

戦略的創造研究推進事業  
—チーム型研究(CREST)—

研究領域

「超空間制御に基づく高度な特性を有する  
革新的機能素材等の創製」

研究領域事後評価用資料

研究総括： 瀬戸山 亨

2021年9月



## 目 次

1. 研究領域の概要 .....	1
(1) 戦略目標 .....	1
(2) 研究領域 .....	6
(3) 研究総括 .....	7
(4) 採択課題・研究費 .....	8
2. 研究領域および研究総括の設定について .....	10
3. 研究総括のねらい .....	11
4. 研究課題の選考について .....	12
(1) 研究課題の選考方針 .....	12
(2) 選考結果 .....	12
(3) 選考結果の纏め .....	14
5. 領域アドバイザーについて .....	16
6. 研究領域のマネジメントについて .....	18
7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について .....	30
8. 総合所見 .....	47



## 1. 研究領域の概要

### (1) 戦略目標

「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」

#### ① 達成目標

空間空隙構造制御技術（物質を構成する元素間結合の隙間（「空間空隙」）の形状・寸法・次元及び配列等の構造を自在に設計・制御・活用するための共通基盤となる技術）により、そのもととなる物質が本来持ち得なかった革新的な機能を創出し、通常の方法では解決できない環境・エネルギー、医療・健康等における諸課題を解決するグリーン・ライフ部素材の創製に向け、以下の目標の達成を目指す。

- 選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を可能とする革新的な空間空隙制御材料の創製
- 空間空隙構造制御技術に係る技術体系の構築

#### ② 将来実現し得る重要課題の達成ビジョン

本戦略目標において「達成目標」に記載した研究成果が得られることで、その諸技術を活用した新たな機能を持った材料が創製され、幅広い社会ニーズや産業分野での課題解決に適用することが可能となる。デバイスや医薬品等の各応用分野に応じて、学术界と量産・市場化等を担う産業界との協力体制を早期から構築することにより、第4期科学技術基本計画（2011年8月19日閣議決定）に掲げられたグリーンイノベーション及びライフイノベーションの推進に向け、環境・エネルギー、医療・健康、社会インフラ等の分野から、例えば、以下の成果が事業終了後5年程度で得られることを目指す。

- ・不安定な気体を効率的に貯蔵・輸送し、かつ自在に分離・変換する技術の開発
- ・排水や汚染水、大気の浄化を高性能かつ経済的に行う分離膜の開発
- ・感知機能や有効成分の放出調整機能を備えたドラッグデリバリーシステムの開発
- ・耐震・免震機能を飛躍的に向上する空隙率制御による超軽量・高強度構造材料の開発

このほか、太陽電池・二次電池等のエネルギー変換材料や、半導体・超伝導等の電磁気材料、センサー・生体適合材料等の分子認識材料といった様々な分野での実用化が考えられる。

#### ③ 具体的内容

（背景） 「空間空隙」を舞台とする新しい概念へ！

近年、物質・材料の設計の自由度及び組成・構造の制御性が格段に向上し、持続可能社会の実現に不可欠な新機能を発現する物質・材料の創出が可能となってきている。この10年間の成果として、ポーラス（多孔質）材料、メソポーラス材料、カゴ状構造物質などで、特異なナノ構造を特徴とする新物質の形成法や多様な機能を引き出すシーズ技術が発掘され、

熾烈（しれつ）な国際競争の中で、技術の先鋭化が著しく進展してきた。現時点で我が国は素材産業において世界的に高いシェアを誇り、基礎的な研究も高いレベルにあるが、今後も競争力を維持できる保証はない。特に、物質・材料に対し、高エネルギー変換、超伝導、高イオン伝導、耐熱、高機械強度、軽量、生体活性、医療、創薬等に関わる新機能の発現や、飛躍的な機能向上に対する要求が世界的に高まっている中、各国に先駆けて、「界面」「表面」といった概念から歴史的に一歩進んだ「空間空隙の活用」という新しい概念の下、革新的な次世代新機能材料を開発・供給していくという戦略が今こそ求められている。

（研究内容） 「空間空隙」を活用した新機能の創出へ！

本戦略目標で提示した空間空隙構造制御による新機能材料の創製という新たなコンセプトの下、それを目指す過程で創出される多数の技術シーズを基盤とし、基礎・応用、物理・化学など、立場の異なる研究者間の意識を高いレベルで共有し、人的ネットワーク形成を促進しつつイノベーション創出を図る。具体的には、達成目標である「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を可能とする革新的な空間空隙制御材料の創製」の実現に向けた（1）技術シーズに基づく機能先鋭化の課題、及び（2）社会実装に向けた基盤的技術課題と、達成目標「空間空隙構造制御技術に係る技術体系の構築」に向けた（3）材料創製の基盤となる観察・解析技術、原理解明等に係る課題を相互に連携しつつ推進することにより、達成目標及び将来ビジョンの実現を目指す。具体的には、以下の研究を想定する。

- （1） 空間空隙制御材料の設計と合成＜機能先鋭化＞
  - ・ 空間空隙制御材料における構造及び相互作用の設計と機能発現
  - ・ 空間空隙構造を有する物質の新規合成技術開拓
- （2） 空間空隙制御材料の実装＜社会実装に向けた基盤的技術＞
  - ・ ナノからマクロへの規模拡大、高強度化、高速合成、低コスト化
- （3） 共通基盤技術の構築＜観察・解析技術、原理解明＞
  - ・ 空間空隙制御材料における物理的諸現象（物質輸送・貯蔵及び物質・エネルギー変換等）の観測・解析技術
  - ・ 計算機シミュレーション及びマルチスケール・モデリングによる空間空隙構造の合成プロセス及び構造と機能の設計・解析技術

#### ④ 政策上の位置付け（政策体系における位置付け、政策上の必要性・緊急性等）

第4期科学技術基本計画では、産業競争力の強化に向けた共通基盤の強化のため、「付加価値率や市場占有率が高く、今後の成長が見込まれ、我が国が国際競争力のある技術を数多く有している先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術、高機能電子デバイスや情報通信の利用、活用を支える基盤技術など、革新的な共通基盤技術に関する研究開発を推進するとともに、これらの技術の適切なオープン化戦略を促進する」こととされ、また、領域横断的な科学技術の強化に向け、「先端計測及び解析技術等の発展につながるナノテクノロジーや光・量子科学技術、e-サイエンス等の高度情報通信技術、数理科学、システム科学

技術など、複数領域に横断的に活用することが可能な科学技術や融合領域の科学技術に関する研究開発を推進することとされている。さらに、「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策について〈中間取りまとめ〉」（2011年7月 科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会）においては、「国際的な優位性を保持するためには、革新的な技術の開発が不可欠であることから、社会的課題を設定する際に把握可能な技術のみに重点化するのではなく、中長期的観点から、潜在的可能性を持つ技術の創出に向けた研究開発等の取組も推進すべき」とされ、課題解決に向けた重点研究開発課題である「物質材料設計及び制御技術」の一つに「空間及び空隙構造の制御」が取り上げられている。

以上のとおり、第4期科学技術基本計画に掲げられている重要課題「グリーンイノベーションの推進」「ライフイノベーションの推進」「我が国の産業競争力の強化」に向け、革新的な材料の開発が政策的にも求められているところである。

#### ⑤ 他の関連施策との連携及び役割分担・政策効果の違い

現在、我が国の材料開発関連の戦略目標としては、物質・材料の特性・機能を定める元素の役割の解明を目指す「レアメタルフリー材料の実用化及び超高保磁力・超高靱性等の新規目的機能を目指した原子配列制御等のナノスケール物質構造制御技術による物質・材料の革新的機能の創出」（2010年度戦略目標）や、「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」（2012年度戦略目標）が存在する。これら既存の戦略目標は材料組成や成分そのものを改変させて「如何（いか）に新機能を創発させるか？」といった考え方であるのに対し、本戦略目標は元素や分子間に存在する「空間や空隙（カゴ）を如何に活用するか？」といった全く異なるアプローチである。すなわち、既存の戦略目標と目的や研究内容において相互補完関係にあり、新機能創出という共通目標を掲げて異なるアプローチから推進するものである。既存の戦略目標との相乗効果により我が国の材料開発の基盤を更に強固なものとすることで、環境・エネルギー、医療・健康等の諸分野における新材料開発において革新をもたらすことが可能となる。なお、空間空隙制御材料の一つの例として触媒やエネルギーキャリア（エネルギーの輸送・貯蔵のための担体）があるが、「環境、エネルギー、創薬等の課題対応に向けた触媒による先導的な物質変換技術の創出」（2012年度戦略目標）及び「再生可能エネルギーの輸送・貯蔵・利用に向けた革新的エネルギーキャリア利用基盤技術の創出」（2013年度戦略目標）との研究成果や基盤技術の共有等の連携を図ることが求められる。

文部科学省においては、2012年度より、ナノテクノロジーに関する研究設備の全国的な共用体制を構築する「ナノテクノロジープラットフォーム」事業を開始するなど、研究施設・設備の共用や異分野融合のための環境整備を促進している。本戦略目標においては、研究の効果的推進、既存の施設・設備の有効活用、施設・設備導入の重複排除等の観点から、大学・独立行政法人等が保有し広く開放されている施設・設備や産学官協働のための「場」等を積極的に活用することが求められる。

## ⑥ 科学的裏付け（国内外の研究動向を踏まえた必要性・緊急性・実現可能性等）

空間空隙制御材料としては、ゼオライト、メソポーラス材料、多孔性金属錯体（金属-有機骨格体（Metal Organic Framework（MOF））/多孔性配位高分子（Porous Coordination Polymer（PCP））等が主要な材料群となっている。特に、近年 MOF/PCP に関係する論文数が中国を中心として世界的に増加傾向にあり、トムソン・ロイターの「Materials Science and Technology 2011」においても、3つの注目研究テーマの1つに MOF が採り上げられ、当分野に対する中国の対応について、「これらのデータは、MOF の研究が中国の研究者と中国政府にとって優先的な研究分野であることを示しており、これは恐らく、単に学術的興味のためだけでなく、エネルギー貯蔵やその他の産業応用に向けた巨大な可能性を狙ってのことだろう」と紹介している。また、同社の論文引用数に基づく分析によると、“ドラッグデリバリーやバイオセンサーへの応用に向けたメソポーラスシリカナノ粒子（Mesoporous silica nanoparticles for drug delivery and biosensing applications）”や“高秩序メソポーラスポリマーカーボン構造（Highly ordered mesoporous polymer and carbon frameworks）”が世界的に注目されているところである。

一方、我が国では、世界で初めてメソポーラスシリカの合成に成功するとともに、多孔性配位高分子（PCP）の応用可能性に 1990 年代から着目し世界的な成果を上げるなど、「空間空隙」を活用する試みは他国に先駆けて行われてきた。最近では、セメントの構成成分の一つでもあるナノサイズのカゴ状の骨格がつながった構造を有する  $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$ （C12A7、酸化カルシウム・酸化アルミニウム化合物）を活用した高活性なアンモニア合成触媒の実現が発表され、約 100 年前に確立されたアンモニア製造技術（ハーバーボッシュ法）に革新をもたらす可能性があるとして産業的にも学術的にも注目されている。また東日本大震災以降、セシウム等の放射性元素の回収・除去にゼオライト等のメソポーラス材料が着目されるなど、空間空隙制御材料による課題解決の新たな展開も期待されている。

以上のような国内外の研究動向を踏まえ、我が国としてもこれまでの学術的・技術的・人的蓄積を生かし、「空間空隙」という新しい概念の下、応用展開を見据えた基盤的研究を早急に実施すべきである。

## ⑦ 検討の経緯

国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター（JST/CRDS）が開催した「物質・材料分野」俯瞰（ふかん）ワークショップ（2008 年 12 月）及び「ナノテクノロジー分野」俯瞰ワークショップ（2009 年 8 月）において、ナノテクによる新機能材料開発の重要性が改めて確認されるとともに、重要課題として「空間空隙制御・利用技術」が挙げられた。これを受け、科学技術未来戦略ワークショップ「空間空隙制御・利用技術」（2009 年 10 月）が開催され、「新物質開発を先導する指導原理の一つとして空間・空隙を設計・制御する方法論はコアとなる重要概念であり、そのための具体的な諸技術は社会課題解決や産業競争力強化に大きく寄与する」との共通認識が得られるとともに、具体的な技術的課題の抽出や



制度設計上の課題に関する検討が行われた。上記の議論を踏まえ、JST/CRDS 戦略プロポーザル「空間空隙制御材料の設計利用技術～異分野融合による持続可能社会への貢献」が策定され、「微細な空間・空隙を設計・制御することにより、革新的物質機能を生み出す方法論」がコアとなる概念として示され、地球規模の社会的課題解決や、我が国の産業競争力強化に大きく寄与することが期待されている。

以上の議論も踏まえ、科学技術・学術審議会 研究計画・評価分科会 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会が取りまとめた「ナノテクノロジー・材料科学技術の研究開発方策について<中間取りまとめ>」(2011年7月)において、課題領域「科学技術基盤」における「物質材料設計及び制御技術」として、「空間及び空隙の制御(ナノ、マイクロ、ミリのマルチスケールのポーラス構造等で、高比強度、強靱性、選択透過性、反応性等の実現等)」が課題解決に向けた重点研究開発課題とされ、既存の組織を超えて活動を統合するような新たな枠組みが必要であるとの指摘がなされ、それ以降、継続的に議論が重ねられた。

また、総合科学技術会議 科学技術イノベーション政策推進専門調査会 ナノテクノロジー・材料共通基盤技術検討ワーキンググループにおいて、今後強化すべき技術領域の一つとして空間空隙制御材料が取り上げられ(2012年11月)、特許網構築の重要性、実用化に向けた集中的な取り組みとともに、合成・物性・相互作用等のメカニズムの理解に向け、計算科学を含む基礎的なアプローチを並行して進めることの重要性が示された。

本戦略目標は、これらの検討の結果を踏まえて設定されたものである。

## ⑧ その他

本戦略目標においては、「空間空隙」という新しい概念の下、応用展開を見据えた基盤的研究を推進することとしている。環境・エネルギー、医療・健康等における諸課題の解決のためには、空間空隙構造制御技術を軸に様々な研究領域の研究者が積極的に参入し、実質的に協働するための環境が必要となる。また、本戦略目標の成果を共通基盤技術の構築に向けて発展させていくためには、産業界との協力体制を早期から構築するなどの取組が重要である。

## (2) 研究領域

「超空間制御に基づく高度な特性を有する革新的機能素材等の創製」(2013年度発足)

### 研究領域の概要

本研究領域は、21世紀の人類社会が直面する環境・資源・エネルギー・医療・健康等の諸課題を解決するために、空間空隙を有する物質の次元、形状、大きさ、組成、規則性、結晶性、および界面を高度設計する超空間制御技術を構築し、既存材料・技術では到達困難な革新的機能素材等の創製を目的としている。

具体的には、エネルギー(原料)や化学資源の貯蔵、輸送、分離、(触媒的)物質変換、エネルギーの高効率利用、環境汚染物質の低減・除去、生活水の獲得、さらに医療・健康に関わる素材において、実現されていない“あらまほしき高度の機能・物性”の発現を目的として、物質を構成する原子・分子の配置と結合によって生じる空間空隙構造を高度設計・制御すること、すなわち、超空間制御により、十分に差異化された革新的機能素材等の創製を目指した研究開発を推進する。

研究対象は、ポーラス材料、メソポーラス材料、層状構造物質、かご状構造物質、ナノチューブ、高分子、超分子、生体分子、構造材料などの一般的な空間空隙材料に限らず、空間空隙が機能発現の場となりうる物質・材料であり、化学、物理、生物学、工学、計算科学、計測技術等の異分野間の知見を融合したチーム体制のもと、単なる基礎研究ではなく、世界でダントツの素材・製品につながる機能・物性が発現し産業化の端緒となる研究課題を推奨する。

**物質中の微細な空間・空隙構造を制御した材料の設計・利用技術**

**空間空隙制御材料とは** 物質・材料を構成する元素間結合の「すき間」の形状・寸法・次元および配列などの構造をナノ～マイクロメートルで制御することによって、バルク材料にはない新機能を発現する材料。構造、機能、相互作用を検討し、それらを組織化して新機能を創出、革新的機能材料を開発する。分離、吸着、触媒、貯蔵、イオン伝導、エネルギー変換などの機能を発揮させる。

機能・物性は構成**元素**と**構造**(結晶系、アモルファス)でほぼ決まる。

バルク材料

ナノスケールで「すき間」の制御

ナノテクの進展で制御が可能に!

