【戦略的創造研究推進事業チーム型研究(CREST)】

原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能

研究領域中間評価

研究総括:君塚 信夫

令和7年2月21日

目次

- 1 研究領域の概要:戦略目標
- 2 研究総括のねらい
- 3 研究課題の選考
- 4 領域アドバイザー
- 5 研究領域の運営/研究費の配賦
- 6 研究の進捗状況
- 7 総合所見と展望

1. 研究領域の概要:戦略目標

■戦略目標

自在配列と機能

■達成目標

原子や分子を思い通りの位置や順序で精密に配列させる技術を開発するとともに、配列に由来する材料機能との相関を解明することによって、機能材料設計の新しい指針を獲得することを目指す。

- ○一次元~三次元配列や順序を制御する技術の開発と体系化
- ○配列構造の解析・計測技術の開発
- ○ナノスケール配列により生み出される物性・機能を活かした材料の創製

https://www.mext.go.jp/b menu/houdou/2020/mext 00485.html

1. 研究領域の概要: CREST研究領域

■研究領域名

原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能

■目指すところ

原子・分子の配列・配向・組織化・階層構造、そのエネルギーランドスケープを 自在に制御することによって、はじめて生み出される電子的、磁気的、光学的機能 や化学的機能などを"原子・分子システム機能"と定義する。

原子・分子の自在配列構造に独自の化学的、物理的あるいは生物科学的な機能(原子・分子システム機能)を発揮させるための基盤技術の創出を目指す。

1. 同種・異種原子の配列と結合が自在に制御されたナノマテリアルを、ナノ〜メソースコピックに至る任意の次元・大クリスの開発

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 の開発

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

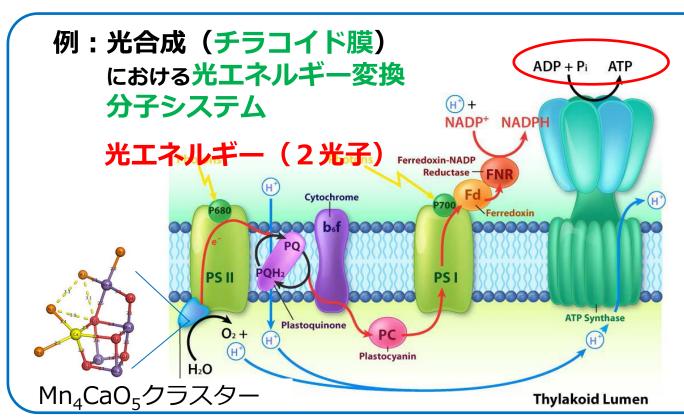
4. 原子・分子の定序配列・配向構造を自在制御することによって、はじめて生み出される電子的、磁気的、光学的機能や化学的機能などの分子システム機能を、配列・配向・組織化・階層構造との相関において明らかにし、これらの科学的知見を体系化。

2. 研究総括の狙い

■目指すところ

"原子・分子システム科学"における基盤学理の創成と学際融合領域の創出

原子・分子の自在配列制御に基づき有用な「仕事」をするための仕組みを設計・構築する学術



自在配列・自己組織化に基づく機能制御

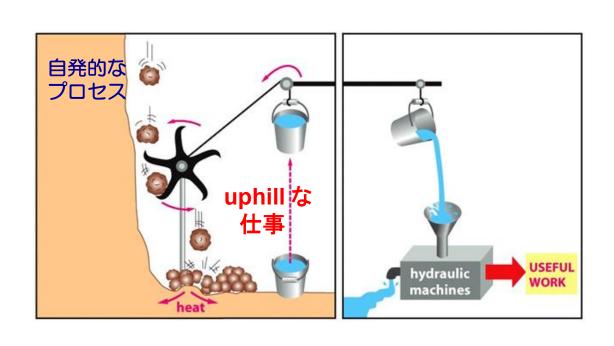
- タンパク質&分子配列制御に基づくエネルギーランドスケープ制御(光化学系IIー電子伝達系-光化学系I)
- 原子配列制御(Mn₄CaO₅クラスター)
- 水の酸化反応(チラコイド膜内腔)
- 光誘起電子移動(2フォトン逐次励起)
- ベクトル的な電子、プロトンの輸送
- NADP還元(酸化・還元反応の空間制御)
- 電子移動とプロトン輸送の共役
- ・ プロトン輸送とATP合成酵素の共役
- ・ ATP合成(uphill反応=**有用な仕事**)

2. 研究総括の狙い

■目指すところ

"原子・分子システム科学"における基盤学理の創成と学際融合領域の創出

原子・分子の自在配列制御に基づき有用な「仕事」をするための仕組みを設計・構築する学術



- 1. 原子・分子の自在配列と 有用な仕事を生み出す 物理・化学的現象を 空間的,時間的に共役組織化。
- 2. 原子・分子組織構造の精密制御と エネルギーランドスケープ制御 (指向性のある物性・機能)

3. 研究課題の選考

採択年度	応募件数	書類選考 採択件数	面接選考 採択件数	採択倍率
① 2020年度	113 (6)	10 (1)	6	5.3
② 2021年度	66 (2)	9 (1)	5	7.6
③ 2022年度	62 (2)	8 (0)	4	6.5
合計	241	27	15	6.2

