

（令和 4 年 7 月_文末に特記事項を追記）

ERATO 伊丹分子ナノカーボンプロジェクト事後評価（最終）報告書

【研究総括】伊丹 健一郎（名古屋大学 トランスフォーマティブ生命分子研究所(WPI-ITbM)、
大学院理学研究科／拠点長・教授）

【評価委員】（敬称略、五十音順）

北川 宏（京都大学 大学院理学研究科／教授）

袖岡 幹子（理化学研究所 袖岡有機合成化学研究室／主任研究員）

戸部 義人（委員長；大阪大学産業科学研究所 産業科学ナノテクノロジーセンター
／招へい教授）

橋詰 富博（株式会社日立製作所研究開発グループ／シニア研究員）

評価の概要

本プロジェクトの全体構想は、未踏・新奇なナノカーボンを構造的に純粋な分子として設計・合成するとともに、それらを基盤として圧倒的に優れた機能性材料を創成し、それらの応用展開までを図ることにより、「分子ナノカーボン科学」という新分野の確立と、イノベーションの創出を目指すものである。具体的には、次の 3 つのテーマに取り組んだ。

（1） 構造が明確に定まったカーボンナノチューブとグラフェンナノリボンさらには新奇な 3 次元湾曲ナノカーボンの精密合成法を開発するとともに、その応用展開を図る。

（2） 走査型プローブ顕微鏡、単一ナノ構造近接場分光イメージング、単一光子計数技術ならびに X 線結晶構造解析を駆使した単一ナノカーボンの構造・物性解析を行い、ナノカーボンの構造・物性相関やナノカーボン間の相互作用を明らかにする。

（3） ナノカーボン分子の集合体や単結晶のユニークな特徴を活かした新しい吸着・磁性・光学マテリアルの創出を目指す。

上述の目標達成に向けて、伊丹研究総括が合成化学の力量を発揮しつつ反応開発から取り組むことで自在に目的化合物を合成しようという着眼点は、既存の方法を利用して炭素骨格を構築することが多い他の研究とは一線を画しており、本研究の最も特徴的かつ秀でた点である。また、中空分子の集合体を用いた応用を目指すグループと構造が規定されたカーボンナノチューブの物性の解明を目的とするグループを含めることで、合成化学にとどまらずより包括的にナノカーボンの科学技術分野の拡張を目指している点も評価できる。それにより、研究目標・計画を有機化学分野にとどまらず材料ならびに応用物理分野に拡張し、新たに合成された物質の可能性を追求する計画は、意欲的であり高く評価される。

プロジェクトの運営体制として、伊丹研究総括のもとに編成された 3 グループのそれぞれにグループリーダーを配置し、各グループに十分な数の研究員と技術員が配置された。合成された新物質の太陽電池材料としての性能評価ならびにカーボンナノチューブの力学特性の計測に関しては、共同研究先である学外の専門家に委託することで研究の効率化を図った。研究場所は主にキャンパス内の 3 か所に分散しているが、グループ内はもとより伊丹研究総括とグループリーダーをはじめとするメンバー間の意思疎通は十分図られていた。

社会・経済への貢献については、産業界との連携を複数の企業との間で実施しており、すでに試薬として上市されている化合物があるほか、機能材料としての応用に関する共同研究も進んでいるので、十分な連携がなされたと判断される。また、合成された化合物の多くは新しい炭素骨格をもっているため、 π 共役系化合物に対して一般に期待される光・電子材料としての機能だけでなく、機械的性質や動的性質を利用した機能材料への応用も考えられ、産業界に刺激を与えるものと期待される。さらに、アウトリーチ活動については、一般市民を対象とする講演会や中高生を対象とする講演会・教室等におけ

る活動に非常に積極的に取り組んだ。肉眼では見ることができない物質である分子のイメージを一般市民や中高生に把握させることは容易ではないが、伊丹研究総括らの熱意と念入りに作成された画像を用いて巧みに興味を惹き付けることで、科学技術の普及に大きく貢献したといえる。

以上を総合すると、本プロジェクトは高度な目標を見事に達成し、戦略目標「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」の達成に資する十分な成果が得られたと評価できる。