元素戦略を補完する戦略

**環境・資源・エネルギー分野に強み**  
**“バルク材料にはない革新的新機能の発現”**

分離 吸着 触媒 貯蔵 熱電変換 超伝導

軽量 イオン伝導

**空間空隙制御材料**

- ・エネルギー変換: 光電、電気化学、熱電、摩擦
- ・超伝導: エレクトロニクス、電力貯蔵、送電
- ・物質貯蔵: 触媒、吸着、捕獲、輸送、電極材料
- ・反応・合成: 触媒(MOF)、反応場
- ・構造材料: 軽量、高強度、高耐久、断熱
- ・分離: レアメタルやガス、液体の分離・吸着技術

・CRDS戦略プロポーザル: 空間空隙制御材料の設計利用技術 ~異分野融合による持続可能社会への貢献~ (平成22年3月発行)

・CRDS WS報告書: 科学技術未来戦略ワークショップ「空間空隙制御・利用技術」(平成21年10月開催)

(3) 研究総括

瀬戸山 亨（三菱ケミカル株式会社 エグゼクティブフェロー／サイエンス&イノベーションセンター瀬戸山研究所 所長）

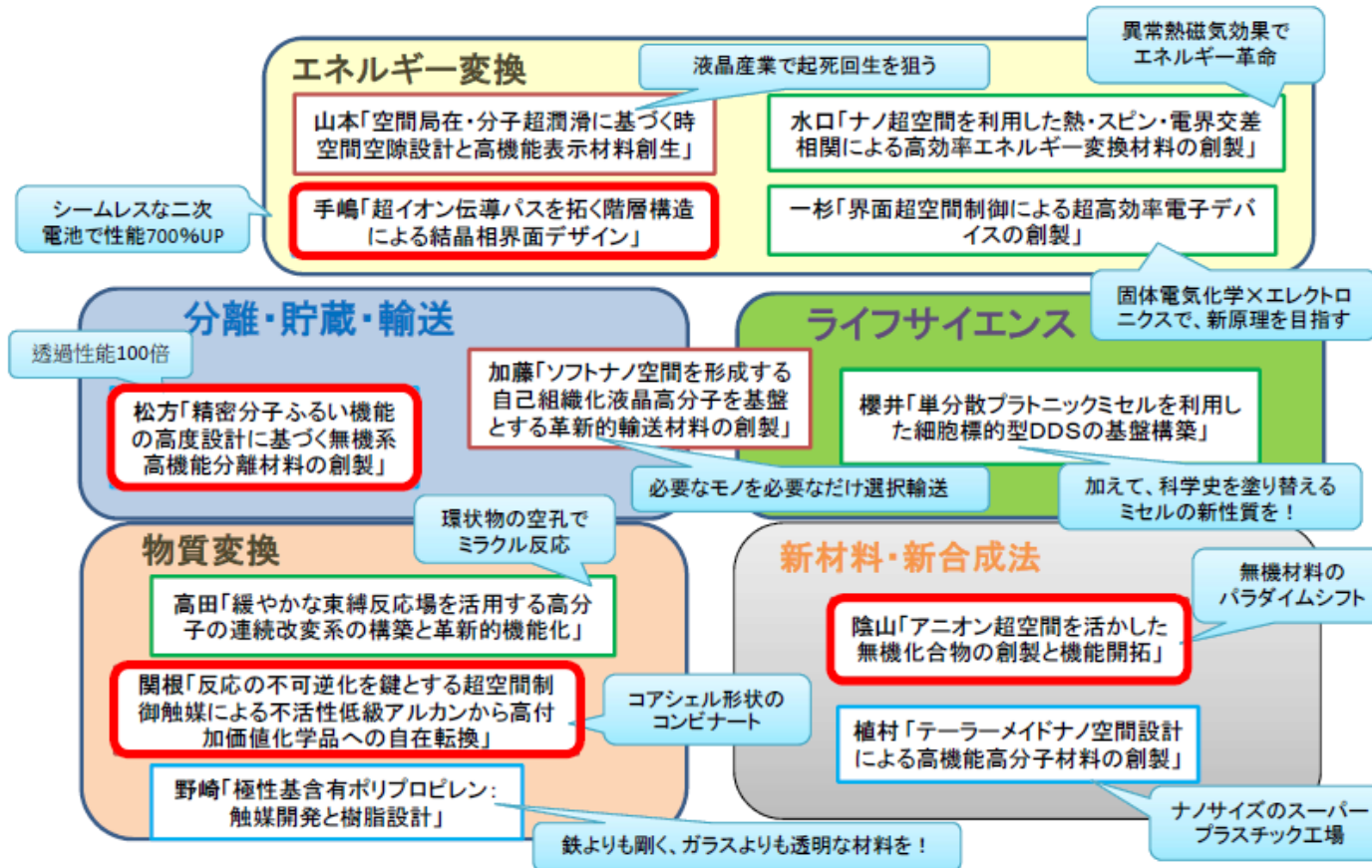
## (4) 採択課題・研究費

(単位：百万円)

採択年度	研究代表者	事後評価時 所属・役職	研究課題	研究費
2013年度 一期	植村 卓史	東京大学・教授	テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製	351
	手嶋 勝弥	信州大学・研究所長／教授	超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン	320
	野崎 京子	東京大学・教授	極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計	327
	松方 正彦	早稲田大学・教授	精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製	391
2014年度 二期	陰山 洋	京都大学・教授	アニオン超空間を活かした無機化合物の創製と機能開拓	342
	加藤 隆史	東京大学・教授	ソフトナノ空間を形成する自己組織化液晶高分子を基盤とする革新的輸送材料の創製	289
	関根 泰	早稲田大学・教授	超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換	279
	山本 潤	京都大学・教授	空間局在・分子超潤滑に基づく時空間空隙設計と高機能表示材料創生	243
2015年度 三期	櫻井 和朗	北九州市立大学・教授	単分散プラトニックミセルを利用した細胞標的型DDSの基盤構築	327
	高田 十志和	広島大学・特任教授	緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化	231
	一杉 太郎	東京工業大学・教授	界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製	320
	水口 将輝	名古屋大学・教授	ナノ超空間を利用した熱・スピン・電界交差相関による高効率エネルギー変換材料の創製	293
			総研究費	3,698

※コロナ延長による追加支援(単位：百万円)：櫻井チーム7、高田チーム3、水口チーム4.3

# CREST超空間制御ポートフォリオ



Technology起点の差異化が困難な時代 ⇔ Scienceとしての深化／差異化 : 社会実装

## 2. 研究領域および研究総括の設定について

本研究領域は、21世紀の人類が直面する環境・エネルギー、医療・健康等の諸問題を解決するために、物質を構成する原子・分子の配置と結合によって生じる隙間、すなわち、空間空隙の形状、寸法、次元、大きさ、組成、規則性、結晶性および界面を自在に設計・制御・活用する空間空隙構造制御技術によって、既存材料・技術では実現困難な新機能・新物性を発現させ、革新的機能性材料を創製することを目的とする。「空間空隙」とは、ナノ、メソ、マクロといった様々なスケールの物質で発現する機能を理解し、設計・制御する際の新しい基本概念であり、研究推進に当たっては異分野間交流による融合の促進やシナジー効果が不可欠となる。したがって、化学、物理、生物学、工学などの多数の学問的知見を融合し、さらに日本が誇る最先端の計算科学、計測技術等を活用したネットワークを形成することが必須となる。

エネルギーの効率的利用、環境負荷の低減などの10年後、20年後の社会が欲する大きな課題（NeedsではなくWants）を予見し、空間空隙構造の高度設計・制御（＝超空間制御）を切り口として、現状では達成しえない「あらまほしき物性・機能」をもつ新素材等の創製を目指して機関横断型もしくは分野横断型のチーム研究を推進する。ここでは、大きな新産業創生の足掛かりを作るためのインキュベーション期間と位置づけ、世界でダントツの素材・製品につながる機能・物性が発現する物質・材料開発に取り組むことで、産業化の端緒となる新たな科学技術イノベーションを創出することが見込まれる。したがって、CRESTを選定することは適切である。

瀬戸山亨氏は、固体触媒、無機材料設計、環境エネルギー工学の第一線の研究者として、多孔性固体酸触媒を用いた低環境負荷テトラヒドロフラン開環重合プロセスの開発など、これまで機能性無機材料の探索研究・工業化研究を精力的に取り組んできた。その業績は高く評価され、石油化学賞やグリーン・サステイナブルケミストリー賞（経済産業大臣賞）などを受賞しており、本研究領域を推進するに必要な先見性、洞察力を十分に有していると考えられる。また、触媒学会の理事・副会長、石油学会理事、ゼオライト学会副会長、文部科学省「元素戦略プロジェクト」評価委員などを務めていることから、関連分野の研究者から信頼され、適切な評価と公平な選考を行いうると見られる。さらに、(株)三菱化学科学技術研究センター合成技術研究所長・無機系機能材料研究所長を務めており、大きな新産業創生の足掛かりを作ることをミッションとする本研究領域のマネジメントを行うに適した経験、能力を備えていると考えられる。

以上を総合すると、同氏は他国の追随を許さないダントツの革新的機能材料の創製を目指したCREST研究領域の研究総括として適任であり、優れた調整能力と強力なイニシアティブを発揮すると期待できる。

### 3. 研究総括のねらい

21 世紀に入り、国際環境は大きな変動の渦中にあり、それに伴い日本も適切な戦略をもって対応しないと世界から取り残されかねない状況にある。特に経済、環境面での変化は著しく、中国に代表される新興国の経済的台頭、地球規模での大規模な気候変動(いわゆる地球温暖化)、福島第一原発事故以後の原子力政策、さらにシェールガスと呼ばれる非在来型化石資源の急速な普及は、これからの人類社会にとって適格な方針・戦略をもってのぞまないと取り返しのつかない結果につながりかねない。しかしながら、これらのことは、科学立国を目指す日本にとっては最先端科学の発展系として差異化された技術・製品を世界に発信する好機と捉えることができる。

こうした背景の下、空間空隙の高度な設計・制御、すなわち“超空間制御”は、特にエネルギーの効率的利用、環境負荷の低減といった領域において、幅広い用途・応用展開が期待できるものである。

本研究領域においては、ポーラス材料、メソポーラス材料、層状構造物質、かご状構造物質、ナノサイズ粒子、ナノチューブ、高分子、超分子、生体分子、構造材料などの一般的な空間空隙材料ばかりでなく、空間空隙設計が高い機能や物性発現に主要因として寄与する様々な物質・材料等を研究対象としている。日本の研究者による材料の構造設計・制御の先進性、自由度は既にかなり高い水準にあるが、本領域では更に具体的な高い物性・機能の発現につながる材料等の設計・制御を目指している。また、材料・素材が単独で機能を発現することは極めて希であり、多くの場合には他との組み合わせや界面設計によって機能が発現する。本研究領域ではこうした視点に立ち、現状では達成しえない“あらまほしき物性・機能”を念頭において、それにかなう新材料等を超空間制御技術によって達成すること、さらに機能・物性発現のメカニズムを解明・予測することを目指す。また、ひとつの優れた物性やひとつの機能では差異化が不十分の場合が多く、他の追随を許さないダントツの材料等を日本が発信するには「複合化」という視点が不可欠であり、実際の材料とリンクした“複合化した超空間制御”によって創出される物性・機能の理論的裏づけ、これらを実証する評価・解析技術の構築もターゲットとしている。

## 4. 研究課題の選考について

### (1) 研究課題の選考方針

新しい産業の創生には10年後、20年後の社会が欲する大きな課題、すなわち狭義の「needs」ではなく「wants」を予見することが重要である。本研究領域での言う「wants」として、

- ・エネルギー原料、化学原料等を高効率で分離・貯蔵・輸送する、さらにそれを有価な化学品に(触媒的に)変換・効率的に分離するための材料等の創製
- ・環境汚染物質の低減・除去、生活水の確保に必要な材料等の創製
- ・エネルギーの効率利用、省エネに関わるエネルギー変換材料、構造材料等の創製
- ・ライフサイエンス分野における新しい反応(機能)場の創生

等が挙げられる。しかしながら、これらに限らずさまざまな「wants」が存在しているのも事実であり、現時点で想定される「wants」に対応する課題・解答案を“超空間制御”という切り口で挑む提案も広く歓迎した。

また課題解決への取り組み方として、産業化に必要な要件についての協議が十分に尽くされるよう、原則として各課題については企業との協働が望ましいとし、本研究領域での研究開発は大きな新産業創生の足がかりを作るための incubation 期間と位置づける時間感覚で捉えることとした。

“超空間制御”は新しい概念であり、異分野間交流による融合の促進やシナジー効果が不可欠であり、化学、物理、生物学、工学などの多数の学問的視点を持ち、かつ、日本が誇る最先端の計算科学や計測技術を活用した提案を募った。

なお、研究提案書には下記5点の明示をお願いした。

- 「wants」の具体的なイメージと産業への波及効果(規模感)
- 「wants」の実現に必要な素材・部材、プロセスの性能・物性・機能の目標値の定量化
- 目標値を達成する具体的な「超空間設計」の技術戦略と研究計画(CREST期間内)
- Scientificの視点での技術戦略優位性(差異化)とTechnologyへの落とし込み手法
- 可能な範囲で、複数領域のSynergy効果の発現

### (2) 選考結果

#### ① 2013年度選考結果

初年度は、物質変換・エネルギー変換、貯蔵・分離・輸送、構造材料、ライフサイエンスの4分野を主として、空間・空隙自身の設計、配列を利用した高機能素材やデバイスにつながり、かつ産業創生に貢献できると期待される応用を強く意識した提案を期待し、合計63件の応募があった。13名のアドバイザーからの助言を受けながら書類選考で12件、面接選考で4件を採択した。最終的な採択課題は、物質変換2課題(下記1,2)、エネルギー変換1課題(3)、分離1課題(4)である。



1. メソ多孔体 (MOF) を利用した高機能性材料創生「場」の設計
2. 錯体触媒の配位子場の高度空間設計による機能性ポリマー合成とその構造材料への応用
3. 高度な結晶性・配向性制御による高性能二次電池の設計
4. 分子ふるい機能の高度設計と高透過性能を有する無機系分離膜の設計

ここでは、CREST 研究期間が終了した 5 年後に、実用化研究の段階に入れる水準に達することが期待できそうな課題を半分程度採択した。

構造材料分野の提案は、特異的な構造であるところに留まっており、それによってどのような物性・機能を発現させ、どういった実際の応用につながるかという意識の高いものが少なかった。またライフサイエンス分野の提案は、研究内容自体は素晴らしいものもあったが、本領域の「超空間制御」という基本コンセプトにどうつなげるかという点で不十分であった。これらの分野では、十分準備の上、来年度以降に再度提案するよう促した。

初年度は“答えを出す”という意思を強く打ち出し、開発色の強い課題をかなり意図的に採択したが、次年度以降はもう少し長期的でスケールの大きな課題を設定することとした。

## ② 2014 年度選考結果

2014 年度は 61 件の応募を得て、書類選考で 12 件、面接選考で 4 件を採択した。採択課題は、物質変換 1 課題 (下記 1)、エネルギー変換 2 課題(2, 3)、分離 1 課題(4)であった。

1. 不活性低級アルカンから高付加価値化学品への効率的触媒反応プロセス
2. 「アニオン超空間」の視点を導入した無機化合物の新たな機能の開拓
3. 超空間設計と分子超潤滑を活用した高機能表示材料の創製
4. 自己組織化液晶高分子を基盤とした高精度高分子系分離膜の設計

これらの提案は、企業からの具体的な「needs」を聞き取り、それを「wants」に昇華させることによって、将来の大きな事業性を予測することが出来ることに加えて、science としての進化・深化が大いに期待でき、提案内容に記載されていない科学上の発展、産業上の発展もありうるのではないかと考え採択した。

物質変換、エネルギー変換分野は、予備的な検討がしっかりしており、また 21 世紀の科学が解決すべき課題、日本の産業競争力の維持の為の課題といったものを良く整理し、それに対する科学上の「wants」を“超空間制御”という設計の概念に従って、具体的な材料・プロセスとして提案し、産学両方の評価委員から高い評価を受けたものが数多くあった。

