

戦略的創造研究推進事業
－CREST(チーム型研究)－

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」

研究領域中間評価用資料

研究総括：君塚 信夫

2025 年 2 月

目 次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	1
(3) 研究総括	1
(4) 採択研究課題	2
2. 研究総括のねらい.....	3
3. 研究課題の選考について.....	3
(1) 研究課題の選考方針および選考結果.....	3
(2) 研究課題採択の評価.....	4
4. 領域アドバイザーについて.....	5
5. 研究領域のマネジメントについて.....	7
(1) 研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく研究課題の指導.....	7
(2) チーム型のネットワーク研究所として活動事例.....	8
(3) 研究費配分上の工夫.....	11
6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について.....	12
7. 総合所見	28
(1) 研究領域のマネジメント.....	28
(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況.....	30
(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性.....	32
(4) 科学技術イノベーション創出に向けた今後への期待、展望、課題.....	33
(5) 所感	33

1. 研究領域の概要

(1) 戦略目標

「自在配列と機能」

(2) 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」(2020 年度発足)

(3) 研究総括

氏名 君塚 信夫(九州大学 大学院工学研究院 主幹教授)

上記詳細は、以下 URL をご参照ください。

国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)公開資料「新規研究領域の事前評価」

<https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/index.html>

令和 2 年度新規研究領域の事前評価

https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/hyouka_r2.pdf

(4) 採択研究課題

採択年度	研究代表者	所属・役職 採択時 ¹	研究課題
2020 年度	末永 和知	産業技術総合研究所・ 首席研究員 (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 に基づく一次元ヘテロナノ構造の制 御合成と物性・機能設計
	村橋 哲郎	東京工業大学・教授 (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	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	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	東京大学・教授 (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	東京工業大学・教授 (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

¹ 変更/移動のあった場合、下段に括弧つきで記載

研究採択時の研究費は、原則、2.8 億円の研究費総額とした。

研究総括裁量経費、および戦略的創造研究推進事業の年次余剰予算により、研究費を追加配賦した。配賦については全件個別申請とし、「5. (3) 研究費配分上の工夫」に基づいて実施した。「国際強化支援策」、「出産・子育て・介護支援制度」の追加施策も行った。なお、「国際強化支援策」は2023年度より研究総括裁量経費枠に組み入れ、研究領域内判断施策となった。

2. 研究総括のねらい

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、精密に制御された組織構造に独自の化学的、物理的、あるいは生物科学的な“システムとしての機能”をデザインするための基盤技術の創出を目指す。

研究分野としては、原子・分子から成る有機分子、生命分子、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・ナノ物質群などの幅広いマテリアル分野を対象とする。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。また、(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・1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る。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を“(原子)分子システム機能”と定義し、制御された原子・分子の配列・配向・組織化・階層構造と(原子)分子システム機能との相関を明らかにする。以上の科学的知見を体系化して、新しい学際領域研究である“分子システム科学”における基盤学理の創成を図る。

3. 研究課題の選考について

(1) 研究課題の選考方針および選考結果

① 研究課題の選考方針

選考は戦略目標に従い、次の選考方針を掲げて臨んだ。

1. 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。
2. 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。

3. 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。
4. 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。

②選考結果

2020 年度採択課題は、「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」、「超原子を基盤とする階層性ナノ物質科学の創成」、「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」、「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」、「単層 CNT に基づく一次元ヘテロナノ構造の制御合成と物性・機能設計」、「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」の 6 課題である。これらの研究課題間では、分野横断的な融合展開も期待される。

2021 年度採択課題は、「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」、「自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築」、「固液電気化学相界面の多階層構造制御」、「原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出」、「神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム」の 5 課題である。前年度採択で手薄であったナノ界面における分子配列とそれによるシステム機能開発分野が強化された。

2022 年度採択課題は、「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」、「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」、「含 BN ナノカーボン分子の自在合成と配向制御」、「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」の 4 課題である。原子・分子・ナノ物質の自在配列によるシステム機能開発において、より明確な力学・電子デバイスの社会実装を目指した研究課題が加わった。

(2) 研究課題採択の評価

3 年間の募集と採択により、無機、有機、低次元材料、金属―有機分子界面、光機能材料、生体高分子・タンパク質などの幅広い学術分野から研究課題をバランスよく構成することができた。また、配列制御・組織化制御を、実社会に貢献できるシステム機能の創出につなげようとする研究課題も選出できた。申請された研究課題の中で、本研究領域がカバーする学術分野の基幹となる原子/原子層の配列/組織化制御に関しては、挑戦性ならびに波及性の高い提案が多く、またイノベーション創出に結びつく学際融合研究の基盤となることが期待されたため、結果として幾分の重点化が認められる。“超原子(佃チーム)”、“ナノメタリクス(村橋チーム)”、“ナノ結晶相(寺西チーム)”、“多元素イオンクラスター(塩谷チーム)”および“ヘテロ CNT/原子層(丸山・町田チーム)”については、原子/原子層の配列/組織化

に基づく機能システム創出をキーワードに、各々の特徴を最大限に活かした普遍的な学理構築を期待している。本研究領域は、世界最高レベルの電子顕微鏡による構造解析と電子線吸収分光を開発する末永チームを擁し、研究領域における構造評価の要となることを期待している。

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

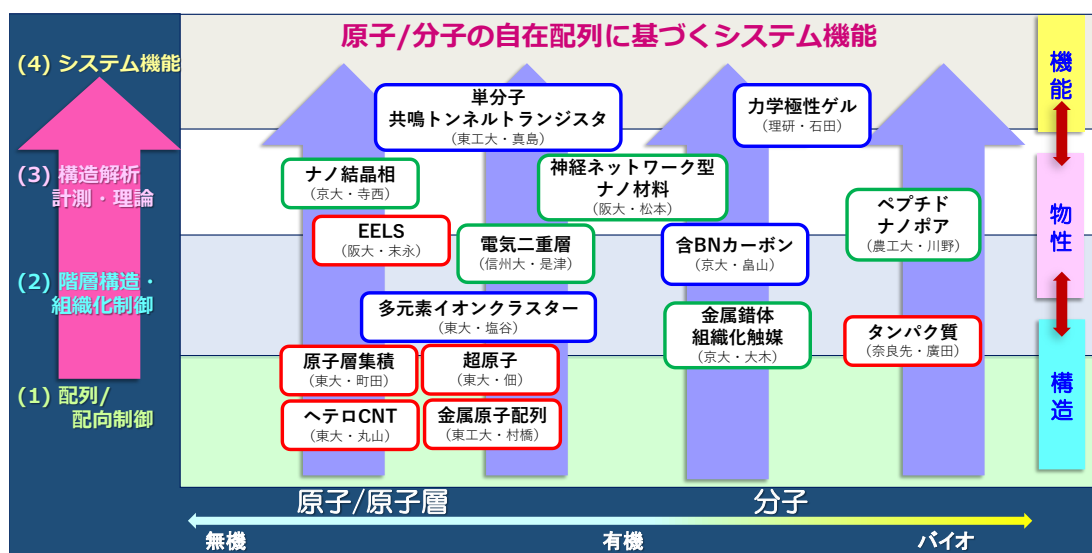


図1 CREST 研究領域「自在配列システム」ポートフォリオ(1, 2, 3期)

4. 領域アドバイザーについて

領域アドバイザーは、先端的な研究を行い、国際的にも高い業績をあげ、幅広い視野を有し、経験豊富な候補者の中から、下記の要素を考慮して表1に示す領域アドバイザーを選定した。

1. 研究分野の融合・連携

有機化学、無機化学、金属錯体化学、光化学、計算科学、理論化学、バイオテクノロジー、ナノテクノロジーなど多様な分野における指導的研究者。

2. 新たな学理の創出

新しい学理を創出し、研究コミュニティの信頼が高い研究者。

3. 社会実装

知財、MOT (Management of Technology, 技術経営) 経験のある企業経営者。

表 1 CREST「自在配列システム」研究領域の領域アドバイザー

領域アドバイザー名 (専門分野)	着任時の所属 ¹	役職	任期
浅見 正弘 (光機能材料化学、MOT)	富士フィルム(株) (日本知的財産協会)	取締役 (参与)	2020 年 4 月～
幾原 雄一 (材料科学・電子顕微鏡学)	東京大学	教授 (特別研究教授)	2020 年 4 月～
片山 佳樹 (バイオテクノロジー)	九州大学	教授	2020 年 4 月～
北川 宏 (無機化学・金属錯体化学)	京都大学	教授	2020 年 4 月～
関根 千津 (有機材料科学、MOT)	(株)住化技術情報センター (合同会社 RiseWave 啓)	社長 (代表社員)	2020 年 4 月～
山田 容子 (有機化学・機能材料化学)	奈良先端科学技術大学院大学 (京都大学)	教授	2020 年 4 月～
吉澤 一成 (計算科学)	九州大学 (京都大学)	教授 (研究員)	2020 年 4 月～

¹変更/移動のあった場合、下段に括弧つき記載

5. 研究領域のマネジメントについて

(1) 研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく研究課題の指導

研究領域全体会議および研究チーム別のサイトビジットや個別面談により、各研究チームの進捗状況を把握し、今後の進め方を領域アドバイザーも参加して議論している。研究領域主催の主要な会議の開催実績は以下の通りである。

表2 「自在配列システム」領域における領域会議、評価会、サイトビジットの実績

年度	会議名	日時	場所	参加者数
2020	第1回領域会議 (1期生キックオフ会議)	2020/12/18	オンライン会議	47名
	1期生サイトビジット		オンライン会議	—
2021	第2回領域会議 (2期生キックオフ会議)	2021/10/11	オンライン会議	94名
	第3回領域会議	2021/12/11	オンライン会議	98名
	2期生サイトビジット		オンライン会議	—
2022	第4回領域会議	2022/12/3・4	JST 別館 1F ホール (ハイブリッド)	125名
	3期生サイトビジット		オンライン会議	—
2023	1期生サイトビジット		代表所属機関 (ハイブリッド)	—
	課題中間評価会	2023/10/22	JST 別館 4F 会議室 F (ハイブリッド)	—
	第5回領域会議	2023/12/16・17	JST 別館 1F ホール (ハイブリッド)	136名
2024	2期生サイトビジット		代表所属機関 (ハイブリッド)	—
	2期課題中間評価会	2024/11/24	AP 市ヶ谷 5F-D (ハイブリッド)	—
	第6回領域会議	2024/12/21・22	大阪大中之島センター (ハイブリッド)	110名

発足時(2020年)はコロナ禍により対面での会議開催が困難であったため、採択課題のサイトビジットと領域会議は Zoom によるオンライン会議とした。採択年次のサイトビジット

は、本来は評価者(研究総括・領域アドバイザー)が研究代表者所属機関を訪問し、対面で行うことが望ましいが、止むを得ず 15 課題全てオンライン形式とした。その代わり、後述するように、中間評価の半年前にサイトビジット(対面)を行っている。

領域会議は 2022 年 12 月 3 日開催の第 4 回領域会議より対面式とした。より多くの研究参加者が参加できるようにオンライン形式も併用した。その結果、全ての研究代表者が対面式で参加し、計 125 名の参加者が得られた。翌 2023 年度から研究領域内共同研究を積極的に推進する案内を出していたこともあり、休憩中に共同研究に関する打合せや研究者交流が進んだように感じる。研究領域内共同研究については、後述の「(2)チーム型のネットワーク研究所として活動事例」を参照されたい。

