大阪大学

研究紹介

リサーチ 2021

RESEARCH 2021
ISIR, OSAKA UNIVERSITY

ISIR OSAKA UNIVERSITY

産業科学研究所

研究・技術シーズ目次

情報 Information
材料 Material
解析 Analysis
バイオ Bio
医療 Medical

Contents

大阪大学産業科学研究所 研究組織

第１研究部門（情報・量子科学系）	テーマ番号	
量子システム創成研究分野（大岩研）	17	18
界面量子科学研究分野（千葉研）	15	16
先進電子デバイス研究分野（関谷研）	13	14
複合知能メディア研究分野（八木研）	3	4
知能推論研究分野（鷲尾研）	7	8
知識科学研究分野（駒谷研）	1	2
知能アーキテクチャ研究分野（沼尾研）	5	6
第２研究部門（材料・ビーム科学系）		
自然材料機能化研究分野（能木研）	25	26
半導体材料・プロセス研究分野	29	30
先端ハード材料研究分野（関野研）	21	22
エネルギー・環境材料研究分野	23	24
励起物性科学研究分野	36	
量子ビーム物理研究分野（細貝研）	43	44
量子ビーム物質科学研究分野（古澤研）	41	42
第３研究部門（生体・分子科学系）		
励起材料化学研究分野（藤塚研）	31	32
機能物質化学研究分野（笹井研）	33	34
精密制御化学研究分野（中谷研）	51	52
複合分子化学研究分野（鈴木研）	53	54
生体分子反応科学研究分野（黒田研）	49	50
生体分子制御科学研究分野（西野研）	55	56
生体分子機能科学研究分野（永井研）	47	48
産業科学ナノテクノロジーセンター		
ナノ機能材料デバイス研究分野（田中研）	19	20
ナノ極限ファブリケーション研究分野（吉田研）	39	40
ナノ構造・機能評価研究分野（末永研）	37	38
ナノ機能予測研究分野	11	12
ソフトナノマテリアル研究分野（家研）	27	28
バイオナノテクノロジー研究分野（谷口研）	45	46
産業科学 AI センター		
トランスレーショナルデータビリティ研究分野（櫻井研）	9	10
総合解析センター	35	
ユシロ化学工業ポリマーゲル共同研究部門	57	
フレキシブル3D実装協働研究所	58	

テーマ Theme 1

対話を通じて知識を獲得する対話システム

Dialogue Systems Acquiring Knowledge

研究分野 Department 知識科学 Knowledge science

研究者 Researcher 駒谷和範 K. Komatani　武田 龍 R. Takeda

キーワード Keyword 対話システム、対話ロボット、知識グラフ、チャットボット
dialogue system, dialogue robot, knowledge graph, chat-bot

応用分野 Application 医療介護、家電、エンタテイメント
medical care, electrical appliances, entertainment

研究開発段階 基 礎 ▼ ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

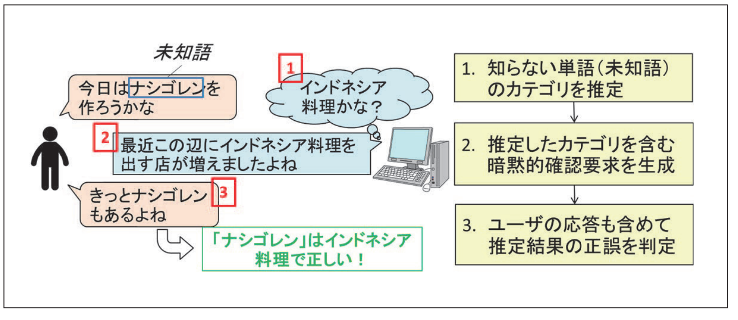
　人と言語を用いてインタラクションするシステムの実現に向けた研究開発を行っています。
　最近一問一答型の対話システムは多く作られるようになってきましたが、それを上回る、飽きられないシステムを実現するための技術が必要です。

概要・特徴

**　対話を通じて知識を獲得する方式に関する基礎研究を行っています。対話の中でユーザ発話から得られる情報をもとに、どのようにシステムが人間に尋ねればいいのかを考える手法を開発しています。**

技術内容

　システムが持つ知識の表現として、単純な質問応答対だけでなく、リレーショナルデータベースよりも柔軟な知識グラフとすることや、そこから対話システムによる応答選択に有用な汎化した知識を取り出すことも検討しています。これを通じて、自然な対話を続けながら、少しずつ賢くなっていくシステムを目指しています。



社会への影響・期待される効果

- 言語を用いた人と機械とのインタラクションを実現
- 機械に対する親密度やユーザエクスペリエンスの向上

【論 文 Paper】

[1] K. Komatani, M. Nakano: User Impressions of Questions to Acquire Lexical Knowledge. Proc. SIGDIAL, pp.147-156 (2020).

[2] K. Komatani, Y. Fujioka, K. Nakashima, K. Hayashi, M. Nakano: Knowledge Graph Completion-based Question Selection for Acquiring Domain Knowledge through Dialogues. Proc. IUI, (accepted), (2021).

【特 許 Patent】

[1] 中野，駒谷，大塚：音声対話システム及び音声対話方法，特許第6126870号，特願2013-040742.

2 テーマ Theme

小型マイクロフォンアレイを使った音源定位

Sound source localization with small microphone array

研究分野 Department	知識科学 Knowledge Science	研究者 Researcher	駒谷和範 K. Komatani　武田 龍 R. Takeda
キーワード Keyword	対話ロボット、音源定位、深層学習 dialogue robot, sound source localization, deep neural network		
応用分野 Application	医療介護、防犯、家電、エンタテイメント medical care, crime prevention, electrical appliances, entertainment		

研究開発段階　基 礎 → **実用化準備** → 応用化

背　景

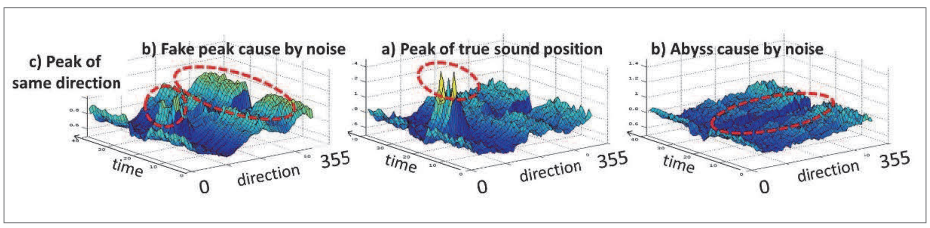
「百聞は一見に如かず」というように、音には一覧性や可視性がなく、記録や検索が難しいという問題があります。また音は可視光などに比べて波長が長い等の性質があることから、回折や反射による残響などの特性があります。このため、とりわけ周辺雑音や複数の音が存在する場合には、音の到来方向を検出するのは単純ではありません。

概要・特徴

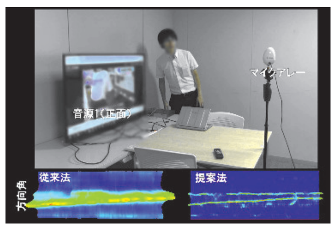
ロボットの頭部に装着された複数のマイクロフォンなど、小型のマイクロフォンアレイを使って、音の到来方向を検出する音源定位を開発しています。これは人の音声に対して応答する対話ロボットを実現するには必須の技術です。

技術内容

特にマイクロフォン間の位置関係や特性をキャンセルするために、無響室において測定したインパルス応答を用い、入力音響信号と方向ラベルの間の写像をDNN (Deep Neural Network) を使って学習することで、高精度化を図っています。またこれを用いた音源分離や音声認識の高性能化にも取り組んでいます。



ロボットのマイクを用いた場合の音源定位結果の例



リアルタイム音源定位

社会への影響・期待される効果

- ロボットに装着された複数のマイクロフォンで音源定位を実現
- 音の到来方向の記録や可視化が可能

【論 文 Paper】

[1] R. Takeda, et al.: Unsupervised Adaptation of Neural Networks for Discriminative Sound Source Localization with Eliminative Constraint, Proc. IEEE-ICASSP, pp.3514-3518 (2018).

[2] R. Takeda and K. Komatani: Unsupervised Adaptation of Deep Neural Networks for Sound Source Localization using Entropy Minimization. Proc. IEEE-ICASSP, pp.2217-2221 (2017).

