

## ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクト事後評価報告書

【研究総括】 中村 栄一 (東京大学大学院理学系研究科／教授)

【評価委員】 (あいうえお順)

阿知波 洋次 (首都大学東京大学院理工学研究科／教授)

大須賀 篤弘 (京都大学大学院理学研究科／教授)

川合 眞紀 (東京大学大学院新領域創成科学研究科／教授 兼 理  
化学研究所基幹研究所／主任研究員)

高橋 保 (委員長：北海道大学触媒化学研究センター／教授)

### 評価の概要

フラーレンやナノチューブなどの炭素系クラスターは、電子機器や医療技術をはじめとした各種産業技術での応用展開が見込まれている物質である。これら物質群に内在する性質を引き出すと同時に、新たな性質を付与するというコンセプトは、新しい科学技術基盤を構築するなど、大変重要な要素が含まれている。ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクトでは、研究総括である中村栄一博士の、それまでの精密合成化学における研究知見を出発点として、デバイス工学や顕微鏡科学などの分野も採り入れた新しい研究領域の開拓を目指してきた。

独創的な発見と実績に基づき十分に練られた計画でプロジェクトが始まったが、結果として当初計画した以上の興味深い反応、分子構造、デバイス特性、顕微鏡観察技術などが次々と発見され、驚きに満ちた研究成果として結実した。とりわけ有機分子の動画撮影は、世界初の画期的成果であり、その解釈も含めて広い分野に影響、波及する技術である。また、独自に合成した新規分子を新しい手法で積層した塗布型有機薄膜太陽電池は、実用化を見据えて次の研究フェーズに進みつつある。これらの成功は、様々な状況に対応できる分子を自在に設計、合成できる合成化学の力に裏付けられている。

以上を総合すると、ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクトは卓越した研究水準にあり、戦略目標「環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製」に資する十分な成果が得られたと認められる。

## 1. 研究プロジェクトの設定および運営

### 1-1. プロジェクトの全体構想

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

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

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

### 1-2. プロジェクトの枠組みや研究体制、および研究活動の状況

上記設定目標を実現するために、中村研究総括は

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

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

さて、本プロジェクトの評価としては、2007 年 11 月に中間評価が実施された。有機小分子の運動を世界で初めて電子顕微鏡で直接観察することに成功するなど顕著な成果を挙げており、当時の評価委員から一致して高い評価を受けた。プロジェクトの終了に向けては、分子の動画撮影に関する基本的課題の検証と、グループ間のさら

なる連携強化による研究展開を要望した。

成果の詳細については次章で述べるとするが、全てのグループにおいて中間評価以降も顕著な研究展開があった。ナノ構造解析グループでは分子動画撮影の検証を進め、ついには化学者の夢であった化学反応の電子顕微鏡による直接観察に成功した。また、機能素子グループとデバイス創製グループの連携が明らかに強化されており、新規に合成したフラレン誘導体を用いた有機 EL 素子、有機薄膜太陽電池が構築された。とりわけ有機薄膜太陽電池は実用化に向けた体制の構築を進めつつある。これらを踏まえ、中間評価の提言に応える効果的な運営がなされると同時に、当初の目標を遙かに上回る成果を挙げたものと評価したい。当プロジェクトによって生み出された成果は、基礎学問として重要なもの言うまでもなく、産業化に近いものを含み、さらに新しいサイエンスの潮流として広く異分野に波及しうるものを多く含んでいる。ERATO プロジェクトの高い目標・理念に見事なまでに応えたと言える。

以上ここまで、プロジェクトの設定や運営、研究活動状況について述べてきた。中村総括の強力なリーダーシップにより、一つの理想形とも言える研究体制を敷き、各グループがそれぞれ、あるいは連携してプロジェクトの中心に据えた目標に収束する成果を挙げたことは賞賛に値する。また、本プロジェクトに参画した若手研究者は、終了までに多くが大学などのポストに転出しており、若手のキャリアパスとしても本プロジェクトの研究員のポジションが有効であったことは明瞭である。

〔研究プロジェクトの設定および運営〕 a+ (特に優れて的確かつ効果的であった)  
 〔研究活動の状況〕 a+ (特筆して望ましい研究活動・展開を示した)

## 2. 研究成果

### 2-1. 機能素子グループ

機能素子グループでは、合成化学の手法を駆使して機能性フラレン誘導体の開発を行ってきた。フラレンの官能基修飾の可能性を広げ、「フラレンの合成化学」の新局面を開拓し、その有用性を実証したと言える。将来の材料提供を見据えて高効率反応、複数の官能基を導入する反応、安価な試薬を用いる反応を開発するなど、スケールアップを容易にするための工夫が新規反応の随所に見られる。また、得られた誘導体は有機太陽電池、有機 EL 素子、液晶、単分子デバイスなどの材料となりうる機能を獲得した。創出された新規分子は数百種類にも及ぶ。

特筆すべき成果は枚挙に遑がないが、中間評価後の成果でとりわけ言及すべきなのは、二重付加型フラレン SIMEF (ビスシリルメチルフラレン) の開発であろう。高効率反応の開拓を通じ、電子受容体に適した電子物性とフラレン特有の集積特性を見事なまでに両立した分子を創出した。SIMEF の開発が後に言及する有機薄膜太陽電池の効率向上の鍵となっており、PCBM 等の既存電子受容体材料より優れた特性を示したことは応用に向けて極めて重要な成果である。