本研究領域の特色として、課題中間評価年度(中間評価会の半年前)にサイトビジットを実施している。これは、研究計画書に記載されている中間目標に対する達成度を研究代表者ならびに主たる共同研究者から直接ヒヤリングし、目標に向けた各グループの進捗状況、チーム内の連携状況や、各チームの抱える課題を確認・アドバイスするためである。2023 年度に 1 期生 6 課題、2024 年度に 2 期生 5 課題、何れも対面、オンラインのハイブリッド方式とし、領域アドバイザーもほぼ全員参加した。各研究者に対して、領域アドバイザーや研究総括から様々な視点からの質問やコメントが多くなされるとともに、中間評価会まで残り半年間の研究指針・優先順位も含めて活発な意見交換がなされた。2025 年度も 3 期生 4 課題で実施予定である。

課題中間評価会は、2023 年 10 月に 1 期生 6 課題、2024 年 11 月に 2 期生 5 課題、ハイブリッド方式にて実施した。領域アドバイザー・研究総括は、研究課題ごとに、研究の進捗状況や研究成果などを把握し、これを基に「1. 進捗状況と今後の成果見込み」と「2. 研究課題の継続可否と今後の対応」を評価した。各研究代表者には研究総括コメントとして中間評価の結果を伝達し、この内容は各研究課題の次年度以降の研究計画に反映されている。中間評価コメントを受けた研究代表者が、さらに領域アドバイザーや研究総括を訪問して意見交換を重ね、その結果、その後の研究プレゼンテーションやチーム内連携が顕著に向上した例もあり、コミュニケーションベースの指導が着実に進められている。

(2) チーム型のネットワーク研究所として活動事例

本研究領域の研究総括方針は、CREST の“チーム型ネットワーク研究所”の概念を活かして最大の創発効果を得ることにある。1〜3 期生までの全研究課題が揃った第 4 回領域会議において、研究総括より「本研究領域の力を結集して分子システム科学の基盤学理を創成し、それによる新しいシステム機能の発現を目指す。各チーム研究担当者からの学際融合研究提案を募集し、研究総括裁量経費を重点的に配分する」と、研究領域メンバーに対して直接周知した。

具体的には、研究チーム間が共同研究を行う場合、次年度の研究計画とセットで共同研究内容を提案し、研究総括裁量で研究費を増額した。

① 研究領域内外の共同研究の推進

本研究領域では、図 1 CREST 研究領域「自在配列システム」ポートフォリオで示したように、無機・有機化学からバイオテクノロジーの研究分野で各チームが世界トップレベルの研究を展開している。これらを効果的に結び付けることができれば、研究総括の狙いに記した学際融合領域ならびに“分子システム科学”の創出が期待できる。

同じ戦略目標「自在配列」のさきがけ研究領域「原子・分子の自在配列と特性・機能」(西原寛研究総括)とは、第 1 回領域会議から相互の研究者の傍聴参加を認めてきた。第 5 回領域会議では、チーム間共同研究、チーム内トピックスを若手研究者が発表する場としてポスターセッションを設けたが、ここにさきがけ研究者から 6 件の発表を受け入れた。このうち鈴木博士(さきがけ 3 期生)と川野(CREST 2 期生)が意気投合し、2024 年度から共同研究に至った。

以下に共同研究の実施一覧を示す。

表 3 「自在配列システム」研究領域内・外における共同研究内容(2024 年 12 月時点)

年度	担当者	担当者	内容
2023～	末永 (末永 T)	町田 (町田 T)	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 (廣田 T)	川野 (川野 T)	ポアサイズ制御人工ナノポアタンパク質の創製
2023～	町田 (町田 T)	丸山 (丸山 T)	一次元・二次元ヘテロ構造デバイスの光電変換特性
2023～	大木 (大木 T)	丸山 (丸山 T)	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 (大木 T)	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 (大木 T)	寺西 (寺西 T)	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～	真島 (真島 T)	寺西 (寺西 T)	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 (川野 T)	鈴木雄太 (さきがけ)	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 (廣田 T)	真壁幸樹 (さきがけ)	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

②国際研究交流の推進

海外のトップ研究者とのネットワーク形成、共同研究への発展、研究代表者・共同研究者、さらに若手研究者のプレゼンスとビジビリティ向上を促すべく、各研究課題の研究担当者(研究代表者と主たる共同研究者)には、海外の著名な研究者の招へい、ミニ国際会議などを推奨しており、研究総括裁量経費などによる追加支援を行っている。以下に国際研究交流で研究費支援した一覧を示す。

表4 「自在配列システム」研究領域で研究費支援した国際研究交流

年度	担当者	内容
2022	大木	招へい：Meyer 教授(独、Friedrich Alexander 大学)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、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：蘭、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)

② 若手研究者育成の推進

近年、日本の基礎研究力の低下が叫ばれており、JST においてもホームページトップでこれに対する取り組みの特設ページを開設している。本研究領域でも若手研究者の育成を重要と捉え、研究領域内若手研究者の育成に取り組んでいる。具体的には、第5回領域会議からポスターセッションを設け、チーム内およびチーム間共同研究に実際に取り組んでいる若手研究者が発表する場を意識的かつ積極的に設けた。応募多数で時間と会場の関係で31件に絞ったが、現地参加の研究者と評価者が全員ポスターセッションに参加し、若手研究者の研究活動内容をフォローしている。第6回領域会議でもポスターセッションを実施した。

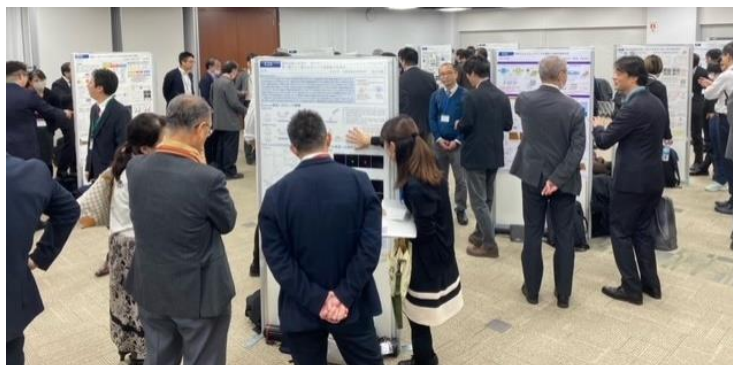


図2 CREST 研究領域「自在配列システム」第5回領域会議におけるポスターセッション風景

研究開始時の研究担当者(研究代表者と主たる共同研究者)は教授クラス：31 名、准教授クラス：10 名、助教クラス：3 名の計 44 名であったが、現時点までで准教授⇒教授 6 名、助教⇒准教授(講師)2 名の昇任がなされ、キャリアパスは順調に形成されていると言える。以下に研究担当者(主たる共同研究者)の異動一覧を示す。

表 5 「自在配列システム」研究領域研究者の異動・昇任

異動年月	研究担当者	内容(上段：異動前／下段：異動後)
2022/2 月	原野 幸治 (1 期：佃 T)	東京大学 特任准教授 物質・材料研究機構 主幹研究員
2022/2 月	項 栄 (1 期：丸山 T)	東京大学 准教授 浙江大学(中国) 教授
2022/4 月	中嶋 琢也 (1 期：佃 T)	奈良先端科学技術大学院大学 准教授 大阪公立大学 教授
2023/4 月	中島 裕美子 (2 期：大木 T)	産業技術総合研究所 研究チーム長 東京工業大学(現：東京科学大学) 教授
2023/4 月	長尾 祐樹 (2 期：是津 T)	北陸先端科学技術大学院大学 准教授 (同上) 教授
2024/4 月	川村 出 (2 期：川野 T)	横浜国立大学 准教授 (同上) 教授
2024/4 月	武石 明佳 (3 期：石田 T)	理化学研究所 理研白眉研究チームリーダー 神戸大学 講師
2024/8 月	中西 勇介 (1 期：末永 T)	東京都立大学 助教 東京大学 准教授

(3) 研究費配分上の工夫

研究開始時の研究費は、原則 2.8 億円である。これは、研究総括裁量による機動研究費を確保するためである。機動研究費は研究者からの申請を個別に研究総括が判断し、配賦した。前述した通り、重点配賦対象としたのとしたのは研究領域内外との学際融合・連携研究の推進である。一方、研究課題内で新たに取り組みたい研究テーマに対しても内容を精査した上で配賦を行った。また、2023 年度からは追加支援の「国際強化支援策」の予算枠が廃止されたため、これに関しても機動研究費の中から配賦した。

戦略的創造研究推進事業で設定された追加支援の中で、「出産・子育て・介護支援制度」では、申請に応じ配賦した。

6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について

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して、15 の研究課題に取り組んでいる。

各チームの研究成果は確実に上がっており、高インパクトファクターの総合科学誌としては、*Nature* に 4 報 (末永チーム 2 報、丸山・大木チーム各 1 報)、*Science* に石田チーム 1 報が出版され、*Nature* 姉妹誌に計 26 報、*JACS* 誌に 17 報、*Angew. Chem. Int. Ed* 誌に 11 報、合計で 437 報の原著論文が発表されている。ちなみに、研究担当者 (研究代表者と主たる共同研究者) の h-index (平均値) は、ここ 1 年で 1.7 増加しており、主要メンバーの研究基礎力と国際視認性は確実に向上している。

チーム間の学際共同研究については、前述の通り 2023 年度より始まっているが、現時点で既に 2 報の原著論文が出版されている。

・末永チーム (1 期) – 町田チーム (1 期)

“Crossover between Rigid to Reconstructed Moiré Lattice in h-BN-encapsulated Twisted Bilayer WSe₂ with Different Twist Angles”, *Nanoscale* (<https://doi.org/10.1039/D4NR01863J>)

・寺西チーム (2 期) – 真島チーム (3 期)

“Resonant tunneling in a colloidal CdS semiconductor quantum-dot single-electron transistor based on heteroepitaxial-spherical Au/Pt nanogap electrodes”, *Nanoscale Advances* (<https://doi.org/10.1039/D4NA00288A>)

特許出願に関しては、第 3 回全体領域会議における各チームの発表に先立ち、JST 知的財産マネジメント推進部により知財サポートに関するセミナーを開催した。現時点で 33 件の特許出願がなされており、このうち畠山チームからは、CREST 研究開始 2 年で 11 件もの出願がなされている。

JST 共同プレスはこれまで 11 件であり、その内 1 件は文部科学省戦略的創造研究推進事業の代表的成果として文部科学白書に掲載された。また、JST が主催する新技術説明会に 1 件発表、「化学と工業」特集記事 4 報寄稿された。

各研究課題別のこれまでの進捗、および代表的な研究成果について、次ページ以降に示す。

①研究課題「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」(末永チーム)

本研究では、たとえばナノチューブの内部空間や層状物質の 1nm 以下という極めて狭いすきまに物理的あるいは化学的方法を用いてアルカリ金属や金属塩化物などを整列させ、必要に応じてさらに光・熱・ガスなどを使った反応を利用して、新しい低次元物質を合成する。このように、ナノ空間を用いた新物質の創製を、分子・原子レベルでの電子状態計測手法や、二次元材料の高効率な転写技術、構成単位ごとに光学特性・輸送特性の測定法の開発と並行して進めている。*Nature*(2 報)、*Nature Materials*、*Nature Communications*、*Nature Electronics*(2 報)をはじめトップジャーナルに論文が発表されており、きわめて順調に研究が進展している。