[3] R. Takeda and K. Komatani: Sound Source Localization based on Deep Neural Networks with Directional Activate Function Exploiting Phase Information, Proc. IEEE-ICASSP, pp.405-409 (2016).

テーマ Theme 3

犯罪捜査支援のためのマルチモーダル生体認証による鑑定システム

Multi-modal Biometric Verification System for Supporting Criminal Investigation

研究分野 Department　複合知能メディア Intelligent Media

研究者 Researcher　八木康史 Y. Yagi　槇原 靖 Y. Makihara

キーワード Keyword　歩容、マルチモーダル、個人認証、犯罪捜査
gait, multi-modal, person authentication, criminal investigation

応用分野 Application　科学捜査 forensics

研究開発段階　基礎　**実用化準備**　応用化

背　景

歩き方の個性に基づく個人認証技術である歩容認証技術は、カメラから離れた場所でも利用可能な唯一の生体情報(バイオメトリクス)であり、近年、注目を集めています。

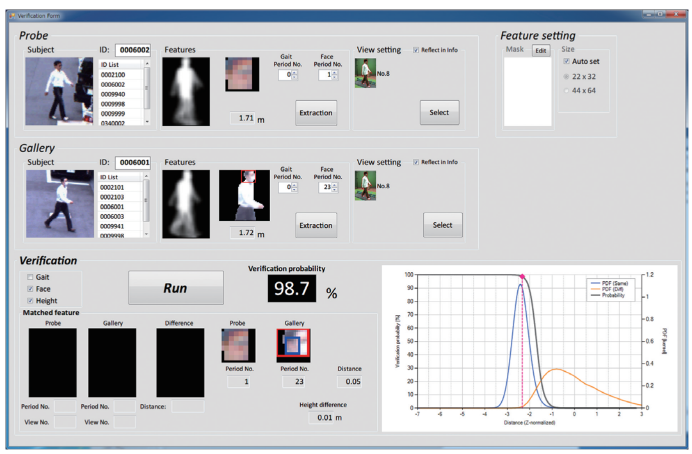
概要・特徴

本研究においては、歩行映像解析により、歩容・頭部テクスチャ・身長のマルチモーダル生体情報の統合による高精度な同一人物性の鑑定を行うシステムを開発しました。単一の防犯カメラ映像からマルチモーダル生体情報を抽出するため、幅広いシーンに適用可能です。また、GUIを備えたシステムとして構築されているため、一定の研修を積むことで、歩行映像解析の非専門家である一般の捜査員でも実施可能になります。

技術内容

本システムは対象の登録ダイアログ、シルエット生成ダイアログ、個別鑑定モジュール、一括鑑定モジュールからなるGUIアプリケーションとして構成されています。

歩容・頭部テクスチャ・身長による認証結果を時空間解像度といった条件変化を考慮して適応的に統合し、本人事後確率(歩容による人物の同一性)を算出します。



社会への影響・期待される効果

- 防犯カメラに映った犯人と容疑者の歩行映像解析による人物の同一性鑑定により犯罪捜査を支援する
- 一般の捜査員向けのマルチモーダル鑑定システムを構築する

【論 文 Paper】

[1] 木村卓弘, 村松大吾, 槇原靖, 八木康史, "歩容・頭部・身長を用いたマルチモーダル鑑定システム", 電子情報通信学会論文誌A バイオメトリクス小特集, Vol. J98-A, No. 12, pp. 659-663, Dec. 2015.

[2] H. Iwama, D. Muramatsu, Y. Makihara, and Y. Yagi, ``Gait Verification System for Criminal Investigation," IPSJ Trans. on Computer Vision and Applications, Vol.5, pp. 163-175, Oct. 2013.

テーマ Theme 4

デュアルタスクによる高齢者認知機能診断システム

Cognitive Assessment for Elderly from Dual-task Performance

研究分野 Department　複合知能メディア Intelligent Media

研究者 Researcher　八木康史 Y. Yagi　槇原 靖 Y. Makihara

キーワード Keyword　デュアルタスク、認知機能計測、ビッグデータ dual-task, cognitive assessment, big data

応用分野 Application　高齢者支援 elderly care

研究開発段階　基 礎　／　**実用化準備**　／　応用化

背　景

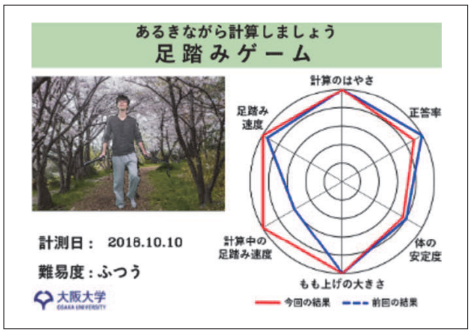
超高齢化社会に向かう中、認知症を患う高齢者は今後増加していくことが予想されます。認知症は、リハビリ・投薬によって進行を遅らせることができるものの、治療・改善は難しいと言われているため、できるだけその初期症状（早期認知障害）を検出し、適切な進行防止策を講じなければなりません。認知症・早期認知障害の診断方法として、Mini-Mental State Examination（MMSE）やFrontal Assessment Battery（FAB）と呼ばれる方法が存在しますが、いずれの方法も臨床心理士によるインタビューや生活観察などが必要なため、頻繁には実施できません。

概要・特徴

歩行などの運動タスクと計算等の認知タスクを同時に行うデュアルタスクを高齢者が実施する様子をセンサ類で観測し、両タスクの振る舞いから早期認知障害の可能性のある群を検出する手法を提案しました。3年以上にわたるシステム運用実績、現場の声を踏まえた設計、収集された（及び、今後収集される）データの規模（人数・実施回数）が本研究の強みです。

技術内容

歩行などの運動タスクと計算等の認知タスクを同時に行うデュアルタスクを高齢者が実施する様子をセンサ類で観測し、両タスクの振る舞いから早期認知障害の可能性のある群を検出します。その手法の中で行われる機械学習や性能評価のために、高齢者の日々のデュアルタスクの様子を自動的に観測・蓄積するゲーム型のシステムを構築し、10を超える高齢者施設や科学館で常設・運用しています。現在運用されているシステムにより高齢者の日々のデータが自動蓄積され、それらを基により良いモデルの学習を進めています。



社会への影響・期待される効果

- ゲーム型のデュアルタスク体験により高齢者の認知機能を推定する
- 多人数・他回数の高齢者デュアルタスクデータセットを構築する

【論 文 Paper】

[1] K.Aoki, T.T. Ngo, I. Mitsugami, F. Okura, M. Niwa, Y. Makihara, Y. Yagi, H. Kazui,``Early detection of lower MMSE scores in elderly based on dual-task gait," IEEE Access, Vol. 7, pp. 40085-40094, Mar. 2019.

【特 許 Patent】

[1] 八木康史, 満上育久, 山添大丈, 中澤満, 丹羽真隆,「デュアルタスク遂行能力評価方法, 及びデュアルタスク遂行能力評価システム」, PCT/JP2016/058353, 2016.

テーマ Theme 5

適応能力を持つコンピュータ技術の開発

Highly Adaptive Computer Technologies

研究分野 Department 知能アーキテクチャ Architecture for Intelligence

研究者 Researcher 沼尾正行 M. Numao　福井健一 K. Fukui

キーワード Keyword 機械学習、人工知能(AI)、専門家エージェント、ユーザインタフェース
machine learning, artificial intelligence, expert agent, user interface

応用分野 Application 自動作曲、ゲーム型教材、データマイニング
automatic composition, educational game, data mining

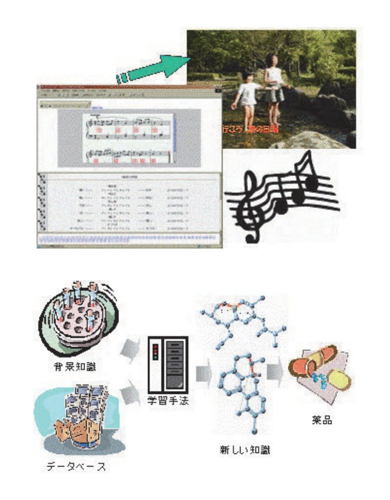
研究開発段階 基礎 → **実用化準備** → 応用化

背　景

情報端末環境が普及するにつれて、インタフェースの悪さに起因するテクノストレスや、スパムメール、多量データによる情報洪水の問題が生じています。本研究では、これらの原因がコンピュータシステムの柔軟性の欠如にあることから、その対策として適応能力を持ったコンピュータの開発を進めてきました。心理実験と高度な機械学習技術の組合せにより、こうした課題の克服を目指しています。