ライフサイエンス・ヘルスケア分野からの提案は、募集開始時に積極的な応募を呼びかけたこともあり 2013 年度の 2 倍以上の提案があり最終選考にも数件残ったが、依然として“超空間制御”による場の設計が十分に説明しきれていないこと、特定の疾患の予防、検知といった 1 対 1 的な内容のものが多く、研究というよりは開発という色彩・匂いが強かったことなどの点で、採択には至らなかった。

### ③ 2015 年度選考結果

2015 年度は、3 年間を通じて最多の 69 件の応募があった。書類選考で 12 件、面接選考で 4 件を選び採択課題とした。最終年度もライフサイエンス領域から 20 件近い応募があり、また、社会的要請の故か、熱電変換材料を中心としたエネルギー変換領域からの応募も多数あった。採択課題は、物質変換 1 課題（下記 1）、エネルギー変換 2 課題(2, 3) ライフサイエンス 1 課題(4)であった。

1. 緩やかな束縛反応空間を活用する高分子の連続改変系の構築
2. 界面超空間制御技術による次世代革新記憶材料設計
3. スピントロニクスの高次元空間制御による高効率熱電変換材料の創製
4. ミセル超空間の特異的な束縛構造を利用する細胞標的型 DDS の基盤構築

これらの課題はいずれも科学的に興味深く、また将来の社会実装も期待できるものと考えられる。

最終年度、ライフサイエンス領域から 1 課題採択し、「超空間制御」ポートフォリオとしてバランスの良い課題構成となったと考えている。

### (3) 選考結果の纏め

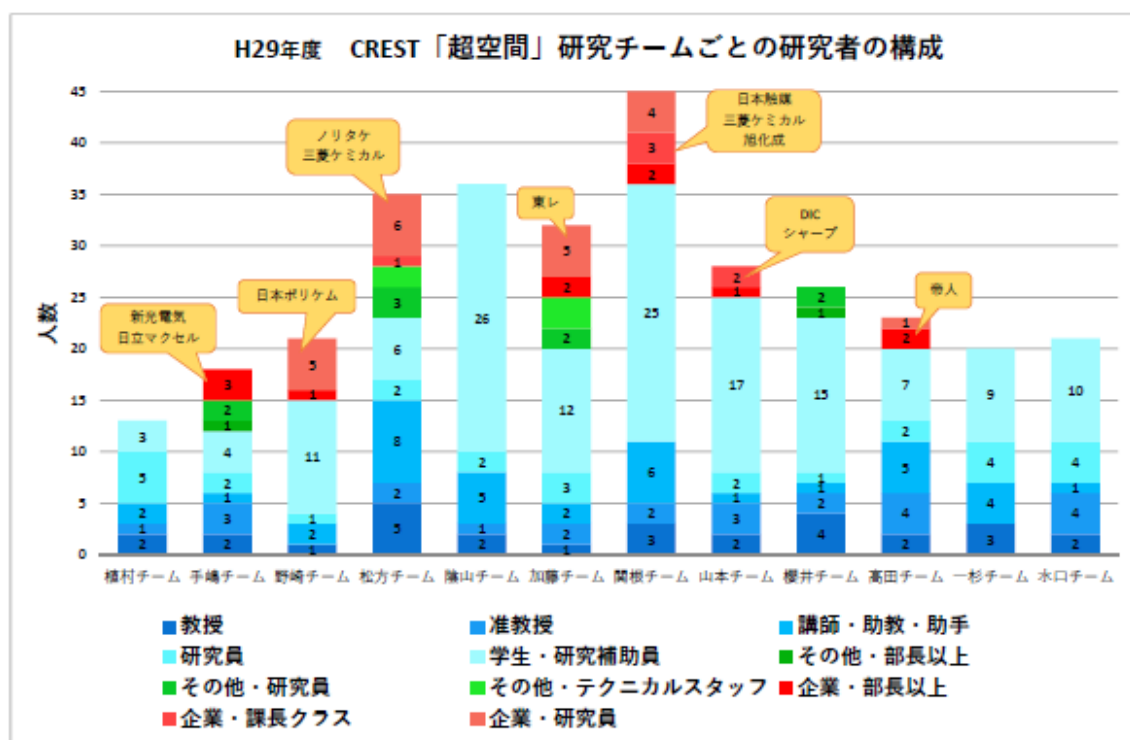
3 年間で採択した 12 課題を概観すると、エネルギー変換領域 4 課題（手嶋チーム、山本チーム、一杉チーム、水口チーム）、物質変換領域 3 課題（野崎チーム、関根チーム、高田チーム）、分離 2 課題（松方チーム、加藤チーム）、新規機能設計 2 課題（植村チーム、陰山チーム）、ライフサイエンス領域 1 課題（櫻井チーム）となっており、「超空間制御」の概念をベースにした興味深い課題を採択できた。12 課題のタイトルは以下の通り。

1. テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製（植村 T）
2. 超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン（手嶋 T）
3. 極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計（野崎 T）
4. 精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製（松方 T）
5. アニオン超空間を活かした無機化合物の創製と機能開拓（陰山 T）
6. ソフトナノ空間を形成する自己組織化液晶高分子を基盤とする革新的輸送材料の創製（加藤 T）
7. 超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換（関根 T）
8. 空間局在・分子超潤滑に基づく時空間空隙設計と高機能表示材料創生（山本 T）
9. 単分散プラトニックミセルを利用した細胞標的型 DDS の基盤構築（櫻井 T）
10. 緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化（高田 T）
11. 界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製（一杉 T）
12. ナノ超空間を利用した熱・スピン・電界交差相関による高効率エネルギー変換材料の創製（水口 T）

これら採択した課題は、企業からの具体的な「needs」を聞き取り、それを「wants」に昇華させることによって、将来の大きな事業性を予測することが出来ることに加えて、サイエンスとしての進化・深化が大いに期待でき、提案内容に記載されていない科学上の発展、産業上の発展もありうる。今後の研究の進展・発展が大いに期待できるものである。

運営については、基本的に大きな4領域（①物質変換・エネルギー変換領域、②分離・貯蔵・輸送領域、③機能性素材領域、④ライフサイエンス領域）を柱とし、これらをより太くすることを最優先とし、さらに領域間のシナジーにより新しい革新的な素材等の創製に繋げていく。他者にコピーされにくい素材であるためには、特徴ある複数の機能・特性の組合せによる「知の複合化」（ブラックボックス化）が不可欠である。組み合わせ界面を科学的に解析し、それを深化させると同時に有効な知財戦略の確立を目指す。そのためには近視眼的ではない民間企業との連携が不可欠であり、研究開発ステージに応じた研究体制の最適化に努める。

以下に、本研究領域を構成する各研究チームの構成（民間企業も含む）を示す。



## 5. 領域アドバイザーについて

領域アドバイザー名	現在の所属	役職	任期
猪俣 誠	日揮触媒化成(株)	テクニカル アドバイザー	2013年6月～2021年3月
上田 渉	神奈川大学	教授	2013年6月～2021年3月
北川 宏	京都大学	教授／理事補	2013年6月～2021年3月
黒田 一幸	早稲田大学	教授	2013年6月～2021年3月
佐々木 高義	物質・材料研究機構	フェロー	2013年6月～2021年3月
多辺 由佳	早稲田大学	教授	2013年6月～2021年3月
千葉 雅俊	田辺三菱製薬(株)	部長	2013年6月～2019年3月
土井 正男	北京航空航天大学	教授	2013年6月～2021年3月
堂免 一成	信州大学	特別特任教授	2013年6月～2021年3月
中田 道生	三菱エンジニアリング プラスチック(株)	執行役員	2013年6月～2015年3月
駒谷 隆志	三菱エンジニアリング プラスチック(株)	代表取締役 社長	2015年4月～2021年3月
中山 智弘	科学技術振興機構	室長／ フェロー	2013年6月～2021年3月
原田 宏昭	日産財団	常務理事	2013年6月～2021年3月
平野 愛弓	東北大学	主任研究者／ 教授	2013年6月～2021年3月

領域運営 アドバイザー名	現在の所属	役職	任期
浅見 正弘	日本知的財産協会	参与	2013年6月～2021年3月
軽部 大	一橋大学	教授	2014年4月～2021年3月

研究推進委員名	現在の所属	役職	任期
須崎 友文	三菱ケミカル(株)	主任研究員	2016年8月～2021年3月

### \*人選にあたっての考え方

本領域で取り扱う研究の専門領域（専門的視点）、産業化に繋げるための視点（産業的視点）、経済学や未来社会学等、社会情勢との整合性（社会的視点）から十分な議論が行えるよう、幅広い領域の専門家に領域アドバイザー、領域運営アドバイザーをお願いした。

(1) 専門的視点：(領域アドバイザー)

無機系領域 3名(北川、黒田、佐々木)

有機/高分子系領域 3名(多辺、土井、原田)

バイオ系領域 2名(平野、千葉)

触媒系領域 2名(上田、堂免)

プロセス領域 2名(猪俣、駒谷)、JST1名(中山)

(2) 産業的視点：(領域アドバイザー)

企業 4名(猪俣、千葉、駒谷、原田)

大学等 8名(上田、北川、黒田、佐々木、多辺、土井、堂免、平野)、JST1名(中山)

(3) 社会的視点：(領域運営アドバイザー)

企業 1名(浅見)

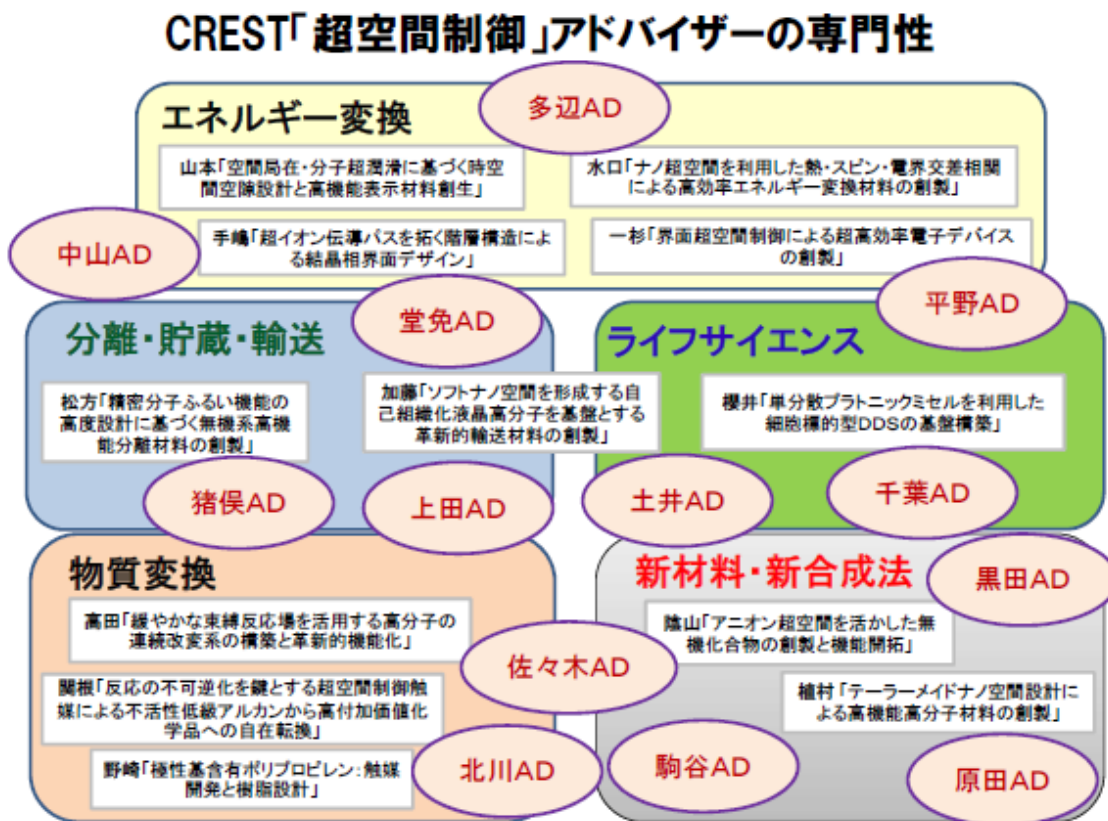
大学 1名(軽部)

(JST 1名(中山))

(4) その他

課題の推進を本格化させるにあたり、表面物理、分光解析等の専門領域補強のため、企業から研究推進委員1名(須崎)を任命した。

各研究課題に対応した領域アドバイザーの専門性を以下に判り易く示す。



## 6. 研究領域のマネジメントについて

新しい産業の創生には10年後、20年後の社会の欲する大きな課題を予見することが必要であり、本CREST領域では、産業化に必要な要件について企業と協議を進めていただきながら、CREST終了段階で「五合目」突破を目指し、新産業創出の足がかりを作りたいと考えた。

CREST研究に要求されるのは、現状では達成し得ない“あらまほしき物性・機能”を念頭において、①従来路線ではない尖ったダントツ性、②科学的論理性、③Wants性、④事業化可能性の4点。さらに、模倣できない、他社の追従を許さないという視点も重要であり、理論に裏打ちされた基礎技術の組合せ・連携、複合化により、強く革新的な技術の創成を目指した。

募集段階からなるべく企業と協働した体制で取り組むようお願いしており、結果、12チーム中7チームがチーム内に企業を取り込んで研究を進めている。また、産業界からのアドバイザーを4名を配置した。

チーム内の共同研究グループを含めて成果の展開が見えるものについては、研究代表者と協議した上で部分的にでも次のステージ、例えば、ACCELやNEDOプロジェクト等に紹介し、テンポ良く繋いでいくことを意識して進めている。

各チームより月報を提出いただき、こまめに最新状況を把握し、必要に応じて、特許出願、関連企業の研究状況確認や連携、他プロジェクトへの切り出し申請等について、検討するようコメントしている。

また、さきがけ「超空間」研究者との連携を深めるため、領域会議でのオブザーバー参加、合同キックオフ会、合同シンポジウム等を通して、バーチャルネットワーク型研究所としての研究体制をフル活用した。

研究課題の進捗管理、指導については、採択直後（10月）に研究代表者の研究サイトを訪問し、具体的な研究計画を主たる共同研究者を含めて議論し、3年後、5年後の達成目標のイメージをチーム内で共有化した。研究進捗は、月報（全体版；A4、3-4枚でチームとしての進捗状況を報告、グループ版：各グループの中間目標に対する進捗状況を3,4行で報告）で把握した。進捗状況に不安がある場合は別途サイトビジットを行い研究方向性等の詳細議論を行い、各チームで行われる研究進捗報告会へは可能な範囲で参加した。

### (1) 総括サイトビジットと各チームの研究進捗報告会

採択年度10月に全研究チームのサイトビジットを行い、その後は課題中間および事後評価に向けた事前打合せなど、必要に応じて適宜実施した。各チームの研究進捗報告会は研究代表者の主催で定期的に、主に合宿形式で行われ、研究進捗のグループ間での相互理解と今後の方向性・具体的な戦略についてCREST参加者全員で議論・共有化した。

#### ① サイトビジット、課題事後評価に向けた打合せ（合計：27回）

植村 T(3回)、手嶋 T(2回)、野崎 T(2回)、松方 T(2回)

陰山 T(3回)、加藤 T(2回)、関根 T(2回)、山本 T(3回)

櫻井 T(2 回)、高田 T(2 回)、一杉 T(2 回)、水口 T(2 回)

② 研究進捗報告会 ※主に、合宿形式で各チーム(大学)持ち回りでの開催

合計 17 回(総括・領域担当出席)

※オンライン開催含む

## (2) 領域会議

領域会議の実績は以下の通り。全 7 回(年 1 回開催)実施した。出席者は、研究総括、領域アドバイザー、領域運営アドバイザー、研究推進委員、研究代表者、主たる共同研究者、研究参加者(有志)、さきがけ研究者(有志)であり、「超空間」研究領域メンバーの交流、情報交換が積極的に行えるよう、親睦・交流会を含めて実施した(第 7 回のみコロナ感染症のため親睦・交流会中止)。

第 1 回	2014 年 4 月 15 日(火)	13:00~17:15	JST 東京本部別館	40 名参加
第 2 回	2015 年 4 月 14 日(火)	13:00~18:30	JST 東京本部別館	65 名参加
第 3 回	2016 年 4 月 8 日(金)	9:30~18:00	JST 東京本部別館	78 名参加
第 4 回	2017 年 4 月 17 日(月)	9:30~17:45	JST 東京本部別館	100 名参加
第 5 回	2018 年 4 月 18 日(水)	10:00~17:40	JST 東京本部別館	86 名参加
第 6 回	2019 年 4 月 16 日(火)	10:00~17:40	JST 東京本部別館	67 名参加
第 7 回	2020 年 10 月 5 日(月)	13:00~18:15	オンライン zoom	46 名参加

