

研究領域「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」中間評価 (課題評価) 結果

1. 研究領域の概要

本研究領域は、原子・分子の配列や配向を合理的に制御した原子・分子組織構造を自在構築し、そのエネルギーランドスケープを制御するとともに、その組織構造に独自の化学的、物理的、あるいは生物科学的な機能を発揮させるための基盤技術の創出を目指すものです。

研究分野としては、原子・分子から成る有機分子、生命分子、高分子、金属イオン、金属錯体、無機化合物や金属クラスター、ナノカーボンをはじめとする分子・ナノ物質群を研究する分野を広く対象とします。例えば、(1) 同種・異種原子の配列と結合が自在に制御された機能性分子やナノマテリアル、単位(ユニット)分子の定序配列(シーケンス)構造が共有結合あるいは非共有結合的に合理的に制御されたオリゴマー、高分子などを対象に、それらの溶液中、表面・界面、あるいは固体状態における高次構造や組織化構造を、一次元、二次元、三次元配列や順序を制御しつつ、かつナノ～メゾ～マクロスコピックに至る任意の次元・スケールで制御する技術、(2) 得られた原子・分子組織系において、各々の構造単位や着目する元素・官能基、機能団の配列・配向を、有機化学的な精密さを持って自在制御するための技術を開発するとともに、(3) 得られた配列構造の電子状態やエネルギーランドスケープを原子・一分子レベルの精度で解析・計測する技術や理論・計算科学的手法の開発を進めます。さらに、(4) 原子・分子の定序配列・配向構造を自在制御することによって、はじめて生み出される電子的、磁氣的、光学的機能や化学的機能などの“分子システム機能”を、配列・配向・組織化・階層構造との相関において明らかにし、これらの科学的知見を体系化して、分子システム科学における基盤学理の創成をはかります。

2. 中間評価の概要

2-1. 評価の目的、方法、評価項目及び基準

戦略的創造研究推進事業・CRESTにおける中間評価の目的、方法、評価項目及び基準に沿って実施した。

2-2. 評価対象研究代表者及び研究課題

2021年度採択研究課題

- (1) 大木 靖弘(京都大学化学研究所 教授)
金属配列による電子伝達ネットワーク形成と触媒機能開拓
- (2) 川野 竜司(東京農工大学大学院工学研究院 教授)
自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築
- (3) 是津 信行(信州大学アクア・リジェネレーション機構 教授)
固液電気化学相界面の多階層構造制御
- (4) 寺西 利治(京都大学化学研究所 教授)
原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出
- (5) 松本 卓也(大阪大学大学院理学研究科 教授)
神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム

2-3. 中間評価会の実施時期

2024年11月24日(日曜日)

2－4．評価者

研究総括

君塚 信夫 九州大学大学院工学研究院 主幹教授

領域アドバイザー

浅見 正弘 日本知的財産協会 参与

幾原 雄一 東京大学大学院工学系研究科 教授

片山 佳樹 九州大学大学院工学研究院 教授

北川 宏 京都大学大学院理学研究科 教授

関根 千津 (同) RiseWave啓 代表社員

山田 容子 京都大学化学研究所 教授

吉澤 一成 京都大学福井謙一記念研究センター 研究員

外部評価者

該当なし

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 金属配列による電子伝達ネットワーク形成と触媒機能開拓

2. 研究代表者： 大木 靖弘（京都大学化学研究所 教授）

3. 中間評価結果

Mo-Fe-S クラスター系における窒素還元とシリルアミンの合成に続き、多電子還元による CO₂ から高選択的なメタンへの直接変換反応、Mo-Co-S クラスター系で有機ヒドラジン（推定）の合成反応、Fe₅₅ ナノクラスターの合成など、クラスター分子触媒系で極めて高レベルの研究が進展している。君島グループによる嫌気測定用クライオセルの開発も、空気に不安定なクラスターの XAFS 測定成果が期待される。一方、当初の提案は、クラスター分子触媒の生物無機化学的研究ではなく、0次元の分子触媒を2D金属配列化し、クラスター間の電子伝達ネットワーク形成に基づく電解駆動型の触媒機能を開拓する挑戦的課題であった。PMO担体を用いるアプローチについては、Fe₄S₄ クラスターの固定が検討されているが、正岡グループとの連携によるカルバゾールを含む配位子を用いた Mo₃S₄ クラスターの電解重合系にシフトしている。挑戦的研究においてはかかる方向転換はやむを得ず、高度な思考活動がなされたものと思われる。一方で、本領域の目標「自在配列」に鑑み、研究の位置づけや意義を再確認していただきたい。カルバゾールポリマー系はアモルファスと思われるが、二次元分子配列と主張されるのであれば、その根拠を示していただきたい。また、中島グループの研究がPMOの化学修飾にとどまらないよう、チーム内の十分な意思疎通と連携をとられ、CO₂ 電解還元のための自在配列制御手法を構築されることを期待する。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築