概要・特徴

- **学習機能を持ったコンピュータの開発**
- **複雑な構造をしたデータから新たな知識を発見する手法の開発**



技術内容

学習機能を持ったコンピュータの開発では、高効率化のためのアルゴリズム、学習のための背景知識の獲得など、情報環境の整備を支援しています。これらは、ユーザインタフェースやデータマイニングの技術として定着しつつあります。

このような技術の適用例として、感性獲得機構を提案し、世界で初めて、ユーザの個性と感情に適応して自動作曲を行うシステムを開発しました。

また、膨大な情報空間を活用し、意味を持つ情報を見出す研究を進めており、化学薬品をはじめとする複雑な構造をしたデータから新たな知識を発見する手法を開発しています。大量の化学物質データおよび化学の背景知識によって、構造から生理活性を予測するための新しい知識を発見します。また、新規に発見された規則や相関関係などに基づいて、新たな薬品の開発を促進することを目指しています。

社会への影響・期待される効果

- 高度な学習機能による情報処理の高効率化
- 複雑な情報構造からの新たな知識の獲得

【論 文 Paper】

[1] N. Thammasan, K. Moriyama, K. Fukui, and M. Numao. "Familiarity Effects in EEGbasedEmotion Recognition", Brain Informatics, 1-12 (2016).

[2] V. Vachiratamporn, R. Legaspi, K. Moriyama, K, Fukui, and M. Numao. "An Analysis of Player Affect Transitions in Survival Horror Games", Journal on Multimodal User Interfaces, 9 (1). 43-54 (2015).

【特 許 Patent】

[1] 特願2015-169802.「楽曲聴取経験有無推定方法,楽曲聴取経験有無推定装置,及び楽曲聴取経験有無推定プログラム」

テーマ Theme 6

時空間データからの知識発見と予測

Knowledge Discovery and Prediction from Spatio-Temporal Data

研究分野 Department 知能アーキテクチャ Architecture for Intelligence

研究者 Researcher 福井健一 K. Fukui　沼尾正行 M. Numao

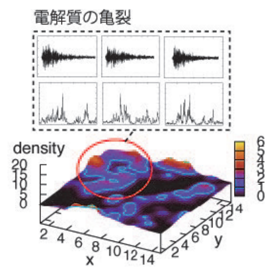
キーワード Keyword データマイニング、人工知能(AI)、機械学習、因果、物理モデル
data mining, artificial intelligence, machine learning, causality, physical model

応用分野 Application 睡眠解析、地震解析、損傷解析、気象予測
sleep analysis, earthquake analysis, damage analysis, climate prediction

研究開発段階 基 礎 — 実用化準備 — 応用化

背　景

自然現象、生体活動、また現代の機器は複数の要素からなり、それらが相互作用しながら秩序を保っています。本研究では、このような多くの因子からなる系のメカニズムの理解を目的として、事象発生の因果関係推定法やクラスタの可視化手法などを開発してきました。複雑な自然現象・生体活動の理解や解明、早期の異常検知や予兆検出、また物理モデルと機械学習の融合による予測精度の向上を目指します。

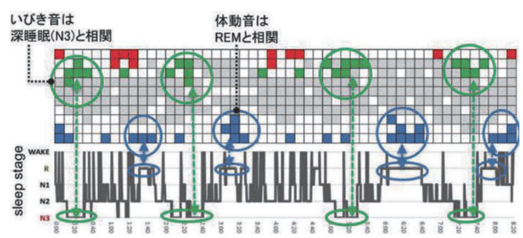


概要・特徴

- **観測データ系列から事象発生の因果関係を推定**
- **時間的に変化するクラスタの様子を可視化**
- **機械学習と物理モデルを融合し高精度化**

技術内容

- **事象発生の因果性データマイニング**
  事象の系列データから因果性を推定するデータマイニング技術を開発し、燃料電池の損傷部材評価や地震発生パターンの解析などへの応用を行ってきました。
- **動的クラスタ可視化ニューラルネットワーク**
  クラスタリングとその時間変化の可視化を同時に行うニューラルネットワークを提案し、睡眠音から睡眠パターンの可視化などの応用を行ってきました。
- **物理モデルを制約とするディープラーニング**
  データから学習するディープラーニングに、その物理現象を表す基礎方程式を制約として導入する方式を提案し、上空の風予測において予測精度の向上を確認しました。



社会への影響・期待される効果

- 複雑な現象からの知識発見
- 状態監視・管理システムへの応用
- 異常・予兆検知への展開

【論 文 Paper】

[1] Ken-ichi Fukui, Yoshiyuki Okada, Kazuki Satoh, and Masayuki Numao. "Cluster Sequence Mining from Event Sequence Data and Its Application to Damage Correlation Analysis", Knowledge-Based Systems, vol. 129, pp. 136-144, 2019.

【特 許 Patent】

[1] PCT/JP2018/029517,「睡眠の質判定システム、睡眠の質モデル作成プログラム、および、睡眠の質判定プログラム」

テーマ Theme 7

ビッグデータからの推定・予測・知識発見

Estimation prediction and knowledge discovery from big data

研究分野 Department　知能推論 Reasoning for Intelligence

研究者 Researcher　鷲尾 隆 T. Washio

キーワード Keyword　ビッグデータ、データマイニング、機械学習、知識発見、最適化
big data, data mining, machine learning, knowledge discovery, mathematical optimization

応用分野 Application　基礎研究成果を含めた機械学習やデータマイニング技術を、科学、情報ネットワーク、品質・リスク管理、医療、セキュリティー、マーケティング、金融など、様々な分野のビッグデータ解析に役立てる応用研究
application to big data analysis of scientific study, information network, quality/risk management, medicine, security, marketing and finance

研究開発段階　基 礎　実用化準備　応用化

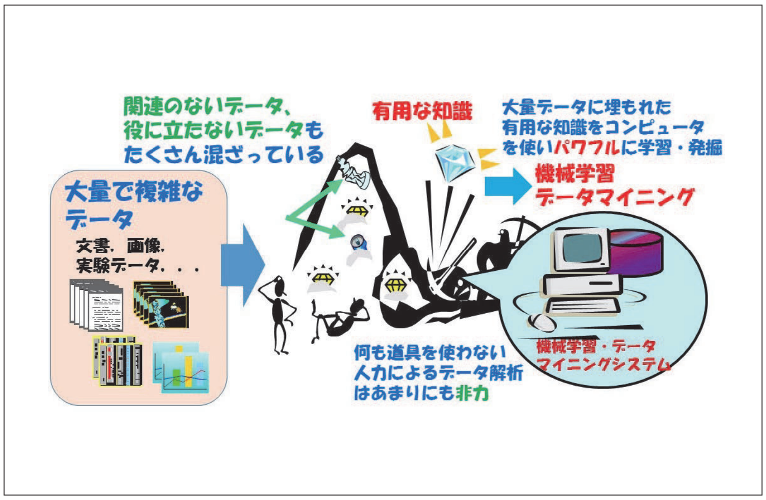
背　景

膨大で複雑なデータから、そこに埋もれた傾向の分析や知識の発見、変化の予測を行うことが求められています。

概要・特徴

膨大な情報の処理をコンピュータにより行うための、機械学習及びデータマイニングと呼ばれる推論方法や技術の研究開発をしています。

多くの科学技術、産業、社会の分野において、膨大な情報を処理することで既存ハード・ソフト技術では達成できない高い性能を有するシステムを実現できます。



技術内容

様々な情報の探索、検索、統計処理、確率計算、データベース、それらを融合した理論、手法、技術、システムツールが含まれます。

社会への影響・期待される効果

- 電力網データから需給管理のための太陽光発電供給モデルを構築
- 顕微鏡画像を1000倍高速に超解像化
- 外れ値に頑健で高次元でも効率的な汎用的機械学習手法
- 量子状態の異常検出によって量子計算の信頼性を向上

【論 文 Paper】

[1] S. Hara, C. Weichih, T. Washio, T. Wazawa, T. Nagai. SPoD-Net: Fast Recovery of Microscopic Images Using Learned ISTA. Proc. the 11th Asian Conference on Machine Learning (ACML'19), pp.694-709, 2019.