## (3) CREST・さきがけ「超空間」合同キックオフミーティング

CREST と同時に発足したさきがけ「超空間」研究領域との合同キックオフミーティングを開催した。同じ研究領域に属する研究者が集い、人的ネットワーク作り、研究課題の情報交換を目的としたもので、口頭発表、ポスター発表で議論を深めた。

□ 日時：2014 年 3 月 10 日(月) 12:50~18:00

□ 場所：JST 東京本部別館

□ 参加：研究総括、領域アドバイザー、CREST/さきがけ研究者 60 名参加

## (4) CREST・さきがけ「超空間」合同シンポジウム及び研究成果報告会

日本化学会春季年会での特別企画、コラボレーション企画として、CREST・さきがけ合同シンポジウム「超空間を舞台とする新しい化学」「超空間が拓く革新的機能と新素材」を開催した(2015 年~2019 年は毎年開催(5 回)、2020 年は新型コロナウイルス感染症のため中止、2021 年はオンラインで開催予定)。日本化学会年会会場での開催もあり、毎回 100 名以上の参加(日本化学会調査)を得て盛況であった。

① 日本化学会第 95 春季年会(2015) 特別企画

「超空間制御」研究領域合同シンポジウム~超空間を舞台とする新しい化学~

□ 日時：2015 年 3 月 26 日(木) 13:30~16:30

- 場所：日本大学 船橋キャンパス
- ② 日本化学会 第 96 春季年会 (2016) コラボレーション企画  
「超空間制御」研究領域合同シンポジウム～超空間を舞台とする新しい化学～  
□ 日時：2016 年 3 月 25 日(金) 13:30～16:40  
□ 場所：同志社大学 京田辺キャンパス
- ③ 日本化学会 第 97 春季年会 (2017) コラボレーション企画  
「超空間制御」研究領域合同シンポジウム～超空間が拓く革新的機能と新素材～  
□ 日時：2017 年 3 月 18 日(土) 10:00～16:00  
□ 場所：慶応義塾大学 日吉キャンパス
- ④ 日本化学会 第 98 春季年会 (2018) コラボレーション企画  
「超空間制御」研究領域合同シンポジウム～超空間が拓く革新的機能と新素材～  
□ 日時：2018 年 3 月 21 日(水) 10:00～16:30  
□ 場所：日本大学理工学部 船橋キャンパス
- ⑤ 日本化学会 第 99 春季年会 (2019) コラボレーション企画  
「超空間制御」研究領域合同シンポジウム～超空間が拓く革新的機能と新素材～  
(兼) CREST「超空間制御」研究成果報告会 (第 1 期)  
□ 日時：2019 年 3 月 18 日(月) 10:00～16:45  
□ 場所：甲南大学 岡本キャンパス
- ⑥ 日本化学会 第 100 春季年会 (2020) コラボレーション企画 ※学会は中止  
CREST「超空間制御」研究成果報告会 (第 2 期)  
□ 日時：2020 年 3 月 23 日(月) 13:30～15:45  
□ 場所：東京理科大学 野田キャンパス
- ⑦ 日本化学会 第 101 春季年会 (2021) コラボレーション企画  
CREST「超空間制御」研究成果報告会 (第 3 期)  
□ 日時：2021 年 3 月 19 日(金) 13:00～15:40  
□ 場所：オンライン

#### (5) 対外向け PR

日本化学会秋季事業「CSJ 化学フェスタ」では、「元素戦略」「分子技術」と連携した物質・材料の創出に関する紹介、「超空間」の切り口で拓く新しい化学分野の展開の説明を積極的に行った。

- ① 現代化学、523 号、頁 24-32、2014 での超空間研究領域の PR  
座談会「超空間を設計する化学」(瀬戸山総括、黒田一幸総括、北川進 AD)  
解説記事「空間制御の歴史」(辰巳敬教授)  
解説記事「儂い穴、頑固な穴」(小谷元子 AD)  
解説記事「ジャイロイドの迷宮」(堂寺知成 AD)



- ② 第4回 CSJ 化学フェスタ JST 特別企画  
 “元素”と“分子”と“空間”の総合制御で未来の物質・材料を生み出そう  
 日時：2014年10月15日(水) 10:00～17:10  
 場所：タワーホール船堀
- ③ 第6回 CSJ 化学フェスタ テーマ企画  
 ナノ空間材料 ～穴ぼこだらけがいい感じ～  
 日時：2016年11月15日(火) 9:30～12:00  
 場所：タワーホール船堀
- ④ JST フェア（櫻井 T1 件）  
 日時：2017年8月31日～9月1日  
 場所：東京ビックサイト
- ⑤ 新技術説明会（一杉 T）  
 日時：2019年3月8日 12:45～14:55  
 場所：JST 東京本部別館  
 参加登録数：135 件

#### (6) 特許申請とプレスリリース

権利化に必要な成果は特許出願することを推奨し、研究総括を始め企業出身の領域アドバイザーからの助言などを基に積極的に取り組んだ。また、研究機関から出願しなかった特許については JST 知的財産部門の協力を得て出願に繋げるための方針検討を適宜行った。

プレスリリースも積極的に行い、JST との共同プレスリリース案件 12 件（準備中 1 件含む）、研究機関単独でのプレスリリース 9 件となっている。

#### (7) 国内外研究機関との連携

CREST 研究の遂行にあたり、各チームとも多くの研究機関（研究者）の協力を得て進めることができた。

##### 植村チーム

##### 【国内】

- ・陣内浩司教授（東北大学）：

高分子ブレンドの同定に関する研究連携を実施。電子顕微鏡観察により、MOF を使って合成したサンプルが分子レベルで完全に混合した状態であることを解明。

- ・関修平教授（京都大学）：

細孔内での高分子の導電性評価やキネティクスの解析で連携。細孔内での特異な電子状態やキャリアの長寿命化を確認、新しいナノエレクトロニクス材料構築に向けた重要なデータが数多く収集。

## 【海外】

- Piero Sozzani 教授、Sozzani 教授（ミラノービコッカ大学（伊））：  
固体 NMR 法による MOF 細孔内に導入した高分子の構造情報を取得。Sozzani 教授グループの研究者が植村研究室に滞在し新規カーボン材料開発に向けた共同研究を実施。
- Christina Serre 教授（CNRS（仏））：  
チタニアナノワイヤー含有 MOF の提供を受け、細孔内でポリチオフェンの合成を実施。太陽電池の理想構造とされるドナー・アクセプターの分子レベルでの完全交互配列構造を構築。ナノハイブリッド体合成に関する共同研究を実施中。

## 手嶋チーム

### 【国内】

- 中山将伸教授（名古屋工業大学）： 古典力場 MD 計算， 第一原理 DFT 計算
- 幾原雄一教授（東京大学）： 電子顕微鏡観察
- 金村聖志教授（首都大学東京）： 全固体電池全般
- 杉本渉教授（信州大学）： 全固体複合負極評価
- 陰山洋教授（京都大学）： 複合アニオン化合物合成 ※CREST「超空間」
- 一杉太郎教授（東京工業大学）： 薄膜型全固体電池作製 ※CREST「超空間」
- 齋藤永宏教授（名古屋大学）： 複合アニオン化合物合成
- 産業界： 熱分解ガスクロマトグラフィー、ナノインデンテーション
- 物質・材料研究機構ナノ材料科学環境拠点(GRREN)： STEM-EELS 分析
- 長野県工業技術センター： 放電プラズマ焼結、SEM-EBSD 解析

### 【海外】

- Prof. Bruce Dunn（カリフォルニア大学ロサンゼルス校）： 電池反応解析
- Prof. Shairly Meng（カリフォルニア大学サンディエゴ校）： 電池反応解析
- Prof. Jeff Sakamoto（ミシガン大学）： 固体電解質開発
- Prof. Ju Li（マサチューセッツ工科大学）： オペランド透過型電気化学電子顕微鏡観察
- Prof. Doan Nguyen Vicky（オハイオ州立大学）： 電池反応解析、複合アニオン化合物合成
- Prof. Denis Yu（香港城址大学）： シリコン系負極、表面処理技術
- Prof. Nicolas Louvain（モンペリエ大学）： 複合アニオン化合物

## 野崎チーム

### 【海外】

- Prof. L. W. Chung（South University of Science and Technology of China）：  
反応機構の理論的解析に関する共同研究

## 松方チーム

### 【海外】

- A. Neimark 栄誉教授（Rutgers University）：  
分離膜と吸着材の分子レベルの細孔構造の精密決定に関する共同研究を実施、サブナ

ノおよびナノメートルサイズの細孔が示す分離と吸着機能のより厳密な理解を目指している。(A. Neimark 教授：マイクロ・メソ細孔の分布に関して信頼度の高い密度汎関数法の提唱者)

#### 陰山チーム

##### 【国内】

- ・複合アニオン新学術領域研究（陰山代表、阿部連携研究者）：

ネットワークを有効に利用し、CREST 課題を加速。例えば、長谷川哲也教授（東大）、木本浩司博士（NIMS）、北川俊作助教（京大）、小林玄器准教授（分子研）、石井悠衣助教（大阪府大）、前園涼教授（JAIST）、本郷研太准教授（JAIST）、越智正之助教（阪大）、山方啓准教授（豊田工業大）、桑原彰秀博士（JFCC）との研究協力、連携を実施。

- ・産業界との連携： 陰山チーム 3 社、阿部チーム 2 社との共同研究へ進展。

##### 【海外】

- ・JST 国際強化支援策を活用して、それぞれの研究者との国際連携を実施。

J. Kono 教授、E. Morroson 教授（ライス大学）、T. McQueen 教授（ジョンズ・ホプキンス大学）、C. Brown 主任研究員（米国標準技術研究所）、A. Abakumov 教授（露・Scoltech）  
J. Hadermann 教授（ベルギー・アントワープ大）

#### 加藤チーム

##### 【国内】

- ・原田慈久教授（東京大学）：

液晶ナノ高分子を用いた水処理膜材料の開発、軟 X 線を利用した水の状態解析、SPring-8 を利用した相互作用する水と材料の構造解析に関する共同研究を開始、継続中。

- ・手嶋勝弥教授・是津信行教授（信州大学環境・エネルギー材料科学研究所）：

液晶電解質を用いたリチウムイオン二次電池に関する共同研究を開始、継続中。

- ・瀬川浩司教授（東京大学）：

液晶電解質を用いた色素増感太陽電池開発に関する共同研究を実施中。

- ・産業界との連携：

液晶膜による分離や液晶電解質に関して複数の企業と共同研究を実施中。

#### 関根チーム

##### 【国際】

- ・Prof. Truls Norby (Oslo University、ノルウェー)： 関根チーム学生が常駐
- ・Prof. Emiel Hensen (Eindhoven 工科大、オランダ)： 関根チーム学生が長期滞在
- ・Prof. Yushan Yan (University of Delaware、米国)
- ・Prof. Ye Wang (Xiamen University、中国)
- ・Prof. Jeong Gil Seo (Myongji 大学、韓国)： JST 国際強化支援策のもと 1 年滞在
- ・Prof. J. W. Bae (成均館大学、韓国)： 椿グループにて Sabbatical 滞在
- ・Prof. Xin-gang Li (天津大学、中国)：

触媒に関する共同研究を実施、共著論文を執筆・掲載。

・Norby 教授 (オスロ大) :

ノルウェー政府に国際共同研究を申請、2 件採択され進行中。

・Seo 教授 (Myongji 大、韓国) :

韓国政府に国際共同研究を申請、現在審査中。

#### 櫻井チーム

##### 【国際】

- ・2018 年イエナ大学 (Prof. Dr. Ulrich S. Schubert、高分子学会副会長) から招待を受け、ナノメディシン物性評価とプラトニックミセル集中講義のために 3 か月滞在。
- ・同大学へ博士研究員を派遣、高分子ミセルでのプラトニックミセル創生研究を実施。イエナ大との共著論文は 5 報 (Macromolecules など)。
- ・ESRF (仏) Narayan グループ (放射光施設) へ博士研究員を派遣、ミセルの会合挙動の動力学を測定 (共著論文)。

#### 高田チーム

##### 【国内】

- ・井上将彦教授 (富山大学) : 合成、構造解析に関する研究
- ・鈴木大介准教授 (信州大学) : ポリマー表面へのマクロサイクル触媒の固定に関する研究
- ・桑田繁樹准教授 (東京工業大学) : マクロサイクル触媒の X 線結晶構造解析の協力依頼
- ・富田育義教授 (東京工業大学) :  
高分子反応の専門家として、反応条件の設計や新しい高分子反応開発に協力依頼
- ・古屋秀峰准教授、渡邊寿雄准教授 (東京工業大学) :  
量子化学的 MD 計算法の確立、タンパクなどの巨大分子の計算に関する研究連携。

#### 一杉チーム

##### 【国内】

- ・組頭広志教授、堀場弘司准教授 (高エネ研・東北大学) :  
放射光を用いた光電子分光、吸収分光
- ・平原徹准教授 (東京工業大学) : 光電子分光
- ・杉山純博士 (CROSS 中性子科学センター) : ミュオン
- ・福谷克之教授 (東京大学) : 核反応分析
- ・白澤徹郎博士 (産総研) : 放射光 X 線回折
- ・Daniel Packwood 講師 (京都大学) : 機械学習
- ・手嶋勝弥教授、是津信行教授 (信州大学) : 稠密結晶試料提供
- ・守谷誠講師 (静岡大学) : 固体電解質試料提供、構造解析

##### 【海外】

- ・Butt 博士 (Max Planck Institute for Polymer Research (Mainz))
- ・Seungwu Han 教授 (Seoul National University) : 機械学習ポテンシャル

## 水口チーム

### 【国内】

・長浜太郎准教授（北海道大学）： 新しい熱電材料の開発（共同研究）

・CREST 研究者との共同研究

「エレクトレットMEMS振動・トライボ発電」研究領域：

小野新平研究分担者(電力中央研究所)

「ベイズ推論とスパースモデリングによる計測と情報の融合」研究領域：

日野英逸研究分担者(統計数理研究所)

「計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出」研究領域：

水上成美研究代表者(東北大学)

### 【海外】

・Manuel Bibes 教授(CNRS、フランス)： 酸化物磁性体の開発と評価（共同研究）

・Tobias Kampfrath 教授(ベルリン自由大学、ドイツ)：

異常ネルンスト効果を利用したテラヘルツ波発生実証（共同研究）

以上、各チームでの主な連携活動を記載したが、特に JST 国際強化支援策（海外研究者の招へいおよび CREST 研究者の海外派遣支援制度）等を積極的に活用し、海外の有力な研究者と様々に協力して多くの研究成果をあげてきた。

### (8) 研究費配分上の工夫（CREST 増額支援と総括裁量経費支援）

研究の進捗状況や研究計画の変更に応じて、適宜研究予算の追加支援を行った。CREST プロジェクト予算、総括裁量経費から実施した。下記に 500 万円以上の支援状況を示す。

チーム名	年度	グループ名	金額	項目
手嶋チーム	2014	手嶋	6,000	充放電検査装置とスパッタ用カソード電極の増強
	2015	手嶋	21,000	※) 充放電装置、雰囲気制御炉、ボールミル
	2015	藤田	5,000	AFM用サンプル加熱ステージ
	2016	手嶋	10,500	DSC、SIP、計算ソフト
	2016	藤田	6,000	SPM、TOF-SIMS用充放電評価システム
	2017	手嶋	9,520	放射温度計、ベッセル、ドラフト
野崎チーム	2014	野崎	12,000	グローブボックス
松方チーム	2014	金子	6,500	冷凍機
	2015	金子	10,000	動的量子分子篩能計測装置
	2015	児玉	10,000	質量ガス分析計
陰山チーム	2015	陰山	43,000	※) 分子線エピタキシー (MBE) 装置
	2016	陰山	9,340	クヌーセンサー、RHEED解析システム、放射温度計
	2016	阿部	6,000	ガスクロ
	2017	陰山	5,000	ラウエ X 線回折装置設備備品
関根チーム	2015	窪田	11,900	粒子径・ゼータ電位測定装置、真密度測定装置
	2016	関根	9,000	化学吸着測定装置
	2017	窪田	5,200	シミュレーションソフトウェア
櫻井チーム	2016	櫻井	9,000	粒子径分布測定装置
	2018	櫻井	10,800	粒子構造解析装置
一杉チーム	2016	一杉	20,000	※) AI ロボット合成装置移設と増強
	2017	一杉	6,000	AI ロボット合成用ソフトウェア
	2019	一杉	5,000	AI ロボット用分光測定ユニット

