

## ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクト中間評価報告書

【研究総括】 中村 栄一 (東京大学大学院理学系研究科／教授)

【評価委員】 阿知波 洋次 (首都大学東京大学院理工学研究科／教授)  
川合 眞紀 (東京大学大学院新領域創成科学研究科／教授 兼理化学研究所中央研究所／主任研究員)  
高橋 保 (委員長：北海道大学触媒化学研究センター／教授)  
永瀬 茂 (自然科学研究機構 分子科学研究所／教授)  
侯 召民 (理化学研究所中央研究所／主任研究員)

### 評価の概要

フラーレンやナノチューブなどの炭素系クラスターは、電子機器や医療技術をはじめとした各種産業技術での応用展開が見込まれている物質である。これら物質群に内在する性質を引き出すと同時に、新たな性質を付与するというコンセプトは、新しい科学技術基盤を構築するなど、大変重要な要素が含まれている。

ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクトでは、研究総括である中村栄一博士の、それまでの精密合成化学における研究知見を出発点として、デバイス工学や顕微鏡科学などの分野も採り入れた、新しい研究領域の開拓を目指すものである。新形式の炭素クラスター群の合成や、炭素クラスター分子系電子デバイスの創製、またこれらの基盤技術として個々の分子の立体構造の時間変化を観察する電子顕微鏡の開発などを、重点的研究項目として定めている。

我々評価委員は、2007年11月13日に中村総括およびプロジェクトの構成員に対してヒヤリングを行ったが、研究領域（プロジェクト）の設定の仕方、プロジェクト内の研究グループの運営やそこから得られている研究成果の質など、どれをとっても申し分のない状況であると評価できる。まだプロジェクトが発足して3年が経過した中間評価の段階であるが、すでに、発足当初に期待した以上の研究成果を挙げており、世界的に見ても卓越した研究水準にあるといえる。

プロジェクトの研究期間の前半における最大のハイライトは、やはり「透過型電子顕微鏡 (TEM) を用いた単一分子の動的振る舞いの観察」であろう。これまでの化学は、分子の動きをマクロなものとして捉え、解析を行い、またそれを記述してきた。今回、単一有機分子の立体構造の変化などを直接観察できたことは、すでに世界的にも注目を浴び、今後競争が始まるとされる大きな成果である。これらをはじめ、プロジェクトから生み出された卓越した研究成果からは、その一方で、「そもそも何を見ているのか」など、いくつかの基本的疑問が生じており、残る研究期間でそれらを解明することを期待したい。またグループ間の連携をより緊密化するなど、今後の研究方針に工夫を施すことで、さらなる高い水準を目指し、研究を進めてもらいたい。

## 1. 研究プロジェクトの設定および運営と今後の見込

### 1-1. プロジェクトの全体構想

本 ERATO プロジェクトの研究総括である中村栄一博士は、プロジェクト発足（2004年10月）以前の、たとえば科学研究費補助金（科研費）・特定領域研究「有機化学新現象」や科研費・特別推進研究「炭素クラスター複合体の精密有機合成化学」において、フラーレンの5員環部分をシクロペンタジエニル基に変換して鉄金属原子と結合させた「フラーレン・フェロセン複合体」や、さらに置換基を導入した「シャトルロック液晶分子」の合成などを手がけてきた。これらの成果を基礎として中村総括は、炭素クラスターを基に作り出されるナノサイズの多元素複合化合物群およびそこに内在するであろう性質および機能に着目し、以下3つの大きな研究目標

- (1) 有機及び無機化合物と複合化した新形式の炭素クラスター化合物や炭素豊富有機および無機化合物群の合成
- (2) これらの化合物群の特徴を活用して新しい光および電気物性を持つシステム、生理活性を示すシステムの構築
- (3) 炭素クラスターを含む複雑なナノ構造体の構造決定のための新しい手法の開拓

を本 ERATO プロジェクトにおいて設定した。高活性・高機能を有する炭素クラスター系新物質を「創る」「動かす」「見る」という、こうした一連の研究をひとつの研究プロジェクトのもとで推進することで、将来の分子系電子材料の研究開発などに向けた基盤技術の創出の役割を担い、戦略目標「環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製」に資することにも根ざした、新しい研究領域の開拓に力を注いでいる。