グラフェンの層間に高密度でアルカリ金属を挿入する技術を開発し、従来のおよそ 2 倍のアルカリ金属が充填可能となった。これまでのグラファイトインターカレーションで定説とされていた説を覆す内容であり、高容量二次電池の開発が期待される。また、高エネルギー分解能 EELS により、原子の振動エネルギーから ^{12}C 、 ^{13}C 同位体を原子レベルで識別・可視化することに成功している(*Nature*, 2022)。EELS 検出器の分解能向上についても、順調に成果が得られている。



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

研究代表者: 末永 和知(大阪大学 教授)

主たる共同研究者: 吾郷 浩樹(九州大学 教授)、中西 勇介(東京大学 准教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

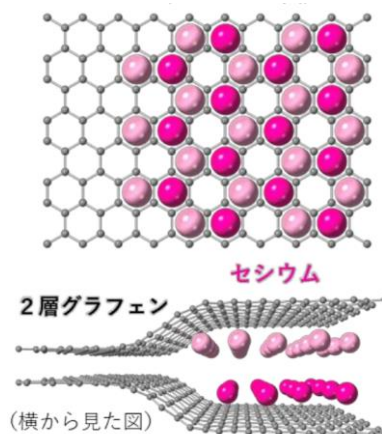
- ・グラフェンの層間に高密度でアルカリ金属を挿入する技術を開発
- ・グラフェン層間には単層のアルカリ金属しか充填できないと広く認識されており、各層が完全に充填された状態が理論的な充電極限と考えられてきたが、今回はおよそ2倍の充填が可能で2層アルカリ金属構造がグラフェン層間に安定に存在することを実験的に突き止めた
- ・高容量二次電池の開発に期待

研究成果とインパクト

- ・過去100年の歴史のあるグラファイト層間物質の研究においても、予想されていなかった高い充填率のアルカリ金属稠密構造を実現
- ・グラフェン電極を用いることで、二次電池の電気容量を最大2倍にできる可能性を示唆
- ・原子レベルで制御されたエネルギー材料開発の実例

今後の展開等

- ・電気自動車や通信機器に向けた2層～少数層グラフェン電極による大容量二次電池の開発
- ・充電・放電など実際のバッテリー機能の原子レベル解析が可能に
- ・その場観察によるバッテリー性能劣化の原因解明など、エネルギー材料開発における基礎研究にも貢献



二層グラフェン中のアルカリ金属(セシウム)の高密度充填モデル *Nature Comm誌* (2024)

図3 末永 T「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」

②研究課題「超原子を基盤とする階層性ナノ物質科学の創成」(佃チーム)

本研究では、独自の精密化学合成・構造解析・理論計算の手法を総動員して、新しいナノ物質科学の学術基盤の構築を目指している。まず、多彩な構造因子を原子精度で規定した超原子群を創製し、基礎物性との相関を体系化する。次に、超原子分子の合成技術を開発し、その結合論・反応論・物性論を打ち立てる。さらに、超原子を次元性と対称性を制御しながら配列・集積化する技術を開発し、超原子の協同作用による新しい物性を探索する。

正 20 面体 Au_{13} 超原子をプラットフォームとし、その中心原子を異種原子 M ($M=\text{Pd}$, Pt , Rh , Ir) に置き換えた一連の配位子保護超原子正 20 面体型 MAu_{12} を系統的に合成するとともに、様々な配位子を位置・個数選択的に導入する技術を開発、得られたクラスターの発光効率や光触媒性能の向上に成功している。また極細金ナノロッドと Ag^+ の反応により Ag の単原子層コーティングを実現し、光学特性の変調に成功している。金・銀超原子のライブラリーをさらに拡充し、部分的な融合や規則的な集積化の技術を確立してゆくことで、超原子をナノスケールの人工原子とした、階層横断的な新しい物質化学の創出が期待される。



超原子を基盤とする階層性ナノ物質科学の創成

研究代表者: 佃 達哉 (東京大学 教授)

主たる共同研究者: 中嶋 琢也 (大阪公立大学 教授)、原野 幸治 (物質・材料研究機構 主幹研究員)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫 (九州大学 主幹教授)

研究概要

金属原子の集合体である超原子を機能性人工元素と捉え、下記の課題に取り組むことで、新しいナノサイエンスの学術基盤の構築を目指しています。(1) 際立った基礎物性をもつ超原子群を原子精度で創製し、周期表として体系化、(2) 超原子同士が部分的に融合した超原子分子の合成技術を開発し、特異な物性の探索、及び超原子の結合論・物性論を構築、(3) 超原子を精密に配列・集積化する技術を開発し、超原子の協同作用による新しい物性の探索。

研究成果とインパクト

金・銀超原子を原子精度で系統的に合成する技術を開発し、幾何・電子構造を評価し、発光特性や触媒性能との相関を明らかにしました。これらの成果を通して、超原子の特異的な物性・機能の発現機構に基づいた合理的な設計指針を提示しました。また、超原子を構成単位とする擬似的な分子や集積体などの高次構造体の構築技術や観測技術の開発に成功しました。

今後の展開等

金・銀超原子のライブラリーをさらに拡充し、部分的な融合や規則的な集積化の技術を確立することで、超原子をナノスケールの人工原子とした階層横断的な新しい物質化学の創出につなげたい。

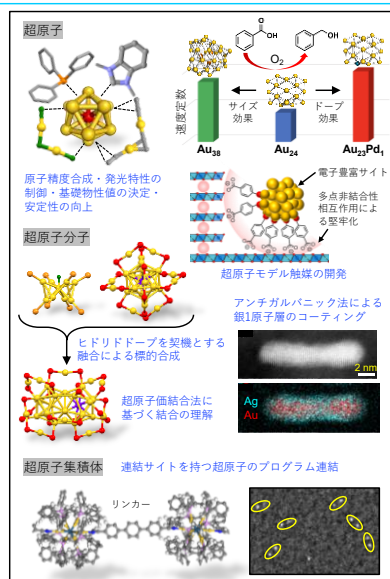


図4 佃 T「超原子を基盤とする階層性ナノ物質科学の創成」

③研究課題「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」

(廣田チーム)

サイズと構造が均一であるタンパク質を自由自在に集積する技術の開発は、機能性タンパク質を化学分子とする構造体構築につながることから、ナノ化学における新しい研究分野への発展が期待できる。本研究では、研究代表者が実施してきた 3D ドメインスワッピング (3D-DS) の研究をさらに発展させ、3D-DS によるタンパク質超分子の形成機構や 3D-DS を利用する自在技術の開発、新しい抗体酵素の開発など、3D-DS の基礎から応用まで実験と理論の包括的な研究を行い、3D-DS によるタンパク質自在配列の基盤学理を創成するとともに、革新的医薬品の開発を目指している。3D ドメインスワッピングを示す抗体軽鎖の可変領域の 4 量体の単結晶 X 線結晶構造解析に成功し、原子レベルでの立体構造とその性質を明らかにしている。(Nature Communications, 2023)。helix-loop-helix モチーフの二次構造変化を *in silico* で DS に結び付けるヘムタンパク二量体の設計と合成を行い、実際に X 線単結晶構造解析を行っている。2 種の helix-loop-helix モチーフを有する 2 種のタンパクのヘテロ dimer 形成という形で、3D-DS 概念が一般化されつつある。



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

研究代表者: 廣田 俊(奈良先端科学技術大学院大学 教授)

主たる共同研究者: 重田育照(筑波大学 教授)、一二三 恵美(大分大学 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

4量化する抗体軽鎖の会合挙動を調査し、3Dドメインスワッピングで会合した抗体軽鎖の立体構造を初めて原子レベルで特定することに成功した。4量化には疎水性相互作用が大きく寄与していることが示され、これらの情報は抗体の会合を防ぐことに役立つ。また、この抗体軽鎖は、3Dドメインスワッピングにより4量体で存在するときのほうが単量体として存在するときよりも2次構造量が多く、安定であることが示唆された。

研究成果とインパクト

本研究により得られた知見は、新規抗体医薬品の開発に役立つ。また、化学修飾やタンパク質融合など、抗体を多量化して機能化させる手法はいくつか存在するが、本研究の3Dドメインスワッピングでは、他の分子を用いずに抗体を多量化することができ、機能性抗体を創製する新しい方法として注目される。

今後の展開等

- ・同じ戦略目標のさがけ領域の研究者と連携し、完全抗体での会合体状態を確認し、本現象の一般性を調査する。
- ・抗体の可変領域を自由自在に配置する新しい分子基盤を創出し、特許出願を目指す。

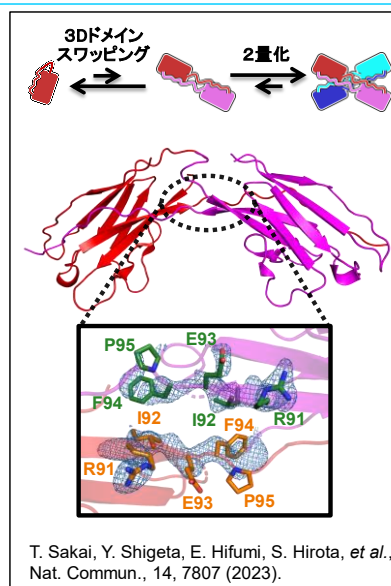


図5 廣田 T「3D ドメインスワッピングを利用したタンパク質の自在配列と機能化」

④研究課題「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」 (町田チーム)

本研究では、ファンデルワールス複合原子層における隣接原子層間のツイスト角度を精密に制御して、原子層の配列や配向(ツイスト角 θ)を自在に配列する van der Waals(vdW)積層技術を開発している。レーザー角度分解光電子分光(ARPES)技術と組み合わせてこれらのバンド構造を直接的に決定し、 θ と層数に対する物性相図の構築ならびに新規物性の創発を狙っている。単原子層 WTe_2 同士をツイスト角 0° および 180° で接合した二層 WTe_2 において、ARPES によるバンド構造観察の結果、対称性の変化がスピン分裂の有無を支配していることを明らかにし、vdW 積層を利用した対称性エンジニアリングという、物性探索の新しい手法を提案・実証している。ポリ塩化ビニル膜を用いた pick-and-flip 法という独自の原子層転写技術も開発し、マニピュレーション技術として特許化を進めている。これまでに、ツイスト角度を自在に制御して二次元物質を積層する技術はほぼ確立されたと評価できる。複数量子遷移金属ダイカルコゲナイド WSe_2 から二重量子井戸構造に相当するファンデルワールストーンネル接合構造(単層 $\text{WSe}_2/\text{h-BN}$ /数層 WSe_2)を作製し、共鳴トンネル電流ピークを観測している。巨大な負性微分抵抗(NDR)を伴う電流ピークが観測され、vdW 積層マテリアルを利用したサブバンドオプトエレクトロニクス応用の可能性が拓かれつつある。



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

研究代表者: 町田友樹(東京大学 教授)

主たる共同研究者: 石坂香子(東京大学 教授)、笹川崇男(東京科学大学 准教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

複数量子遷移金属ダイカルコゲナイドのサブバンドを利用して、二重量子井戸構造による共鳴トンネル効果を観測した。負性微分抵抗(NDR)が観測され、ファンデルワールス自在配列によるサブバンドエレクトロニクス応用の可能性を拓く基盤となる点で意義が大きい。二次元マテリアルを利用した負性微分抵抗素子として最大値となるピーク/バレー比(PVR)を実現した。

研究成果とインパクト

二次元マテリアルを利用したNDR素子としては最高値のPVR値が実現できた。既存マテリアルのIII-V族半導体を用いたNDR素子の世界最高値と比較してもほぼ同レベルのPVRに達しており、今後の最適化でさらなる向上が期待できる。