2,000万円以上（※印）の大型支援の内容は以下の通りである。

◆手嶋チーム（リチウムイオン二次電池評価装置一式：21,000千円）

研究の進捗により、高入出力対応バルク型全固体リチウムイオン二次電池の評価設備を導入し、LIB研究加速を目指した。

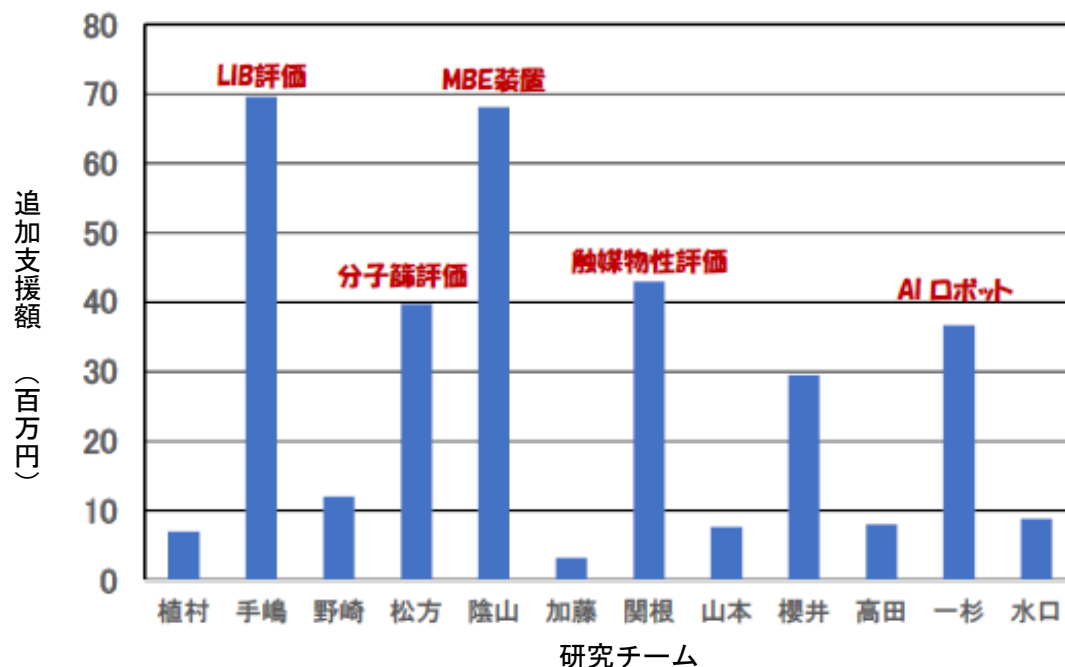
◆陰山チーム（分子線エピタキシー装置一式：43,000千円）

研究計画（結晶合成法）の追加により、MBE装置を導入し、混合アニオン人工超格子薄膜の異種積層による革新的物理機能の開拓を目指した。

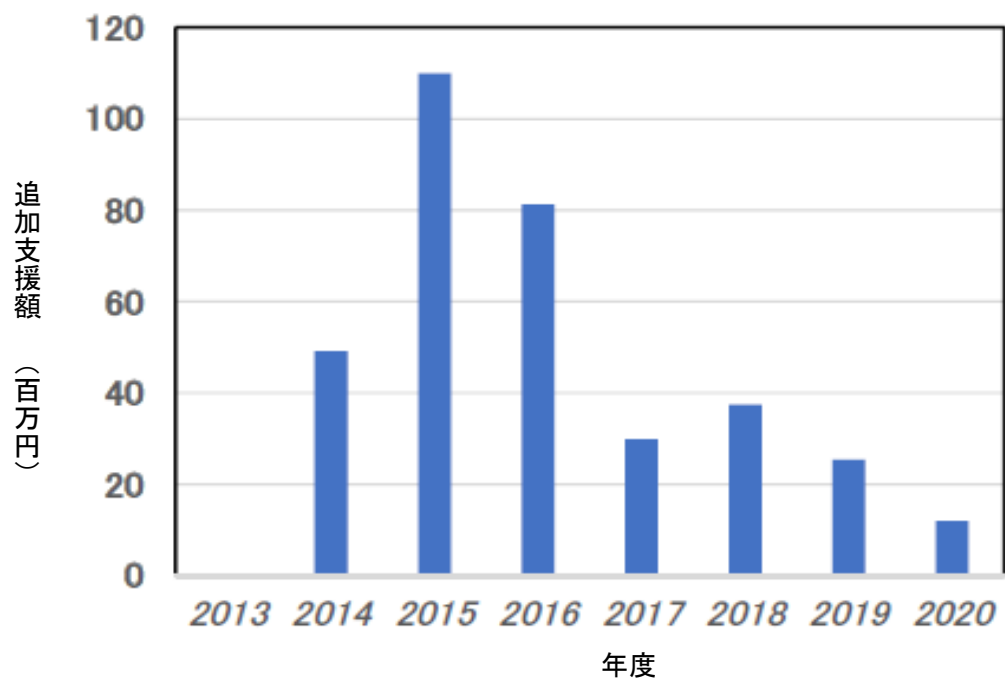
◆一杉チーム（AI ロボット合成・評価装置移設・増強：20,000千円）

研究計画（実験のAIロボット化）の追加により、成膜・評価を複合・一体化した実験ロボットシステムを東北大学から東工大へ移設、評価機能の増強を実施し、全固体リチウムイオン二次電池等の研究加速を目指した

下記に、チーム別研究費の追加支援状況を示す。研究ステージ、導入設備に応じて減り張りのある研究費の追加支援を実施した。



【参考】 年度別研究費の追加支援状況 (支援総額：333 百万円)



(9) 中間評価（2018年3月3日実施）結果への対応

①「産学連携チーム研究のモデルケースとして、さらに国際特許出願を期待する。」

中間評価時点（2017年度）と事後評価時点（2020年度）での産学連携チーム（下記7チーム）の特許出願件数を比較すると以下の通りである。

チーム名	中間評価時点			事後評価時点		
	合計	国内	国際	合計	国内	国際
手嶋チーム	10	10	0	30	19	11
野崎チーム	13	11	2	28	25	3
松方チーム	3	3	0	4	4	0
加藤チーム	4	3	1	8	5	3
関根チーム	11	11	0	13	13	0
山本チーム	5	4	1	8	6	2
高田チーム	0	0	0	1	1	0
合計	46	42	4	92	73	19

研究開始から中間評価（2013～2017年度）までの特許出願件数は、国内42件/国際4件に対し、中間評価～事後評価時点（2018～2020年度）では、国内31件/国際15件となり、短期間で比較的多くの出願、特に、国際出願が大きく増加した。領域会議やサイトビジットにおいて、特許出願を含めた成果発信の可能性を検討し、それぞれの状況に応じて、論文投稿、特許出願、ノウハウ蓄積など、適切なアクションが取れるよう指導した。

②「本研究領域ならではの融合研究を進めていただき、新しい技術が芽生えることを期待したい。」

21 ページ「(8) 国内外研究機関との連携」に融合研究を記載した。(国内/国外研究機関)との研究連携件数は以下の通りである。

植村 T (2/2)、手嶋 T (10/7)、野崎 T (0/1)、松方 T (0/1)、陰山 T (10/6)、加藤 T (4/0)、関根 T (0/9)、櫻井 T (0/3)、高田 T (5/0)、一杉 T (8/2)、水口 T (4/2)、合計 76 件 (国内連携：43 件、国外連携：33 件) を行っている。また、他領域を含めた CREST 研究領域での連携は 6 件であり、今後更なる融合研究に繋がることを期待している。

③「これまでの基礎的研究を発展延長させた従来と異なる切り口での研究成果が挙がること、超空間という領域名を代表するような俊英なる研究成果が生まれることを期待する。」

それぞれの研究課題は広範な視点から「超空間」と密接に関連しているが、特に、植村卓史教授は多孔性金属錯体 (MOF) の創り出す「超空間」を「機能発現の場」として捉え、合成場、集積化場、分離場として利用する新しい化学分野を確立した。更に CREST 研究期間を 1 年間延長し、従来法では分離精製が不可能であった高分子材料において末端基の僅かな違



いを認識する分離技術に成功し、高分子分離に革新を起こした。また、触媒反応場として触媒研究チームとの融合も期待されている。

**④「学術的に意義ある成果が出ていれば、中長期的な視点でその展開を指導していただきたい。」**

研究課題を基礎研究型、明確な出口を意識した目的基礎研究型に分けて考え、それぞれの研究目標、研究ステージに応じて、研究方針、特許戦略など中長期的な視点で成果展開を議論してきた。その中でいくつかの大きな展開が見られたが、特に、陰山洋教授は文部科学省「新学術領域研究」（2016-2020 年度）『複合アニオン化合物の創製と新機能』の領域代表、加藤隆史教授は文部科学省「新学術領域研究」（2019-2023 年度）『水圏機能材料：環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成』の領域代表として新しい研究分野の開拓に、櫻井和朗教授は 2017 年北九州地区先進バイオテクノロジー研究施設「IEST Lab. (イーストラボ)」の初代センター長に就任し、長期的視点での社会実装を目指した展開が期待されている。

**⑤「本研究領域の全 12 チームから得られた優れた成果を、最終シンポジウムにおいては、その全貌が理解できるよう十分にアピールしていただきたい」**

研究課題の終了年度末に CREST「超空間」研究成果報告会を開催している（2019 年度 2 期採択課題については新型コロナウイルス感染症の影響で中止）。2021 年 3 月に、2、3 期採択課題の合同研究成果報告会を計画しており、その中で CREST「超空間」研究領域の全貌が理解できるようアピールする予定である。

## 7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について

### (1) 研究成果の達成度

以下に、12 チームの研究課題の進捗状況と所見について以下に述べる。なお、2013 年度（1 期）、2014 年度（2 期）、2015 年度（3 期）採択課題について、それぞれ、2018 年度、2019 年度、2020 年度に課題事後評価を実施した。なお、3 期課題については、新型コロナウイルス感染症の影響を受けて、半年間研究期間を延長し、2021 年度に簡易評価を実施した。

#### ① 平成 25 年度採択課題

##### ・植村チーム：テーラーメイドナノ空間設計による高機能高分子材料の創製

[研究課題の進捗状況]

多孔性金属錯体 (MOF) や有機ケージ状化合物が有するナノ空間を利用することで、通常法では全く不可能な新規高分子材料群を戦略的に創製し、設計指針と共に新しい化学分野の確立を目指した。

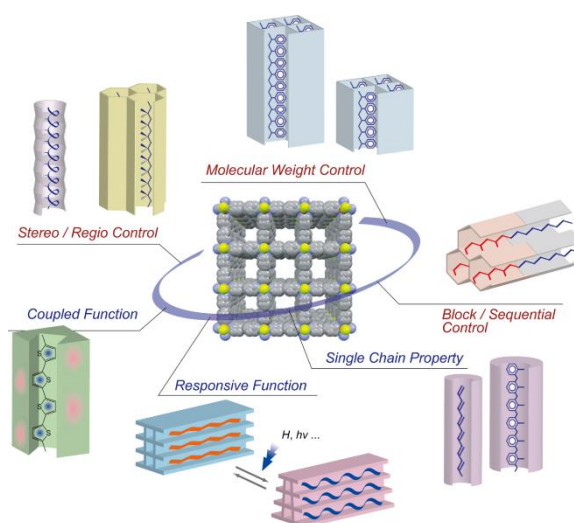
これまでの研究では、植村グループが中心となり、多彩な多孔性材料やモノマーの設計を行い、高分子をベースとした新規ナノ物質群の創製を実現してきた。その過程で、長岡グループによる理論計算や水野グループによる固体 NMR 解析の

協力も得て、空間内での特異な反応メカニズムの解明や優れた性能を示す高分子材料を創製する指針を得ることに成功した。種々のモノマーや高分子の細孔内でのダイナミクスや集積・配向構造を評価することが可能になってきており、理論、解析、実験の積み重ねによる、総合的な検討による「ナノ空間高分子化学」が展開できるようになった。これにより、相溶化が不可能と言われてきた高分子の組み合わせでさえ、分子レベルで完全に相溶化できることや、モノマーの精密配置が可能な空間を用いることで、これまででない周期性シーケンスを有する共重合体を合理的に作り出す手法を開発できた。

また、高分子混合物のほんのわずかな構造の違いを認識し、精密に分離することも可能にしたことから、基礎学問としてのみならず、産業分野へも大きな影響を及ぼす研究として期待できる。

[所見]

MOF の空間を利用した反応場によるポリマー設計は国際的にも注目を集めている研究領域であり、その中で本研究課題が確固たる地位を築いているのは本研究領域としての大きな成果である。特にポリマーアロイの理想的な構造を作り得る方法論を複数提案したことは注目に値する。また、混合物からの高分子混合物の単離では、予想以上の研究成



果が得られており、末端基の種類による拡散速度の違いや分子量の違いを利用する分離技術は、今後いろいろな用途が考えられ、波及効果の大きな応用展開が期待される。

現時点では基礎研究の検証実験に留まっているが、インパクトの大きな産業技術に展開するための課題が具体的に見えてきており、今後の展開に期待したい。

#### ・手嶋チーム：超イオン伝導パスを拓く階層構造による結晶相界面デザイン

[研究課題の進捗状況]

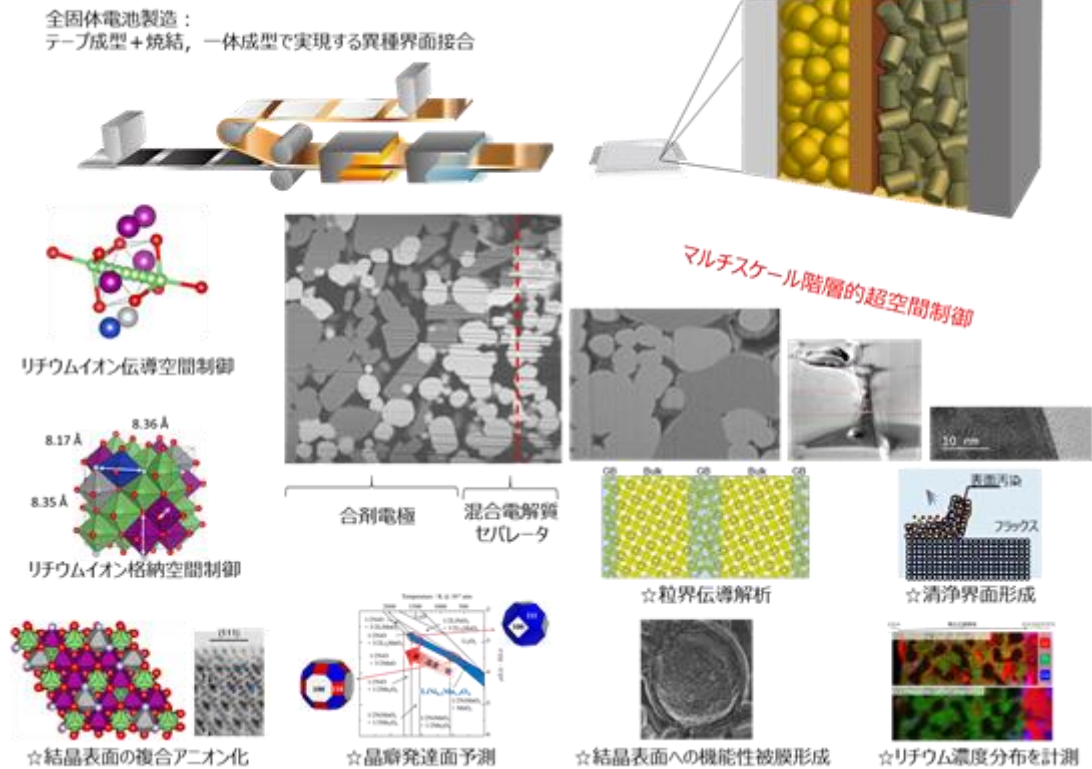
高品位な電極活物質結晶(層)の育成とスムーズな電極界面の形成を同時に実現する『稠密結晶層電極』と『ガラスフラックス』技術を基盤とし、酸化物系全固体電池の研究開発に取り組んだ。特に、フラックスサイエンス&テクノロジーをコア・コンピタンスとし、古くてニッチな結晶育成技術と先鋭的研究アプローチ(計算科学や超高精細分析・解析)を高度に融合させて、イノベーションギャップを埋める最適解の導出を目指した。