[2] M. J. Holland. Scaling-Up Robust Gradient Descent Techniques. Proce. the Thirty- Fifth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI 2021), 2021.

テーマ
Theme
8

計測インフォマティクスによる革新的先端計測の実現

Innovative measurement technology using measurement informatics

研究分野 Department

知能推論
Reasoning for Intelligence

研究者 Researcher

鷲尾 隆
T. Washio

キーワード Keyword

先端計測、機械学習、数理最適化、精度、ロバスト性、低コスト、コンパクト性
measurement, machine learning, mathematical optimization, accuracy, robustness, low cost, compactness

応用分野 Application

計測に向いた機械学習の基礎原理、技術、アルゴリズムを、科学、産業、医療、社会など多方面の先端的計測やIoTセンシングに役立てる研究
application of measurement oriented machine learning to advanced measurement and IoT sensing in science, industry, medicine and society

研究開発段階

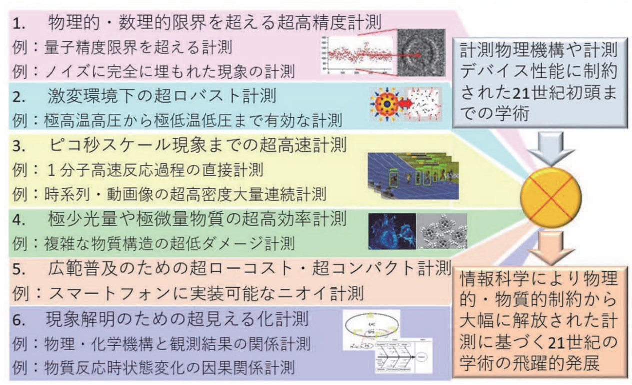
基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

複雑な原理や過程を用いる先端的計測装置やIoTセンサーの高精度化、高感度化、ロバスト化、高速化、低コスト化、コンパクト化、エッジ情報処理の高効率化を行い、広範な問題領域に実装することが求められています。

概要・特徴

複雑な原理を用いる計測過程を機械学習で解析し、その結果得られる計測結果推定モデルを用いて、計測装置やIoTセンサーの高精度化、高感度化、ロバスト化、高速化、低コスト化、コンパクト化を実現する技術の研究開発をしています。また、低消費電力のエッジコンピュータを用いて、上記の情報処理を行うIoTセンシングシステム技術の研究開発も行っています。以上により、現在のデバイス・装置技術では達成できない超高性能な計測装置、センサー、センシングシステムを実現できます。



技術内容

既存の機械学習に加えて、新しく複雑な計測過程をモデル化する機械学習を用いるための理論、手法、技術、システムツールが含まれます。

社会への影響・期待される効果

- 超コンパクト超ローコスト超高精度嗅覚IoTセンサーの実現
- 超高速超解像蛍光顕微鏡の実現
- 超高精度１分子計測ナノギャップセンサーの実現
- 超高精度ウイルス計測ナノポアセンサーの実現

【論 文 Paper】

[1] T. Washio, G. Imamura and G. Yoshikawa, “Machine Learning Independent of Population Distributions for Measurement”, Proc. DSAA2017, 2017.

[2] S. Hara, W. C. Chen, T. Washio, T. Wazawa, T. Nagai, “SPoD-Net: Fast Recovery of Microscopic Images Using Learned ISTA”, Proc. ACML2019, 2019.

テーマ Theme 9

リアルタイム予測システム

Real-time forecasting system

研究分野 Department トランスレーショナルデータビリティ
Translational Datability

研究者 Researcher 櫻井保志
Y. Sakurai

キーワード Keyword 時系列予測、非線形モデル、リアルタイム処理
time-series analysis, non-linear model, real-time processing

応用分野 Application IoT (製造、車両データ解析、環境など)、医療情報
IoT(manufacturing, vehicle sensor data, environmental data, etc.), medical data analysis

研究開発段階 基礎 → 実用化準備 → 応用化

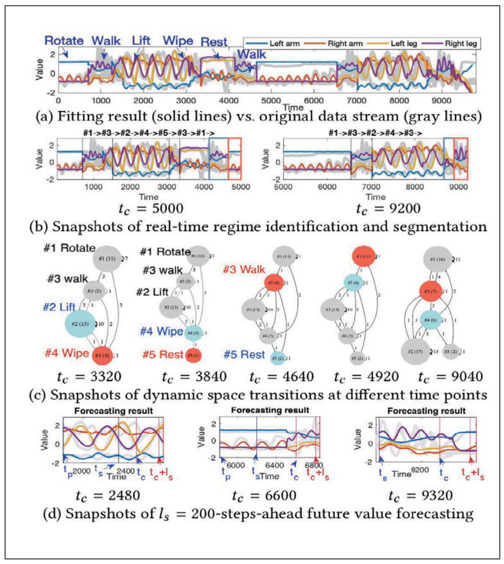
背　景

時系列データは、センサーネットワーク、製造業、経済、ソーシャルネットワーク、医療情報等、様々な分野において大量に生成されています。これらの応用の中で、時系列データのリアルタイム解析、中でもリアルタイム将来予測は、これからのAI時代における最も重要かつ挑戦的な研究課題となっています。

概要・特徴

時系列データは企業活動や人々の行動、自然現象の様々な環境変化や状況変化を表しており、それらの変化は局所的、突発的に起こります。そこで、局所的な環境変化や突発的な状況変化に対して即座に対応することができるリアルタイム予測・要因分析技術を開発しました。

- **時系列データのパターン分け、オンライン学習、将来値の生成、全てをリアルタイムに処理します。**
- **最新の既存手法と比較し大幅な精度向上、計算コストの低減化を達成しています。**



モーションセンサーデータを用いた要因分析の様子

技術内容

時系列モデル間の因果関係（要因－結果関係）を捉え、事象の連鎖をモデル化し、そのモデル選択と将来予測を高速かつ完全自動で行います。数ある予測手法の中で、世界最高の予測精度と計算速度を示しており、最新の深層学習と比較し最大で約670,000倍の高速化、約10倍の高精度化（予測誤差88%減）を達成しています。

社会への影響・期待される効果

- リアルタイムに時系列データの将来値を予測
- 時系列モデル間の因果関係（要因－結果関係）を捉え、リアルタイムに要因分析

【論 文 Paper】

[1] Y. Matsubara, Y. Sakurai: "Dynamic Modeling and Forecasting of Time-evolving Data Streams", ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD), pp. 458-468, August 2019.
[2] Y. Matsubara, Y. Sakurai: "Regime Shifts in Streams: Real-time Forecasting of Co-evolving Time Sequences", ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD), pp. 1045-1054, August 2016.
[3] 松原靖子，櫻井保志："大規模データストリームの将来予測アルゴリズム"，情報処理学会論文誌:データベース，Vol.9 No.4，pp. 32-45，2016年12月.

【特 許 Patent】

[1] 松原靖子，櫻井保志，``予測装置、予測方法およびプログラム"，特願2019-142295，2019年8月1日.

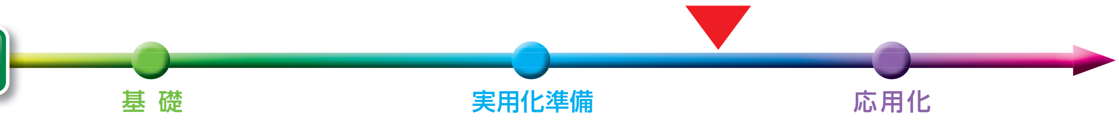
10
テーマ Theme

時系列テンソルからの多角的特徴抽出

Multi-aspect mining of time-series tensor

研究分野 Department	トランスレーショナルデータビリティ Translational Datability	**研究者** Researcher	櫻井保志 Y. Sakurai
キーワード Keyword	時系列テンソル、自動特徴抽出、イベント予測 time-series tensor, automatic mining, event prediction		
応用分野 Application	IoT（製造、車両データ解析、環境など）、医療情報 IoT(manufacturing, vehicle sensor data, environmental data, etc.), medical data analysis		