今後の展開等

・知財戦略を検討するとともに、国内共同研究/国際共同研究への展開も活用しながら素子応用への道程を拓くことを検討する。

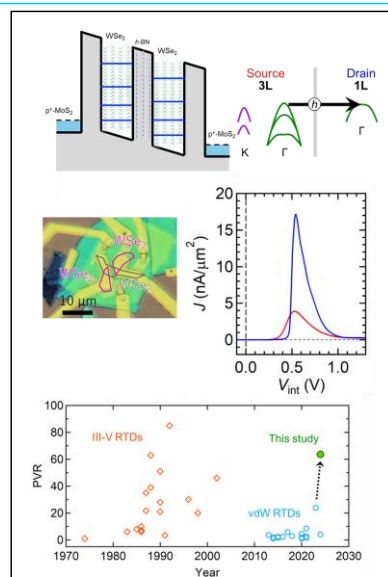


図6 町田 T「原子層のファンデルワールス自在配列とツイスト角度制御による物性の創発」

⑤研究課題「単層 CNT に基づく一次元ヘテロナノ構造の制御合成と物性・機能設計」

(丸山チーム)

単層 CNT と同心状に窒化ホウ素ナノチューブや W や Se 由来の遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) などの異種原子層を形成した新奇一次元ヘテロナノ構造における原子層の順序・配列・配向を自在に制御する合成技術を確認し、超高分解能電顕・顕微分光・物性シミュレーションにより、原子層配列と特異な物性の関係を明らかにするものである。MoS₂、WS₂、NbS₂ などの、多彩な TMDC において 1D ナノチューブ (NT) の合成、ならびに、MoS₂-WS₂、MoS₂-MoSe₂、MoSe₂-WS₂ などの 1D ヘテロジャンクション NT の合成を達成している。また合成一次元単相 CNT のテンプレート外周に BN-NT (窒化ホウ素ナノチューブ)、さらに MoS₂ (二硫化モリブデン) ナノチューブを形成させた CNT@BN@MoS₂-NT において、BN 層を隔てて CNT と MoS₂ 層間にチューブ間の励起子カップリングを観測するなど、特異な構造に基づく特異な光化学的特性を見出している。また、CNT/BNNT/MoS₂NT 積層一次元ヘテロナノチューブを用いて作成したダイオード素子において整流効果を確認するなど、一次元ヘテロナノ構造体における応用の端緒となる成果を上げたことは優れた進捗として評価できる。確立した一次元ヘテロ構造体の調製技術に関わる研究基盤の上に、多様な合成ライブラリーの拡張と、特異な光学、電子物性の創製に基づいたナノ素子としての応用展開が期待される。



単層CNTに基づく一次元ヘテロナノ構造の制御合成と物性・機能設計

研究代表者: 丸山 茂夫 (東京大学 教授)

主たる共同研究者: 末永 和知 (大阪大学 教授)、井ノ上 泰輝 (大阪大学 助教)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫 (九州大学 主幹教授)

研究概要

化学気相成長法による高品質の一次元 (1D) ファンデルワールス (vdW) ヘテロ構造を2020年に報告して以来、同様のヘテロ構造に関する論文が数多く出版されているが、その多様性は限られていた。本研究では、同軸の1D vdWヘテロ構造において、元素が一方のみ異なる軸方向ヘテロナノチューブ (MoS₂-WS₂およびMoS₂-MoSe₂ナノチューブ)、さらに遷移金属とカルコゲンの両方が異なるヘテロナノチューブ (MoSe₂-WS₂ナノチューブ) の合成に成功した。

研究成果とインパクト

上記の成果は一次元ヘテロ構造における元素調整の可能性を示すものである。これらの構造は、現在の一次元ヘテロ構造に関する知識を広げただけでなく、次世代のエレクトロニクスやオプトエレクトロニクスとして新たに開発された一次元ヘテロ構造に関する今後の研究の基礎を築いたと言える。

今後の展開等

・当該新規物質を軸にした国際共同研究の展開

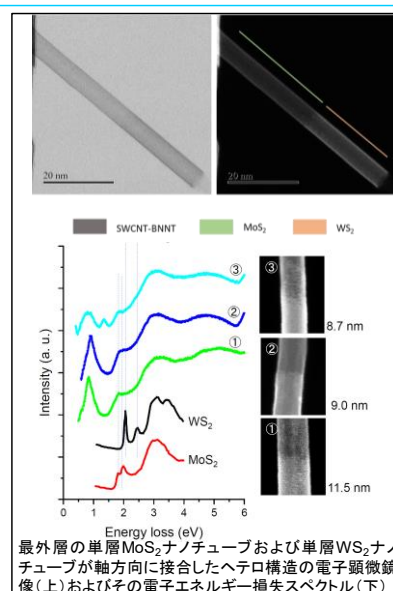


図7 丸山 T「単層 CNT に基づく一次元ヘテロナノ構造の制御合成と物性・機能設計」

⑥研究課題「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」

(村橋チーム)

本研究は、ナノ金属クラスター中の金属原子配列構造を精密かつ自在に制御すべく多座架橋配位子を活用して金属原子配列の次元性、サイズ、形状、異種金属原子配列を制御し、ナノ金属クラスターの精密分子構築を実現する。さらに、分子構造を制御したナノ金属クラスターの特異な基質捕捉能や変換挙動を解明し、触媒機能の開発につなげる。

アレーンを面配位子とした一群の金属ナノクラスターを系統的に合成し、三次元ポリアレーンクラスターの創製ならびに、配位子構造に基づく 13 核 Pd 六方細密充填(hcp) クラスターと 17 核非細密充填クラスターの金属原子配列制御、表面ならびに中心原子空孔をもつ Pd クラスター錯体の発見、Ni₄ 核シート構造の創製と高次結合の概念提唱など、研究領域の基盤構築を進めた点は優れた進捗として評価できる。従来の金属クラスター触媒にない機能発現の手掛かりが得られており、Pd₂ 核錯体を用いた光を使わないアップヒル型反応に対する新概念や、CO₂ の有効利用に資する触媒開発など、この領域での今後の研究の発展が期待できる。



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

研究代表者: 村橋 哲郎(東京科学大学 教授)

主たる共同研究者: 榊 茂好(京都大学 特定教授)、正岡重行(大阪大学 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

ポリアレーンナノクラスターを発見した。アレーンが金属ナノクラスターを包囲状に面架橋配位することを初めて見出し、最密充填型13核および非最密充填型17核パラジウムナノクラスターが生成することを明らかにした。ベンゼン環が4核金属面に面架橋配位することを初めて実証した。少数の面架橋配位子からなる配位子シェルと金属クラスターコアの幾何構造関係を初めて明らかにするとともに、理論解析により、その結合性を解明した。

研究成果とインパクト

パラジウム等の遷移金属原子を分子の中で3次元配列制御し、純粋な化合物として取り出すことは困難とされてきたが、本研究成果はこの課題の克服につながる成果である。錯体化学・有機金属化学におけるアレーンの配位構造概念を大きく拡張する成果である。有機金属型遷移金属ナノクラスターが、均一系で取り扱い可能な高い対称性をもつコンパクトクラスターとして存在することも示す成果である。

今後の展開等

・今回開発した手法を基盤とすることで、均一系金属錯体化学の発展を促す新たな学術研究展開につながる可能性を秘めている。応用面においても、ナノ金属クラスター特有の電子状態や配位環境に基づいた触媒反応の開発につながる可能性がある。

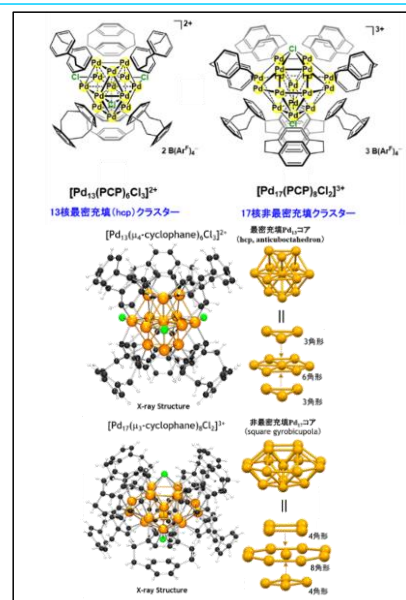


図8 村橋 T「金属原子配列構造の超精密制御に基づく分子ナノメタリクスの創成」

⑦研究課題「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」(大木チーム)

本研究は、金属クラスター錯体の構造制御と集積・配列制御に基づき、電子伝達ネットワークを構築し、CO₂から炭化水素への直接変換に代表される多電子還元反応を、電解反応を利用して促進するボトムアップ型技術の創出を目指している。まず、触媒と電子伝達物質を兼ねるクラスター錯体を、原子の三次元配列により創製する。さらに錯体を二次元配列し、電子の供給箇所と電子を用いる反応箇所の間に生じる空間的な隔たりを埋め、多数の電子が必要な反応を効率化する。これらの知見に基づき、電気エネルギーから化学エネルギーへ変換する基礎技術を構築する。

これまでの研究において酵素を模倣した金属-硫黄クラスターによる窒素還元反応を実現しており、優れた基礎研究として評価できる(*Nature*, 2022)。また、金属-硫黄錯体が、高い活性でCO₂をメタンへ直接還元できることを見出しており、JST 新技術説明会で発表している。一方で当初の目標であったPMO(Periodic Mesoporous Organosilica)を用いたクラスター錯体の定序配列と機能評価に関し、配位部位としてビピリジン有するPMOを作製し、その内部空間にMo₃S₄Feクラスターを固定化しているが、期待に反してCO₂還元活性が低く、PMOの電気伝導性の低さが課題となっている。現在、正岡ら(村橋チーム)との班間連携研究により、電解による高分子合成反応を利用してクラスター触媒を集積する手法でこの問題を克服しつつある。



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

研究代表者: 大木 靖弘(京都大学 教授)

主たる共同研究者: 中島 裕美子(東京工業大学 教授)、君島 堅一(高エネルギー加速器研究機構 特別准教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

自然界の窒素(N₂)固定は、窒素を生物が利用できる形態へ変換し供給するのに不可欠な酵素反応である。この反応の触媒は、複雑な三次元原子配列からなる金属-硫黄クラスターであるが、過去50年に渡る研究の中で、タンパク質から抽出したクラスターや化学合成されたクラスターは、いずれもN₂を還元できなかった。本研究では、酵素がどのようにN₂を捕捉し、なぜタンパク質がなければN₂の還元が起こらないのか、化学の視点から仮説を導いた上で、適切な金属-硫黄クラスターを設計・合成してN₂還元反応を達成した。

研究成果とインパクト

酵素の機能に正しく仮説を立てて分子として具現化すれば、金属-硫黄化合物が最難関の還元反応にも利用できることを示す好例であり、自然界を超える窒素固定反応を開発するための大きな第一歩にも位置付けられる。

今後の展開等

・本成果は、優れた基礎研究に位置付けられ、この先には酵素を超える触媒活性の実現に向けた挑戦が待っている。自然界を超えた暁には、持続可能な社会に寄与するN₂還元法が現実味を帯びる。工業化学反応(Haber-Bosch法)および原料の水素製造過程からは年間3億トン以上CO₂が排出される。