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

本プロジェクトでは「分子ナノカーボン」の自在合成と物性の解明を目的としている。「分子ナノカーボン」とは構造や分子量が規定された巨大芳香族炭化水素とみなすことができ、それらのなかでも特徴的な2次元あるいは3次元の構造をもつ多様な化合物群を目標物質に定めている。これらの化合物はデバイスへの応用の可能性と同時に、天然物がそうであったように合成化学の新手法開発の目的物としての観点から、世界的に活発な研究対象となっている。言わば合成化学的に取っ掛かりのない炭化水素を、伊丹研究総括の合成化学の力量を発揮しつつ反応開発から取り組むことで自在に合成しようという着眼点は、既存の方法を利用して炭素骨格を構築することが多い他の研究と一線を画しており、本研究の最も特徴的かつ秀でた点である。また、中空分子の集合体を用いた応用を目指すグループと構造が規定されたカーボンナノチューブの物性の解明を目的とするグループを含めることで、合成化学にとどまらずより包括的にナノカーボンの科学技術分野の拡張を目指し、ナノカーボンに新しいブレークスルーを起こしている点も評価できる。

1-2. プロジェクトの目標・計画

伊丹研究総括が専門である化学合成グループにおいては、触媒的合成法を機軸とする有機合成化学に関する豊富な知識と経験に基づき、既存の方法では合成できなかった(1)ナノグラフェン類似の構造をもつ平面芳香族炭化水素、(2)非平面構造をもつ新奇な芳香族炭化水素、(3)ナノチューブ類似の中空構造をもつ環状芳香族炭化水素を合成する計画である。これらの化合物は多くの化学者が過去に挑んだにもかかわらず達成できなかったものや、現在も取り組んでいるものであり、それらを目的物に設定すること自体が有機化学の分野に大きなインパクトを与えると期待されるため、この計画は秀逸といえる。

また、上述のように、研究目標・計画を有機化学分野にとどまらず材料ならびに応用物理分野に拡張することにより新たに合成された物質の可能性を追求する計画は、意欲的であり高く評価される。

1-3. プロジェクトの運営

研究体制として、伊丹研究総括のもとに編成された3グループのそれぞれにグループリーダーを配置し(加えてグループ1および3にはサブグループリーダーも配置)、各グループに十分な数の研究員と技術員が配置された。合成された新物質の太陽電池材料としての性能評価ならびにカーボンナノチューブの力学特性の計測に関しては、共同研究先である学外の専門家に委託することで研究の効率化を図った。また、研究推進主任および研究推進員による研究支援ならびに知財化等の支援体制も十分に整っていた。研究場所は主にキャンパス内の3か所に分散しているが、グループ内はもとより伊丹研究総括とグループリーダーをはじめとするメンバー間の意思疎通は十分図られていた印象を強く受けた。

研究費の執行に関連しては、特に分子集積、物理工学グループの研究計画を遂行するのに必要とされる特殊測定装置、分光器や顕微鏡などの設備が導入され、充実した体制が整っていた。また特殊な

技術を要するレーザー分光装置や超高真空 STM 装置も時間をかけて調整され順調に稼働していた。国際的な連携に関しては、当初から米国の L. T. Scott 教授を連携研究者として共同研究を行っているほか、合成グループにおいていくつかの共同研究がなされた。まだ多くの成果は未発表であるが、機能、物性研究面における共同研究も行われ、全体として活発な国際連携が行われたと判断される。産業界との連携に関しても複数の企業との間で行われており、試薬として上市されている化合物があるほか、知財権の関係から具体例の開示はなかったが機能材料としての応用に関する共同研究も進んでいるので、十分な連携がなされたと判断される。

伊丹研究総括が高度な有機合成化学の専門家であるのに対し、まったくバックグラウンドの異なる若手のグループリーダーとの間で学問的に深いところでの相互理解が行われているかについては懸念されるところであった。しかし、合成から物性にわたる優れた研究成果から判断すると、伊丹研究総括による緩急をつけたマネジメントによりそのギャップはかなり埋められたものと判断される。論文執筆をはじめとした成果創出が研究期間内に全研究項目において満遍なく出たとは必ずしも言えないものの、研究期間終了後にさらなる成果の創出が期待できる基盤が構築できたと考える。