研究開発段階



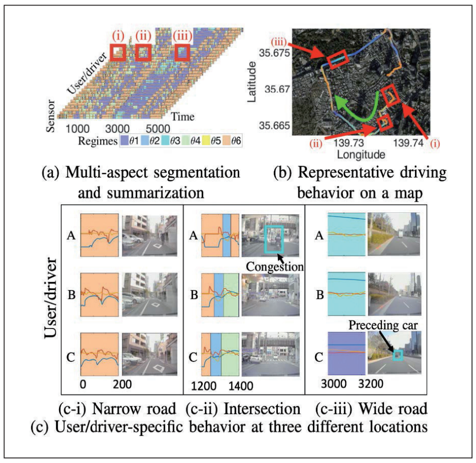
背　景

近年のセンサーデバイスの低価格化や高性能化に伴い、生産設備や車両走行、ヘルスケアデバイスなどから得られる時系列データは、より大規模かつ複雑になっています。このようなデータの利活用において特に重要となるのが、大規模時系列データからの効果的な特徴抽出と情報要約、および将来イベントの予測技術の開発です。

概要・特徴

現実世界で収集される時系列データは（車両、センサー、時間）のような複数の属性を持つデータ形式であり、本研究ではそのような複雑な構造を持つビッグデータから時系列テンソルを用いて効果的に特徴を完全自動で抽出、要約する技術を開発しました。また、要約情報に基づいて様々な事象の発生を予測することを可能とする時系列イベント予測技術を開発しました。

- **時系列テンソルに含まれるパターンの時間遷移と個体差の抽出を全て自動的に行います。**
- **最新の既存手法と比較し大幅な精度向上、計算コストの低減化を達成しています。**



車両走行センサーデータを用いた特徴抽出の様子

技術内容

時系列テンソルの複数ドメインにまたがる多角的なパターンを捉え、そのパターンの時間遷移と固有差をモデル化し、要約情報を高速かつ完全自動で抽出します。右図は、車両走行センサーデータから、ハンドル操作、加減速、停止など車両走行の様々な共通パターンを抽出するとともに、交通状況によって生じる車両走行の違いを把握し、例えば慎重な走行、スムーズで安定した走行、渋滞時の走行など車両走行のグループ化を完全自動で行います。

社会への影響・期待される効果

●完全自動で時系列テンソルの特徴を抽出　●要約情報に基づく高精度なイベント予測

【論 文 Paper】 [1] T. Honda, Y. Matsubara, K. Kawabata, Y. Sakurai: “Multi-Aspect Mining of Complex Sensor Sequences”, IEEE International Conference on Data Mining (ICDM), pp. 299-308, November 2019. [2] 本田崇人, 松原靖子, 根山亮, 櫻井保志: “車両走行センサデータからの自動パターン検出”, 情報処理学会論文誌: データベース, Vol.9 No.3, pp. 1-13, 2016年9月. [3] 本田崇人, 松原靖子, 川畑光希, 櫻井保志: “大規模時系列テンソルによる多角的イベント予測”, 情報処理学会論文誌:データベース, Vol.13 No.1, pp. 8-19, 2020年1月.

【特 許 Patent】 [1] 本田崇人, 松原靖子, 川畑光希, 櫻井保志, “時系列解析に基づくイベント予測装置、イベント予測方法およびプログラム”, 特願2020-8388, 2020年1月22日.

11
テーマ
Theme

第一原理電子状態計算による固体物性・材料機能の予測

First-principles prediction for material property and functionality

研究分野 Department
ナノ機能予測
Theoretical Nanotechnology

研究者 Researcher
白井光雲 K. Shirai
籾田浩義 H. Momida

キーワード Keyword
第一原理計算、相安定性・結合、磁性、超伝導、誘電性、光学特性、遷移金属酸化物系、金属有機分子結晶系、二次電池正極材料、触媒反応
first-principles calculation, phase stability, bonding nature, magnetism, superconductivity, ferroelectricity, optical properties, transition-metal oxides, metal-organic molecular crystals, cathode materials for secondary battery, catalytic reactions

応用分野 Application
固体物性の理論解析・予測
Theoretical analysis and prediction for material properties

材料 Material

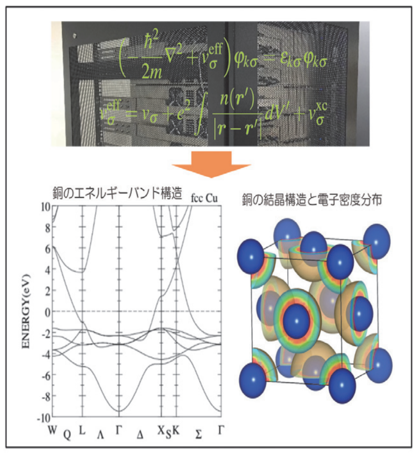
研究開発段階
基 礎　実用化準備　応用化

背　景

新奇な固体物性の解明や新材料の研究開発においては、電子・原子レベルの理論シミュレーション解析が必要とされます。

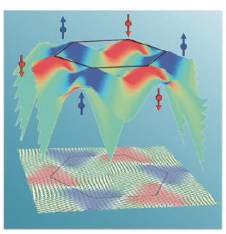
概要・特徴

計算機を用いて密度汎関数理論に基づくコーン・シャム一電子方程式を解くことにより、物質の電子状態（電子のエネルギーバンド構造・状態密度）を得ることが可能です。

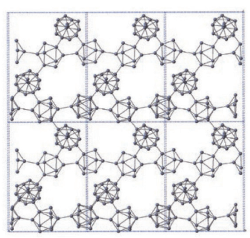


技術内容

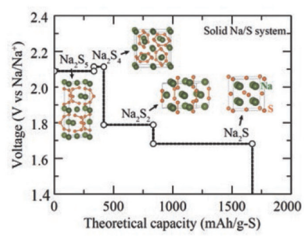
非経験的・量子論的シミュレーション手法である第一原理電子状態計算に基づき、種々の固体系・表面系で発現する物性・機能を理論的に予測する研究を行っています。発現機構を電子状態の特異性から明らかにすることによって、新たな物質を設計する研究にも展開しています。また、第一原理計算に必要となる基礎理論や計算手法の開発にも取り組んでいます。



スピン・電荷・軌道の秩序に起因する強誘電性・マルチフェロイック物性の理論研究



フラストレーションを起こす単体半導体



ナトリウム二次電池の充放電機構

社会への影響・期待される効果

次世代エレクトロニクス・スピントロニクス材料（マルチフェロイック物質やトポロジカル物質など）やエネルギー材料（リチウムイオン・ナトリウムイオン二次電池電極など）などの材料特性解析・基礎物性研究を進めています。様々な物質・材料への応用展開が可能な計算手法です。

【論 文 Paper】

[1] Phys. Rev. Lett. 115, 037602 (2015).
[2] Phys. Rev. B 97, 035113 (2018).
[3] Nano Lett. 18, 3235 (2018).
[4] Phys. Rev. B 100, 195137 (2019).
[5] Electrochimica Acta 330, 135286 (2020).
[6] Nature Commun. 11, 159 (2020).

テーマ Theme 12

マテリアルズ・インフォマティクス
Materials Informatics

研究分野 Department ナノ機能予測 Theoretical Nanotechnology

研究者 Researcher 白井光雲 K. Shirai　籾田浩義 H. Momida

キーワード Keyword 機械学習、物質探索、物質設計、物性最適化、構造予測
Machine learning, Materials exploration, Materials design, Property optimization, Structure prediction

応用分野 Application 材料の結晶構造探索、固体物性の解析
Theoretical analysis and prediction for material properties

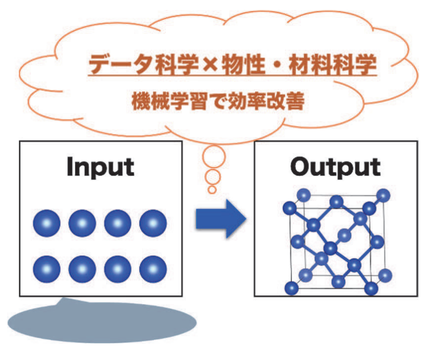
研究開発段階 基礎 ▼　実用化準備　応用化

背　景

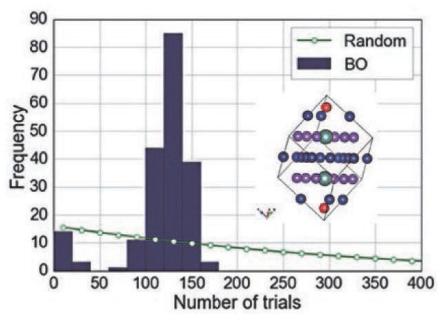
実験・理論・計算・データサイエンスの手法を組み合わせることによって、望ましい機能をもつ新物質開発の高効率化が求められています。