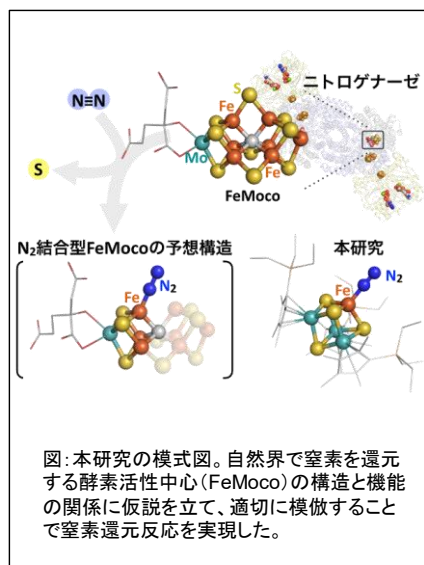


図9 大木 T「金属配列による電子伝達ネットワーク形成と触媒機能開拓」

⑧研究課題「自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築」(川野チーム)

本研究は、アミノ酸配列を人工的に設計(de novo 設計)したペプチドナノポアをリポソーム上に構築し、ナノポアを介したペプチド分子の輸送現象を実現するとともに、アミノ酸のシーケンスを、電気化学的な精密計測手法であるナノポア計測技術を駆使して決定するアミノ酸シーケンサーシステムを開発することを目的とする。

SVG28 ペプチドナノポアを用いた一分子検出においては、体積差の大きな W や G に関しては見分けることに成功している。一分子検出可能なナノポアを作る配列である SVG28 は疎水性が高く、そのままでは無細胞発現系において発現することが不可能であったため、AlphaFold2 を用いてナノポア形成ペプチドの疎水性アミノ酸側鎖を親水性に改変したナノポア形成ペプチドを設計している。その結果、無細胞発現系による合成に成功し、ポア形成能を確認している。また、簡便なペプチド合成方法として、固相合成光切断法を確立しつつある。DNA ナノ構造をテンプレートとしてペプチド鎖の会合数を制御する手法の開発にも成功するなど、今後、ポリペプチド鎖のシーケンスやプロテオームへの応用にむけた基盤技術として研究進展が期待される。



自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築

研究代表者: 川野 竜司(東京農工大学 教授)

主たる共同研究者: 臼井 健二(甲南大学 准教授)、川村 出(横浜国立大学 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

人工脂質二分子膜中で自己会合してナノサイズの孔を安定に形成する β ヘアピンペプチドを、そのアミノ酸配列を自在に設計して創出する。そのために計算機を用いた網羅的配列探索、簡易合成系の確立を行っている。

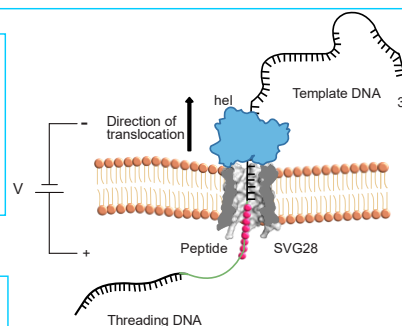
このようにして作製したペプチドナノポアを用い、プロテインシーケンス(右図)を目指した電気的一分子計測を行う。

研究成果とインパクト

これまで世界的に天然の pore-formingタンパク質を用いたナノポア計測が主流であった。最近計算機を用いた de novo設計ナノポアが作られるようになってきたが、一分子計測まで至っていない。本研究では de novo設計ペプチドナノポアの無細胞合成、およびその一分子計測に成功した。今後プロテインシーケンス応用を目指す。

今後の展開等

- ・ナノポア計測による、腫瘍マーカーや糖鎖の検出にも成功しており、JST A-stepなどに応募し、社会実装を目指している。
- ・イタリアや、オランダのグループと共同でプロテインシーケンス実現のために必要な基礎的メカニズムの解明を進めている。
- ・2024年に機械学習を用いたナノポア計測の解析法に関し特許を出願した。



本研究で目指すペプチドナノポアシーケンサ

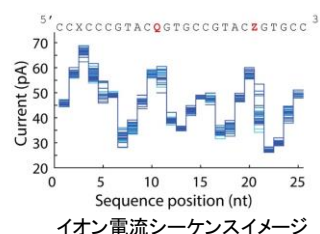


図 10 川野 T「自在配列設計ペプチドによるナノポアシステムの構築」

本研究では、(1)多元素化、複合化によってもたらされる『配置エントロピーの増大による準安定相界面の活用』と、(2)液晶性高分子の動的連続体媒体としての特徴や多分子性、配向制御によりもたらされる『安定化された異方的ポテンシャルや階層構造の周期性が連続的に変化する動的な連続体媒体の活用』を指導原理とする、エネルギーランドスケープを制御した多階固液電気化学相界面の形成と、その相間イオン拡散のダイナミクス制御に取り組む。ハイエントロピー電極活物質の合成については、充放電反応過程における不可逆相転移の抑制、体積変化の緩和などに関して成果を得ている。本課題のチャレンジは、親疎水のミクロ相分離を駆動力としたリオトロピック液晶を電極活物質上に構築した固液電気化学相界面の形成と構造・機能制御にあるが、両親媒性アルキルスルホン酸ポリイミド (ASPI-Li) が電解液の取り込みによりリオトロピック液晶性を発現し、乾燥状態と比較してリチウムイオン伝導度が 1,000 万倍向上するなど、リオトロピック液晶性高分子電解質では最も高い伝導度を示すことを見出した。また、人工不働態膜層として ASPI-Li-2 を $\text{LiNi}_{0.5}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_2$ (NCM523) 粒子にコーティングすることにより、NCM523 電極の放電速度特性が著しく向上するなど、新たな二次電池系を理論設計できる基盤ができつつある。

研究総括：君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

リオトロピック液晶性高分子電解質を人工不働態膜層として正極活物質表面に被覆することにより、拡散律速による制限を超えた、優れた急速放電特性を実現

21

⑩研究課題「原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出」(寺西チーム)

本研究は、無機物質の原子層配列制御による準安定非平衡構造ナノ粒子群の創製、ならびに、結晶相配列制御による協奏機能構造体(三次元超構造体、超格子)群を創製し、ナノ結晶相システム機能を開拓すること目標とする。ナノスケール無機物質における原子層配列制御では、イオン結晶においてカチオン交換過程におけるナノ結晶母体の特異な形状変化の発見、擬二元非平衡規則化合物ナノ粒子のライブラリー構築、イオン性結晶ナノ粒子の形状制御による超構造体の三次元構造制御に成果を挙げている。

イオン結晶ナノ粒子がカチオン交換を容易に受けることはよく知られているが、その超構造体が形状を維持したままほぼ完全にカチオン交換されることを発見しており、六角形プレート形状の $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ イオン結晶ナノ結晶中の Cu^+ を Mn^{2+} で置換したときに、一部の Cu^+ のみを置換した場合はプレートの一部が欠損したような半月形状へと変化する一方で、全ての Cu^+ を置換すると元の六角形プレート形状をもつ MnS ナノ結晶が生成するという、特異な変形プロセスが生じることを発見した(*Nature Communications*, 2024)。形状修復プロセスで様々な金属カチオンを適用し、複数種類の結晶相を含む様々な六角形プレートを得ることに成功しており、今後、ナノ粒子超構造デバイス作製が容易かつ正確に行える可能性がある。また、金光グループは主たる共同研究者の定年退職後、全メンバーが寺西グループに編入され、引続き「未踏ナノ物質群の光物性・光機能開拓」のテーマを推進し、非線形光学分光によるナノ粒子からの高次高調波発生の観測に成功している。



原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出

研究代表者: 寺西 利治(京都大学 教授)

主たる共同研究者: 立津 慶幸(名桜大学 上級准教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

六角形プレート形状の $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ ナノ結晶中の Cu^+ を Mn^{2+} で置換したときに、一部の Cu^+ のみを置換した場合はプレートの一部が欠損したような半月形状へと変化する一方で、全ての Cu^+ を置換すると元の六角形プレート形状をもつ MnS ナノ結晶が生成するという、特異な変形プロセスが生じることを発見した(上图)。形状修復プロセスで様々な金属カチオンを適用することで、複数種類の結晶相を含む様々な六角形プレートを得ることに成功した(下图)。

研究成果とインパクト

量子ドットや光触媒として使われるナノサイズのイオン性結晶の形状は特性に影響するため、特異な形状変化を引き起こす化学反応は、機能性ナノ材料設計のための重要な知見になる。本研究で発見された現象は、温和な条件でイオン結晶中の組成と形状を同時に大きく変化させる技術として、新しいナノ結晶物質群の創製に应用可能である。

今後の展開等

- ・福島国際研究教育機構の「水素エネルギーネットワーク構築に関する研究開発」委託事業(令和5~11年度)において、水分解アノード電極触媒応用を目指した複合金属水酸化物触媒へ展開する。
- ・領域内連携として、二種類の結晶相を含む六角形プレートの電気伝導特性を真島G(東京科学大学)との共同研究で明らかにする。

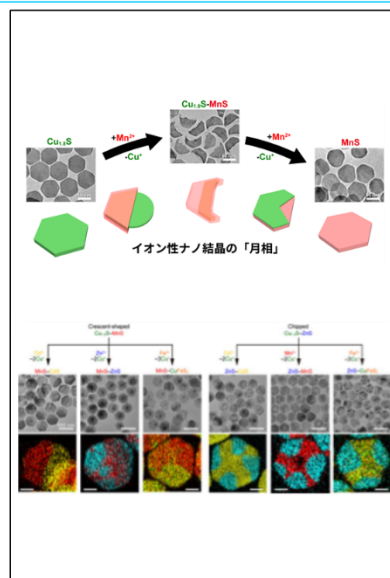


図 12 寺西 T「原子層・結晶相自在配列による未踏ナノ物質群の創出」

⑪研究課題「神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム」(松本チーム)

従来の人工ニューラルネットワークはノイマン型コンピュータを利用し、メモリとプロセッサの間でデータをやり取りするため、非常にエネルギーを消費し、推論精度の向上には時間と電力が必要なことが問題視されている。本研究は、定序配列によりエネルギーと距離を制御した「神経型機能コア」を「配向ネットワーク」に埋め込み、「神経ネットワーク型情報処理」が可能な、ニューロモルフィックな物理リザーバー・コンピューティング分子システムを創成しようとするものである。リザーバー・コンピューティングは2000年代初頭に開発された機械学習アルゴリズムであり、本研究においては閾値を持つ非線形特性とヒステリシスを示す材料(神経型機能コア)を電導性高分子やカーボンナノチューブなどで接続したネットワークを構築する。分子設計とネットワーク電気物性の相関を明らかにして演算能力指標を確立し、刺激一応答の相関を機械学習により選び取る手法の神経型情報処理を行い、文字認識や音声認識などの機能が示されている。導電性高分子に内在するグレインがボトルネックとなり、電導機構の非線形をもたらしことを見出し、「イントリンシックニューラルネットワーク」の概念を提案している。各研究担当者グループが各自の物質系の物性(非線形性)とリザーバーとしての機能を探求しているが、リザーバー・コンピューティングの機能要素であるランダムネスと、本研究領域で求める「自在配列」との整合性をとることが求められ、全体的視野から研究者間の連携を強くして推進すること、国際誌へのより活発な発表を通して情報発信に努めることが期待される。



(神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム)

研究代表者: 松本 卓也(大阪大学 教授)

主たる共同研究者: 永野 修作(立教大学 教授)、田中啓文(九州工業大学 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

生体脳に学び、神経細胞、神経ネットワーク、高次機能の3つの階層に対応する人工系の構築を目指している。神経機能の中核である非線形特性と履歴特性を分子やナノ材料で創出するキーとして「イントリンシックニューラルネットワーク」の概念と「ボトルネック形成」戦略を提示した。この考え方に基づき、分子ネットワークの構造・配向を制御し、高い情報処理機能を示す結果を得た。

