



研究代表者	東京大学・大学院理学系研究科・教授	研究者番号：90262104
	佃 達哉（つくだ たつや）	
研究課題情報	課題番号：26A203	研究期間：2026年度～2030年度
	キーワード：超原子、原子クラスター、原子精度合成、物性機能相関、先端計測、理論化学	

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

人類はこれまで、わずか数十種類の元素をパズルのように組み合わせ、多種多様な機能材料や医薬を創製することで、文明の豊かさや健康を享受してきた。従来の物質開発における基本戦略は、各原子の電子構造や結合性に関する体系的な知識に基づき、それらを目的の形へ精密に組み上げていく手法が主流であった。しかし、現代社会が直面するエネルギー・資源・環境問題を根本から克服し、真に持続可能な未来を拓くためには、既存の延長線上にはない、全く新しい視座に立った物質創成のパラダイムが必要である。

こうした背景のもと、我々は数個から数百個の原子が強固に結集した「原子クラスター」という極微細な粒子に着目した。この粒子は、我々に馴染みの深いバルク（塊）の状態とは峻別される特異な原子配列や離散的な電子状態をとり、既存の通念を覆す驚異的な物性を発現する可能性を秘めている。さらに興味深いことに、粒子全体が一つの「巨大な原子」として振る舞うことから、我々はこれをナノスケールの人工原子、すなわち「**超原子**」と定義した（図1）。超原子の真骨頂は、構成原子の数、種類、あるいはその幾何構造をわずかに操作するだけで、光学的・化学的・電子的特性を劇的かつ自在に変調できる点にある。

本領域では、この超原子を革新的な材料を構成する「次世代の基本単位（パーツ）」と位置づけ、従来の化学では到達し得なかった広大な未知の領域（ケミカルスペース）において、新物質の創出に挑む。自然界の制約を超えた「新たな構成ブロック」を自ら設計し、それらの間に働く相互作用や次元性を精密に制御しながら、結合・会合・組織化させる。これにより、個々の超原子の特性を凌駕する高度な機能を集積させ、新たな物質科学の地平を切り拓く。最終的には、超原子マテリアルに関する構造論・結合論・物性論を包含する強固な学術基盤を構築するとともに、社会的課題の解決に資する革新的材料の創出を目指す。

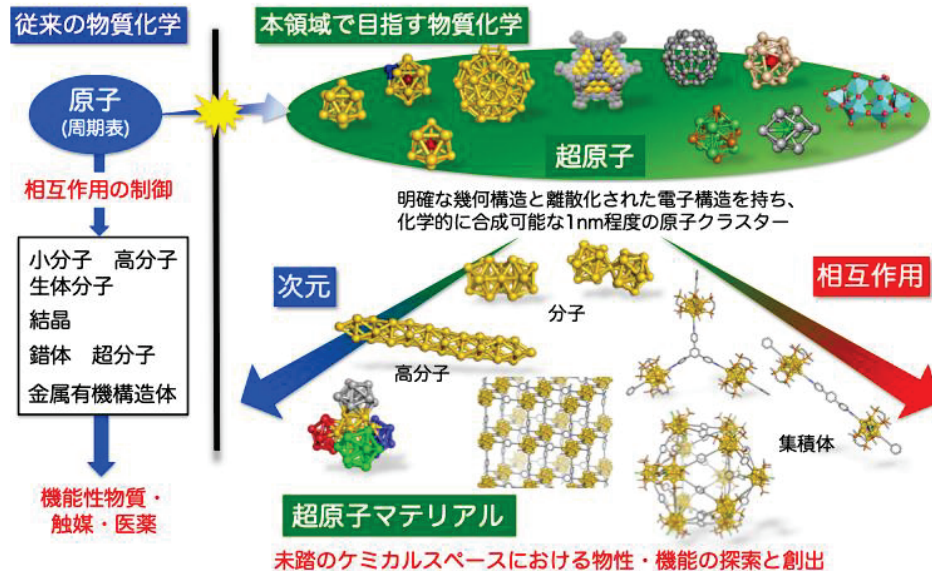


図1. 本領域が目指す超原子を基本単位とする新しい物質化学の概要

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●本領域研究を推進するための戦略

本領域における研究推進の基幹は、原子レベルで構造が厳密に規定された「超原子ライブラリー」の拡充、およびそれらをボトムアップ的に結合・集積化する基盤技術の開発である。これにより、既存物質の延長線上にはない多様な「超原子マテリアル」を創出する。同時に、最先端の計測手法を駆使して構造と物性の相関を明らかにし、個々の超原子が結集することで初めて発現する特異な物性や機能が創発する機構を、理論的に解明する。これらの学理に裏打ちされた精密な設計指針に基づき、目的とする機能を織り込んだ超原子マテリアルを創製する技術を確認することで、超原子を基盤とした新たな物質化学を体系化する。**超原子マテリアルでしか実現できない物性・機能は何か？**という根源的な命題を領域全体で共有し、以下の三つの計画班が有機的に連携してその解を模索する（図2）。