### 1-2. プロジェクトの枠組みや研究体制、および研究活動の状況

上記設定目標を実現するために、中村研究総括は

- 1) 機能素子グループ：新形式の炭素クラスター群を合成する（研究実施場所：東京大学大学院理学系研究科内に ERATO の研究スペースを確保）
- 2) デバイス創製グループ：合成した炭素クラスター群を利用してデバイスを作成する（研究実施場所：同上）
- 3) ナノ構造解析グループ：分子構造やナノ構造およびその動態を、電子顕微鏡を用いて観察する（研究実施場所：産業技術総合研究所つくば事業所内に ERATO の研究スペースを確保）

という研究グループおよび研究課題を設定した。これらの設定は極めて調和が取れており、また中村総括のこれまでの専門分野であった精密合成化学の単なる延長線上や大規模化に留まることなく、顕微鏡科学やデバイス工学を融合した研究基盤の創出を行い、またデバイス創製グループは企業からの出向研究者で構成されるなど、ERATO の枠組みを活かした世界的研究水準の構築に挑戦する取り組み姿勢は、高く評価できる。さらに研究グループのリーダーとして若手研究者を登用するなど、人材育成の姿勢もうかがわれる。

また我々評価委員は、中間評価ヒヤリングが行われた際に（2007年11月13日）東京大学内の実験施設を見学したが、最新の機能をもったドラフトや、デバイス作成

のためのグローブボックスと蒸着装置が一体化した設備および各種物性測定装置が導入され、目的にあった実験環境の整備がなされていた。そこから現在までに得られている研究成果は、次節以降で詳細に述べるように、どのグループも顕著な業績をあげていると評価できる。特にナノ構造解析グループは、東京から物理的に離れたつくばの産総研で研究を実施しているが、東大サイトとの連携はうまくいっていることは、何よりも研究成果が証明している。また機能素子グループとデバイス創製グループは前者が新規機能性材料を合成し、後者がそれを用いた機能性素子を作製、評価する役割を担っているが、今後さらにこれらのグループが深く連携を進めていけば、さらなる研究展開が期待できよう。

上記の点から、本 ERATO プロジェクトの設定および運営（および今後の見込）などに対して、我々評価委員としての所見を改めて整理する。中村総括の精密合成化学での研究知見をプロジェクト発足時の出発点とし、ERATO の事業趣旨でもある「異分野融合・産学連携」を積極的に採り入れた研究体制は、「炭素クラスター系分子材料の新たな機能を引き出す」という中村総括らプロジェクト構成員の強い信念の表れであり、またそのことは次節で述べる研究成果の状況からとらえてみても、極めて理に適ったかたちで進められている。ナノ構造解析グループの研究成果をはじめとして、「新たな研究の流れ」が生み出される可能性が随所に見られることは、本 ERATO プロジェクトが極めて高い研究水準にあることを示しており、事業趣旨にも適っていることである。一方そうであるがゆえに、いくつもの解明すべき基本的課題が生まれてきたこともまた事実であり、さらなる高みを目指して、残る研究期間に取り組むことを期待したい。

[研究プロジェクトの設定および運営と今後の見込]

a+ （特に優れて的確かつ効果的である）

[研究活動の状況]

a+ （特筆して望ましい研究展開を示しており、今後にもさらに期待できる）

## 2. 研究成果の現状と今後の見込

### 2-1. 機能素子グループ

機能素子グループではまず、フラーレン誘導体の新反応の開発を行った。フラーレン誘導体である PCBM (Phenyl C61-butylic acid methyl ester) は、有機太陽電池の n 型半導体材料としてさかんに研究されているが、本グループでは、より優れた性能を有するフラーレン材料を開発することをひとつの目標としている。

このためには、自由自在にフラーレンを変換させる技術が必要となる。まず検討を加えたのは、フラーレンへの置換基の導入である。グリニャール試薬を用いてフラーレンにベルト状に置換基を導入して、生成物の発光機能を調べている。また環状に導入した置換基の中央部分が 5 員環のシクロペンタジエニル型配位子となることから、フラーレン遷移金属錯体を数多く合成し、金属錯体液晶の創製に成功している。

さてこのグループの大きな目標は、フラーレン誘導体を実際のデバイスに組み込んで応用へ展開するための化合物合成である。新規光電変換材料として優れた機能を持つ化合物を見出すためには、デバイス創製グループとの密な連携が望まれる。デバ