研究成果とインパクト

神経型物理演算において、分子・ナノ材料で非線形特性とボトルネック形成を実現する考え方と実験的実例を示した。これまで見過ごされ、あるいは価値がないと考えられてきた「常識に挑戦」する方向である。新しい研究潮流を拓くインパクトがある。また、現在のAI技術で問題となる計算量爆発、エネルギー消費量増大に対処するために簡便なエッジ計算を実現する方法論を示した。

今後の展開等

- ・田中グループのALCA-Next 採択
- ・Application to Unconventional information processing technologies' in cooperation with JST and NWO (The Netherlands)
- ・マテリアルを用いた学習手法、センシング処理、出力部分の回路化に関する特許出願済
- ・本研究で実現した脳型の「分類タスク」から次のステップである「連想」・「関連付け」へ進めて、物質による生物らしい機能発現の研究へと進める。

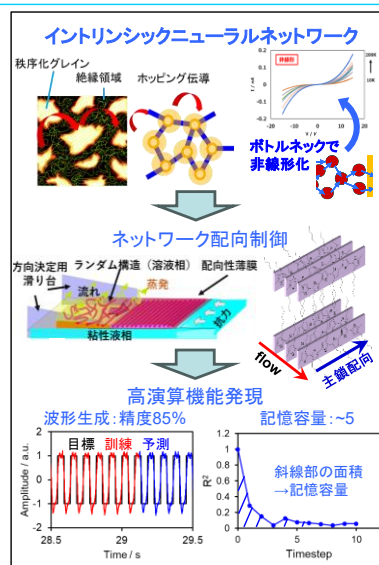


図 13 松本 T「神経ネットワーク型分子・ナノ材料システム」

⑫研究課題「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」(石田チーム)

電場・磁場・光などに対し極性応答する材料は数多く知られていたが、「力」に対し極性応答する材料は、これまで報告されていない。本研究では、研究代表者らが開発する力学極性ゲル(左右の剪断に対して異なる弾性率を示すゲル)について、理論と実験の両面から基礎学理の樹立を目指すとともに、物質やエネルギーを整流化する本ゲル特有の能力を活かし、広範な機能の実証を目指している。

シート状物質が配向配列した複合材料において、シートの並行/直行方向で剪断弾性が著しく異なることを見出し、視覚的にも大変インパクトある力学応答極性を実現している(*Science*, 2023)。線虫の一方方向性走行誘起、振動エネルギーの重力位置エネルギー変換など、様々な分野への応用展開が進められており、また同時に、数理モデルの構築など、基礎部分も掘り下げつつ進捗している。今回の材料が乱雑な振動エネルギーを一方方向の物質移動に変換しうる能力を持つことから、物質の分離、エネルギーの回収、生物行動の制御など、幅広い分野で応用されることが期待される。



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

研究代表者: 石田 康博(理化学研究所 チームリーダー)

主たる共同研究者: 奥村 大(名古屋大学 教授)、坂井 伸行(物質・材料研究機構 主任研究員)、木戸秋 悟(九州大学 教授)、武石 明佳(神戸大学 講師)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

「力」にて極性応答する初めての材料「力学極性ゲル」を開発した。斜めに配向したナノシートを内包するゲルに対し、横方向の剪断を加えた際、左右の剪断における硬さの差は実に67倍となり、あたかも「一方方向にのみ開く扉」のように振る舞う。その結果このゲルは、乱雑振動を一方振動に変換する・衝突物を非対称に反射する・線虫の集団を一方方向に走行させるなど、低秩序状態から高秩序状態を作り出す、すなわちエントロピー増大に逆らう機能を発揮した。

研究成果とインパクト

電場・磁場・光などに対して極性を示す材料の発明は、人々の日々の生活を一変させる影響を与えてきた一方、「力」に対し極性を示す材料が、これまで想像すらされてこなかった。「力」という普遍的なエネルギーを整流化する本材料には、乱雑振動エネルギーの回収・望みの方向に伝達する力をスポーツ用品・微小生物を選別するクロマトグラフィーなど、夢のある応用が期待される。

今後の展開等

・論文発表から1年の間に、6つの民間企業ならびに2つの研究機関から問い合わせがあり、3件の共同研究が現在進行中である。

・本成果を扱ったニュース動画(テレ東京BIZ YouTubeにて公開)がこれまでに53万回再生されており、科学コミュニティを超えて広く関心を集めている。

“力” に対し極性応答する初の材料



物体やエネルギーの整流化を実証した



物事の秩序を高める機能一般への期待

- ・乱雑振動からのエネルギー回収システム
- ・望みの方向に力を伝達するスポーツ用品
- ・微小生物を選別するクロマトグラフィー

図 14 石田 T「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」

⑬研究課題「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」

(塩谷チーム)

本研究では、金属イオンとコア(C、P、O 元素)・シェル配位子から成る多元素金属イオンクラスター、および単位クラスターの多次元自己融合体を対象とし、実験・理論・計測により、原子・分子の精密配列法の設計概念と合成技術を確認し、新物質群の体系化を目指している。さらに、構造に特異な物性を記述する結合・物性・反応論を開拓し、高安定クラスターを光バイオ分析に、高活性クラスターを触媒化学に展開し、物質科学の新たな局面を切り拓くことを目的としている。

金属イオンクラスターの多元素化、オリゴマー化、ポリマー化に応用できる種々の非金属元素中心クラスターや 4 種類の二量体の合成技術、ならびにその構造同定法を確認している。これらは、金属イオンクラスターの固体物性や反応性に基づく、一連の新しい機能性物質群を社会に提供できる可能性がある。また、これらの多くが長寿命発光を示すため、光バイオイメージングなどのライフサイエンスへの展開が期待されるが、炭素中心 Au-Ag クラスターの構造制御とりん光特性を活かした細胞内小器官輸送への応用について *Nature Communications*(2022)に掲載されるなど、順調に進捗している。



多元素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

研究代表者: 塩谷 光彦(東京理科大学 教授)

主たる共同研究者: 小澤 岳昌(東京大学 教授)、江原 正博(分子科学研究所 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

◆一原子エッチング法による金属イオンクラスターの精密合成と機能創成

CAu₅からCAu₅クラスターへの一原子エッチング法を確認し、CAu₅クラスターのりん光発光性の著しい変化と構造特異性、および金属錯体との反応性とその反応機構を明らかにした。また、クラスター内のC-Au結合やAu^I...Au^I相互作用について、Wiberg結合次数、原子間距離、相互作用エネルギーを比較し、金属イオンクラスターの結合論を展開した(*Nat. Commun.* 2024)。

研究成果とインパクト

従来の金属イオンクラスターの合成法は、支持配位子の化学修飾によるボトムアップ型であった。一方、本エッチング法はトップダウン型であり、ボトムアップ法では困難な、電子構造や光物性が著しく異なるクラスターの合成を可能にする。エッチング部位は反応性が高く、異なる金属や配位子の導入の基点となるため、ポスト機能化による新たなクラスター構築法が提供される。

今後の展開等

本エッチング法は一原子エッチングや異種金属の導入のみならず、二原子エッチングや二量化にも適用できる(右図下)。これらの発光(りん光、近赤外円偏光)を利用した分析法や、触媒機能の開発を進める。

東京都立大学の山添教授(溶液内構造解析)、および中国福州大学のZhen教授(クラスター合成、CPL測定)との共同研究体制を強化する。

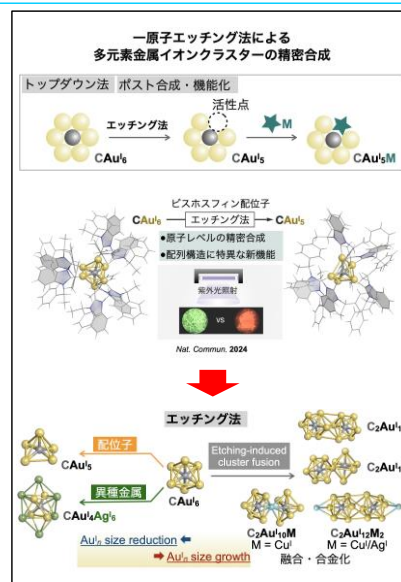


図 15 塩谷 T「多元素金属イオンクラスターの精密設計と自在配列が拓く新物質科学」

⑭研究課題「含 BN ナノカーボン分子の自在合成と配向制御」(畠山チーム)

本研究は、精密有機合成と化学気相成長法を組み合わせることで、炭素・ホウ素・窒素原子の配列が精密に配列制御された巨大 π 共役系を有する「含 BN ナノカーボン分子」を創製し、含 BN ナノグラフェンを用いた超蛍光 OLED などのデバイスを作製すること、またデバイス中における TADF 分子、発光体 BN ナノグラフェンなどの構成要素の分子配向を制御することに基づき、次世代の高性能有機光エレクトロニクスを実現しようとするものである。

既に、逐次的多重ホウ素化手法の開発による新奇な MR(多重共鳴効果型)TADF 分子の合成に成功し、また含 BN 高色純度青色 TADF 材料(DABNA-2)を用いたレーザーデバイスにおいて縮環構造を導入した誘導体(CzBNPh)を用いることによるレーザー劣化抑制効果を確認するなど、良好な研究展開を示している。*JACS* 誌、*Angew. Chem. Int. Ed* 誌にコンスタントに論文発表しており、また最近では緑色超蛍光 OLED の開発研究成果が *Nature Communications*(2024)に掲載され、特許出願も 11 件と多く、CREST 研究開始後 2 年の研究進捗は極めて高いと判断される。



(研究課題名)

研究代表者: 畠山 琢次(京都大学 教授)

主たる共同研究者: 安達 千波矢(九州大学 教授)

戦略的創造研究推進事業 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

研究総括: 君塚 信夫(九州大学 主幹教授)

研究概要

ホウ素と窒素(酸素)の多重共鳴効果を使用した熱活性化遅延蛍光材料(MR-TADF)は、半値幅の狭い高色純度の発光を示すことから、次世代のOLED用発光材料として注目を集めている。しかしながら、逆項間交差速度(k_{RISC})が十分ではなく、実用輝度(100~1000 cd m⁻²)で外部量子効率(EQE)の低下(ロールオフ)が起きるため、実用化における足枷となっている。本研究では、3つのホウ素、2つの窒素、4つ酸素原子を用いた新たな分子骨格を設計・合成し、高色純度青色発光と高い k_{RISC} を両立することに成功した。

研究成果とインパクト

1つのホウ素と2つの窒素からなる青色MR-TADF材料であるDABNA-1に、1つのホウ素と2つの酸素からなるDOBNAを2つ縮環させた、DOB2-DABNAを設計・合成した結果、 k_{RISC} を10⁶ s⁻¹まで向上させることに成功した。本材料を用いることで、濃青色発光(CIEy = 0.049)と1000 cd m⁻²における高いEQE(21.6%)を両立することに成功した。これは、これまでに報告された濃青色MR-TADF材料を用いたOLEDの3倍の値である。

今後の展開等

今後、分子構造の最適化を進めつつ、安達グループとの連携により、長寿命の超蛍光 OLEDを開発する。十分な素子寿命が得られたら企業との共同研究により実用化を進める。