概要・特徴

機械学習の手法を用いて、与えられた元素組成から安定な結晶構造を予測するツールや物質機能を特徴付ける記述子を同定するツールの開発を行っています。



機械学習による構造探索の加速



技術内容

- 計算科学手法による結晶構造探索：与えられた元素組成に対して、構造生成手法と構造最適化計算を組み合わせることで安定な結晶構造の理論予測を行います。ベイズ最適化の手法を用いることで高効率な探索が可能です。
- 線型独立記述子生成法：物性と強い相関をもつ記述子（説明変数）を生成することにより、効率的な物性予測・材料設計を行うことが可能です。

CrySPY
▶**結晶構造探索ツール**
https://tomoki-yamashita.github.io/index.html

LIDG
▶**線型独立記述子生成ツール**
https://github.com/Hitoshi-FUJII/LIDG

社会への影響・期待される効果

新材料設計のためのデータサイエンス手法の開発・公開を進めています。材料の安定結晶構造および物性を理論予測する研究を行っています。磁石材料の探索や電池材料の開発など、効率的な材料開発への応用展開が期待されます。

【論 文 Paper】

[1] Electrochimica Acta 195, 1 (2016).
[2] Phys. Rev. Materials 2, 013803 (2018).
[3] Appl. Phys. Express 11, 041201 (2018).
[4] npj Computational Materials 4, 32 (2018).
[5] Sci. Tech. Adv. Mater. 20, 1178 (2019).

材 料 Material

13
テーマ
Theme

IoT・AIを活用した大面積シート型センサーシステムの研究開発

Sheet-type Large-area Sensor Systems utilizing IoT and AI

研究分野 Department
先進電子デバイス
Advanced Electron Devices

研究者 Researcher
関谷 毅 T. Sekitani
須藤孝一 K. Sudoh
植村隆文 T. Uemura
和泉慎太郎 S. Izumi
荒木徹平 T. Araki
吉本秀輔 S. Yoshimoto
野田祐樹 Y. Noda

キーワード Keyword
フレキシブルエレクトロニクス、センサー、サイバーフィジカルシステム(CPS)
flexible electronics, sensors, Cyber-Physical Systems

応用分野 Application
バイオシグナルセンサー、ウエアラブルセンサー、IoT
bio-signal sensors, wearable sensors, Internet of Things(IoT)

材料 Material

研究開発段階
基礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

優れた機械的特性（フレキシビリティ）と電気的特性を同時に実現した次世代デバイス、“フレキシブルエレクトロニクス・フォトニクス”の研究に取り組んでいます。有機材料を 含む機能性ソフト材料を用いた電子デバイス、光デバイスを基盤技術とし、情報通信技術か ら医療・福祉・バイオ分野、インフラ保守点検など広範な領域において新しい科学を創出し ます。さらに、その具体的応用例を実証し、社会実装することを目標にしています。

概要・特徴

“フレキシブルエレクトロニクス・フォトニクス”の応用研究は、微細構造形成技術、ナノ構造解析技術、最先端材料科学、高度集積化エレクトロニクス技術に支えられています。我々のグループでは、材料、デバイス、界面物理、物性物理、回路設計、システム設計、情報処理といった広範な学術分野を融合した新しいモノづくりを実現しています。

技術内容

有機材料の「優れた電気的・機械的特性」に加えて、「自己組織化現象（有機超分子構造形成）」、「低エネルギー加工性」を応用したフレキキシブルエレクトロニクスの基礎材料・物性研究および応用研究を行っています。特に、有機ナノ分子積層技術、有機半導体/絶縁体界面制御技術、有機分子材料物性制御技術、分析技術、有機機回路設計技術といった有機材料特有の技術開発を広範な領域において行うことで、有機トランジジスタの高度集積化を実現しています。

社会への影響・期待される効果

- メーターサイズの大面積性と、薄膜高分子フィルムの柔軟性を兼ね備えた大面積センサーシステムの構築とこれより得られる膨大な情報のリアルタイム可視化による社会の最適化
- 実世界の情報を正確かつ存在感無く収集するためのセンサーシステムにより、社会システムをより快適に、最適に、安全安心にするための基盤技術開発
- 次世代医療、ヘルスケア、構造物スマート管理など超少子高齢社会を迎えた我が国において社会基盤を支えるテクノロジーの実現

【論 文 Paper】
[1] Nature Materials 9 (2010) 1015.
[2] Science 326 (2009) 1516.
[3] Nature Materials 6 (2007) 413.
[4] Nature 499 (2013) 458).
[5] Nature Materials 8 (2009) 494.
[6] Science 321 (2008) 1468.
[7] Nature Communications 3 (2012) 723.
[8] Advanced Intelligent Systems 2 (2020) 2000093.
[9] Science Advances 6 (2020) eaay6094.
[10] Nature Electronics 2 (2019) 351.

14
テーマ Theme

シリコン基板中への空洞形成
Void Formation in Si Substrates

研究分野 Department
先進電子デバイス
Advanced Electron Devices

研究者 Researcher
須藤孝一
K. Sudoh

キーワード Keyword
シリコン微細構造
silicon micro-structure

応用分野 Application
微小電気機械素子
Micro-Electro-Mechanical-Systems (MEMS)

研究開発段階
基 礎 ／ 実用化準備 ／ 応用化

背　景

固体材料の様々な産業応用において、ミクロな表面形態を制御することが重要な課題となっており、表面形態の形成メカニズムを理解することは、制御するための第一歩となります。固体表面の表面形態形成現象の普遍的側面に注目し、結晶成長などの非平衡過程を通して表面が形作られていく物理的なメカニズムについて解明し、固体表面の表面形態を利用した産業応用への展開を進めます。

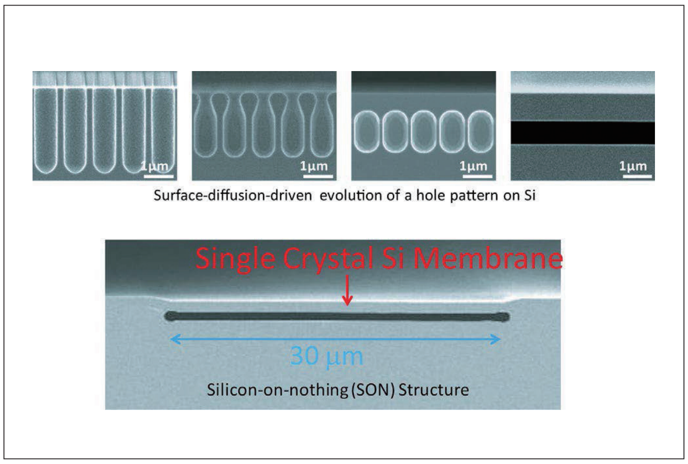
概要・特徴

リソグラフィーや水素アニールなど標準的な半導体製造技術を利用して簡便なプロセスによって、シリコン基板に空洞構造やシリコン膜を形成することが可能です。

技術内容

シリコン基板上に形成した高アスペクト比の微細ホールパターンを高温アニールすることによって引き起こされる自発的形態変化を利用してシリコン基板中に様々な微細空洞構造を形成することができます。また、100nmから1mm程度のシリコン膜を形成することも可能です。

シリコン基板上に形成した微細構造を水素雰囲気や真空中など酸化が起こらない環境で高温アニールすると表面拡散による形態変化が起こります。高アスペクト比のホールが表面拡散によって変形するとき、ホールの開口が自発的に閉じてシリコン基板中に空洞が形成されます。初期のホールパターンの設計によって様々な空洞構造を形成することが出来ます。



社会への影響・期待される効果

- 従来にない簡単なプロセスでシリコン基板中に微細空洞構造を作製する
- 安価で高品質な単結晶シリコンナノ膜の作製を実現する

【論 文 Paper】
[1] K. Sudoh, R. Hiruta, H. Kuribayashi, J. Appl. Phys. 114, 183512 (2013).
[2] K. Sudoh, H. Iwasaki, R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu, J. Appl. Phys. 105, 083536 (2009).