() は女性研究代表者

研究担当者47名中 主たる共同研究者 (女性研究者) は4名_/

■選考方針(領域要件評価の観点)

戦略的創造研究の原点に立ち返り、人類が直面する重要な課題を克服するための「**究極の原子/分子システム機能は何か**」という「**学術的問い**」に寄与する成果が期待される挑戦的な提案を採択した。

- ○研究課題ならびに手法の学術的意義と創造性が明確な先駆的研究であること。
- ○ものづくりや測定技術の開発のみを目的とするものでなく、得られた**原子・分子の配列・配向構造、組織化(階層)構造**と それらが示す**エネルギーランドスケープ・物性・機能**との**相関を解明**しようとする計画が、具体的に読み取れる提案であること。
- ○一般性(インパクト)のある新技術が目標とされており、目標が達成された場合に**科学技術イノベーションや社会的価値の創造**に 寄与しうること。
- ○構想を実現するために、学際的な研究チームが適切に組まれており、十分な連携が見込まれること。

2020年度採択課題(6件)

研究代表者	所属·役職 (中間評価時)	研究課題名
未永 和知	大阪大学 教授	ナノ空隙を利用した原子・分子の配列制御と物性 測定法開発
佃 達哉	東京大学 教授	超原子を基盤とする階層性ナノ物質科学の創成
廣田 俊	奈良先端科学技術大学 院大学・教授	3Dドメインスワッピングを利用したタンパク質の自在配列と機能化
町田 友樹	東京大学 教授	原子層のファンデルワールス自在配列とツイスト 角度制御による物性の創発
丸山 茂夫	東京大学 教授	単層CNTに基づく一次元へテロナノ構造の制御合成と物性・機能設計
村橋 哲郎	東京科学大学 教授	金属原子配列構造の超精密制御に基づく分子ナノメタリクスの創成

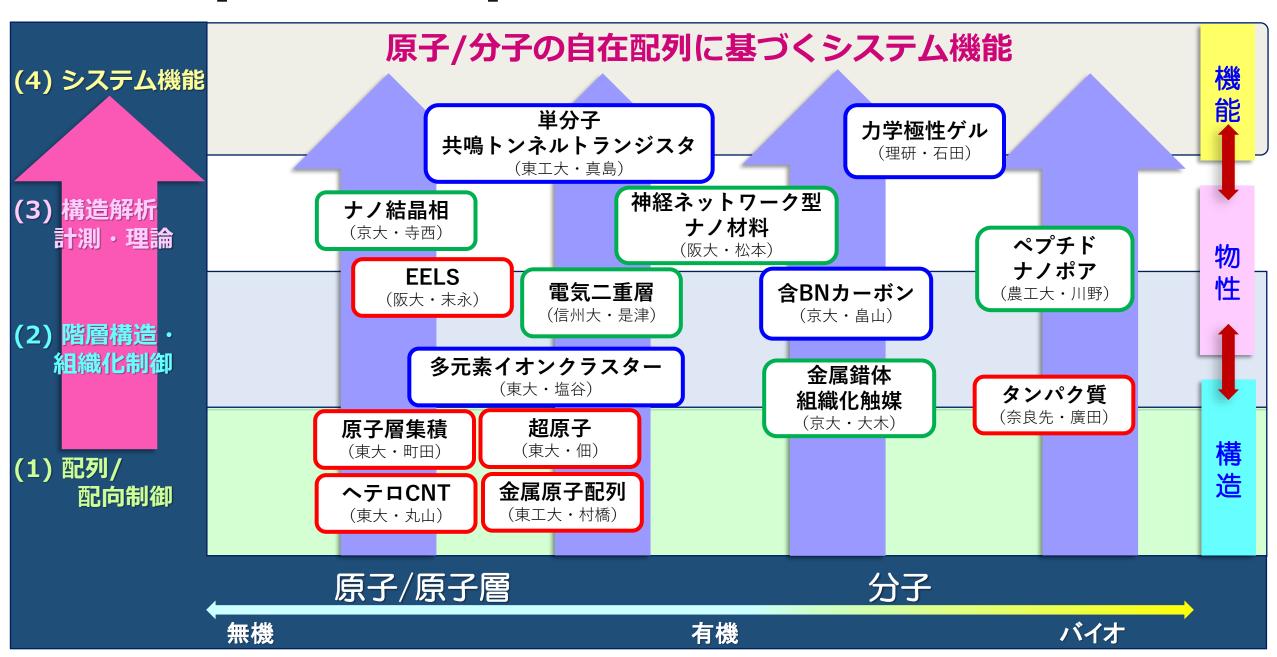
2021年度採択課題(5件)

研究代表者	所属·役職 (中間評価時)	研究課題名
大木 靖弘	京都大学 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
川野 竜司	東京農工大学 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
是津 信行	信州大学 教授	固液電気化学相界面の多階層構造制御
寺西 利治	京都大学 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
松本 卓也	大阪大学 教授	神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム

2022年度採択課題(4件)

研究代表者	Ť	所属·役職 (中間評価時)	研究課題名
石田 康博		理化学研究所 チームリーダー	エントロピー増大に逆らう革新材料「力学極性ゲル」による物質・エネルギー・生物の整流化
塩谷 光彦		東京理科大学 教授	多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配 列が拓く新物質科学
畠山 琢次		京都大学教授	含BNナノカーボン分子の自在合成と配向制御
真島 豊		東京科学大学教授	光配向単分子架橋共鳴トンネルトランジスタのシ ステム機能化