〔研究プロジェクトの全体構想〕〔研究プロジェクトの目標・計画〕〔研究プロジェクトの運営〕

a+ (十分に的確かつ効果的である)

2. 研究の達成状況および得られた研究成果

2-1. 化学合成グループ

化学合成グループでは、従来は合成困難と考えられていた多環状芳香族炭化水素を標的として、研究総括のリーダーシップのもとにグループがもつ合成化学の力量をいかに発揮することでそれらの合成を見事に達成した。標的としたのは、(1)グラフェンナノリボン (GNR) 類似の芳香族炭化水素分子ならびにオリゴマー・ポリマーと、非平面構造をもつワーブドナノグラフェン (WNG) ならびに負の曲率をもつ化合物を中心とする芳香族化合物群と、(2)リング、ベルト、チューブのような中空構造をもつ環状芳香族化合物ならびにそれらを構成要素するカテナン、ノットのような機械的に結合した環状芳香族化合物を含む 3 次元化合物群である。以下に(1)、(2)のそれぞれについてその内容を評価する。

(1)の課題に関しては、APEX と名付けた π 骨格拡張法により、コーブ型のエッジ構造をもつ可溶化 GNR とそれに関連する多環状芳香族化合物の合成を達成した。さらに基質を工夫することでアームチェア型のエッジ構造をもつ可溶化 GNR の合成も実現した。特に、触媒的重縮合反応がリビング型で進行することにより分子量が制御された高分子量の GNR が合成できたことは、基礎化学として興味あるとともに応用の観点からも極めて重要な成果である。これらの成果で特筆すべき点は、既存の反応を利用するのではなく、反応基質の設計とそれに適した触媒系の設計により目的物の合成を達成していることであり、合成化学の力量が最も発揮された特徴的な成果といえる。加えて、クロロフェニレンの APEX 2 量化により位置選択的に置換トリフェニレンを合成し、その酸化的炭素結合形成・脱水素反応によりアームチェア型 GNR 類似の多環状芳香族化合物の合成法も開発したが、ここでも合成化学の巧みな技法が用いられている。さらに APEX 法の拡張により、他法では合成困難な 8 員環の高効率形成反応を開発し、APEX 法の多様性と有用性を見事に証明した。

本プロジェクト開始前に報告された非平面 2 次元シートである WNG は、触媒的クロスカップリングと酸化的炭素結合形成・脱水素反応により短段階で合成できるだけでなく、特異な構造をもつシート状物質として興味もたれる。本プロジェクトでは、APEX 法に関連するねじれ構造をもつ芳香族炭化水素の合成へと発展させるとともに、WNG への電子的摂動を与える置換基導入や水溶性の付与ならびにバイオイメージングへの応用に関する研究が行われた。なかでも WNG 周辺炭素への位置選

択的ホウ素化法の開発とそれに基づく共役系の拡張は、負の曲面をもつ巨大 π 電子系物質の足掛かりとして分子と物質の概念をつなぐ物質への発展が期待される。

以上のように、本課題においては合成化学の力量を遺憾なく発揮し、APEX 反応と名付けられた芳香環への位置選択的な官能基導入および芳香環上での位置選択的な sp^2 炭素間結合形成を可能とすることにより、多様かつ多種類の新しい多環状芳香族骨格の合成を達成した。

(2)の課題に関しては、本プロジェクト開始以前に環状にフェニレン鎖がつながったシクロパラフェニレン (CPP) の合成を国内外の2つの研究グループとほぼ同時に発表していた。プロジェクト開始後の CPP 関連研究として、環サイズの異なる CPP やナフタレン、ピレンなどの拡張共役系から構成される CPP の合成、さらには有機分子との会合現象や金属錯体の合成と物性調査を行い、継続して優れた研究成果をあげた。またカーボンナノケージという中空構造のかご型3次元構造をもつ CPP の類縁体にも研究を展開した。これらの成果は、CPP 関連研究が世界的に活発に行われるようになったきっかけとなるものであり、芳香族化学の分野に大きなインパクトを与えている。