15
テーマ
Theme

柔らかいスピントロニクスデバイスの開発

Development of flexible spintronics sensors

研究分野 Department: 界面量子科学 Interface Quantum Science

研究者 Researcher: 千葉大地 D. Chiba

キーワード Keyword: スピントロニクス、フレキシブルエレクトロニクス、IoTセンサー spintronics, flexible electronics, IoT sensors

応用分野 Application: フレキシブルデバイス、ひずみゲージ、磁気メモリ flexible and wearable devices, strain gauge, magnetic memory

材料 Material

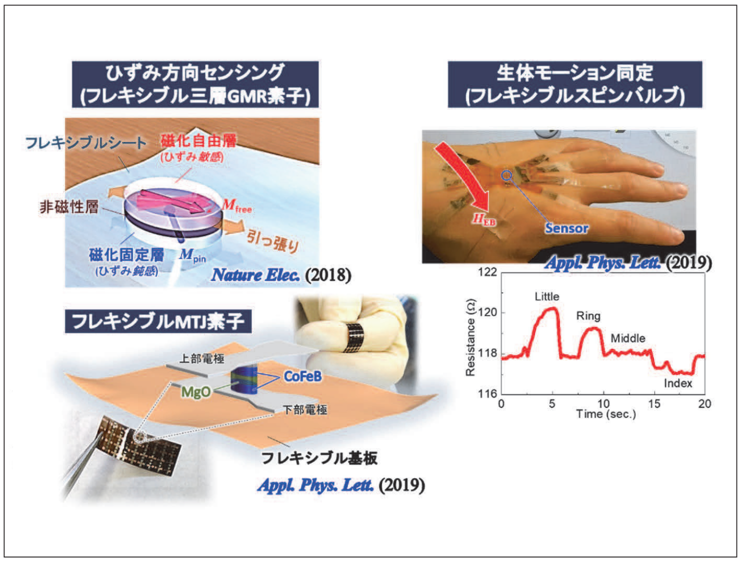
研究開発段階　基 礎　**実用化準備**　応用化

背　　景

磁気記録の高度化を目指し発展してきたスピントロニクスですが、IoT時代へのさらなる貢献を目指し、高感度なセンサーやウェアラブルなデバイスへの展開が期待されています。

概要・特徴

硬いSi基板上に形成されてきたスピントロニクスデバイスを、柔らかい基材の上に直接形成することに成功し、実用展開の可能性を広げました。



技術内容

- スピン素子をフレキシブル基板上に実装することに成功し、ひずみ方向をセンシングするフレキシブルスピントロニクス素子を実現
- 生体モーションをスピントロニクス素子で同定可能であることを初めて実証
- 実用上最も重要なスピントロニクス素子＝磁気トンネル接合(MTJ)をフレキシブル基板上に直接形成することに成功

社会への影響・期待される効果

スピントロニクスデバイスに柔らかさを付与することで、メカニカルなモーションセンサーやウェアラブルデバイスへスピントロニクス素子の優位性を活かしていくことが可能となります。特に、IoT用途を目指し、集積化されたウェアラブル知能センサーシートや無電源でメカニカルモーションを記録できるレジスタなどへの展開が期待されます。また、スピントロニクス材料の力学的性質と磁性の関りを原子・ナノスケールから理解することで、デバイスの性能向上や機能創発につながる可能性があります。

【論 文 Paper】
[1] Nature Elec. 1 (2018) 124-129
[2] Appl. Phys. Express 12 (2019) 053001
[3] Appl. Phys. Lett 114 (2019) 132401
[4] Appl. Phys. Lett 114 (2019) 202401

【特 許 Patent】
[1] 特願2017-29314　[2] 特願2019-14792

16
テーマ
Theme

グラフェンバイオセンサー

Graphene biosensors

研究分野 Department
界面量子科学
Interface Quantum Science

研究者 Researcher
千葉大地 D. Chiba　小山知宏 T. Koyama　金井 康 Y. Kanai　小野尭生 T. Ono

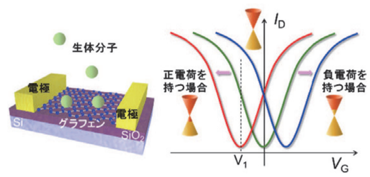
キーワード Keyword
グラフェン、トランジスタ、バイオセンサー、インフルエンザ、ラボオンアグラフェンFET
graphene, transistors, biosensors, influenza, lab-on-a-graphene-FET

応用分野 Application
病原体検出、医療診断、薬剤開発
pathogen detection, medical diagnosis, drug development

研究開発段階
基 礎　実用化準備　応用化

背　景

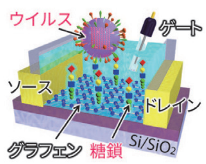
２次元炭素材料グラフェンは、極めて高い移動度や比表面積、水中での安定性など特異な性質を持っています。これらの性質は、水中に露出した広いグラフェン表面に検出対象を直接接触させ、それによるキャリア変調を大きな電流変化として取り出すことを可能にします。よってグラフェンは、高感度バイオセンサーやバイオ分析プラットフォームの材料として極めて有望であり、我々はその潜在力を引き出すための研究を進めています。



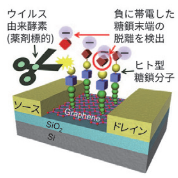
グラフェンFETでの検出のしくみ

概要・特徴

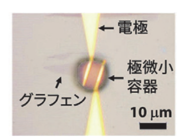
グラフェントランジスタの表面を種々の生体分子で機能化したり、マイクロ流体デバイスと複合化すること(lab-on-a-graphene-FET)により、様々な病原体や薬剤応答を電気的に高感度計測することに成功しました。



糖鎖修飾グラフェンFETによるウイルス検



糖鎖切断反応の計測



極微小容器と複合化したグラフェンFET

技術内容

- グラフェン電界効果トランジスタ(FET)上に正／負の電荷を持った生体分子が吸着することによる伝達特性の変化を計測し、生体分子を高感度検出する事に成功。
- ヒトや鳥の細胞上に存在し、インフルエンザウイルスが感染時に足掛かりとする分子であるシアロ糖鎖をグラフェンFET上に修飾(機能化)し、感染機構を模擬することで、ヒト感染性のインフルエンザウイルスだけを高感度検出することに成功。
- 上記のシアロ糖鎖は、ウイルスが細胞内で増殖後に他細胞へと感染を広げるときに切断される。抗ウイルス薬のターゲットとなっているこの切断反応を、シアロ糖鎖修飾グラフェンFETで計測し、薬効評価することに成功。
- グラフェンFETによる計測は、標的がグラフェンから数nm以上離れると検出困難になるデバイ遮蔽の問題があった。標的の反応産物を極微小容器(10-12 L以下)に封じ込めて検出する事で、この問題を解決。

社会への影響・期待される効果

我々のグラフェンバイオセンサーは、事実上ほぼ全ての検出対象に適用可能です。医療診断、薬剤開発や環境計測など幅広い応用が期待できます。センサーの社会実装を目指して既に複数の民間企業と共同研究を活発に進めており、今後も、グラフェンを用いた分析のアイデアや高感度検出のニーズを持つ方との共同研究を推進したい。

【論 文 Paper】
[1] Carbon-related Materials (2021) 91
[2] bioRxiv 2020.03.18.996884
[3] Nano Lett., 19 (2019) 4004
[4] ACS Omega, 3 (2018) 3137
[5] ACS Sens., 3 (2018) 200
[6] Jpn. J. Appl. Phys. 57 (2018) 06510

【特 許 Patent】
[1] 特開2018-036154

材料 Material
医療 Medical

17
テーマ Theme

電界制御量子ドットを使った量子中継器開発

Development of quantum repeaters using electrically-controlled quantum dots

研究分野 Department 量子システム創成 Quantum System Electronics

研究者 Researcher 大岩 顕 A. Oiwa

キーワード Keyword 量子ドット、スピン、光子、量子技術、量子中継、量子インターフェース
quantum dots, spin, photon, quantum technologies, quantum repeaters, quantum interface

応用分野 Application 量子暗号通信、量子ネットワーク、量子IoT
quantum cryptography, quantum internet, quantum IoT

