

## ERATO 山元アトムハイブリッドプロジェクト事後評価(最終)報告書

【研究総括】山元 公寿(東京工業大学 科学技術創成研究院化学生命科学研究所 教授)

【評価委員】(敬称略、五十音順)

塩谷 光彦(東京大学 大学院理学系研究科化学専攻 教授)

鈴木 賢(旭化成株式会社 上席理事/研究・開発本部化学・プロセス研究所 所長)

所 裕子(筑波大学 数理物質系 教授)

三澤 弘明(委員長;北海道大学 電子科学研究所 研究推進教授/名誉教授)

森川 健志(株式会社豊田中央研究所 Beyond-X 研究部門 シニアフェロー)

## 【プロジェクトの概要】

ERATO 山元アトムハイブリッドプロジェクト(2015年10月発足)の全体構想は、従来まで未開拓の物質群であったサブナノサイズの同種または異種元素の原子数が精密に制御されたサブナノ粒子を創製し、次世代の革新的機能材料を生み出すことである。規則的な幾何学構造を持つ精密高分子構造体( dendrimer)を利用した独創的な創製アプローチとしてアトムハイブリッド法を確立させるとともに、これらサブナノ粒子の新物質群ライブラリーを構築し、構造や触媒特性・電磁特性などを解析して新物質群の位置付けを明確にしてきた。

2021年4月からのERATO追加支援期間(機関継承型)では、本期間で得られた研究成果を核とし、サブナノ粒子の新たな機能開拓等に取り組むとともに、これまでに構築したサブナノ粒子ライブラリーのデータベース化と公開、研究機関におけるアトムサイエンスの拠点の構築を目指した。

## 【研究プロジェクト(領域)の設定および運営に対して】

本プロジェクトは、アトムハイブリッド法の活用によるサブナノ粒子群の創製の他、サブナノ粒子の新たな物性を開拓することを目標としており、従来とは異なる新たな合成方法と構造解明の手法を開発するという点で極めて挑戦的な取り組みといえる。また、本プロジェクトの進展に伴い、 dendrimer 構造と合金構造の相関、合金構造と活性の相関の解明等の新たな挑戦的課題が生まれつつあることから、基本構想の発展性が高く、新しい学問領域の起点と波及効果が示されている。サイエンスのみならず、従来よりも飛躍的に高い活性の触媒や発光・電子デバイスなど、社会実装を目指すべき研究成果の創出も期待できる。

本プロジェクトでは、サブナノ観察・サブナノ物性・サブナノ反応・社会実装の4つのグループが設定され、各研究グループに有機化学、触媒化学、物理化学、分光学など専門の異なる優秀な若手研究者が配置された。グループ間のコミュニケーションを密接に行う仕組みも構築され、研究総括の強力なリーダーシップのもとで研究活動が機能的に運営された。プロジェクトヘッドクォーターは、特許出願や権利化活動等を通じ、応用研究も意識した上での基礎研究の推進を十分に支援した。追加支援期間では、企業との共同研究の実施により合成方法の検討や物性評価等に取り組む等、産学連携体制の構築に向けた活動を引き続き積極的に推進した。

## 【研究の達成状況および得られた研究成果】

本プロジェクトにより、異なる種類の金属原子を含む膨大な化合物群の創製を可能にするアトムハイブリッド法の、汎用性と拡張性の高さが実証された。創製される化合物群における元素組成の組合せも無数にある。本プロジェクト期間中に実用元素70種類のうち67種類を用いた最大5元素までを集積したサブナノ粒子の作成に成功した。これらの成果による学術的波及効果は非常に高いと評価できる。また、サブナノ粒子の触媒反応の発現、新たなホウ素原子層物質の発見、低加速原子分解能STEM(走査型透過電子顕微鏡)を活用した金属ナノ結晶には見られないサブナノ粒子の動的挙動の可視化、AI技術を導入した高度な分析手法を駆使した構造解析など、いずれも学術的に非常に高いレベルにあ

る。特に、高い活性と選択性を有するサブナノ粒子触媒を実現したことは、従来の固体触媒の研究開発における概念を覆す特筆すべき成果である。追加支援期間では、ホウ素原子層物質の二次元構造を制御した合成技術の開発、STEM 像データをもとに AI 技術を用いることで可能にしたサブナノ粒子の原子構造解析技術の構築等の成果が得られた。研究成果が、Nature や Science の姉妹誌、JACS (米国化学学会誌)などの著名な学術誌に多く発表されていることも評価に値する。さらに、インパクトファクターの高い複数の国際レビュー誌の編集委員会からサブナノ粒子の総説の執筆を依頼されて発表している。これは、輩出された研究成果が世界トップレベルであると認知されている証左といえる。