次のターゲットとして達成されたベルト状分子 (カーボンナノベルト: CNB) の合成は有機化学の金字塔として歴史に残る成果である。ベルト状分子では、 π 電子の非局在化の様相が CPP のようなリング状分子とは全く異なりナノチューブに近づくと考えられるため、「分子ナノカーボン」の研究プロジェクトとして欠かせることのできないターゲットである。したがって、その合成を達成した意義は大きい。しかも、過去に多くの研究者が CNB の合成に挑戦したにもかかわらず、これまで成功した例がなかった。今回の合成に用いられた反応自体は既知のものであり APEX 法のような斬新さはないが、大きなひずみが生じるベルト構造の形成段階において還元的なクロスカップリング反応を用いることで、目的物やそれに至る中間体の酸化的分解を抑制するという合成デザインが巧みになされており、本グループの合成化学における実力が遺憾なく発揮されたといえる。さらに、最初の合成から間を置かず、サイズの異なる CNB を合成するとともに、企業との連携により試薬として市販するまで迅速に展開した。ナノチューブ状構造への伸長や CNB の集積による集合体構築といった新しい化学領域への発展を期待させる大きな成果である。このように、従来の芳香族化合物の化学では不可能であった分子群の合成を実現し、いわば常識を覆す成果を挙げたことは称賛に値する。

さらに、当初は計画されていなかった CPP の発展として、炭化水素骨格で構成されたカテナン、ノットとよばれる特徴的な幾何学構造をもつ複雑な分子の構築に成功した。このような複雑な幾何構造を構築するには、共有結合によるピン止め法を用いるより超分子化学的相互作用を用いるほうが効率的であるため、従来は炭化水素で構成されるものの合成は困難とされてきた。合成収率はまだ高くないが、炭化水素カテナンおよびノット構造構築の成功のカギは四面体構造をもつケイ素化合物の利用であり、従来の常識を覆す大きなインパクトがある。ここでも合成化学的力量が存分に発揮されたといえる。これらの特異な構造をもつ縮合多環芳香族炭化水素の物性の解明を通じて、超分子化学や物性有機化学の発展に大いに寄与することが期待される。

さらに同グループでは(1)、(2)の多様な化合物群を用いて、主に共同研究を通じたデバイス応用に関する研究を行っている。現時点において実用の可能性を示唆する特筆に値する性能は観測されていないが、このタイプの研究には非常に多くの実験の積み重ねが必要であるため、性急に成果を期待するのは好ましくない。ターゲットを絞りこんだ実験とともに、当プロジェクトの終了後も基礎物性の一つとしての計測が継続的に行われることを期待する。

これらの研究成果は、影響力の大きな論文に多数発表されているだけでなく、伊丹研究総括が多くの招待講演を行うとともに数々の荣誉ある賞を受賞していることから客観的に高く評価されており、化学分野に大きなインパクトを与えていることは明らかである。伊丹研究総括の活躍ぶりは化学分野にと

どまらずより広い分野からも注目されていることは、その成果の大きさを物語っている。知財化に関しては、研究課題の性格上、論文ほどの多くを期待することはできないが、可能なものについては積極的に行っており、十分であると判断される。総合すると、本グループの成果は極めて優れており、十二分に高い水準にあるといえる。

2-2. 分子集積グループ

このグループは、中空の構造をもつシクロパラフェニレン (CPP) や類似のかご型巨大炭化水素の空孔を利用した吸着・包接機能の基礎研究と応用の可能性を探索することを目的とした。本プロジェクトの産業応用の点では重要な位置を占めている。

CPP 結晶が形成する空孔への分子の取り込みや相互作用に関して、(1)アルコールや水の吸脱着特性、(2)芳香族小分子の共結晶化、(3)酸素、窒素分子の吸着、(4)CPP が形成するチャンネル内の水分子の結晶化の詳細な研究を行った。これらはすべて CPP 結晶が形成する空孔の性質を解明する重要な研究である。また、カーボンナノリング、カーボンナノベルト熱膨張・収縮についても調査した。これらは一連の新規物質が合成されて初めて系統的に行うことができる基礎物性に関する研究であり、その意義は大きい。しかし、全般に着実な進捗が見られるものの、その度合いはやや遅く、現時点では CPP が形成する特異な空間に特異的な特筆すべき現象は見られていない。