論文掲載、特許出願などの充実を見ても、本グループがプロジェクト躍進の原動力として大きな役割を果たしてきたことは疑いのないところである。

### 2-2. デバイス創製グループ

デバイス創製グループでは、機能素子グループや東大化学教室のグループと連携し、独自材料による新規デバイスの創製を担った。中間評価後 2 年間の進展は目を見張るものがあり、従来型とは異なる構造を有する有機 EL 素子、有機薄膜太陽電池を創製、論文発表をすると同時にプレス発表を行った。いずれの成果も新聞、Web に多数記事が掲載され、社会から高い評価を受けた。

また、本グループに対する高い評価は、上記のような目に見える形の成果のみならず、デバイス創製の事前検討において、極めて綿密かつ精緻な戦略を立てていた点にも与えられるべきであろう。機能素子グループによって開発された新規分子が短期間の内にデバイスに結びついたのは、当グループによる系統的な HOMO/LUMO 準位とキャリア移動度に関するデータ取得法の開発と、適切な有機デバイス作成装置の開発に依るところが極めて大きい。

具体的成果としては、塗布型有機薄膜太陽電池について言及する。このデバイスでは、電子受容体として SIMEF、電子供与体として独自にテトラベンゾポルフィリン (BP) を用い、世界最高レベルの変換効率 (論文既報値 5.2%) を得た。BP も独自に用いた低分子材料であり、将来実用化に向けてのハンドリングの容易さが考慮されている。また、BP の物質特性を十分に活かし、p-i-n 型三層構造を SIMEF と共に構築することに成功した。有機薄膜太陽電池の成功は、機能素子グループとの連携が格段に進歩したことを示しており、異分野結集型のプロジェクトとして極めて理想的な姿であると言える。

ここに述べたように、実用に近い有機デバイスの創製に成功したことは高く評価できる。総括、グループリーダーらの実用化に向けた意識が高く、企業とタイアップした今後の展開に期待される。

### 2-3. ナノ構造解析グループ

ナノ構造解析グループでは、計画当初から有機小分子の構造を電子顕微鏡で直接観察することを目指してきた。この野心的、挑戦的なテーマにおける基本的戦略は、必要と考えられる機能をもつ電子顕微鏡を開発すると同時に、可視化に適した分子を設計・合成し、さらに観察に適した環境場を十分に考察するところにある。こうした優れた視点のもと、中間評価までに単一有機分子の立体構造が時々刻々と変化する様子を動画として撮影することに成功した。これは当プロジェクトを代表する成果の一つであり、当該分野の大きな進展を印象づけた。観測した分子運動の解釈や理解については、今後とも多くの議論を巻き起こすであろうが、評価委員の要望に添った基礎的な検証が行われてきており、観察できる分子・現象の拡大に指針を与えている。

本グループではプロジェクトのおよそ中間段階でグループリーダーの交代があったが、成果は減速することなく芳香族アミド結合の可視化、ナノホーン外部に結合した巨大分子の動的解析などを次々に成功させた。そして最近、フラーレンのナノチューブ内での二量化反応、つまり次の大きな目標であった化学反応の原子レベルでの可視化に成功し、論文・プレス発表した。電子顕微鏡の中では困難と思える温度制御、特に低温での観察にも果敢に挑戦し、反応する分子の原子像を捕らえるところまで来たことは高く評価できる。ここで観測された化学反応の詳細については、今後さらに電界の効果、電子照射の効果なども併せて、他の化学反応観測手法の原理原則も加味した解釈に期待したい。

ここに述べたように、電子顕微鏡により様々な分子が、一分子のレベルで観測できることを世界に先駆けて示してきた業績は高く評価できる。

以上ここまで、プロジェクトを構成する 3 つのグループ研究成果および所見を、今後への期待も含めて記述してきた。グループ毎の研究成果は言うまでもなく、国際的に有力な論文誌への掲載、あるいは特許の取得がなされており、質・量共に充実している。

プロジェクト終了直前の 2010 年 1 月、JST 戦略的イノベーション創出事業に「塗布型長寿命有機太陽電池の創出と実用化に向けた基盤技術開発」という課題名で中村研究総括らが採択された。幸いにして、ERATO で得られた成果を切れ目無く次のフェーズに移行させることが可能になった。今後、実用に向けた研究開発のさらなる加速が期待できる。

〔研究成果（科学技術的側面）〕 a+ （成果として秀逸である）

〔研究成果（産業・社会的側面）〕 a+ （成果として秀逸である）

### 3. 総合評価

ERATO 中村プロジェクトは、合成化学・デバイス工学・電子顕微鏡などの異分野の研究者を結集し、各々が自らの枠を超えて貢献したことにより、稀に見る成功を収めた。研究総括の強力なリーダーシップによって導かれたのは明白であり、理想的なプロジェクトのマネジメントがなされた。当プロジェクトによって生み出された成果は、基礎学問として重要なのは言うまでもなく、産業化に近いものを含み、さらに新しいサイエンスの潮流として広く異分野に波及しうるものを多く含んでいる。ERATO プロジェクトの高い目標・理念に見事なまでに応えたと言える。

以上、ERATO 中村活性炭素クラスタープロジェクトは卓越した研究水準にあり、評価委員の総意として、戦略目標「環境負荷を最大限に低減する環境保全・エネルギー高度利用の実現のためのナノ材料・システムの創製」に資する十分な成果が得られたと判断する。

〔総合評価〕 A+ （戦略目標の達成に資する十分な成果が得られた）