CREST[自在配列システム] 課題ポートフォリオ(2020・2021・2022)



4. 領域アドバイザー

■ 領域アドバイザー (7名:(元)産業界2名、女性2名)

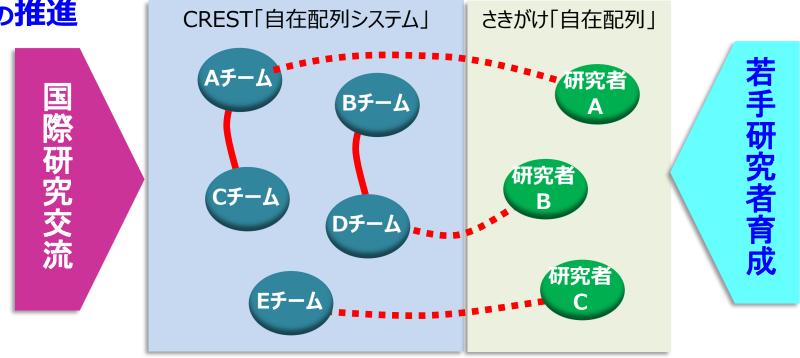
氏名	所属・職位	専門
浅見 正弘*	日本知的財産協会・参与	光機能材料化学、MOT
幾原 雄一	東京大学・教授	材料科学・電子顕微鏡学
片山 佳樹	九州大学・教授	バイオテクノロジー
北川 宏	京都大学・教授	無機化学・金属錯体化学
関根 千津**	合同会社RiseWave啓・代表社員	有機材料科学、MOT
山田 容子	京都大学・教授	有機化学・機能材料化学
吉澤一成	京都大学・研究員	計算科学

- ○研究分野の融合と連携を意識した、有機化学、無機化学、バイオテクノロジー、 計算科学、電子顕微鏡学など多様な分野における指導的研究者
- ○産業界で技術経営(MOT)、知財に関する経験豊富な経営者
 - *元富士フイルム㈱取締役 **元㈱住化技術情報センター社長

5. 研究領域の運営:基本方針

CRESTの"チーム型ネットワーク研究所"の概念を活かし最大の創発効果を得る

- 1. 研究領域内外の共同研究の推進
- 2. 国際研究交流の推進
- 3. 若手研究者育成の推進



原子・分子システムのコンセプト 🔷 学際融合研究の創発

5. 研究領域の運営:研究費配賦

■採択時の配賦予定総額を2.8億円とした。

- ■研究総括裁量による機動研究費の重点配賦対象としたのは、 研究領域内外との共同研究の推進である。
- ■国際強化支援、出産・育児・介護支援のための予算を申請に応じ 各チームに配賦した。

5. 研究領域の運営:個別イベント

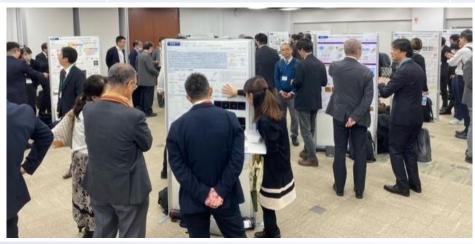
目的	手段	内容
全体計画の 確認	サイトビジット	 採択年度(若しくは翌年度上期)に研究担当者と評価者(総括・AD)にてオンライン会議。研究の立上がり状況を確認、成果イメージ・課題を共有。 課題中間評価年度の上期に研究代表者を訪問。達成目標(中間)に対する進捗、チーム内の連携状況を確認・アドバイス。
研究進捗確認、 全体計画修正	領域会議	基本的に年1回の実施。当日の議論に加えて 評価者コメントをフィードバックする。
	課題中間評価	研究の進捗状況や実施状況を把握し、 「進捗状況・今後の成果見込み」と 「研究課題の継続可否,今後の対応」を評価。 これを基に研究計画の見直しを指示する。

5. 研究領域の運営:追加支援、他

目的	手段	内容	
共同研究の推進	領域会議	 全15課題が揃った第4回領域会議にて、共同研究に 重点配賦予定であることを総括より説明。 提案内容を個別に審査し、2023年度より研究費を 追加配賦。 	
国際研究交流	個別申請と承認	• 提案内容を個別に審査、研究費として追加配賦 (2023年度よりCREST全体の「国際強化支援」予算が無くなり、総括裁量による機動研究費として配賦)	
若手の育成	領域会議 (ポスター発表)	第5回及び第6回領域会議にてショートプレゼンテーションとポスター発表を実施。	
アウトリーチ	学会誌・展示会等での報告	 新技術説明会にて大木(2期生)より発表「CO2をメタンへ還元する分子性触媒と電極化技術の開発」 "化学と工業"誌(Vol.77, No.6 2024)特集 "『自在配列』で拓く新展開"で4報文。 	