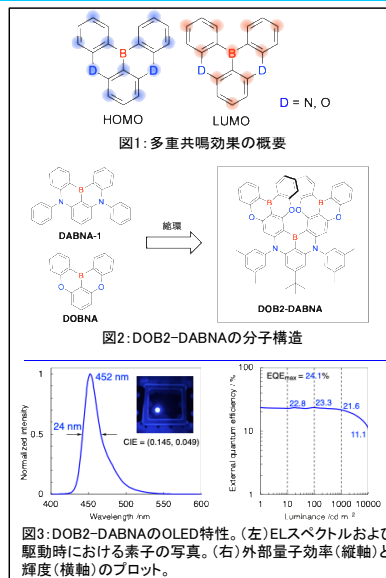


図 16 畠山 T「含 BN ナノカーボン分子の自在合成と配向制御」

⑮研究課題「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」(真島チーム)

金属電極— π 共役分子—金属電極架橋構造における共鳴トンネル伝導をゲート電極からの外部電界により変調する「単分子共鳴トンネルトランジスタ」は、数 nm の π 共役系分子を電子が 1 アト秒 (10^{-18} s) の高速で横切るトランジスタであり、超高速動作の実現が期待される。本研究は、「単分子共鳴トンネルトランジスタ」を効率よく構築する技術を開発し、室温で作動させることを目標としている。このために、まず熱揺らぎに打ち勝つことのできる全剛直な π 共役分子をナノギャップ電極間に効率よく接続固定化し、かつゲート電極からの電界により π 軌道のエネルギー準位を変調させる技術を開発する。これまでに、無電解金めっきナノギャップ間に分子が導入された際に電流変化を、その場観察できるシステムを構築している。また、ナノギャップ間での光配向単分子架橋技術として、溶液に浸漬したサンプルに、ナノギャップ方向に平行に偏光した YAG レーザー光 (波長 1064 μ m) を照射すると、ナノギャップ間の狭い局在空間で増強する光電場により π 共役分子の長軸が配向し単分子架橋構造の形成が促進されることを見出している。また、単分子片側吸着接合素子において負性微分抵抗 (NDR) 現象を観察し、HOMO 準位が電界により分極することを DFT 計算により明らかにして、単分子接合素子における共鳴トンネル効果に起因した NDR 現象であることを明らかにしている。

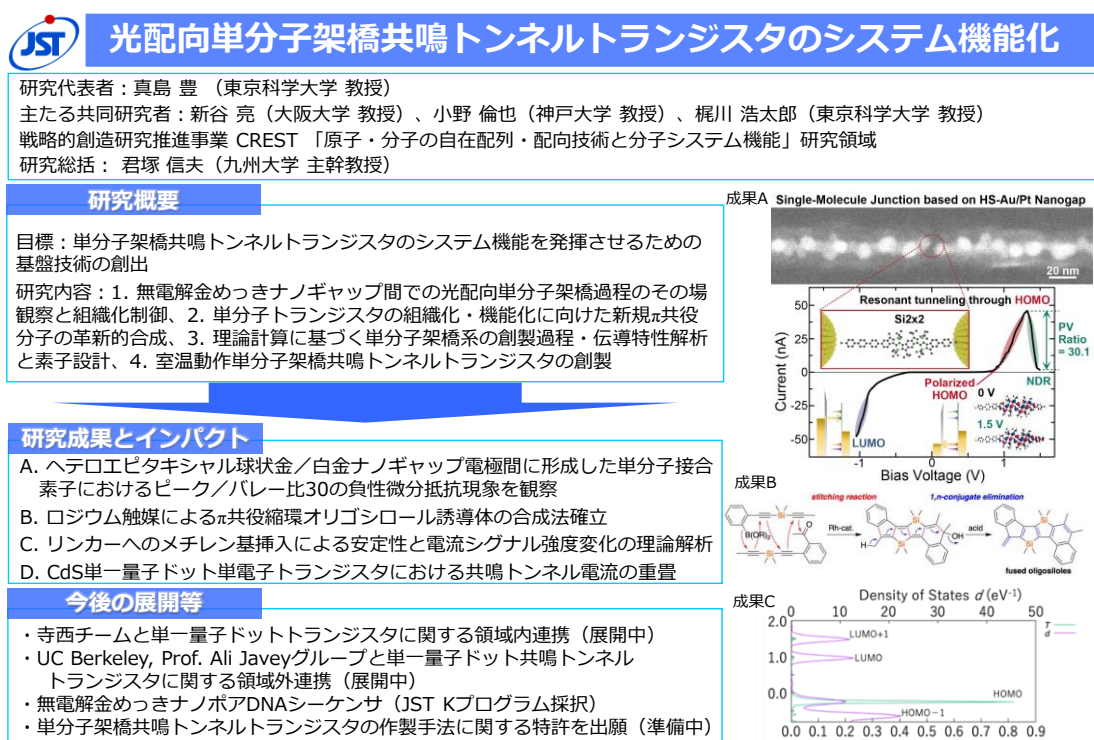


図 17 真島 T「光配向単分子架橋共鳴トンネルトランジスタのシステム機能化」

7. 総合所見

(1) 研究領域のマネジメント

本研究領域では、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、磁氣的、光学的機能や化学的機能などを“(原子)分子システム機能”と定義し、原子・分子の自在配列構造に基づく(原子)分子システム機能の創出とその相関に関する科学的知見を体系化すること、またそれによって学際的な研究領域“(原子)分子システム科学”における基盤学理の創成を図ることを目指した。原子・分子の定序配列・配向構造を制御した“モノづくり”自体がゴールでないことは、本研究領域の略称「自在配列システム」に“システム”というキーワードを含め、公募資料にも明確に宣言している。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基盤を与えるものであるが、これらの基礎的基盤技術・方法論は四半世紀内に物質科学における新しいパラダイムと破壊的イノベーションをもたらすことが期待される。

- 研究課題の募集、選考にあたっては、国際的に高い水準の研究者が率いるチームによる提案であり、(1)本研究領域の目的に適った、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、(2)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、(3)新技術が目標とされた基礎研究であって、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、(4)学際的なチームで研究者間の十分な連携によりシナジー効果が期待できる提案であること、をそれぞれの研究提案に求めた。これらの方針を領域アドバイザーにご理解いただき、その結果、これらの要件を満たす研究課題を採択することができたと考える。

- 研究領域運営においては、先ず各研究課題(チーム)の研究成果を最大化すべく、各研究チームの進捗状況を定期的に、研究領域全体会議、研究チーム別のサイトビジットならびに個別面談により調査・把握し、各チームの抱える課題や問題を早期に発見するように努めている。

本研究領域の特色として、課題中間評価年度(中間評価会の半年前)に研究総括、領域アドバイザーによるサイトビジットを実施し、目標に向けた各グループの進捗状況、チーム内の連携状況を確認するとともに、アドバイスしている。領域アドバイザーにより高所大所からの意見や様々な視点からの的確なフィードバックがなされ、産業界から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についても有用なアド

バイスが与えられている。各チームには、常にチャレンジングな研究を推奨しているが、次項において述べるように、必要に応じて研究項目の優先順位を明確にさせ、計画目標や研究方法について柔軟な見直しを促している。

- 原子・分子の自在配列技術において革新的なアイデアや技術を創出する上においては、チーム内のみならず、チーム間での研究者間のネットワークを強化し、異分野の専門家とのコラボレーションを促進することが不可欠である。本研究領域の第二の特色として、チーム間の学際融合研究の促進を重要視しており、研究総括裁量による機動研究費は、チーム間における学際融合研究の提案に対して増額配賦している。この方式によって、現在9つの共同研究が領域内で横断的に進んでおり(p.9、表3)、学際的研究の創発を促す効果が認められている。チーム間のコミュニケーションを高めることは、各チームの研究内容の深化や、新しい展開をもたらす効果のみならず、本研究領域独自のイノベーションの芽を生み出すことが期待されることから、引き続き、チーム間の学際融合研究を鼓舞してゆきたい。

- 本研究領域の第三の特色として、若手研究者を研究領域全体で育てる意識を共有している。領域会議では、各チームの若手研究者(博士課程学生、博士研究員、若手教員)が口頭発表による研究紹介とポスター発表する場を意識的かつ積極的に設け、そのアクティビティを領域内の研究者全員が共有できるようにしている。これにより、他チームの研究代表者、共同研究者が若手研究者と知己を得るとともに、世代を超えた情報交換が進んでいる。第1回領域会議から、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を認めてきた。また第5回領域会議では、チーム間共同研究、チーム内トピックスを若手研究者が発表する場としてポスターセッションを設け、さきがけ研究者から6件の発表を受け入れた。このうち鈴木博士(さきがけ3期生)と川野(CREST2期生)が2024年度からの共同研究に至っている。若手研究者を軸とする学際的なテーマの発掘はイノベーションの芽になることが期待され、本研究領域の後半では、若手研究者のアイデアに基づく論文を対象とする表彰など、若手研究者のエンカレッジに力を入れたい。

- また本研究領域においては、若手研究者のキャリアパス形成が順調に進んでおり、表5(p.11)で述べたように、准教授⇒教授6名、助教⇒准教授(講師)2名の昇任があった。若手研究者の受賞も多く、中西(末永チーム、コニカミノルタ画像奨励賞(2021)、飯島賞(2021)、若い世代の特別講演証(日本化学会、2021))、高野(佃チーム、日本化学会進歩賞(2022))、原田(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(町田チーム、日本学術振興会賞(2021))、若藤(町田チーム、Nanoscale Horizons 賞(2023))、谷藤(大木チーム、錯体化学会研究奨励賞(2022)、科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞(2024))、川村(川野チーム、日本核磁気共鳴学会進歩賞(2023))、猿山(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(寺西チーム、

Nanoscale Horizons 賞(2024))、琴岡(松本チーム、応用物理学会講演奨励賞(2022))をはじめ、各チームの博士研究員や大学院生も多く学会講演賞・ポスター賞を受賞している。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況

本研究領域で採択された原子、クラスターから生体高分子(ペプチド、タンパク質)の自在配列に至る、15 分野の研究課題は概ね当初の計画に沿って遂行され、戦略目標の達成に貢献する研究成果が着実に創出されている。既に世界をリードする研究チームは過半数以上であり、特に当初の計画を超えて発展している研究は全体の～30%とみている。

研究機関が残り一年弱となった第 1 期の 6 チームは佳境に入っており、末永チームは単色化電子源を用いエネルギー分解能を極限まで高めた電子エネルギー損失分光(EELS)により、中性子 1 つ分の重さの違いを原子の振動エネルギーの差として検出、炭素同位体原子 ^{12}C と ^{13}C のナノメートルスケールでの識別(空間分解能～約 0.3nm)に世界で初めて成功するなど(*Nature*, 2022)、高分解能 EELS 技術が様々な材料の同位体分布測定に展開されつつある。ナノ空隙を利用した新物質創製テーマにおいても、グラフェン層間にアルカリ金属が六方最密充填型の二層構造が安定に存在することなどを見出し、科学技術イノベーションに大きく寄与する研究成果が得られている。

丸山チームは単層 CNT 上に BN ナノチューブ(BNNT)や遷移金属ダイカルコゲナイドナノチューブ(TMD-NT)を同心円状に CVD 積層させたヘテロナノチューブにおける原子層の配列・配向制御と物性評価を進め、SWCNT@BNNT、SWCNT@MoS₂-NT、SWCNT@BNNT@MoS₂-NT などのヘテロ同心積層構造や、SWCNT@BNNT 上に WS₂、MoS₂ の 1D ヘテロジャンクション構造が得られること、また SWCNT-BNNT-MoS₂NT ヘテロ接合が整流効果を示すことを見出している。

