くないと言わざるを得ない。従来を越えて、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。プロジェクト全体がよりレベルの高いステージに登る可能性があるため、今後を期待したい。

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つつあり、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、大きさのフィットした環状パネル分子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は、素晴らしい。更に、この回転運動が慣性回転になっていることの証拠を掴みつつあり、独自性の高い研究がなされたと判断できる。 C_{60} 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、まだ基礎現象の発見の段階ではあるが、大変興味深く、是非実証いただきたい。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。円偏光発光の異方性因子 g 値が半世紀ぶりに更新されるなど、環状構造ならではの性質が強く反映された結果が得られており、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ている。ただ、製品化にはコスト等の他の要因も関わってくる。リチウムイオン電池の研究開発には多くの研究者が取り組む競争相手が多い分野であるため、今後、企業とのコミュニケーションを十分に図り、製品化へ向けた展開が進むことを期待したい。

研究成果としては、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を行っている。今後は、基礎科学としても他に類のない概念創出を期待したい。

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体が超電導を示す」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。結果的に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方向転換をおこなった。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、このグループから本プロジェクトとしての際立った成果が得られていないのは残念である。この決定に関しては理論グループによるドーピングされた[6]CNAP 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。

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[6]CNAP 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ており、レベルの高い研究がなされている。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パ体」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ため、企業と協力しながら進めていただきたい。

研究総括の強いリーダーシップのもと、集積構造体グループ（グループ A）との緊密に連携し、縮退した電子状態に基づく新物性の発見を通して、「縮退 π 集積」の意義が明確になることに期待したい。

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光発光収率を達成してきた OLED が、いろいろな試行錯誤の末に、5Me-[5]CMP をキャリアに使うことで正孔輸送層、電子輸送層などが不要な単層で効率よく OLED デバイスを構築できることを発見したことは、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。5Me-[5]CMP 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。

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思われる。企業と共同で研究開発することで製品化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、磁場変化で色が変化す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る。

強相関係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電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 phenanthrene 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、その目標は順調に達成されている。さらに、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る。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。

今後は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当初に想定された成果を集積構造体グループから生み出される新規大環状分子およびその集積体にもどのように展開していくかが課題である。各グループで見出しつつある不思議な現象の理論的解明を積極的に進め、将来的なブレイクスルーに結び付けられるよう「縮退 π 集積」という本プロジェクトにおける主体的な役割を求めたい。望むらくは、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）で扱っている物性以外にも、有用な物性を理論的に予測し、実験が試行されるような仕組みがあると、なお一層良い。

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系を有機合成して、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つつある。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でも呼ぶべき分子群に限定したものであるが、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つつある。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が挙げられる。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。

このような興味深い発見を端緒として、今後縮退 π 集積系の特異性をさらに探求していくことが期待される。理論に基づく現象の詳細な理解が求められるとともに、理論交差グループ（グループ X）発の設計に基づいたさらに巨大な円偏光発光をもつ新物質創成に期待したい。理論交差グループ（グループ X）には現象の解釈だけでなく、他研究グループへの提言など双方向連携の一層の緊密化を期待する。

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、知的財産権は必須である。今後の展開を考えた上でプロジェクトを進めて頂きたい。

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。重要で興味深い発見がいくつも報告されており、環状構造に特有の現象も見つかり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りつつある。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。

とりわけ、大きな円偏光発光（CPL）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、今後は、様々な興味深い現象の理論的解明により積極的に取り組んでほしい。

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つべきであるが、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。

環状化合物である[6]CNAP 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ため産業界からの期待も高く、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。今後、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、数値目標を明確にしての企業とのより一層の連携や、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、その検討もそろそろ始めるべきである。

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。実施されている研究自体は基礎的なものを多く含んでおり、環状化合物を縮退軌道と関連付けて特徴的な電子物性を探るといった独創性もある。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）を中心として、数々の環状芳香族分子の合成やピーポッド分子中の慣性回転の観測、単層 OLED の成功、発光における巨大異方性など、新たな現象や機能を探り、新しく合成した分子の特性を生かした研究成果があがっている点で、十分に評価できる。社会・経済の変革をもたらす科学技術イノベーションの創出につながるかどうかは、その芽は見つかっているように感じるが、今後の研究展開に依るところが大きい。ただ、発光デバイスやリチウム電池などにおける成果は、既知の機能性の延長線上にある。このような研究は重要かつ意義深いものであるのは間違いないが、もう少し基礎に軸足を置き、将来の本質的なブレークスルーを目指すような進め方のほうが良いかもしれない。応用研究を成果の中心にするのであれば、数値目標も含めた明確なアウトプットと戦略的な知財化が必要であり、あと1年でどこを強くするかは考える余地があるように感じる。

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と、それらの相関、因果関係について、現時点では十分には明らかになっておらず、「分子技術」にまで達しているとは言い難い。残されたプロジェクト期間を考えると、環状構造と関連付けて諸現象の理解に努めることを並行して行う時期に来ていると思われ、各グループの緊密な協力のもと、新規材料の創製と新規物性の発見や大環状構造の縮退した電子構造の特異性の探求とその理論的解明により、「縮退 π 集積」の意義を明らかにし、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」を創出して、基礎科学として世界オンリーワンの成果を期待したい。

以上を総合すると、ERATO の目的に適い、優れた研究成果が得られていると判断する。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」の達成に資する成果が得られていると評価する。

以上