5. 研究領域の運営:領域会議

	日時	内容	方式	参加者
第1回	2020/12/18	・1期生キックオフ	オンライン	47名
第2回	2021/10/11	・2期生キックオフ	オンライン	94名
第3回	2021/12/11	・1期生進捗報告	オンライン	98名
第4回	2022/12/3 · 4	・3期生キックオフ ・1期・2期生進捗報告	ハイブリッド (オンライン/対面)	125名
第5回	2023/12/16 · 17	・1〜3期生進捗報告 ・ポスター発表	ハイブリッド (オンライン/対面)	136名
第6回	2024/12/21 · 22	・1期・3期生進捗報告 ・ポスター発表	ハイブリッド (オンライン/対面)	110名



第5回領域会議の ポスターセッション風景

5. 研究領域の運営:基本方針

CRESTの"チーム型ネットワーク研究所"の概念を活かし最大の創発効果を得る

Prof. B. Meyer

(Friedrich-Alexander Univ.) Prof. C. C. Cummins (MIT)

- 1. 研究領域内外の共同研究の推進
- 2. 国際研究交流の推進
- 3. 若手研究者育成の推進

領域研究担当者の異動・昇任



原野 幸治 (佃T) 東大 特任准教授 →NIMS主幹研究員



項 栄 (丸山T) 東大 准教授 →浙江大学教授



中嶋 琢也 (佃T) NAIST 准教授 →大阪公立大学教授



中島 裕美子 (大木T) 産総研 研究チーム長 →東京科学大学教授



長尾 祐樹 (是津T) JAIST 准教授 →教授



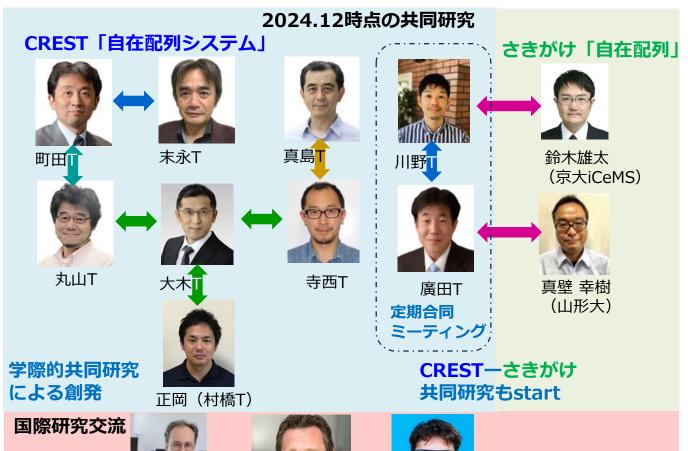
川村 出 (川野T) 横浜国大 准教授 →教授



武石 明佳 (石田T) 理研 白眉チームリーダー →神戸大学講師



中西 勇介 (末永T) 東京都立大 助教 →東大准教授

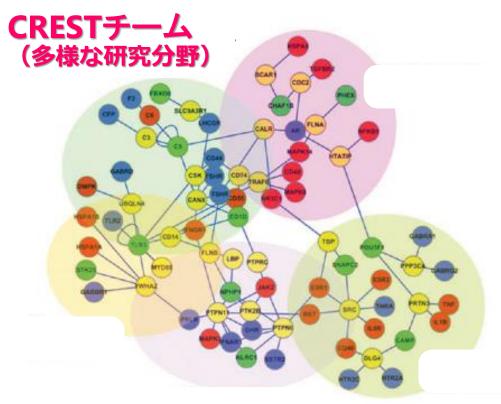


Prof. G. Maglia

(Univ. Groningen)