イスとしてさらに多くのフラーレン誘導体の利用可能性を検討するためには、新しい置換基導入方法の開発が重要であるが、単にやみくもに方法の開発を行うのではなく、物質を取り巻くさまざまなパラメータやデバイス設計などを、なお一層理解することが必要であり、今後の研究の進め方に期待したい。

全体としてこの機能素子グループでは、高いレベルの学術雑誌に数多くの論文を発表するとともに、特許も PCT 出願が 5 件なされており、十分な内容の成果をあげている。

## 2-2. デバイス創製グループ

デバイス創製グループでは、長年企業で有機 EL (Electro-Luminescence) デバイスの研究開発に携わってきた研究者がグループリーダーを務めている。素子評価で最も重要なポイントは、素子作成の環境と測定装置の性能である。素子作製に用いる装置は、蒸着装置とグローブボックスが一体化されたもので、作製途中の素子を空気に触れさせること無く操作がおこなえるようになっている。TOF (Time of Flight) 移動度測定装置、昇華精製装置、FET (Field-Effective Transistor) 評価装置など、素子作製とその評価に必要な環境がきちんと整えられている。

本研究プロジェクトの機能素子グループで合成した新規フラーレン 2 重付加体を用いて有機太陽電池素子を作製している。その中の DFLN-3 (Di-adduct Fullerene) は既存のフラーレン PCBNB (Phenyl C61-butylic acid n-butyl ester) と比較して開放電圧は同程度であるものの、短絡電流がかなり改善されて、変換効率では DFLN-3 の方が従来の PCBNB より良い結果を与えている。今後さらなるフラーレン誘導体の開発により、有機太陽電池の変換効率が大きく改善されていくことが期待される。

なおグループの方針として、素子の作製においては、将来の実用化に向けた観点から、塗布などの湿式法を重要視しているが、実際どの程度の物性値が導き出されるのかを知る観点からは、蒸着やその他の方法を用いたチャレンジにも期待したいところである。また同グループのアクティビティから考えて、既存の素子パターンだけではなく、全く新しい素子構造の提案も検討してもらいたい。

さらにこのグループでは有機 EL 素子への応用を目的として新規ベンゾジフラン誘導体を探索している。Alq3 (tris(8-hydroxyquinoline)aluminum) を電子輸送層とし、新規ベンゾジフランを発光層として素子を組み立てて、Alq3 を発光させずに青色発光を得ている。このようにデバイス創製グループでは、有機太陽電池と有機 EL 素子に焦点をあて、研究体制の整備、素子の作製、素子の評価がうまく機能して、顕著な業績をあげつつある。特許 5 件、学会発表 5 件、論文を JACS に発表しているが、今後研究が加速されることが期待できる。

## 2-3. ナノ構造解析グループ

今回の研究成果でもっとも大きな成果を挙げたのが、ナノ構造解析グループである。これまで分子の動きをマクロな全体の動きとして捉えていたものが、高分解能透過型電子顕微鏡 (TEM) によって観察する手法を用いて、分子個々の動きを直接観察する展開を図ったことで高く評価される。単一有機分子の立体構造が時々刻々と変化する様子について、同グループでは、カーボンナノチューブの中に入れて有機分子アルキルカルボラン分子の立体配座変化や回転運動を連続映像として捉えることに世界で初めて成功し、Science に発表した。この業績は高く評価できる。

「分子個々の動きを直接観察する」というこの研究構想は、本 ERATO プロジェクトから提案された当初は、照射電子ビームが有機分子を分解して、映像としては得られないだろうという意見が往々にしてあったというが、カルボラン頭部に長さの違うアルキル鎖分子を結合させた分子を用いることで、その映像から確かにカルボランアルキル分子であることを確認するとともに、カルボラン頭部に対応するところから、ホウ素 K 殻の吸収スペクトルなどを観察するなど、目的物である分子を見ていることをきちんと証明している。その結果から、予想以上に遅い秒単位の分子の動きが撮影されたり、また低温（測定資料ステージを液体ヘリウムで冷却）においても分子が動くさまが観察されたりしている。この「分子個々の動きが直接観察できる」という、科学技術における極めて大きな進展は、その一方で、「なぜ分子の動きは遅いのか？」「実際にみているものが何であるのか？」「なぜうまく撮影することができたのか？」など、いくつかの基本的な疑問を投げかけており、今後それらを明らかにしていくことに大いに期待したい。