手嶋グループは、実験的および計算科学的手法により、結晶成長方位や晶相・晶癖発達面を制御する因子を明らかにし、世界で初めて結晶外形を含む状態図を提案した。これは、結晶外形を自在制御できるフラックス法を操る本研究領域の研究体制(計算、育成、評価の三位一体)の特長を明示した典型である。この成果を活かした晶癖制御結晶にて、優れたリチウムイオン伝導の発現を見いだしたほか、スピネル型マンガンニッケル酸リチウム化合物のカチオンとアニオン空間を同時制御し、リチウムイオン伝導を高効率化させることで、高エネルギー密度、高出力密度および高電圧耐久性を兼ね備える新材料を開発した。デザイン電極の形成や超精密に接合した活物質/固体電解質複合体の一括形成にも成功し、最終目標としたデザイン化全固体電池動作の道筋を拓いた。

また、湯蓋グループによる TEM 観察と電子回折パターン解析を中心とした結晶構造解析、西川グループによる単粒子測定技術を中心としたマルチスケール解析、藤田グループによるマルチフィジックスによるリチウムイメージングを通して、物理的アプローチに裏付けられた信頼性の高いリチウムイオン拡散経路の設計・可視化も可能になった。

結晶構造制御を研究舞台とした学術的超空間制御はもとより、高品質・ユニークなフラックス結晶群に対する高いニーズに応え、上述の種々の要素技術をスピノフすることで民間企業との強力な垂直連携体制を構築した。産業的視点を取り込んだ超空間制御技術により、社会実装を推し進めるとともに研究代表者を中心とする大学発ベンチャーの設立も見据え、研究成果の学術的還元と社会的還元体制を整えた。

## 超空間制御-酸化物系全固体電池



### [所見]

超高性能全固体二次電池の創成に向けて、フラックス法による固体電解質スクリーニング、正極材料に対する稠密配向性結晶薄膜の合成法の確立、シミュレーションや理論計算等による相平衡・相転位予測など、広範囲にわたる探索・絞り込みにより要素技術を深化させ、素材性能を高め、最終的に二次電池としての性能評価を示すレベルにまで到達した。

本研究課題は複数の企業との共同研究を実施し、電池材料に必要な要素技術の確立を目指したものであり、多くの特許出願、ライセンス契約等の実績を上げている。このことは世界的に注目されている全固体二次電池の開発において、日本の産学連携の成果と言う意味においても意義の深いものである。

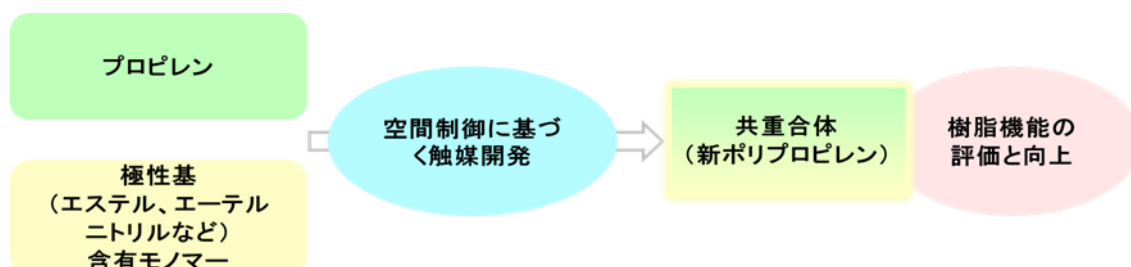
### ・野崎チーム：極性基含有ポリプロピレン：触媒開発と樹脂設計

#### [研究課題の進捗状況]

ポリプロピレンは安価で強度・耐熱性・耐薬品性に優れ、広く一般に用いられている汎用樹脂で、世界で年間5,000万トン以上生産されている合成高分子である。一方で、接着性、相溶性、着色性に劣るなどの欠点があるため、これらの欠点を補うためにポリプロピレンを合成した後、無水マレイン酸のグラフト化や塩素化によって改質している。

これに対し本研究は、プロピレンと、アクリル酸エステル、酢酸ビニル、アクリロニト

リルなどの極性モノマーをランダムに共重合させて、ポリプロピレン主鎖に直接極性官能基を導入した「新ポリプロピレン」を創製することを目指した。具体的に、(1) 共重合体の合成 (2) 立体規則性の制御 (3) 新材料の創出の3課題に対して以下の結果を得た。



- (1) 新規パラジウム触媒ならびにニッケル触媒を開発し、当初目的としたプロピレンと極性モノマーの共重合を達成した。
- (2) パラジウム触媒ならびにニッケル触媒を用いて、微イソタクチックなポリプロピレンの合成に成功し、結晶性を観測するに至った。
- (3) 計算機を活用して極性 PP の分子設計を進め、各期待用途にあるべき一次構造を演繹的に導き、その一部はサンプル合成を通じて材料設計の妥当性を実証した。

本研究は、従来、ラジカル機構による重合後修飾に頼っていた極性基含有ポリプロピレン合成に、触媒的共重合という全く新しい方法論を確立したものであり、様々な官能基を主鎖からの距離を調整しつつ導入できるようになり、これまで決して得られなかった新しい物質群の創製に繋がった。得られた極性基含有ポリプロピレンについては、理論と実験の双方から、相溶化剤として、またフィラーを使いこなす樹脂改質剤あるいはベースポリマーなどとして多彩な用途の可能性を確認できた。本研究の成功はポリプロピレンの用途を飛躍的に広げ、高分子化学に新たな未踏の研究領域を拓いた。

#### [所見]

高難度の極性基含有ポリプロピレン製造用の重合触媒について、Pd系、Ni系の双方において目標値を達成する触媒を複数発見できたことは特筆すべき成果である。工業的に適用可能なレベルに到達するには更なる検討を必要とするが、予想した反応機構を發展させた緩やかな配位子場の概念による触媒活性の向上や空間立体規則性を制御する触媒設計の指針等が得られており、今後、企業との共同研究を發展させ工業化を目指すことを期待している。

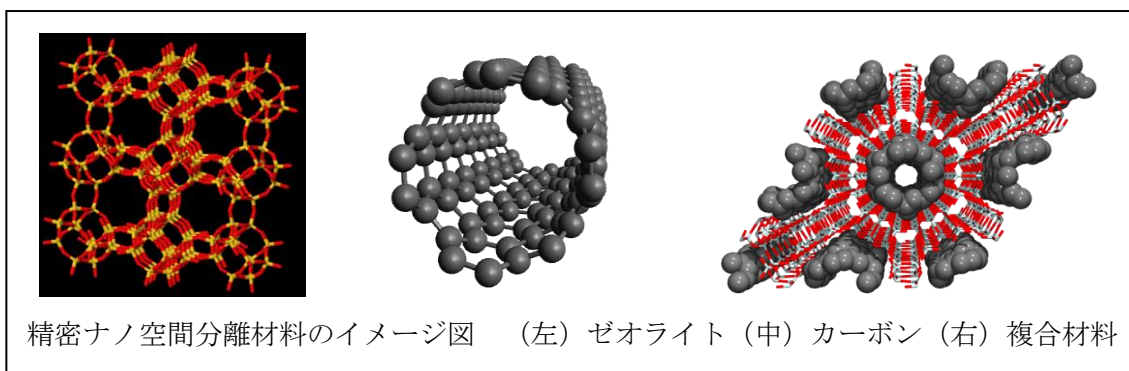
アカデミアと民間企業が連携し、基礎的段階から開発研究初期段階への進め方として、一つの成功事例となる研究体制を構築した。

#### ・松方チーム：精密分子ふるい機能の高度設計に基づく無機系高機能分離材料の創製

##### [研究課題の進捗状況]

ゼオライト、炭素材料を対象としたマイクロ多孔性材料を用いた新規な無機系分離膜、分離材料技術の実装による分離工程の抜本的な省エネルギー化を目指した。さらに、サブナノレベルの細孔に基づく分子ふるい機能を精密に制御・集積した材料を創製、またこれらの材料を活用したプロセス構成・操作指針の構築を目的とした。

本研究では、研究体制図に挙げる8機関の密接な連携のもと、実験的、計算的アプローチの両面からナノ空間制御手法の高度化と空間評価手法の深化を進め、ゼオライトやカーボン、ゼオライト-カーボン複合材料のマイクロ孔を分離対象に合わせてデザイン・制御することで、H<sub>2</sub>/D<sub>2</sub> や 16O<sub>2</sub>/18O<sub>2</sub> といった同位体分離において、量子分子ふるい効果による分離が可能であることを示した。また、ナノ空間が発揮する分子ふるい効果に加え、混合物中の一部の分子が選択的に吸着されるナノ空間を作り出すことで、吸着性能の差に基づく分離が可能となることを見出した。さらに、ゼオライト結晶骨格が吸脱着に伴って格子定数を変える柔軟性を発揮することを見出すとともに、骨格中の交換イオンの直接観察にも成功した。



[所見]

ゼオライト膜を機能層とする分離膜の設計・機能向上について、支持体の構造設計・作成、高透過性の達成、ゼオライト膜形成の反応機構解析などの点で目的を達成した。高度に設計された支持体構造、オレフィンの選択的分離等、次のステージに具体的に移行しており、本研究領域発の分離技術として更なる発展を期待している。

量子分子篩については、ゼオライトと炭素の複合ナノ多孔性材料による分離膜により、想定以上の性能を示すシミュレーション結果が得られ、空間制御の視点で大きな概念の

発展が認められた。実材料でシミュレーション結果の妥当性の検討を進め、本手法が同位体分離に限らず幅広い研究対象に発展することを期待する。

## ② 平成 26 年度採択課題

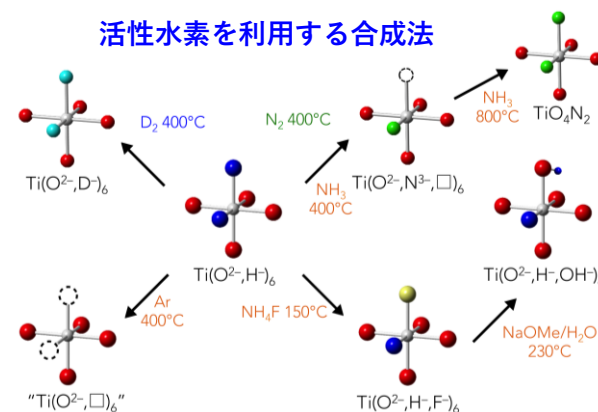
### ・陰山チーム：アニオン超空間を活かした無機化合物の創製と機能開拓

[研究課題の進捗状況]

無機結晶内でアニオン由来の種が占めうる空間を「アニオン超空間」と捉え、アニオンの優れた反応性、操作性を活用することで斬新な配位構造、結合状態をもつ新物質群を創製し、アニオンが主導する革新的で産業・社会的に価値のある化学・物理機能の創出を目指した。

可視光照射下において極めて安定に水を酸化できる層状酸ハロゲン化物  $\text{Bi}_4\text{Nb}_8\text{O}_{8}\text{Cl}$  の発見では、従来の複合アニオン化合物では自己酸化分解が避けられなかったが、特異な価電子帯構造制御に関して実験・理論の両面から調べ、特異なバンド構造の起源を解明、価電子帯位置の精密操作法を実現した。また分光実験によって光励起キャリアの動的性質を検討し、反応過程を見出すとともに有望物質の迅速なスクリーニング法を提案した。

合成に関しては、「酸水素化物を前駆体に用いた複合アニオン化合物の合成 (Labile hydride strategy)」、「固体イオニクスに倣ったアニオン欠損導入によるアニオン交換の促進」、「酸窒化物の中温トポケミカル反応」など、重要な合成コンセプトを提示するとともに、トポケミカル反応で軽視されがちな速度論視点の重要性を指摘した。さらに、中温トポケミカル反応の探索過程で、アニオン欠損層の自在な制御方法を発見した。



また、酸化物イオンに比べヒドリドイオンが圧倒的に圧縮されやすいことを見出した(約2倍)。これはヒドリドが遷移金属間の磁気相互作用を切断する役割を担うことを示すものである。複合アニオン成膜に特化した薄膜装置を用いて、 $\text{SrVO}_2\text{H}$  の常圧金属化、 $\text{EuVO}_2\text{H}$  の異常磁気異方性、高温超伝導が予測されている超格子酸化物の作製など、新しい機能創発を予期させる成果が続々と見出した。

アンモニア合成の実用化に向けたチタン酸水素化物触媒開発では触媒応用の拡張性の高さを示した。

以上のように、複合アニオン結晶の研究推進により、物質合成・機能開拓のいずれにおいても新コンセプトを創出し、次世代のイノベーションに繋がる材料や新しい方向性を打ち出した。固体化学と触媒化学が一体となった研究体制・学生指導は、我が国の現状を踏まえると理想的な共同研究のかたちを提示したといえる。

[所見]

中温域での酸窒化物合成やアニオン欠損などを利用したトポケミカル反応、ヒドリドが有する異常に高い圧縮率、さらにヒドリドが $\pi$ 対称性の金属軌道を切断するという特徴を見出した。加えて、可視光水分解光触媒として層状酸ハロゲン化物  $\text{Bi}_4\text{Nb}_2\text{O}_{12}\text{Cl}$  が有する従来型の複合アニオン化合物とは全く異なるバンド形成を発見し、光触媒の新しい設計指針を提案、これらは本領域のトップジャーナルに数多く掲載され、複合アニオン化合物を学術領域として確立し、世界的に認められる水準に到達している。

・加藤チーム：ソフトナノ空間を形成する自己組織化液晶高分子を基盤とする革新的輸送材料の創製

[研究課題の進捗状況]

従来は不可能であった、物質を高選択的に輸送・分離する革新的素材を開発するために、規則的なソフトナノ空間を自発的に形成し、かつナノ空間の形状や空間を形成する官能基を制御できる材料として液晶を活用し、「自己組織化ナノ液晶高分子」(図1)の開発と材料化、ナノ構造の評価に取り組んだ。

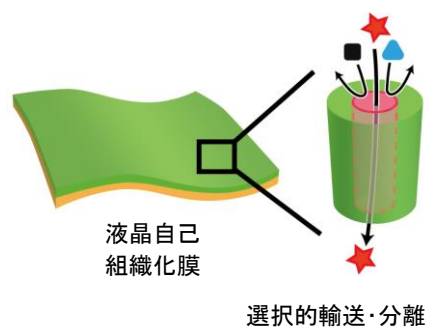


図 1. 自己組織化ナノ液晶高分子による輸送・分離の概念図

水中から有害物やウイルスを効率的・選択的に除去する高分子膜の開発を目的として、ナノチャネル構造を形成する様々な重合性液晶分子を開発・合成し、複合膜化した。次にそれぞれイオンや非イオン性分子、ウイルスを用いて膜の性能を評価する系を構築、膜の機能評価を行った。

高分子膜の開発では、様々な規則構造を形成する重合性液晶分子を開発し、透水性ナノ構造液晶高分子複合膜を作製、輸送能を評価した結果、直径 25 nm のウイルスに対し、99.999%以上という非常に高いウイルス除去性能を有することを明らかにした。さらに、液晶の分子デザイン、イオン液体との複合化、光開裂部位の利用により、孔径を拡大したナノ構造水処理膜を作製し、30 倍以上の透水性向上を実現した。液晶ナノチャネル中の水分子やイオンの運動について計算科学による解析・検証を進め、空隙の大きさや親水部の運動性が物質透過性に与える影響などを明らかにした。

リチウムイオンを選択的に濃縮する材料や安全性の高い電池の電解質となるイオン捕集・輸送材料の開発では、扇型構造のイオン性液晶分子の双連続キュービック相への液晶



構造変化の利用、またフェニルアンモニウム系液晶電解質の開発により、約 1000 倍のイオン伝導度のスイッチング特性を示すことを明らかにした。

層状のスメクチック液晶電解質を利用したリチウムイオン二次電池の開発では、液晶と低分子電解質との複合化により、液晶電解質のイオン伝導特性を向上させ、室温動作や高速充放電を可能にした。