チューブ状の結晶構造の形成を目的とするクリスタルエンジニアリングの課題においては、結晶多形とゲスト分子吸着能の関係に関する研究と溶融した芳香族小分子を用いる包接結晶の合成に関する研究を行った。特に溶融した分子を溶媒として用いる再結晶法は、古くから難溶解性化合物の再結晶法として用いられてきた方法であるが、意図的に包接結晶合成法として利用する着想はユニークであり、発展が期待される成果である。

ヨウ素を包接した CPP 結晶に関する研究では、電場の印加による白色発光という新奇現象を観測した。発光種の電子状態などの詳細についてさらに解明する必要があるが、CPP の中空構造に特異的な現象としての基礎科学的観点だけでなく、応用面からも興味を持たれる。

固体表面への環状共役分子の吸着とピリジン存在下における熱分解により、固体触媒の単体としての利用が期待される含窒素炭素物質の合成に関する研究も行っているが、構造が規定された物質をターゲットとする本プロジェクトの主旨には合致しないため、副次的な扱いとすべきであろう。むしろ、集積化の過程で見出された攪拌によって生じる動的な気-水界面における分子膜形成法は、原理と適用範囲が解明されれば、新たな自己集積膜形成法としての可能性を秘めており、注目される。

総合すると、本グループでは CPP の結晶構造の制御と空孔の利用を目的とした物理化学的研究を行ってきた。化学合成グループと比べて基礎的な研究課題ではあるが、成果のインパクトはそれほど大きくない。また、化学合成グループからの試料提供が律速になることを考慮しても、投稿中や投稿予定の論文を含めた発表論文は多くはない。引き続き蓄積された測定・観測結果を報告し、分子ナノカーボンの科学の確立に努めていただきたい。

2-3. 物理工学グループ

本グループでは、単一の幾何構造をもつカーボンナノチューブ (CNT) の機械的、熱的物性の解明と、合成グループから提供される分子ナノカーボンの物性測定を主なミッションとしている。

構造的に単一の CNT を得るため、まずアルコールの CVD 法で CNT を合成し、その幾何構造を光弾性散乱を用いて確認するとともにラマン分光により直径に関する情報を得ることで、試料を作製している。それらに必要な合成装置や分光装置を組み立て調整するところから研究を始め、CNT の幾何構造に関する多くのデータを蓄積することにより、CNT の構造に依存した物性研究や幾何構造選択的な合成への土台を築いた。

学外の研究協力者との連携により、上記の方法で幾何構造が確認された単一単層 CNT の応力ひずみならびに引張強度といった機械特性の測定に世界で初めて成功した。測定の結果から、CNT の強度が直径と幾何構造の両方に依存する傾向を明らかとし、強靱な材料設計の指針を導いたことは、CNT の機械材料としての可能性に関連して高く評価される。

CNT の励起子熱光物性に関しては、これまで未解明であった 1 次元物質固有の熱輻射特性の実験的観測に成功している。まず、CNT からの熱輻射を選択的に検知する実験系を構築し、加熱用レーザーを用いてラマンスペクトルの変化から CNT の温度を計測した。その結果、幾何構造の異なる半導体型 CNT と金属型 CNT では全く挙動が異なり、前者では熱によって生成した 1 次元励起子の再結合により極めて狭いスペクトル幅の熱的発光を示すという結論を導いた。基礎科学的な成果ではあるが、熱電変換への応用の可能性もあり高く評価される。

化学合成グループとの直接的な連携については、まずコーブ型エッジ構造をもつグラフェンナノリボン (GNR) のキャリア移動度測定が行われた。さらにアームチェア型 GNR の STM 観測や種々の分子ナノカーボンの構造と物性の相関評価に関する研究を通じて化学合成グループをバックアップし画期的な成果に結びつけている。環状ナノカーボン分子を鋳型とする CNT の構造制御に関する研究にも多大の努力が費やされたが、これはまだ実現していない。