"原子・分子の自在配列制御"をキーワードに学際融合をはかる

Atomic & Molecular Systems Science



学際的な共同研究 → 若手研究者の視野& ネットワーク&経験を拡げる。

大きな啓発・育成効果

各チーム内での連携

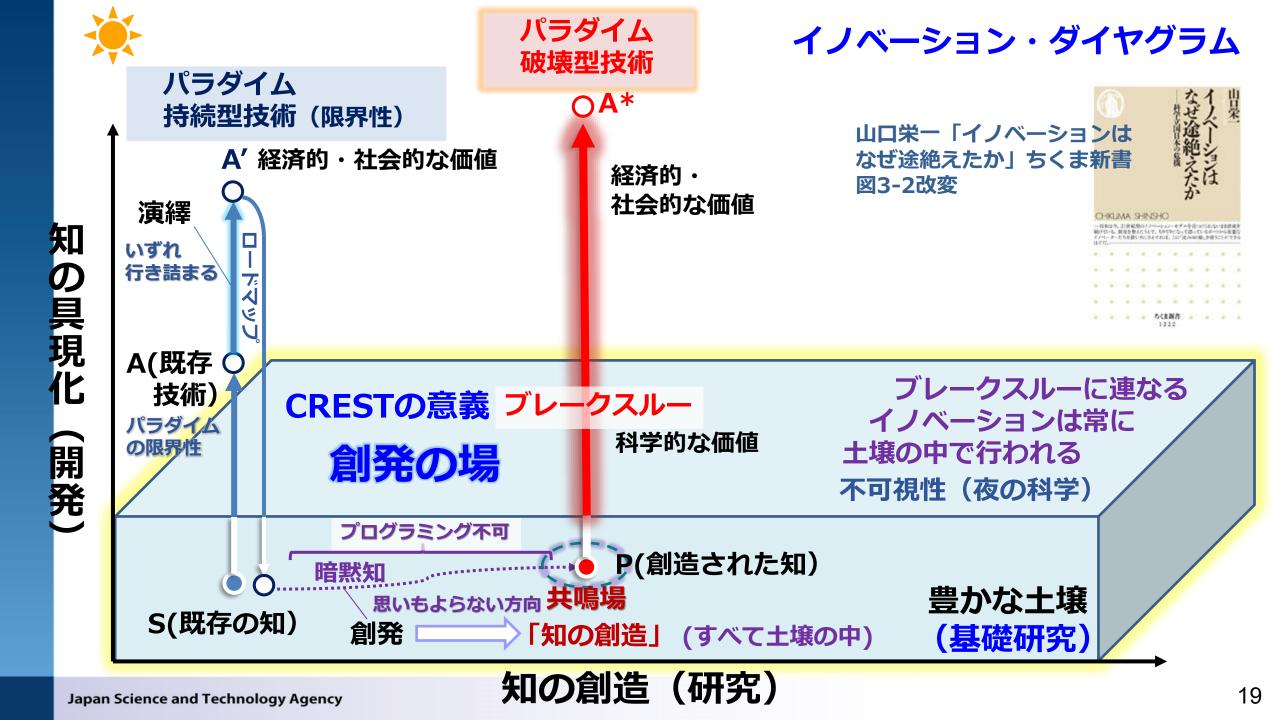
チーム間のnetworking & 学際共同研究

synergy

単独チーム以上のoutput

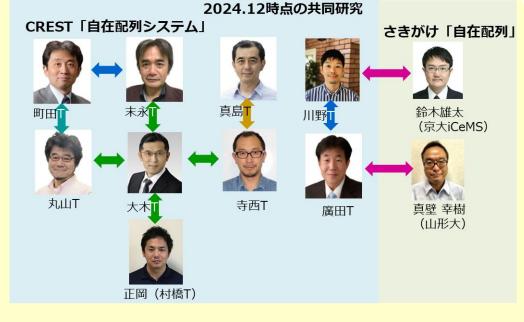
- ●考えてもみなかった新技術・応用
- ●新しい学際的融合分野の創出

を創発するチャンス 18



5. 研究領域の運営:共同研究

年度	研究者	方式
2023 ~	末永-町田	原子層のファンデルワールス自在配列と実空間モ アレ観察
2023 ~	廣田-川野	ポアサイズ制御人工ナノポアタンパク質の創製
2023 ~	町田-丸山	一次元・二次元ヘテロ構造デバイスの光電変換特 性
2023 ~	丸山-大木	CNT合成用クラスター錯体触媒の開発およびCNT により抱接したクラスター錯体の直接TEM観察
2023 ~	大木-正岡 (村橋T)	電解重合を利用したクラスター担持電極触媒の創成
2023 ~	大木-寺西	高輝度X線を利用した三次元Fe配列錯体の精密構 造解析
2024 ~	寺西-真島	半導体ナノ粒子を用いた室温共鳴トンネルトラン ジスタの創製
2024 ~	川野-鈴木雄太 (さきがけ研究者)	自在配列タンパクカプセルの膜透過に関する研究
2024 ~	廣田 – 真壁幸樹 (さきがけ研究者)	全長抗体の3Dドメインスワッピングの観測と抗体 医薬品への応用



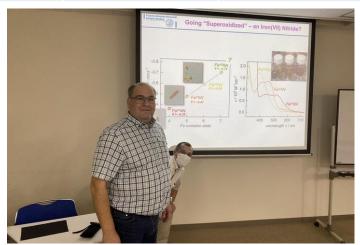
本CRESTに **"創発の場"**

が形成されている

- ・全15チーム中9チーム(6割)が他チームとの共同研究を活発に実施
- ・2025年度からは更に2チームが共同研究に参画予定

5. 研究領域の運営:国際研究交流

年度	研究者	方式
2022	大木	招へい: Meyer教授(独、Friedrich Alexander Univ.)を招へいし、錯体化学会討論会で招待講演および京都大学・化学研究所などでインフォーマルミーティングを開催した。
2023	村橋	招へい: Cummins教授(米国MIT化学科)を招へいし、東京科学大学などでインフォーマルミーティングを開催した。
2024	廣田	国際会議:日本化学会生体機能関連化学部会主催の国際シンポジウムISBC2024のサテライトシンポジウムを奈良で開催した。
2024	川野	招へい・国際会議:オランダGroningen大学のMaglia教授を招へいし、ナノポア に関する国際会議を開催する。(2025/3月予定)



Meyer教授の研究講演会 (2022/9月、京都大学・化学研究所)

国際研究交流







Prof. B. Meyer (Friedrich-Alexander Univ.) Prof. C. C. Cummins (MIT)

本研究代表者らは、既に国際的舞台で活躍しており 国際ネットワークを有している。学生の国際会議発表 の重要性も認識されている。

人材育成、表彰

■人材育成 (研究担当者の昇任)

准教授から教授への昇任 助教から講師・准教授への昇任 6名 2名



原野 幸治 (佃T) 東大 特任准教授 →NIMS主幹研究員



項 栄 (丸山T) 東大 准教授 →浙江大学教授



長尾 祐樹 (是津T) JAIST 准教授 →教授

川村 出 (川野T)