以上のように、ナノ構造液晶を用いて、高レベルウイルス除去能を示す水処理膜の開発や水処理膜の性能を制御するための分子デザインを構築した。また、高効率イオン輸送能を示す液晶電解質の開発や、液晶電解質の新たな応用を達成した。

[所見]

自己組織化により形成されるカラムナー相配向性高分子薄膜(一部スメクチック相)を開発し、アルカリイオンの除去または濃縮、ハロゲンイオン、ウイルスの除去等において、極めて優れた性能発現を確認した。水質汚染に関わる環境問題が世界的な問題として取り上げられ、国内においてもその認識が高まりつつある状況下、研究代表者が、新学術領域研究「水圏機能材料」領域代表者に就任したことは具体的なアウトプットである。

応用展開上の解決すべき技術課題及びその学術的な側面での課題も明らかになってきており、それらの解決に向けての産学連携推進が期待される。

#### ・ 関根チーム：超空間制御触媒による不活性低級アルカンの自在転換

[研究課題の進捗状況]

低級アルカン転換のコアシェル型触媒開発において、シェルでの低温触媒反応と、コアでの選択的触媒反応にフォーカスして研究を進め、表面プロトニクスによる低温触媒作用の発見、新規表面イオン伝導測定の確立、新規 FT 触媒の発見、新規フレームワークを有するゼオライトの発見、といった大きな発見をすることができた。

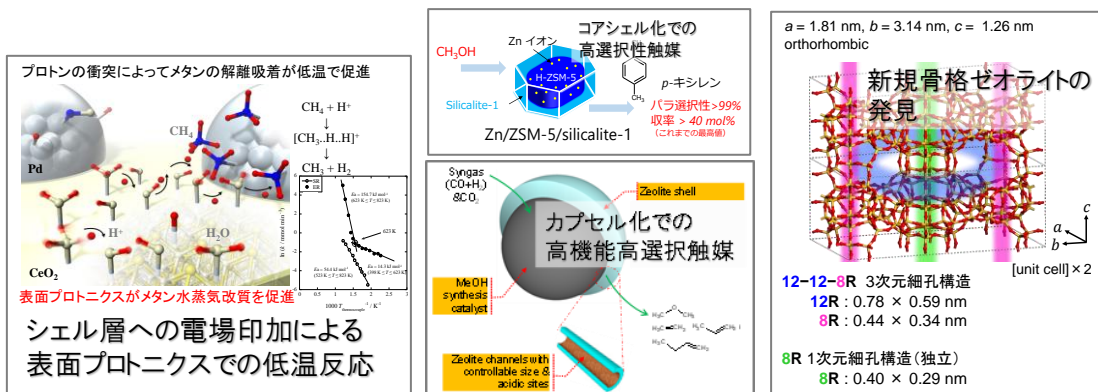
表面プロトニクスによるシェル層外表面での反応においては、触媒表面における吸着水由来のプロトニクスが、担持金属に吸着した分子を活性化し、200 度以下での反応を促進していることを見出した。さらに、交流インピーダンス測定によって、表面イオン伝導を抽出・評価し、350 度より低温側で表面プロトニクスが促進されることを見出した。

シェルとコアの融合においては、メタノール合成触媒と新型カプセル触媒からなる複合触媒を開発し、二酸化炭素を含む合成ガスから一段で p-キシレン(PX) を世界で初めて合成した。また、スイカ型触媒を用いた FT 反応では、大きな触媒金属粒子では長い炭化水素連鎖が成長するという 従来の FT 定説および ASF 則を覆す実験結果を見出している。

さらにゼオライト結晶内活性点位置制御を進め、ゼオライトの結晶内を多層化し、それぞれの層が異なる活性点を有することで 活性点の位置選択的機能を発現させ、逐次反応において、不可逆性を有するこれまでにない高選択的反応を実現させた。

コアの材料としては、新規フレームワーク構造を有する YFI ゼオライト を発見し、IZA に承認された。デュアルファンクション空間を有する 2 種類のゼオライト骨格(MSE、YFI)

について、骨格中の酸点分布、結晶性変化について解明した。



[所見]

触媒表面の水酸基に電場を印加することにより、メタンの改質反応やアンモニア合成といった、従来、高温・高圧を必要とした反応に対して、触媒表面上でのイオン伝導の促進、いわゆる表面プロトニクスによって、活性化エネルギーを大きく低下できることを触媒反応や電気化学的解析などにより明らかにしつつある。

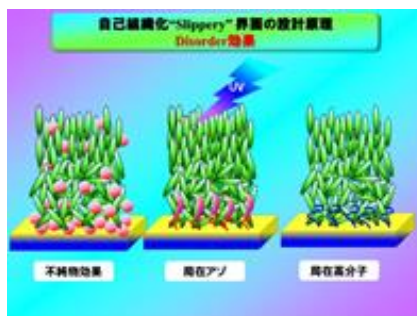
また、8員環と12員環で構成される新しい3次元構造ゼオライトの発見やコアシェル構造の触媒設計によるGTL反応における生成物分布の高度制御など、エネルギー・化学産業においてますます重要性が増してくるとされる数多くの成果が、論文発表、講演によりアピールされた。

加えて、これらの研究活動を通じて複数の若手研究者が、さきがけ、未来社会創造事業に採択されたこともアクティビティの高さの現れである。

・山本チーム：空間局在・分子超潤滑に基づく時空間空隙設計と高機能表示材料創生

[研究課題の進捗状況]

液晶表示材料の開発において、自己組織化スリッパリー界面（超潤滑）を利用する高高速、低エネルギー消費の実現を目指した。基礎物理学的視点と物性計測技術、理論・シミュレーション解析、分子設計・化学合成、デバイス生産・販売企業、表示材料販売企業が一体となり研究を進めた。



自己組織化スリッパリー界面の原理

先ず、スリッパリー界面生成の基本原則である Disorder 効果を不純物の混合により誘

導し、その界面が実現できることを実証した。次に、強誘電性液晶 (SmC\*) にスリッパリー界面を適用し、現行のネマチック液晶の応答速度を 2-3 桁上回る  $100 \mu \text{sec}$  以下の応答速度を維持しながら、駆動電圧を 1 桁以上低下させることに成功した。さらに、温度安定性向上のため、PEG 高分子材料の導入により、 $10^{\circ}\text{C}$ ～液晶-液体相転移温度に及ぶ広い温度範囲で界面が安定に存在できることも確認した。加えて、高分子と液晶分子の相溶性をパラメータとした分子シミュレーションや流体力学的理論に基づいた新液晶表示モードの応答特性の解析、電場応答ダイナミクスなど、理論を用いた予測も並行して実施し、研究推進に大きな原動力となった。

この界面を用いた新しいネマチック液晶表示モードを考案し、実用化を目指すために、PEG ゲル高分子の分子量や架橋密度、塗布条件、アニール条件などの最適化、界面の機構解明や、表示素子の定量的性能評価方法を開発した。テストパネルの作成、パネル製作のプロセス技術の改良、市販液晶パネル製作ラインでの生産テストなどを進め、実際の製品化に向けたステップに移っている。

これらの研究成果は表示材料に止まらない、界面・物質設計の新しい普遍的概念の提唱と実証につながっている。

#### [所見]

液晶表示材料の高速度・低消費電力駆動というトレードオフの関係にある特性の両立を、ナノサイズの液晶高分子の界面でのスベリ現象を利用するという独自アイデアでの実現を目指し、コンセプトの妥当性確認、企業との共同研究での試作品作成など、実用化につなげる段階に到達できた。

日本のディスプレイ産業が苦戦を強いられている中、複数の差異化要素の掛け算としてその復活を期待しており、今後その産業的波及効果の大きさが判明していくものと思われる。

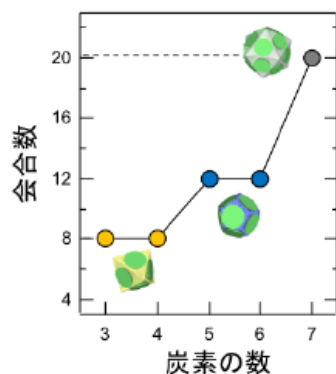
### ③ 平成 27 年度採択課題

#### ・櫻井チーム：単分散プラトニックミセルを利用した細胞標的型 DDS の基盤構築

##### [研究課題の進捗状況]

カリクサレン系の両親媒性化合物が水溶液中で、会合数 2, 6, 8, 12, 20 と不連続で飛び飛びの値をとる単分散 (分布がない) なミセルを作る新規な化合物 (プラトニックミセル) であることを発見した。本研究では、これが一般的に成立する法則であることを実証すること、さらに、DDS 粒子としての応用可能性を明確にすることを目指した。

他の異なるカリクサレン系化合物や界面活性剤などについて、SPring-8 の放射光を使った構造解析などにより、会合数が 30 以下と小さい場合、会合数は 2, 4, 6, 8, 12, 20, 24 から選ばれる数字のどれかになることを発見し、プラトニックミセルが一般的に成立する法則であることを示した。



#### 【カリクサレン系両親媒性化合物の炭素の数を連続的に増加したときの会合数の変化】

次にプラトニックミセルが親水性の官能基が大きな界面活性剤で、かつ、疎水性部分の凝集力が十分に大きな場合に出現することを明らかにし、今までの DDS 粒子では取扱いが困難であった、超疎水性の生理活性低分子化合物を送達する方法の開発に成功した。ハイパーブランチ高分子の反応系をミセル内で束縛することにより、粒径が 10~100 ナノメートルの間で制御された粒子を合成し、疎水性化合物との結合定数が 100 倍増加することを見出した。モデル化合物として従来の技術では使用が困難であったアルファーマンゴスチンを内包させた粒子の抗癌作用を調べたところ、飛躍的な改善が見られた。

今回の研究で得られたナノ粒子は、生体の異物排除機能を回避して、搭載した化合物によって、目的の臓器、さらには細胞、細胞内の特定の器官に到達する能力を持つと思われる。これは、次世代の薬物送達システムの基盤技術となると考える。

#### [所見]

プラトニックミセルの概念を実験と分子動学的シミュレーションの双方から検証し、論文発表等を通じて国内外にアピールし、この概念がミセルに成立する一般法則であることを証明できるレベルに到達している。テクノロジーの観点からも、シクロデキストリンの包摂機能の拡張概念としてプラトニックミセルの方法論を利用することによって、嵩高い分子、タンパク質等を効率的に分離できる手法を見つけ、DDS用途としての展開が医薬品分野で始まっている。また、本課題は新型コロナ感染症の影響を受けて6ヶ月間研究期間を延長し、虚血還流症の治療剤の開発において、既存薬より優れた特性を見出し、前臨床研究での効果を確認するとともに企業への導出を模索している。

#### ・高田チーム：緩やかな束縛反応場を活用する高分子の連続改変系の構築と革新的機能化

##### [研究課題の進捗状況]

鎖状高分子が触媒サイトをもつマクロサイクル触媒の内孔を貫通することで、触媒と高分子上の反応点が緩やかに束縛され、効率良く反応が進行することで高度な構造改変が達成される現象を発展させ、この反応場を活用した、従来の高分子反応や重合反応では合成できない新規高分子や有用な高機能高分子の創成を目指した。

マクロサイクル触媒が高分子反応において、貫通構造を形成するために反応加速が起こるといふ仮説の検証に向けて高分子反応の検討を行ったところ、分子量の大きい高分子基質ほど早く反応が完結する結果を得た。これは分子内・分子間の反応に関わらず、マクロサイクル触媒を用いた高分子反応に特徴的な挙動であり、マクロサイクル触媒がその内孔に高分子基質を包接することで、高分子反応における負の高分子効果を克服しているという機構を明らかにした。

マクロサイクル触媒が高分子鎖を移動しながら反応する高分子反応において、反応と移動が連動する反応系であることを表現するために、量子化学計算と分子動力学計算をハイブリッド化したシミュレーション法を開発した。高分子基質をマクロサイクル触媒が包接したロタキサン型中間体を仮定し、分子動力学計算によって、高分子基質中の未反応と反応後のユニットが混在する場合に、マクロサイクルは未反応点付近に移動する方がよりエネルギー的にも安定になることを示し、マクロサイクル触媒の高分子中の反応と移動が連動して起こっていることをシミュレーションすることに成功した。

#### [所見]

高分子鎖を環状構造の配位金属錯体が貫通しながら各種の反応を触媒することの原理確認、触媒が環状であることの必然性、さまざまな反応への適用による実効性の確認、分子動力学シミュレーションによる反応進行の妥当性の考察など、新しい学術領域を開拓するための土台作りがほぼ完了した。高分子自身を反応基質として機能性を付与するという従来にない概念を実験的に実証したことは、工業的に、将来大きな価値を持つと考えられる。このコンセプトは新しい重合反応場の設計、固相重合の新手法、高分子の解重合についても適用できる可能性があり、その重要性が認識されていくものと思われる。また、本課題は新型コロナウイルスの影響を受けて6ヶ月間研究期間を延長し、触媒機能設計として固体塩基担持触媒開発、反応生成物の官能基導入制御について、さらなる展開を見せている。

#### ・一杉チーム：界面超空間制御による超高効率電子デバイスの創製

##### [研究課題の進捗状況]

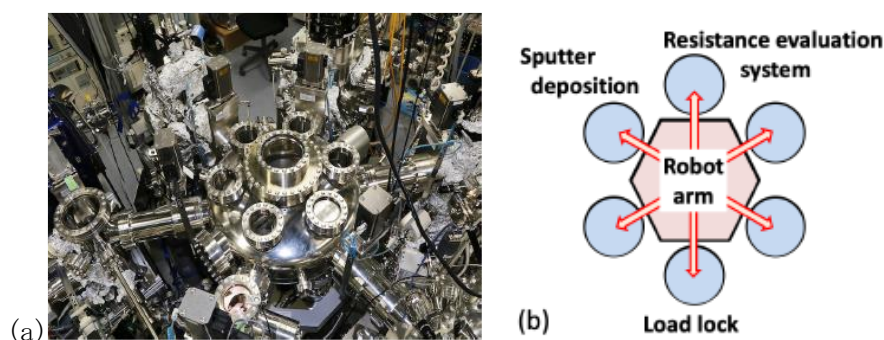
全固体二次電池などでは、固体/固体界面近傍におけるイオンの移動制御が極めて重要であるが、その精緻な制御はまだまだ難しい。本研究では、電場印加下におけるイオンの挙動を正確に記述することを目的に、固体物理をさらに発展させ、固体電気化学の学理構築を目指し、加えて、これらのデバイス材料の合成研究を加速するためのロボットを活用する材料合成技術の開発を目的とした。

全固体二次電池の界面研究では、固体電解質/電極界面をイオンが通過する際の電気抵抗の低減が急務である。その電気抵抗が発生するメカニズムについてプロトンが大きな影響を及ぼすことを実験的に突き止め、さらに理論グループと共同でその発現機構を解明し、その結果、固体電解質と様々な正極材料が形成する界面における界面抵抗が  $10\ \Omega\ \text{cm}^2$  と小さな値を示すことを実証した。さらに、集電体/正極材料界面の電子状態につい

でも明確に示した。

さらに、全固体二次電池は、充電・放電状態の二値のメモリデバイスと見なすことができ、容量を極力小さくすることでメモリとして活用できることを実証した。具体的には、電極と固体電解質の界面だけにイオンを蓄積する超低消費電力型メモリを作成し、ニューロモルフィックメモリとして駆動することを明らかにした。電極表面近傍における電子状態や構造を解明し、金属とイオン伝導体界面の微視的な理解につながった。

デバイス材料の合成研究を加速する方法として、機械学習とロボットを用いた材料合成装置の開発を進め、二つの実験パラメータを自律的に調整し、新物質を見つけ出すシステムを完成した。ベイズ最適化の導入により、少ない実験回数で最適化する材料研究の効率的な技術開発の基礎を確立した。



【AI ロボット材料合成装置の写真と概略図】

#### [所見]

電気化学と物理の交差点で二つの領域を繋ぐというコンセプトに対し、超高効率薄膜全固体二次電池の開発では、固体電解質と正極界面におけるイオン伝導の阻害要因を排除することにより超高速充放電が可能であることを実証し、加えてその界面抵抗の増大・劣化発現機構を解明し、その解決方法を見出している。この技術を応用した脳型記憶材料の開発にも成功し、概念の有用性を証明した。