- A01 合成：**多様な超原子の精密創製とその組織化による、革新的マテリアルの創出
- A02 物性・機能：**超原子マテリアルが秘める特異な物性および未知の機能の探索と実証
- A03 解析・予測：**最先端計測と理論解析による機能発現機構の解明、および新規機能の予見

さらに本領域では、特定の機能に焦点を当てた三つの共同研究を推進し、新たな学問領域を切り拓く。

- 光エネルギー変換機能の創発：**近赤外光に対して鋭敏な応答を示す金超原子オリゴマー（「金量子ナードル」と命名）を増感剤として活用する。太陽光に含まれる低エネルギーの近赤外光を、よりエネルギーの高い可視光へと高効率に変換する次世代光変換システムの実現に挑む。
- 触媒機能の創発：**超原子の集積化によって初めて誘起される特異な電子構造や電荷勾配を活用する。水からの水素発生や二酸化炭素の有用資源化などに対して、従来の触媒を凌駕する高い活性と選択性を併せ持つ超原子触媒の創製を目指す。
- 刺激応答多重機能の創発：**内壁に超原子を精密に配列した特異なナノ細孔体を構築し、外部からの化学的・物理的刺激に呼応してプロトンやリチウムイオン等の伝導性の動的な制御に挑む。さらに、超原子特有の電子授受（レドックス）機能を利用することで、従来の多孔質材料では到達し得なかった多種の機能が連動して発現する、革新的なスマートマテリアルの創成を目指す。

●本領域研究で何をもちたらすのか？

上記の取り組みを通して、以下の重層的な波及効果をもたらしつつを目指す（図3）。

- 学理構築：**多彩な構造因子を持つ超原子の基礎物性を解明し、それらを「新しい周期表」として体系化する。超原子マテリアルの合成・構造評価・理論的取り扱いの基盤技術を確認することで、構造論・結合論・物性論・反応論を包含する物質科学の確固たる足掛かりを築く。
- 人材育成：**領域内での分野横断的な人材交流を通して、既存の専門領域の壁を超えた広い視座を持つ、次世代のアカデミア人材を育成・輩出する。
- 社会還元：**超原子マテリアルを用いて、量子材料、発光デバイス、固体触媒、燃料電池、太陽電池、バイオイメーキング、医療などの分野において技術革新をもたらし、地球規模の社会課題の解決に貢献する。

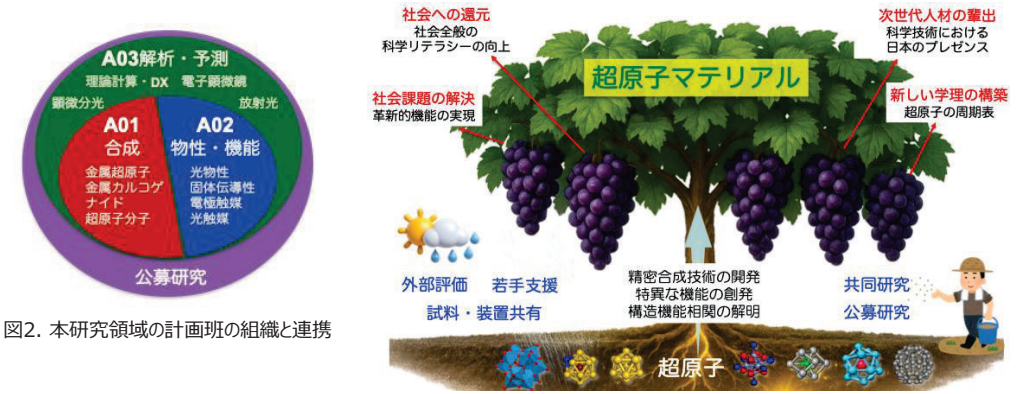


図2. 本研究領域の計画班の組織と連携

図3. 物質化学における新しいパラダイムの創出に向けて