中島 裕美子 (大木T) 産総研 研究チーム長 →東京科学大学教授



| 武石 明佳 | (石田T) | 理研 白眉チームリーダ・ | →神戸大学講師



中西 勇介 (未永T) 東京都立大 助教 →東京大 准教授

■主な表彰者

・中西 勇介(末永チーム): コニカミノルタ画像奨励賞(2021)、飯島賞(2021)、他

・高野 慎二郎(佃チーム) :日本化学会進歩賞(2022)、他

・重田 育照(廣田チーム) :第8回(2023年)分子科学国際学術賞(2023)

・原田 隆平(廣田チーム) : 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞(2021)

・石坂 香子(町田チーム):日本学術振興会賞(2021)

・若藤 祐斉(町田チーム): Nanoscale Horizons賞(2023)

・谷藤 一樹(大木チーム) : 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞(2024)、他

・川村 出 (川野チーム):日本核磁気共鳴学会 進歩賞(2023)

・猿山 雅亮(寺西チーム):日本化学会コロイドおよび界面化学部会 令和5年度科学奨励賞

(2023)

・松本 憲志(寺西チーム): Nanoscale Horizons賞(2024)

・琴岡 匠 (松本チーム):応用物理学会講演奨励賞(2022)

6. 研究の進捗状況

■概要

·原著論文総数437報。

Nature・Scienceに5報、Nature姉妹紙・JACS・Angewandte Chem. Int. Ed.に計54報。

- ・直近1年のh-indexは1.7増加。(研究担当者47名の平均値)
- ・特許出願数は33件。

■代表的成果

科学的・技術的な観点からの代表的成果として、以下の6件紹介する。

- 1. 末永チーム(1期):同位体を原子レベルで識別・可視化
- 2. 村橋チーム(1期):ポリアレーンナノクラスターの発見
- 3. 廣田チーム(1期): 抗体軽鎖4量体の3Dドメインスワッピング(DS)現象&構造を解明
- 4. 寺西チーム(2期):温和な条件でのナノイオン結晶(原子層)形状・組成制御
- 5. 石田チーム(3期):「力学極性ゲル」による物質・エネルギー・生物の整流化
- 6. 町田・末永チーム(1期):ツイスト2層WSe2のモアレ格子緩和(CRESTチーム間共同研究)

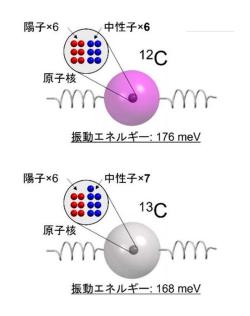
同位体を原子レベルで識別・可視化

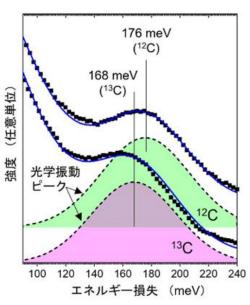
電子エネルギー損失分光(EELS)により、透過電子顕微鏡の空間分解能で¹²C/¹³Cを識別する技術を開発。

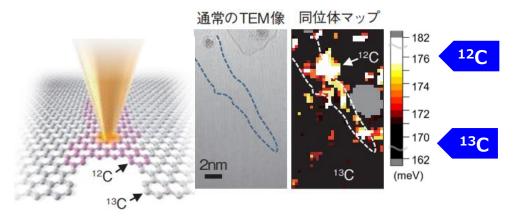
■ ¹³Cグラフェンのクラックに成長した¹²Cグラフェンを 同位体マップで明瞭に識別

■ ¹³C/¹²Cの光学振動とEELSスペクトル

中性子一個分の重さの違いを振動エネルギーの差として検出





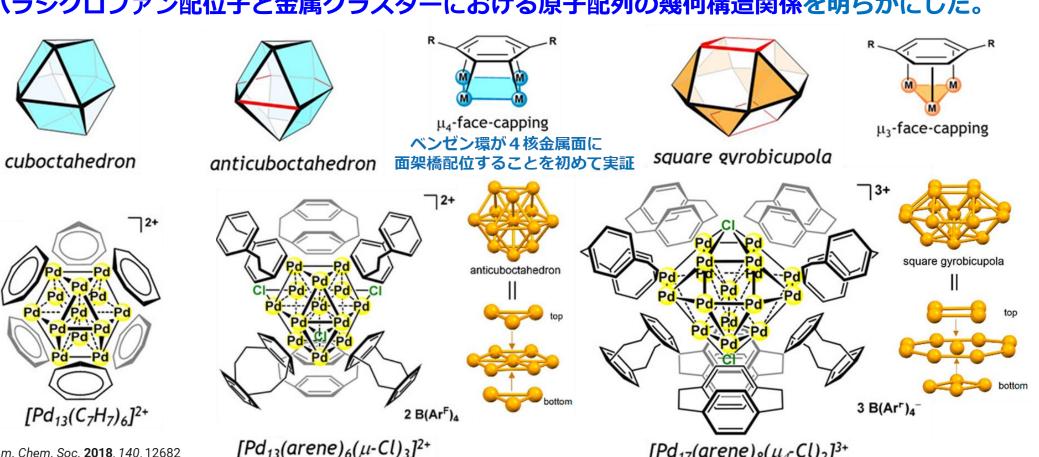


今後の展開

- ・ EELS検出器の更新等で、エネルギー分解能 5meVを目指す。
- 材料科学や生物学の基礎研究の他、創薬研究など幅広い分野での貢献が期待される。

ポリアレーンナノクラスターの発見

■6員環パラシクロファン配位子をアレーン配位子とするPdナノクラスターの単離・構造決定に成功 パラシクロファン配位子と金属クラスターにおける原子配列の幾何構造関係を明らかにした。