AI 型材料合成・評価ロボットの開発は、実験の効率化と研究者の創造力を合理的に結び付けようとする試みであり、特に無機材料設計では世界的にも例が殆どなく、新材料創生において、本手法が活用できる可能性は高い。

#### ・水口チーム：ナノ超空間を利用した熱・スピン・電界交差相関による高効率エネルギー変換材料の創製

##### [研究課題の進捗状況]

熱・スピン・電界交差相関による高効率熱電変換デバイスにおいて、新規な熱電材料、材料を活かすデバイス構造の視点から研究を行った。

異常ネルンスト効果の増幅については、ナノドット構造や多層薄膜構造による電子散乱に關与する界面密度を上げる手法、また、スピン波が励起する材料による熱電効率を高

める手法を明らかにした。これらの材料では、電気抵抗（あるいはホール抵抗）に異方性が無いにもかかわらず、熱磁気効果だけに異方性が現れることも明らかにし、発電素子の複雑な設計技術が不要となり、より効率的な熱電素子の開発、環境発電技術への基礎技術を構築した。

ナノドット含有 Si 薄膜材料においては、ナノドット材料を半導体相、金属相とした時の出力因子の振る舞いを調べ、熱伝導率を、バルク Si と比較して、1/100 程度まで大幅に低減させることに成功し、出力因子をバルク Si 並みの値に増大できれば、高性能な Si 系熱電材料の可能性を示した。特に、Fe シリサイドナノドット含有 Si 薄膜ではゼーベック係数が高くなるように適切なドーピングを行うことで 3 倍程度増大する、性能向上の指針が得られている。これにより、目標であるパワーファクター1桁増大への道筋をつけた。

また、磁気異方性を持ち、高い異常ネルンスト効果が期待できる FePt 系のナノポーラス埋め込み構造のデバイス開発にも成功し、さらに、理論的研究によりナノポーラス形状の数学的なモデルを複数得ることができた。

トポロジカルな2次元渦構造をもつ“磁気スカーミオン”については、磁気構造、熱電効果がほとんど解明されていない。磁気スカーミオンの電流誘起ダイナミクスに関する理論的考察から、系に異方性がある場合に非対称なスカーミオン構造が表れること、また、この構造は円形のコア部分とその周りに広がる三日月形部分で構成され、内部自由度が付加されることによりスカーミオンに多彩な物性が表れることを示した。

#### [所見]

強磁性窒化物材料における異方性異常ネルンスト効果の発見、Fe-Sn 合金等での大きな異常ネルンスト効果の発現確認、ナノ微粒子グラニューラー型合金での異常ネルンスト効果の変調、スカーミオン（スピン渦）と異常ネルンスト効果の関係性の理論的説明、超格子を利用した Si-Ge 系でのパワーファクターの独立設計による従来材料の性能を超える熱電素子構造の提案など、多くの研究成果を挙げている。現時点では、学術領域として全体を整理する前の段階であると考えられるが、日本が世界をリードしている領域であるため、本研究領域の体系化を含めて今後に期待したい。また、本課題は新型コロナウイルスの影響を受けて6ヶ月間研究期間を延長し、ハイブリッドナノ構造による素子設計の可能性の提示、金属導入 SiGe 材料への添加物導入効果により、高出力と低熱伝導率の両立による ZT の向上など、進歩が認められた。

(2)各チームの研究成果の国際的水準及び領域全体としての国際的水準

研究成果として、国際論文誌への掲載が799件(1期:200件、2期:293件、3期:306件)、国際会議での招待講演数が469件(国内は554件)に達しており、国際的な水準は高いと思われる。著名な論文誌での発表は(2020年10月時点)、Nature系姉妹誌18件、J. Am. Chem. Soc. 18件、Angew. Chem. Int. Ed. 19件がそれぞれ出版された。

(3)科学技術イノベーションに寄与する成果の見通し

#### ①特許出願実績

出願は2021年9月時点で110件(国内87件、国際23件)であり、出口に近く、企業とのCREST連携(研究分担)を持つ研究チームから多くの出願がなされた(手嶋T:30件、野崎T:28件、関根T:13件、加藤T:8件、山本T:8件)。今後、企業連携の継続により、戦略的な国際特許の出願比率が高まることを期待している。

領域会議、サイトビジット等において特許出願を含めた成果発信の可能性を検討し、論文投稿、特許出願、ノウハウ蓄積のそれぞれにおいて適切なアクションが取れるように指導した。

#### ②産業界との連携 (※社名については非公開)

JST新技術説明会、JSTフェア、ナノテク展などでの研究課題PR、産業界との共同研究を通して、社会実装を目標とした実用的評価、データ収集を積極的に行っている。各チームの共同研究状況(終了含む)を以下に記載する。

##### 【植村チーム】

・JST新技術説明会で成果発表を行い、多くの企業から興味を示していただいた。実用化に向けた共同研究を行っている。

・高分子分離技術はTLOを通じて企業との共同研究を検討中である。

・その他、重合制御、フィラー開発、ポリマーアロイ、MOF材料で企業各1社と連携を実施

##### 【手嶋チーム】

・下記共同研究を実施・検討中である。

LIB安全性向上(5社)、高エネルギー密度化、高出力化(2社)、正極結晶材料開発(4社)

固体電解質開発(2社)、単粒子測定に関する共同研究(2社)、質量分析装置印加測定機構開発(1社)

・文部科学省地域イノベーション・エコシステム形成プログラム(2017~2021)「革新的無機材料技術の産業実装による信州型地域イノベーション・エコシステム」により、社会実装を加速化している。

##### 【野崎チーム】

・CRESTでの研究連携により実用化研究を予定している

##### 【松方チーム】



- ・開発した分離膜 (Ag-FAU, Cs - BEA, Na-ZSM-5, Si-CHA) について企業との連携を実施・検討
- ・CREST での研究連携により実用化研究を予定している
- ・NEDO「革新的分離技術の導入による省エネ型基幹化学品製造プロセスの研究開発」(2016-2017)
- ・NEDO「二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発」(2017-2021)
- ・SIP-II「脱炭素社会実現のためのエネルギーシステム研究開発計画」(2018)

**【陰山チーム】**

- ・複合アニオン系：民間企業アドバイザー契約
- ・酸水素化物：民間研究所共同研究
- ・触媒研究：民間企業共同研究
- ・太陽電池：民間企業共同研究
- ・光触媒：民間企業共同研究

**【加藤チーム】**

- ・CREST での研究連携

**【関根チーム】**

- ・EIG-CONCERT-Japan「超空間制御による機能材料」(2019-2021)
- ・電場反応：民間企業との連携検討
- ・ガス反応：民間企業との共同研究 ※JST-MIRAI に採択 (2019)
- ・CREST での研究連携

**【山本チーム】**

- ・CREST での研究連携

**【櫻井チーム】**

- ・DDS 開発：大学、民間企業と共同研究

**【高田チーム】**

- ・CREST での研究連携

**【一杉チーム】**

- ・電池界面：民間企業数社と共同研究
- ・AI ロボット：共同研究先調査中 ※JST-MIRAI に採択 (2019)
- ・AI ロボット材料開発：ライセンス、ベンチャー

**【水口チーム】**

- ・AI ロボット：共同研究先調査中

(4)国内外での受賞、報道など

①主な顕彰・受賞

- ・植村卓史：日本学術振興会賞 日本学術振興会 2016年2月
- ・植村卓史：日本化学会学術賞 日本化学会 2021年3月

- ・手嶋勝弥：ACS OMEGA Award アメリカ化学会 2017年8月
- ・野崎京子：Arthur K. Doolittle Award アメリカ化学会 2015年
- ・野崎京子：Ziegler Lecturer 2018 マックスプランク研究所 2018年10月
- ・野崎京子：August Wilhelm von Hofmann Lecture Award ドイツ化学会 2019年9月
- ・野崎京子：日本化学会学会賞 日本化学会 2020年3月
- ・陰山洋：日本化学会学術賞 日本化学会 2017年3月
- ・加藤隆史：日本化学会賞 日本化学会 2017年3月
- ・関根泰：日本化学会学術賞 日本化学会 2019年1月
- ・関根泰：文部科学大臣表彰科学技術賞 文部科学省 2020年4月
- ・櫻井和朗：高分子学会賞（科学） 日本高分子学会 2018年5月
- ・高田十志和：日本化学会賞 日本化学会 2017年3月

## ②報道、プレスリリース

数多くの新聞・雑誌、TV等で研究成果が報道された。研究機関と科学技術振興機構との共同プレス発表のみ以下に記載する。

### 【植村チーム】

1. 2015年7月1日 「混ざり合わないポリマーを完全に混ぜる手法を開発」
2. 2018年1月23日 「分子の並びを巧みに制御できる高分子合成法を開発」
3. 2018年4月25日 「細孔空間を使って異なる分子を交互に配列」
4. 2018年9月7日 「末端だけが異なる高分子の精密分離に成功」

### 【陰山チーム】

1. 2015年10月20日 「活性水素”を利用した新しい酸窒素化物の合成法の開発」
2. 2017年10月31日 「負電荷をもつ水素の新たな性質を発見」
3. 2020年11月24日 「原子空孔の配列を制御する新手法の発見」

### 【関根チーム】

1. 2017年6月7日 「再生可能エネルギー等を利用して、ほしいときにほしだけ低温小型でオンデマンドに駆動するアンモニア合成プロセスを開発」
2. 2017年6月7日 「新規な骨格構造を持つゼオライトの合成に成功」
3. 2018年8月14日 「従来の定説を覆す新規なF T合成触媒」

### 【一杉チーム】

1. 2017年2月9日 「数理的フレームワークにより微小電線の形成過程を再現」
2. 2020年11月19日 「自律的に物質探索を進めるロボットシステムを開発」

## 8. 総合所見

### \* 研究領域としての研究成果の見通し

一期採択では出口に向けた実用化可能性をかなり意識し、二期採択では出口意識と科学的な新規性・独創性のバランスを重視し、三期採択では科学的に興味深いもの、長期的に新産業創造につながる可能性の有る課題といった方針で採択した。

結果的に 2021 年 9 月末時点で、三期を通じての発表論文総数は 799 報であり、学術として客観的にみて高いレベルで成果を発信することができたと考えている。この中で、幾つかの課題、例えば植村課題、陰山課題、高田課題、一杉課題等は新しい学術領域へと発展に繋がる成果が得られたと考えており今後の発展を期待したい。また手嶋課題、松方課題、加藤課題、関根課題等はその重要性への認識が社会動向・技術動向からより重みを増している課題であると思う。またこれらの成果をもとにリーダー及び共同研究者がキャリアアップし、よりよい研究環境を獲得できたことも喜ばしいことであった。

多くの課題で民間企業との共同研究を積極的に推奨したことが機能し、いくつかの課題については科学から技術への移行が進みつつある、或いは、見え始めていると認識している。手嶋課題、野崎課題、松方課題、加藤課題、関根課題、山本課題等で顕著である。特許については企業を共同研究者として実施した課題では外国出願を含めて十二分に多くの特許出願がなされた。2021 年 9 月末時点で三期を通じての日本出願数 87 件、PCT 外国出願数 23 件であり、CREST として十分なアウトプットであると考えている。特に野崎課題の極性基含有ポリプロピレン、手嶋課題の全固体電池での特許出願は顕著であった。事業化を意識した試作、パイロット試験、特許ライセンスに多くの進展があった。

また当初は予想していなかった新しい発見、例えば 8 員環と 12 員環の 3 次元ゼオライト（関根課題）、新しい光半導体の発見とその概念の拡張（陰山課題）等や、期間中にスピントロニクス熱電変換の主流がスピンゼーベックから異常ネルンスト効果に移る（水口課題）、環状触媒による高分子の転換反応での適用範囲の広がり（高田課題）、全固体電池の酸化物系固体電解質と正極材の界面抵抗の発現要因の解明・対応（一杉課題＋手嶋課題）、AI 型無機材料合成ロボット開発のプログラムを CREST 研究期間中に追加したことが国内を先導する研究に発展したこと（一杉課題）、プラトニックミセルをベースにした DDS への応用展開の可能性が得られたこと（櫻井課題）等、今後の発展が大いに期待できる。

### \* 研究領域のマネジメントについて

研究代表者から月報を提出いただき研究の進捗を積極的に把握したこと、必要に応じて行うサイトビジットによるチーム会議など、有効だったと考えているが、採択したどの先生も、その領域では著名な方であり、研究の進め方については高い見識を持ってお

られており、その研究活動を支援することで十分であったと考えている。特に興味深い進捗、成果については、特許出願やプレス発表等について適宜対応していただいたが、一つのプロジェクト内で民間企業が共存した場合、プロジェクトリーダーとそれぞれの民間企業との関係が縦の関係であり、企業間の情報交換という横の関係はあまり機能しないということは今後の課題点であろう。一方、NEDO や JST プログラムへの発展的展開、民間企業とのプロジェクトへの技術移管などもみられ、当初の想定を実現できたと考えている。

**\* 本研究領域を設定したことの意義**

“ナノテクノロジーは新産業創出の有望な手段である”ということ、“超空間制御”という言葉で表現し、研究課題を募集した。その際に民間企業との共同研究を推奨したことにより、アカデミアの研究で散見される自己主張的な将来事業ではなく、真に未来社会が求める研究課題について、現実的に要求される多くのハードルの理解、気づき等を研究代表者、研究参加者に体験していただいたことは意義深いことであると思う。他の CREST と比較してこの色合いを強くしたと思っているが、複数の新しい研究領域が立ち上がっている、あるいはその萌芽につながる結果が得られたことに加えて、実用化に近い段階に研究開発が進んでいる事例も複数件得られており、このような領域設定・運営も有効であったと考えている。研究領域全体として考えると科学と技術が良くバランスできていると考えている。

本領域の最終年度の 2020 年度はコロナ禍への対応、気候変動の深刻化、特に気温上昇の抑制の為にいくつもの革新技術の切望が国内外で顕著になった一年であった。これに対し、本領域で研究活動による成果の多くがそれらに大きく貢献できる可能性があると考えている。革新的エネルギー変換材料・プロセス、物質変換材料・プロセス、水を中心とした環境負荷の低減に資する材料、DDS 適用可能な材料等、募集要項に挙げた研究課題が、まさにその意味が実感される時期に来ており、まさに結果的に“やってきて良かった”、時代の先を見越した設定の多い研究領域だったのではないかと考えている。

**\* 今後への期待や展望**

開発ステージに移行した研究課題、移行して良いと思われる研究課題が複数出始めている。JST の他のプログラムへの発展的展開、NEDO 等への研究成果の切り出し・移行、民間企業との共同開発の加速は極めて重要であることと理解している。JST においてもそのような仕組みの更なる整備を期待したい。特に長期的な観点で維持・発展すべき技術をどのような仕組みで運営するかについては、JST の産学連携事業など他事業との連携にも期待したい。

プログラム開始時には存在しなかった SDGs や Planetary Boundaries という概念は、

今後一層重要性を増していくと思われ、それに対する有効な手段が様々な形で要求されることになるだろう。これまで述べてきたように本プログラムの採択課題とその実績をみれば、それらの要求に対して、今後の大きな貢献が期待できると考えている。

#### \*感想、その他

民間企業の研究者を PO にする事例をもう少し増やすと良いのではないだろうか。上述のように成果の出たものをどのように発展させるか（Science としての学術領域、Technology としての新産業創出）について、横断的な仕組みが必要であると思う。これをバランスよく実施するには、経験を積んだ企業の技術系幹部経験者は良く機能すると思う。

JST の知財については、その方針・予算があるのだろうが、企業であればこれは、最優先で特許化すべきという案件が、特許化の Technical な問題で遅延したり、特許化に至らないケースもあるようである。民間から迅速に特許化できるような仕組み、申し合わせが必要かもしれない。

CREST の PO はとても面白い立場だと個人的には思っており、新しい Science を目の当たりにする楽しさとそれが何に使えるかという想像・創造は極めて魅力的な作業である。まだまだやるべきことは多い。本領域に関わった多くの研究者ばかりでなく、21 世紀の地球規模の課題、日本の重要課題を共有し、その解決の為に技術論や戦略を作るような仕組みが必要だと考えている。

なお、櫻井チーム、高田チーム、水口チームの三課題については、新型コロナウイルス感染症の影響により半年間の研究期間の延長を実施した。三課題いずれにおいても、短期間で実験的制約を受けながらの研究推進であったが、今後の研究進展に繋がる成果が得られており、十分評価に値すると判断している。

以上