町田チームはツイスト角を制御した 2D ファンデルワールス複合原子層のハイスループット合成と角度分解光電子分光(ARPES)によるバンド構造の直接決定・物性評価を進めている。単原子層 WTe₂同士をツイスト角度 0° および 180° でファンデルワールス接合したツイスト二層 WTe₂において、対称性制御に基づくバンド構造の変調に成功し、ファンデルワールス積層における「対称性エンジニアリング」の概念を提出するとともに、h-BN/数層 WSe₂/h-BN/数層 WSe₂/h-BN のトンネル接合において共鳴トンネル電流を観測するなど、数層 WSe₂のサブバンド準位を用いたファンデルワールス二重量子井戸デバイスの端緒を拓いている。

佃、村橋はそれぞれ有機配位子、 π 共役系多座架橋配位子で保護された金属クラスターにおける金属配列構造・組成制御に取り組み、正 20 面体の Au₁₃ 超原子をプラットフォームとしてドーピングや表面修飾が電子構造や光学特性に及ぼす機構の解明、Au₂₄、Au₃₈、Au₆₉ などの新規魔法数超原子の発見と酸化反応触媒機能の開発(佃)、三次元ポリアレーンナノクラスターの発見と面架橋配位子の環サイズに依存した *fcc*, *hcp* 金属(Pd)配列構造制御、原子空孔ダイナミクスの解明とオレフィンのアップヒル異性化触媒機能の開発(村橋)など、新しい原子配列制御手法の開拓とその制御に基づく構造—物性機能の相関理解が進展している。

廣田チームはタンパク質の 3D ドメインスワッピング(DS)によるタンパク質の自在配列と機能性タンパク質超分子の創製を目指し、ヒトヘモグロビンや抗体軽鎖の 3D-DS 構造を X 線結晶構造解析により初めて明らかにしたが(*Nat. Commun.*, 2023)、3D-DS により得られる二量体の安定化は最適条件の探索と分離技術が主であることから、本戦略目標に沿って 3D-DS に基づきタンパク質の 4 次構造を自在に作製する一般的手法の開発も進めた。その結果、深層学習を利用したタンパク質 2 量体の普遍的なコンピュータデザイン手法が開発され、3D-DS に基づく種々のヘテロ二量体がより効率的に得られるとともに、熱安定性の向上などの特徴が明らかにされつつある。

第 2 期、第 3 期のチームについても(原子)分子の自在配列制御技術とシステム機能という高次概念をそれぞれ探索しており、*Nature*(末永チーム 2 報、大木チーム)、*Science*(石田チーム)、*Nature Commun.* (末永チーム、廣田チーム、畠山チーム、寺西チーム、塩谷チーム)、*Nat. Electron.* (末永チーム 2 報)をはじめ高インパクト国際誌への論文発表が続いている。

寺西チームは、従来合成されていない準安定非平衡構造の創製を、結晶系が保たれるカチオン交換反応を利用して進めており、六角形プレート形状の $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ ナノ結晶中の Cu^+ を Mn^{2+} で置換するプロセスで、半月形状と六角形プレート形状の特異な動的変形プロセスの存在を発見している(*Nat Commun.*, 2024)。また三元素からなる規則合金ナノ粒子の構造形成過程において、元素間相溶性が反映されることを見出すとともに、PtCoNi 系合金ナノ粒子が高い酸素還元触媒特性を示すことを実証し、企業との共同研究で、固体高分子形燃料電池(PEFC)への搭載について検討が進みつつある。

畠山チームは、タンデムボラ Friedel-Crafts 反応を基盤として様々な原子配列の含 BN ナノグラフェン骨格を構築し、従来材料の限界を超える色純度と吸光度($\text{FWHM} < 0.10\text{eV}$, $\epsilon > 10^5 \text{ Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$)を持つ青・緑・赤色の最終発光分子(Terminal Emitter: TE)を開発、安達グループの TADF 分子と組み合わせた超蛍光 OLED において緑色と赤色について実用可能なレベルに達し、共同研究企業との検証フェーズに移る。

一方で、次の 3 チームについては、それぞれが研究領域発足時に掲げた戦略目標の達成に向かって、状況把握に即したアドバイスを適切に行う予定である。

大木チームはクラスター錯体の配列化による多電子反応の高効率化を電解 CO_2 還元結び付ける提案で採択され、メソポーラス有機シリカ(PMO)への Mo-Fe-S クラスター錯体の固定化・配列化を進める計画であったが、Fe-S 錯体固定化 PMO は、 CO_2 還元にはほとんど活性を示さなかった。現在は村橋チームの正岡らとのチーム間共同研究でカルバゾール系電解高分子に鉄-硫黄クラスターを固定化する系にシフトし、良好な結果が得られつつある。一方、アモルファス高分子は自在配列の要素が希薄であるため、当初の構想であるクラスター配列の精密制御に基づいて多電子反応を促進する方法論の開発に期待している。

是津チームは、多元素ハイエントロピー化や複合アニオン化を基盤技術とした「準安定相界面の活用」に関する研究を進め、 $\text{LiNi}_{0.8}\text{TM}_{0.2}\text{O}_2$ 化合物において Li 脱離に伴う C 軸の格子定数変化の抑制効果、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の進展

がみられるが、様々な組成の物質がやや各論的に進められている印象である。是津チームの特色は、当初掲げられた固-液電気化学相界面の構造・エネルギーランドスケープ制御と、相間イオン拡散ダイナミクス制御技術の開発であることから、準安定層界面の制御、液晶高分子イオンチャネルの配向性や連続性の自在制御を目指す独自の展開を期待している。

松本チームは材料科学に立脚した物理リザーバー計算の提案であり、導電性高分子薄膜の導電性グレイン/ボトルネック構造が非線形特性をもたらすなどの基礎的知見が得られている。有機機材料を用いるリザーバー計算に関する国内での研究例は少ないが、海外ではウェアラブルデバイス・センサーへの開発も進んでいる。物理リザーバー・コンピューティングに自在配列の概念を導入した研究を着実に進めるとともに、その意義と新規性を、性能指標も含めて明確にすることが期待される。

全体的には、本研究領域全体で各チームの進捗状況を共有し、意見交換や研究交流を深める中で、チーム間の学術的交流や共同研究などのシナジー効果も生まれ、多くの連携・共同研究に結び付いている。引き続き、適切なアドバイスと研究総括裁量経費による機動的な予算支援を行い、前進してゆきたい。

(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性

生命分子組織を含む全てのマテリアルは、原子・分子からナノ、ミクロ、マクロにわたる幾重もの階層構造を有し、与えられた環境の下において、これらの原子・分子・ナノレベルの組織構造がその物性やエネルギーランドスケープ、機能を決める基盤となっている。未来社会において重要性が増すと考えられる量子マテリアルを視野に入れ、マテリアル科学を大きく発展させるためには、原子・分子の配列・配向・組織化・階層構造を精密に自在制御する技術、構造や電子状態を原子レベルで精密に解析し、系のエネルギーランドスケープを制御する技術、さらにそれら組織構造やエネルギーランドスケープに基づいて高次システムとしての機能を創出する方法論が必要不可欠である。このマテリアルサイエンスの新しい基盤は、医療・エネルギー・情報をはじめとする、幅広い技術分野の展開に結び付き、我が国のサイエンスとテクノロジーに新しい潮流を生み出すことが期待される。

過去に JST のさきがけ研究領域、CREST 研究領域において「分子の自己組織化」や「超分子」をキーワードとする複数の研究領域が展開されてきたが、近年の原子レベルで構造制御された金属ナノクラスター化学や、原子配列秩序を持つグラフェン・遷移金属ジカルコゲニド(TMD)などの原子層材料の物理・工学を融合した新しいマテリアルサイエンスとして展開する意義は大きいと考え、研究分野を特定の目的に偏らせず、幅広い視野を持って設定した。

以上の観点から、金属ナノ化学、原子層物理・工学、有機化学、高分子化学から生体関連化学、タンパク質化学などの幅広い学術分野においてトップレベルの研究者が選出され、原子レベルの配列制御技術と世界最先端の観測・測定技術を駆使し、世界トップレベルの学際的研究の展開を目指せる体制となった。中間評価時点において、実際に従来では不可能であった原子レベルの新しい自在配列制御技術やその評価技術、新しい応用が生まれており、研

究領域の設定と方針は妥当であったと考えられる。本研究領域の研究成果が世界に発信され続けることによって、我が国の国際的な競争力が高まるに違いない。

(4) 科学技術イノベーション創出に向けた今後への期待、展望、課題

本研究領域において、超原子・原子/イオンクラスター(佃チーム、村橋チーム、大木チーム、塩谷チーム)や原子層レベルのナノ空間・界面を利用する新材料の創製(末永チーム)、新規イオン性結晶構造の自在構築(寺西チーム)、超タンパク質(廣田チーム)・ペプチド集合体(川野チーム)の精密合成、原子層配列制御に基づく低次元量子・ナノデバイス(町田チーム、丸山チーム)、物理リザバー・コンピューティング(松本チーム)、単分子共鳴トンネルトランジスタの開発研究(真島チーム)におけるテーマの多くは目的基礎研究のステージであり、その基礎的成果が社会実装されるゴールまでには10~30年のスパンを要すると考えられる。一方、高エネルギー分解能EELSの開発(末永チーム)は装置企業との連携により分光器、検出器の早期な社会実装が期待される。末永チーム(吾郷)、町田チームの複合原子層作製技術、ハイエントロピー電極活物質(是津チーム)、力学極性ゲル(石田チーム)、規則合金ナノ粒子による酸素還元(寺西チーム)、含BNナノカーボン光エレクトロニクス(畠山チーム)は、独自の合成技術を有しかつ優れた特性・性能が得られていることから、より短期的な社会実装に結び付く可能性が高いとみている。

本研究領域のなかで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、今後も技術経営の経験が豊かな領域アドバイザーを含む領域アドバイザーメンバー、JSTスタッフを中心に、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。また、CRESTは専門を異にするトップクラスの研究者が集うバーチャルネットワーク研究所であり、既存の知から離れた共鳴場が形成され、その創発により新しい学術の芽や既存のパラダイムを破壊しうるブレークスルーが生まれることが期待される。このために、チーム間、とりわけ次世代の主力たりえる若手研究者を巻き込んだ闊達な学際融合研究を鼓舞し続け、社会課題の解決を視野に入れた物性・システム機能の創出とそれに基づく破壊的イノベーションの萌芽を目指したい。

(5) 所感

本研究領域が発足して4年が経過した今、“自在配列システム”の名称にふさわしい研究成果が世界に発信され、各研究課題が注目される段階に至っていることを、プレス発表や、領域会議・サイトビジットにおける経過報告から感じている。本研究領域の開始当初は、コロナ禍の影響が大きく、途中からようやく対面形式での領域全体会議をスタートできたこと、またそれによってチーム間の学際連携研究がボトムアップにスタートしたことは大変喜ばしい。チーム間における若手研究者の発表機会を増やして可視化する試みは、若手にとっては鍛錬を積む機会であるが、世代を超えたネットワークの形成に繋がっており、若手研

究者が各分野のエキスパートと知己を得て、その着想に学ぶ機会が得られている。

また、本研究領域には学識ならびに研究経験が深い優れた領域アドバイザーに就任いただき、多忙な中、時間を惜しまずに積極的に協力いただけていることを深く感謝している。領域アドバイザー諸氏そして JST スタッフとの緻密な連携とともに、後半の研究展開を強く鼓舞し推進させていきたい。領域アドバイザーの負担を増やさないためには、今後の CREST 研究領域設定において、領域アドバイザーの人数をやや多めに設定することも考えられるであろう。最後に、JST における担当者ならびにスタッフには、本研究領域の運営において強力なバックアップを頂いており、ここに深く感謝申し上げる。

以上