J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 12682

hexagonal close-packed Pd₁₃

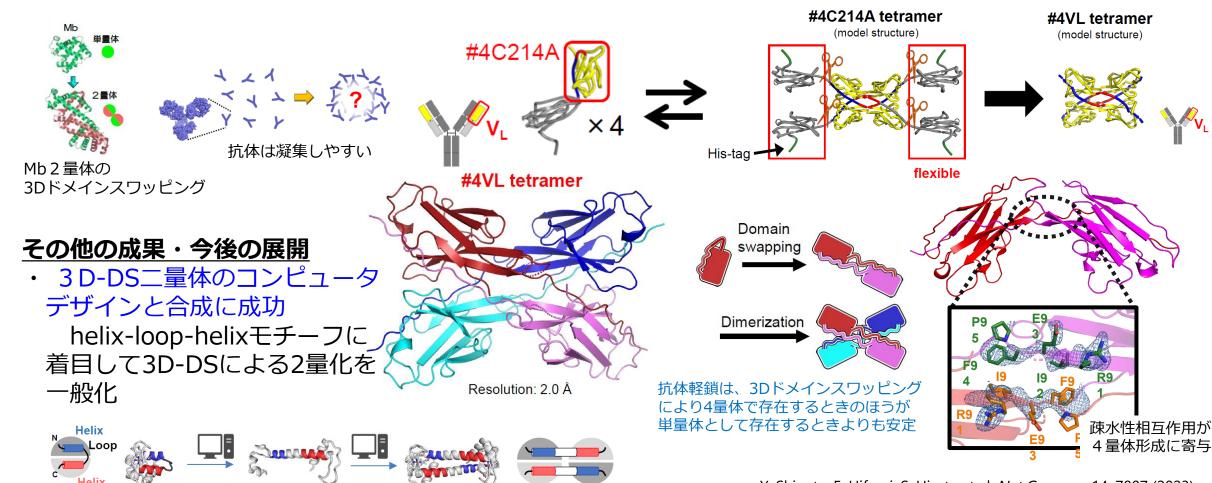
non-close-packed Pd₁₇

 $[Pd_{17}(arene)_8(\mu_4 Cl)_2]^{3+}$

金属核数よりも圧倒的に少ない多座架橋配位子を用いてクラスターの原子配列制御が可能

抗体軽鎖4量体の3Dドメインスワッピング(DS)現象&構造解明

抗体軽鎖の4量体構造の単結晶構造解析に成功、3Dドメインスワッピング構造を初めて解明。3Dドメインスワッピングが、機能性抗体を創製する新しい方法になり得る可能性。



Y. Shigeta, E. Hifumi, S. Hirota et al, Nat Commun 14, 7807 (2023).

Nat.Commun(2024) [Editors' Highlights]

温和な条件でのナノイオン結晶(原子層)形状・組成制御

イオン性ナノ結晶のカチオン交換反応

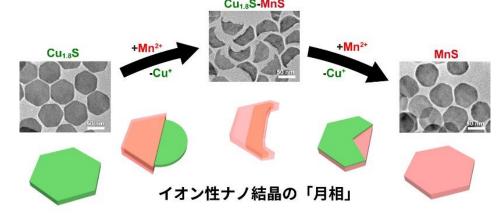
Initial ionic NC Cation sublattice Anion sublattice Cation exchange Cation exchange New cation Small volume fragile robust 形状と結晶系は保持

ナノ粒子形状が変化し、反応終了後は 元の形状に戻るという特異な現象を発見。

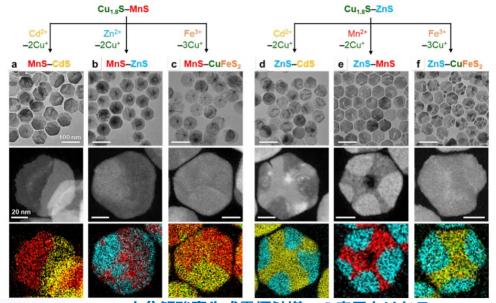
今後の展開

・ナノ結晶の形状と組成は、様々な特性に影響を及ぼす。 チーム内で光物性・光機能を開拓すると共に、領域内外 とも連携し電気特性、触媒性能等を明らかにしていく。

■ナノ結晶のカチオン交換反応中に起こる異方変形と再生



■満ち欠けプロセスを用いた異種結晶相配列を実現



Science(2023)

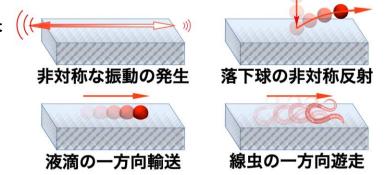
「力学極性ゲル」による 物質・エネルギー・生物の整流化

"力"に極性応答する新材料「力学極性ゲル」を開発。 最大剪断応力方向である45度に配列・配向させた 2Dナノシート内包弾性体は、左右の剪断弾性率差が 最大67倍にも達した。