総合すると、本グループは単一の幾何構造をもつ CNT の幾何構造に依存した機械的、熱的物性に関して非常に優れた成果を得た。計測系の構築と整備に要する時間を考慮すると十分な進捗度と言える。単一の幾何構造をもつ CNT と化学合成グループで合成された分子ナノカーボンの間には、幾何構造と物性との関係という共通点がある。したがって、GNR をはじめとする分子ナノカーボンの構造および物性の解析を通じて同グループをサポートしたことは、合成と物性の連携によるナノカーボンの科学の確立という本プロジェクトの目的に著しく寄与する成果であり高く評価できる。

2-4. プロジェクト全体

上述のように、3 グループの中で化学合成グループの成果は群を抜いている。なかでも、APEX 法と名付けた π 構造拡張法により GNR 類縁体を合成した研究は材料科学分野にも大きな影響を与え合成化学の力量を存分に示したこと、およびベルト状構造の芳香族炭化水素 CNB の初の合成は有機化学における歴史的業績であることは特筆に値する。このグループの研究成果だけでも ERATO の業績として十分に高い水準にあるといえ、今後の新規集積体構築にも期待が持たれる。

化学合成グループに比べると、同グループからの材料の提供を待つ必要があることや、精密な計測装置の構築・整備に時間を要するため、分子集積グループと物理工学グループには不利な点はあるものの、これらの両グループについても一定の進捗は認められた。特に、分子集積グループでは、プロジェクト終了後も、着実に蓄積された測定・観測結果を報告し、分子ナノカーボンの科学の確立に努めていただきたい。物理工学グループでは、ナノカーボン関連物質としての CNT の幾何構造に基づく機械的強度や熱的物性に関して非常に優れた成果を挙げた。また、化学合成グループにより世界で初めて合成された GNR 類の物性および構造評価を行い、化学合成グループとの連携によるナノカーボンの科学の確立に寄与したことも大いに評価される。

総合すると、化学合成グループが全体を大きくリードし、物理工学グループがそれに追随した。これに分子集積グループで得られた知見が加わり、全体としては非常に高い水準にあるといえる。

〔研究の達成状況および得られた研究成果〕 a+ (十分に高い水準にある)

3. 研究成果の科学技術、社会・経済への貢献

3-1. 科学技術への貢献

プロジェクト全体として、*Angewandte Chemie* や *Journal of the American Chemical Society* などの多数の優れた論文とともに *Science* や *Nature*、およびその姉妹紙などの注目される論文を通じて科学技術への国際的な貢献は十分になされている。

化学合成グループの業績は特に有機化学分野の発展に大きな貢献をしている。特筆すべき成果として、具体的には以下のものを挙げることができる。

(1) APEX 法と名付けた π 構造拡張法により可溶化 GNR 類縁体を合成した研究は、有機化学の成果としても高く評価されるだけでなく、合成化学に基づいて材料科学分野に興味ある新物質を提供した点において同分野にも大きな影響を与えた。

(2) ベルト状構造の芳香族炭化水素 CNB の初の合成は有機化学における歴史的業績である。

(3) CPP に関する一連の研究は、関連する研究が世界的に活発に行われるようになったきっかけとなるものであり、芳香族化学分野に大きなインパクトを与えている。

これらは合成化学の力を認識させる独創的なものであり、伊丹研究総括がこの分野を先導していることは多くの受賞からも明らかである。また、新たな合成化学の手法に基づいて、光・電子材料としての応用が期待されるような構造の規定された共役 π 電子系物質を提供し、材料科学分野との連携で新しい分野を開拓しようとする潮流を生むきっかけの一つにもなっている。したがって、ナノカーボン分子合成に関する科学技術分野における貢献は非常に大きいといえる。