なお、サブナノ粒子の価電子数を制御して電子状態を変化させることにより、磁性機能の発現に成功したことも顕著な成果である。今後はそれらの機構解明に向けて、化学分野のみならず他の学術分野への展開も積極的に進めていただきたい。サブナノ粒子の物性解明を進めることにより、科学技術イノベーションに寄与する更なる成果が期待される。なお、追加支援期間を含むプロジェクト実施期間中に、19 件(国内出願 17 件、PCT 出願 2 件)の特許出願が行われており、うち 10 件の特許が登録された。

#### 【研究成果の科学技術、社会・経済への貢献】

本プロジェクトの実施により、従来、物理化学的な手法を用いて真空中で行われてきたサブナノ粒子の合成を、合成化学的に液相中で行うことが可能になり、サブナノ粒子の大量合成に道が拓かれたことは、国際的に高く評価されてきた。超原子、サブナノ粒子触媒、ホウ素原子層物質などの新物質群を誕生させた科学技術への貢献度も極めて高い。また、サブナノ粒子の STEM による高速原子動画撮像は、原子間結合と開裂を伴う動的構造解析を可能にし、物質状態の常識を覆す新しい物質概念の創出につながることを期待される。その他、AI 技術を活用した原子構造解析技術を使った原子間結合のライブラリー作成も計画されており、これらの研究成果が他の研究機関でも活用されることで、今後も物性の基礎研究や、新奇な触媒活性などの成果創出に大きく貢献することが期待される。

社会・経済への貢献としては、サブナノ粒子の新たな活性化機能の発見により、新規合金触媒による希少資源の有効利用やクリーンかつ省エネな化学合成法の開発をはじめ、エネルギー創成、化成品合成への貢献も期待される。追加支援期間では、サブナノ粒子合成のノウハウ(試薬組成、合成方法、合成のポイント、STEM 観察像など)のデータベース化も達成された。また、 dendrimer の合成技術について民間企業とのライセンス契約を締結し、試薬が販売されるに至った。ホウ素原子層物質についても企業からの関心が高く、計 10 社との打合せやサンプル供給などを通して評価を行っている。さらに、企業との共同開発による、ポリエチレンイミンを鑄型としたサブナノ粒子の合成法の確立は、製造コストの大幅な低減が見込まれることから、社会実装に向けた特記すべき成果として今後のさらなる展開が期待できる。

#### 【追加支援による研究体制の定着・発展と研究成果の展開】

ERATO 本期間から、研究総括が所属する研究機関である東京工業大学には、「アトムハイブリッドマテリアル研究ユニット」が設置され、追加支援期間中も本プロジェクトの中核的役割を果たしてきた。当該研究ユニットは、2025 年度までの支援が決定し、引きつづき ERATO で構築した研究体制の定着・発展の取組がなされるとのことである。学内外の関係組織との緊密な連携のもと、上記の成果を基盤的技術と位置づけ、原子の機能・反応・動力学に関する新しい学理の構築を核とした、特徴ある研究活動が継続・発展することを期待したい。

また、本プロジェクト終了後の展開を見据え、大型の競争的資金の獲得もなされているが、これらは山元研究総括だけでなく、グループリーダークラスらも独自に獲得している点は評価できる。こうした点は若手研究者の育成という面でも重要であり、実際に 3 名のグループリーダーの助教から准教授、講師への栄転をはじめ、研究員、RA の全員がプロモーションできたことも特筆すべき点といえる。

上記に述べた活動と並行し、国際共同研究の推進および国際シンポジウムの開催により、異分野の共同研究者も含めたネットワーク構築が図られた。追加支援期間では、対面形式で3つの領域(原子分子ダイナミクス、超原子・オンデマンド合成、ホウ素原子層物質)において、学外研究者や企業も含めたシンポジウムを開催した。ホウ素原子層物質の領域については、コンソーシアムの形成につながり、多くの企業と機能別に共同研究を推進した点は高く評価できる。

以上を総合すると、本プロジェクトは全体的に大幅な進捗が見られ、多数の顕著な成果が生み出されていることから、戦略目標「二次元機能性原子・分子薄膜による革新的部素材・デバイスの創製と応用展開」の達成に資する十分な成果が得られていると評価できる。

[総合評価]A+(十分な成果が得られている)

以上