今後の展開

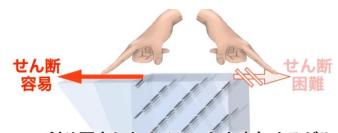
・視覚的にもインパクトある力学応答極性を実現して おり、数理モデルの構築も進めながら、様々な応用分 野に展開中。

■様々な 極性応答



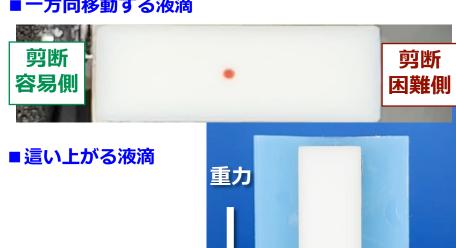
■力学極性ゲル

左右の剪断に対して異なる弾性率を示すゲル



斜め配向したナノシートを内包するゲル 左方向と右方向とで弾性率に67倍の差

■一方向移動する液滴



ツイスト2層WSe2のモアレ格子緩和現象を発見

■共同研究体制



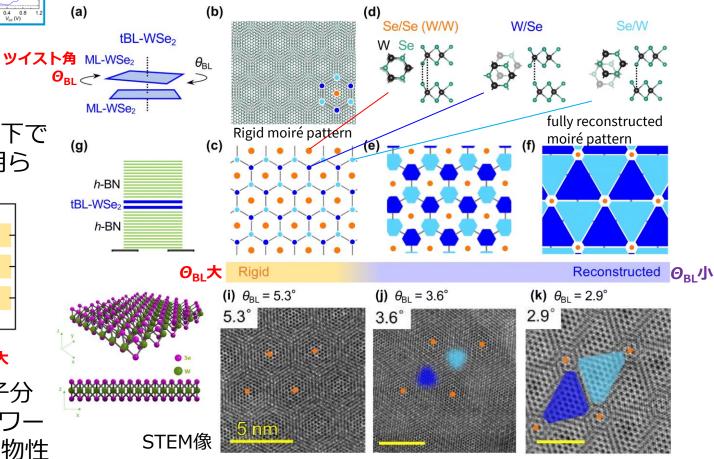
チーム間連携にいち早く取り組み、成果が得られつつある

ツイスト2層WSe₂を走査型透過電子顕微鏡 (STEM) 観察した結果、ツイスト角4度以下で ドメイン形成(6角格子緩和) することが明ら かとなった。

With top and bottom *P*-BN With top *P*-BN With top *P*-BN With top *P*-BN OBL (deg)

今後の展開

末永のSTEM技術、レーザー角度分解光電子分 光(ARPES,石坂)と組合せ、ファンデルワー ルス2Dツイスト原子層材料における特異な物性 発現の理解を進める。 ■h-BNホストによりツイストTMDを安定化する手法を開発。 ツイスト角θ_{BL}に依存して再構成モアレ格子と剛体モアレ格子の クロスオーバー(モアレ格子の緩和/再配列現象)を見出した。



T. Machida, K. Suenaga et al., Nanoscale 16 (2024)

7.総合所見と展望

■ 研究成果

「原子・分子の自在配列・配向技術と分子システム機能」に相応しい研究成果が 順調に世界に発信されている。

■ 領域アドバイザー

幅広い学識ならびに経験を有する優れた領域アドバイザーの積極的な参画を得て、各研究課題(チーム)の研究成果を最大化すべく、各チームの進捗状況を、領域全体会議、チーム別のサイトビジット(中間評価の半年前)ならびに個別面談により把握している。 領域アドバイザーからは、様々な視点からの的確な意見、建設的なエンカレッジがなされ、また特に産業界出身の領域アドバイザーからは、知財や研究成果の社会実装を視野に入れたマネジメントなど、たいへん有用なアドバイスが与えられている。領域会議においては、アドバイザーの助言やコメントをうけて参加者全員で"ブレーンストーミング"がなされるなど、創発の場の雰囲気が熟成されており、大変好ましい。

■ 共同研究

CREST領域内、CREST-さきがけ間において、研究者間の連携と学際的な共同研究が着実に進展しており、CRESTの"創発の場"としての機能が発揮されている。

7.総合所見と展望

■ 若手研究者の育成

さきがけ研究領域「原子・分子の自在配列と特性・機能」(西原 寛 研究総括)の研究者と相互の傍聴参加や、領域会議において、さきがけ研究者によるショートオーラル発表・ポスター発表を受け入れ、専門の異なる若手研究者間のコミュニケーションがとれるとともにさきがけ研究者を含む学際交流ネットワークが構築されつつある。また、若手研究者の受賞やポスト獲得、昇進など、キャリアパス形成も順調に進んでいる。

■ 国際研究交流

各チームの代表研究者や共同研究者は既に国際的に活躍している。 若手研究者を育成するために国際的舞台の発表や討論による鍛錬は重要であり、 ひきつづき積極的に実施する。

■ 原子・分子の配列・配向・組織化・階層構造、そのエネルギーランドスケープを自在に 精密制御するための革新的技術や方法論、新しい機能材料の創出は、すべての科学分野 における新しい学術的基盤を与えるものである。

本CREST領域から生まれる独自の基礎シーズを、我が国が先導するサイエンス・テクノロジーの創出につなげることは、研究領域としての重要課題であり、今後も本研究領域の意義と実証性が高まる運営を常に目指して注力したい。