3-2. 社会・経済への貢献

現時点において、カーボンナノベルトやグラフェンナノリボンの量産化・市販が実現しており、産業創出につながる成果は得られているといえる。このような未知の骨格をもつ巨大芳香族炭化水素を多数創出することで、イノベーションにつながる可能性はあり、その安定・安価な合成法が確立されれば、大きな社会貢献につながる。

特に、合成された化合物の多くは新しい炭素骨格をもっているため、一般に期待される光・電子材料としての機能だけでなく、機械的性質や動的性質を利用した機能材料への応用も考えられる。また、本プロジェクトで開発された合成法は融通性が高いため、適切な分子デザインに合わせた有機合成に適用できる点においても貢献が期待される。たとえば、APEX 法は様々な共役系分子の合成にも適用できるため、機能性材料だけでなく天然物や医薬品を含む幅広い有機化合物の合成に用いられる可能性があり、合成方法論としての価値が高い。

〔科学技術への貢献〕〔社会・経済への貢献〕 a+ (十分な貢献が期待できる)

4. その他特記すべき事項

4-1. 若手研究者支援

若手研究者支援に関しては、すでに 28 名のメンバーが大学・企業等研究機関のポジションに就くか昇任しているほか、若手研究者向けの賞にも、特定の研究者に限ることなく多くのプロジェクトメンバーが受賞している。したがって、十分なキャリアパス支援・人材育成が行われたと判断できる。

4-2. アウトリーチ活動

アウトリーチ活動については、伊丹研究総括が一般市民を対象とする講演会や小・中・高生を対象とする講演会・教室等における活動に非常に積極的に取り組んでいる。肉眼では見ることができない物質である分子のイメージを一般市民や中高生に把握させるのは容易ではないが、研究総括の熱意と念入り

に作成された画像を用いて巧みに興味を惹き付け、社会に対し科学の夢を伝えており、科学技術の普及に大きく貢献しているといえる。

5. 総合評価

本プロジェクトでは「分子ナノカーボン」の自在合成と物性の解明を目的としている。「分子ナノカーボン」とは構造や分子量が規定された巨大芳香族炭化水素とみなすことができ、それらのなかでも特徴的な2次元あるいは3次元の構造をもつ多様な化合物群を目標物質に定めている。物性研究の対象には、単一の幾何構造を有するカーボンナノチューブも含み、化学合成と物性科学との連携により、総合的にナノカーボンの科学技術の確立を目指している。伊丹研究総括のリーダーシップのもとに「化学合成」、「分子集積」、「物理工学」の3つのグループが形成され、これらと研究支援グループの連携のもとに研究が行われている。研究の理念、目的、運営、実施状況、成果など申し分のないプロジェクトである。

「化学合成グループ」では、有機合成化学の力量を発揮し反応開発から取り組むことで、これまで合成困難であった巨大炭素骨格を自在に合成することを主目的とした。このアプローチは、既存の方法を利用して炭素骨格を構築することが多い他の研究と一線を画する本研究の最も特徴的かつ秀でた点である。実際に、多くの卓越した研究成果を挙げているが、なかでも APEX 法と名付けた π 構造拡張法によるグラフェンナノリボン類縁体の合成やベルト状構造をもつ芳香族炭化水素であるナノカーボンベルトの初の合成は、化学分野にとどまらず材料分野にも貢献する特筆に値する成果である。

「分子集積グループ」では、化学合成グループから提供される中空分子の集合体の構造制御ならびに空孔を用いた機能開拓を目的とし、着実に研究を推進したが、現時点の成果は必ずしも目的を十分に達成しているとは言い難い。プロジェクト終了後も蓄積された測定・観測結果を報告し、分子ナノカーボンの科学の確立に努めていただきたい。「物理工学グループ」では、ナノカーボン関連物質としての CNT の幾何構造に基づく機械的強度や熱的物性に関して非常に優れた成果を挙げた。また、化学合成グループにより世界で初めて合成された GNR の物性および構造評価を行い、化学合成グループとの連携によるナノカーボンの科学の確立に寄与したことも大いに評価される。