2. 研究代表者： 川野 竜司（東京農工大学大学院工学研究院 教授）

3. 中間評価結果

AlphaFold2(AF2) を利用した網羅的な構造予測と *in silico* スクリーニングにより導かれたペプチド配列について分子動力学シミュレーションによるポア形成能の事前評価を行い、SVG28 のアミノ酸配列を工夫して再構成型無細胞合成系による目標配列のペプチド合成法を確立している。親水性残基を膜表面部位に導入し、ナノポア形成能と無細胞合成可能な親水性を併せ持つペプチド配列を新たにデザインするなど、多くの進展がある。また脂質膜中のペプチド会合数を固体 NMR（スピンカウンティング）やゲル電気泳動などの実験手法により決定する方法論を開発した点は高く評価される。6 員環、7 員環、8 員環などの分子構造を効率的に作り分ける技術が未だ確立されていないが、DNA コンジュゲートによる会合数制御や、7 量体タンパク質の膜外領域を足場にした SVG28 キメラタンパク質を合成し、クライオ電顕により構造決定している。今後の機能開発や会合数制御の展開が期待される。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 固液電気化学相界面の多階層構造制御
2. 研究代表者： 是津 信行（信州大学アクア・リジェネレーション機構 教授）
3. 中間評価結果

複合アニオン化合物や多元素ハイエントロピー酸化物の網羅的探索に基づき、例えばスピネル型 LNMO の酸化物イオンの一部をフッ化物イオンに置換した(LNMOF)において、Mn に cis-rich な局所配位した化合物を合成し、より高い放電容量を確認するとともに、LiNi_{0.8}TM_{0.2}O₂ 化合物において Li の脱離に伴う C 軸の格子定数変化を抑制した組成の発見、ハイエントロピー酸化物における Li 中間組成相の安定化など、順調な進展がみられる。古山グループによる多元素系汎用ニューラルネットワークの検証やリオトロピック液晶のモデル化等についてもチーム内連携が綿密にとれており、良好である。一方、多元素化、複合化に基づく配置エントロピーの増大効果を狙うアプローチは、世界的な趨勢の中で代表者が CREST 採択以前から進めてきたテーマであり、様々な組成の物質が各論的に進められている印象を拭えない。当初、CREST 課題として掲げられた固液電気化学相界面の構造ならびにエネルギーランドスケープ制御と、相間イオン拡散のダイナミクス制御技術の開発については、NCM523i 電極の放電速度特性が ASPI-2-Li のコーティングにより向上するなど、興味ある知見が得られているが、今後は、これまで得られた知見を基盤に、準安定層界面の制御、イオンチャネルの配向性や連続性の自在制御に向けて、本 CREST 領域研究ならではの展開を期待する。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出

2. 研究代表者： 寺西 利治（京都大学化学研究所 教授）

3. 中間評価結果

独自のコンセプトに基づき、ナノ粒子のカチオン交換による新規（異種組成）粒子調製、ナノ粒子形状と凝集制御による超構造体の構築およびカチオン交換による組成制御、異種原子注入による新規規則合金の調製、等のナノ粒子群ライブラリを構築するための基盤技術を確立したことは高く評価される。六角形プレート状 $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ ナノ粒子の Mn^{2+} とのカチオン交換反応で、半月形状から元の六角形プレート形状をもつ MnS ナノ結晶が生成する特異な変形プロセスの発見や、元素間相溶性に基づく Zn 構造規則合金ナノ粒子の生成は、基礎化学的に重要な成果である。立津グループとの連携も、目に見える形で進められている。規則合金ナノ粒子の酸素還元触媒特性に対しては、順調に成果が出ているが、 L1-PtCo 系が企業との共同研究で展開されていることは喜ばしい。今後、さらなる触媒能の向上に期待する。旧金光グループ（現在寺西グループ）との連携について、ナノ粒子間コヒーレント結合による非線形光電流の発見など、興味深い成果が得られているが、新規光物性の開拓にもさらに注力を続けていただき、未踏ナノ物質群に潜在する物性・機能を明らかにしていただくことを期待する。

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム
2. 研究代表者： 松本 卓也（大阪大学大学院理学研究科 教授）
3. 中間評価結果

本研究は、新たな概念や材料系への展開などを目的として、特に共鳴トンネルの独自評価手法やイン
トリンシックリザーバーの提案と実証、カーボンナノチューブを用いた構造制御など、一定レベルの成
果は得られている。また、文字認識や話者認識における高い成功率を得た点も、評価される。

中間評価における指摘点としては、主な研究者により得られた知見が、国際的な学術論文として十分
に発信されていないことが挙げられる。田中 G と永野 G からは論文発表がなされているが、松本 G
からはこれまでチーム全体からの論文のうち 2 報、2023 年の論文が 1 報であり、論文発表状況に改
善が必要である。論文の出版を通して国際的な進歩性を問うていただきたい。さらに、後半で十分な
成果が得られるよう、課題間の整合性・連携についても確認、検討いただきたい。

また、材料科学に立脚したリザーバー計算の研究は世界的に進められており、近年、導電性ポリマー
やヘテロポリ酸などの分子素材をもちいたリザーバー計算、文字認識や音声認識などの関連した研究
についても報告例が見受けられる。物質系リザーバー計算の分野における世界のトップクラスの研究
に比して、何が未解決な重要課題で、何をどのように凌駕しようとしているのか、本 CREST で生み
出す自在配列技術を如何に独自の成果に結び付けるのかなど、研究目的や方法論上の優位性、新規性
を、各課題における性能指標も含めて明確にして進めていただきたい。