個々の分子を観察することそのものについては、走査トンネル顕微鏡（STM）を用いることで既に多くの研究グループが実現を果たしている。今回本 ERATO プロジェクトによって、電子顕微鏡を用いることで分子個々の動きを直接観察できるようになったことから、化学のひとつの目的である、「化学反応を見る」ことなど、今後一層の研究の進展に期待したい。

以上ここまで、ERATO 中村プロジェクトを構成する 3 つのグループの研究進捗の状況や研究成果の意義などについて述べてきた。「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」ともに現在までに顕著な業績をあげており、とりわけナノ構造解析グループではすでに、単一有機分子の立体構造変化や回転などを時間分解能で可視化するという、世界を大きく先導する画期的な成果をあげている。いまや、この成果に着目した研究グループが海外から現れつつあるとの中村総括からの報告であるが、今後は世界中で研究が活発化するとともに、化学分析の方法にも大きな変化が出てくるかも知れない。分子と分子の化学反応により新しい分子が誕生する様子などを直接捉えることができれば、これまでは化学反応を単に反応式などで書き表してきた状況から新たな 1 ページが開かれる可能性があるわけで、よってこのプロジェクトから生み出される、次なる成果に期待したい。以上の点から、本 ERATO プロジェクトにおける研究成果の状況は、現状において極めて秀逸なものであり、かつ今後にも十分期待できるものであるといえる。

[研究成果の現状と今後の見込]

a+ （成果として秀逸であり、今後にもさらに期待できる）

### 3. 総合所見

研究領域（プロジェクト）の設定の仕方、プロジェクト内の研究グループの運営やそこから得られている研究成果の質など、どれをとっても申し分のない状況である。今回はまだプロジェクトが発足して 3 年が経過した中間評価の段階であるが、すでに、発足当初に期待した以上の研究成果を挙げており、世界的に見ても卓越した研究水準にあることを指す「A+」という評価を授けることが妥当である。しかしながら、同プロジェクトの水準の高さゆえに、更なる新しいコンセプトの提案とチャレンジを継続

することを期待したい。

プロジェクトの研究期間の前半における最大のハイライトは、やはり「TEM を用いた単一分子の動的振る舞いの観察」であろう。これまでの化学は、分子の動きをマクロなものとして捉え、解析を行い、またそれを記述してきた。今回、単一有機分子の立体構造の変化などを直接観察できたことは、すでに世界的にも注目を浴び、今後競争が始まると思われる大きな成果である。この場合、日本が常に先頭を走っていくことができるかが大きなポイントとなるが、現在本 ERATO プロジェクトのみがその能力を持ち合わせている唯一の研究グループであり、よって、本プロジェクトに対する期待は、さらに大きなものとなるであろう。

最後に、このような日本発の研究成果やそのアドバンテージを、いかに伸ばし育てていくかという観点から、本 ERATO プロジェクトならびにそれを運営する科学技術振興機構に対して提言を述べたい。「個々の分子の動態を直接可視化する」ファシリティを現在保有し、そうした点から、本 ERATO プロジェクトひいては我が国が、同分野でのリーダーシップを発揮することが可能な状況にあるといえる。また今後、こうした状況を受けて、「化学反応のようすを映像で直接とらえる」という、化学を志す研究者なら誰もが一度は考える「夢」を実現可能にしようとする動きなどが、世界中からわき上がってくるのが予想できるが、現在本 ERATO プロジェクトこそが、それに答えるだけの技術と知識を持っている。またこれらの状況の中で「今後必要なことは何であるか」ということを考えた際、そのひとつは、現有より性能向上した電子顕微鏡の設置であると考えられる。我々評価委員が行う本中間評価が、「研究の進捗状況や研究成果を把握し、これを基に適切な資源配分、研究計画の見直しを行う等により、研究運営の改善及び機構の支援体制の改善に資すること」を目的として担っているならば、本 ERATO プロジェクトの運営母体である科学技術振興機構には、新規の電子顕微鏡設置などへ向けた、柔軟な研究支援取り組みの検討を強く要望したい。

ERATO で生み出された新しい科学技術のシーズが世界に驚きと感動を与え、もって我が国がその分野でリーダーシップを維持していくことができれば、それはひいては、ERATO というブランドの存在意義を対外的に強く指し示すものであると考えられる。ERATO という競争的研究資金を最大限効率的に運用するためにも、資金面で置かれている現状を色々と考慮・克服しつつ、できるだけ中村総括の希望に沿った支援体制が構築されることをお願いしたい。

〔総合評価〕 A+ （卓越した研究水準にある）