これまでの研究成果に限れば、3グループの中で化学合成グループの成果は ERATO 事業全体の中でも群を抜いており、極めて高い水準にある。化学合成グループが全体を大きくリードし、物理工学グループはそれをバックアップするとともに独自に優れた知見を見出し、さらに分子集積グループにおいても合成化合物に関する知見を提供し、全体としては非常に高い水準にある。若手研究者の育成、アウトリーチ活動も積極的に行われており、これらの点でも十分な達成度に達している。また、研究総括は、ERATO で得られた成果をもとに 2019 年度より自らが研究代表者を務める科学研究費補助金・特別推進研究「未踏分子ナノカーボンの創製」をスタートさせた他、物理工学グループの宮内雄平グループリーダーも 2018 年度より CREST 研究課題「ナノ物質科学を基盤とするサーモエレクトロニクス」の創成」をスタートさせるなど、ERATO で得られた成果をシームレスに展開させる基盤を構築した点も高く評価される。したがって、プロジェクト全体としては十分な成果が得られたと判断される。

以上を総合すると、本プロジェクトは独創的な構想であり、挑戦的な目標達成に向けた学際的研究体制を構築し、高い研究水準につなげたと評価でき、ERATO 制度の特徴を最大限に発揮したものであると評価する。さらに本プロジェクトは全体的に順調に進捗し、戦略目標「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」の達成に資する十分な成果が得られたと評価できる。

〔総合評価〕 A+（十分な成果が得られた）

特記事項（令和 4 年 7 月追記）：

本プロジェクトで開発した APEX 法（縮環 π 拡張: Annulative $\pi(\pi)$ -Extension）に重合反応を適用してグラフェンナノリボン（GNR）を精密合成した研究成果に関し、令和 4 年 3 月 16 日、国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学によって、研究活動に関する不正行為（改ざん・ねつ造）が認定された。

https://www.nagoya-u.ac.jp/info/20220316_jimu.html

https://www.nagoya-u.ac.jp/info/upload_images/20220316_jimu.pdf

https://www.nagoya-u.ac.jp/info/upload_images/20220318_jimu.pdf

具体的には、本事後評価（最終）においても重要な成果として挙げた、化学合成グループによる、APEX 法を用いたコーブ型のエッジ構造をもつ可溶化 GNR の合成、アームチェア型のエッジ構造をもつ可溶化 GNR の合成において不正行為が確認され、これらに関連する論文 2 報は著者らにより取り下げられている。また、化学合成グループと物理工学グループとの連携で行われたコーブ型エッジ構造をもつ GNR のキャリア移動度測定、アームチェア型 GNR の STM 観測などの分子ナノカーボンの構造と物性の相関評価に関する研究においては、化学合成グループによる試料合成の根拠データに明らかな改ざんとねつ造が見られ、合成された試料は論文に掲載された構造を有するものではなく、これに関する論文 1 報も著者らにより取り下げられている。

本事後評価（最終）においては、有機化学のみならず材料化学分野にも貢献するものとして、これら成果を高く評価しただけに、研究不正があったことは極めて遺憾である。大学院生（当時）による研究不正を防ぐことができず、研究プロジェクトのマネジメントに不足があったことは否めない。研究不正により複数の論文が取り下げられた事実も重い。再発防止策の徹底を強く求める。

他方、APEX 法による GNR 合成に関しては、トリフェニレン骨格の 1 段階合成法の開発とナノリボン合成への応用など、特筆すべき成果が出されている。また、2 次元ナノカーボン以外の成果として、カーボンナノチューブ構造をもつ種々のシクロパラフェニレン（CPP）およびカーボンナノベルト（CNB）の合成と性質の解明、CPP への特異的蒸気吸着プロセスの解明、単層カーボンナノチューブの幾何構造と機械特性の相関などにおいても顕著な成果を挙げている。CPP に関する研究が芳香族化学分野に与えたインパクト、世界初の CNB の合成、更には CNB の市販が実現していることなど、科学技術や社会・産業への貢献も確かである。

以上より、研究活動の一部に不正行為があり、今後の展開が期待された成果のひとつが空疎であったことは極めて残念であるが、いくつもの特筆すべき成果は創出されており、本プロジェクトの総合評価としては A（成果が得られた）とすることが妥当である。

以上