研究開発段階 基 礎 ／ 実用化準備 ／ 応用化

背　景

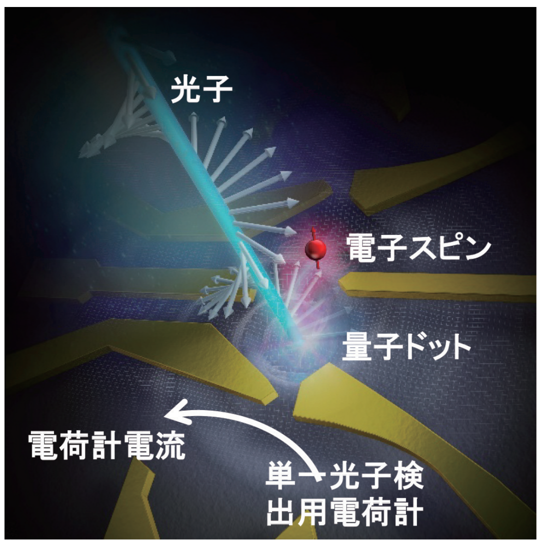
IoTが発達した将来の情報社会において、絶対に安全な通信方法を提供する量子暗号通信が必要とされますが、その長距離化を実現する手法や物理系が未だ未解決です。これを解決して、グローバル量子暗号通信ネットワークを構築することで、将来、情報社会に飛躍的な発展がもたらされます。

概要・特徴

電気制御量子ドットを使って、量子メモリー機能を有する光子ースピン量子インターフェースを開発し、長距離量子暗号通信のための量子中継器を実現します。

技術内容

- 減衰した量子情報を復調する量子中継器が必要で、その開発に不可欠な量子メモリー機能を有する光ースピン量子インターフェースをコア技術とした量子中継技術を開発します。
- 量子中継器は、光と固体量子ビットの間で量子情報を変換するインターフェースと量子メモリーで構成されます。我々は単一光子から半導体量子ドット中の単一スピンとの変換の技術を有します。
- 通信波長帯域での変換技術を開発したうえで、光学系やスピン操作・検出回路、それらを統合した量子中継器システムなどの設計・開発と量子中継の実証を行います。
- 高効率量子もつれ光源の技術開発とのタイアップ。



社会への影響・期待される効果

量子暗号通信のグローバルネットワークが構築され、絶対に安全に情報をやり取りできる社会がもたらされます。

量子ネットワークを介して量子コンピュータを複数台接続することでより高度な量子計算が可能になり、経済や産業に飛躍的な発展がもたらされます。

量子センサーを量子ネットワークに接続することで、量子情報によるIoTが実現されます。

【論 文 Paper】
[1] T. Fujita et al., Phys. Rev. Lett., 110, 266803 (2013).
[2] A. Oiwa et al., J. Phys. Soc. Jpn. 86, 011008 (2017).
[3] K. Kuroyamaet al., Phys. Rev. B 99, 085203 (2019).
[4] K. Kuroyamaet al., Sci. Rep. 7,16968 (2017).
[5] T. Fujita et al., Nature communications 10,2991 (2019).

18
テーマ Theme

半導体スピン量子ビット2次元配列デバイスの開発

Development of a two-dimensional array of semiconductor spin qubits

研究分野 Department: 量子システム創成 Quantum System Electronics

研究者 Researcher: 木山治樹 H. Kiyama

キーワード Keyword: 量子ドット、スピン、集積化、量子技術 quantum dots, spin, integration, quantum technologies

応用分野 Application: 量子計算、量子シミュレーション quantum computing, quantum simulation

研究開発段階: 基礎 / 実用化準備 / 応用化

背景

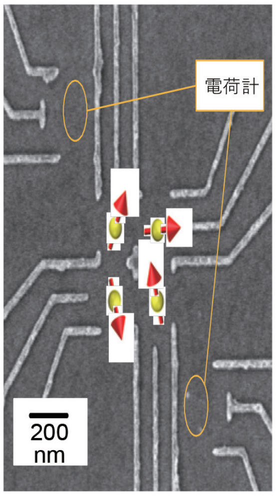
近年、現在のコンピュータと比べて圧倒的な処理能力を持つとされる量子コンピュータの研究開発が、世界中の研究機関や企業で進められています。量子コンピュータの情報単位である量子ビットとして、様々な物理系が研究されていますが、半導体量子ドット中の単一電子スピンは、量子情報の長時間保持や集積化への適性といった利点により注目されています。

概要・特徴

半導体スピン量子ビットの大規模集積化へ向けて、量子ドットの2次元配列デバイスの作製・制御手法を研究し、半導体スピン量子コンピュータの実現に貢献します。

技術内容

- 半導体量子ドットとして、量子井戸基板表面のゲート電極を用いて、量子井戸中に誘起・制御されるゲート制御量子ドットを用います。
- 半導体量子ドットの2次元配列デバイスの研究は世界的にもまだあまり進んでいません。世界に先駆けて中規模集積デバイスの作製と、それを用いたスピン量子ビットの制御を目指します。
- 量子ドット2次元配列デバイスを用いて、量子多体現象の量子シミュレーションも行います。
- 高品質の半導体微細加工技術とタイアップ。



社会への影響・期待される効果

半導体スピン量子ビットの集積化が進むことで、スピン量子コンピュータの早期実現が期待されます。量子コンピュータが実現すれば、その圧倒的な処理能力を活かして、新薬・新材料の開発や災害予測への活用が期待されます。

【論 文 Paper】

機能性酸化物を用いた新奇ナノデバイス創製

Fabrication of novel devices based on functional oxide materials

研究分野 Department
ナノ機能材料デバイス
Functional nanomaterials and nanodevices

研究者 Researcher
田中秀和　神吉輝夫
H. Tanaka　T. Kanki

キーワード Keyword
機能性酸化物、二酸化バナジウム、二次元原子層材料
functional oxide, vanadium oxide, 2D material

応用分野 Application
フレキシブルデバイス、抵抗スイッチ素子、赤外線センサー、NEMS
flexible and wearable devices, switching and sensing devices, Nano Electro Mechanical Systems(NEMS)

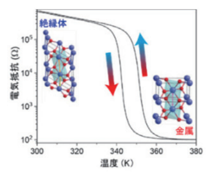
研究開発段階
基礎　実用化準備　応用化

背景

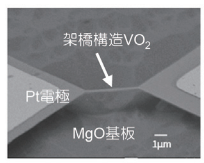
二酸化バナジウム(VO_2)は、67℃付近において絶縁体状態から金属状態へと相転移します。この相転移に伴い電気抵抗値が5桁ほど、赤外線の透過率が50 %以上変化するため、抵抗スイッチ素子や赤外線センサーへの応用が期待されます。

概要・特徴

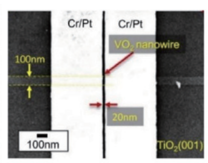
機能性酸化物であるVO_2をナノ構造化させたり、異種機能材料とヘテロ構造化させたりすることで、VO_2のデバイス応用展開の可能性を広げました。



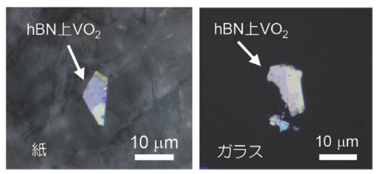
VO_2の電気抵抗値の温度依存性



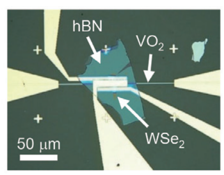
架橋構造を持つVO_2ナノ細線



究極のVO_2ナノ細線デバイス



さまざまな材料上に転写したhBN上のVO_2薄膜



VO_2/WSe_2ヘテロ構造トランジスタ

技術内容

- 酸化マグネシウム(MgO)基板上に成長させたVO_2薄膜を、MgO基板を選択的にエッチングすることで、基板から数μm浮いた架橋構造にすることに成功。
- リソグラフィー技術を駆使することで、電極間距離20nm、線幅100nmのVO_2ナノ細線デバイスを作製。
- VO_2を、六方晶窒化ホウ素(hBN)上に薄膜成長させ、形成したVO_2薄膜とhBNとの積層構造を、粘着性ポリマーを介して異種材料上に転写させせることに成功。
- VO_2と二次元半導体であるニセレン化タングステン(WSe_2)をヘテロ構造化させることで、急峻にオン・オフスイッチする新原理トランジスタの作製に成功。

社会への影響・期待される効果

今回作製したナノ架橋構造型VO_2は、熱散逸が極端に抑制されるため、これを用いれば抵抗スイッチの超低消費電力化、赤外線センサーの超高感度化が期待できます。また、VO_2架橋構造は機械的柔軟性を有するため、アクチュエータへの応用も期待できます。

hBNとVO_2との積層構造を柔軟な材料に転写することで、近年その需要が高まっている、ウェラブルデバイスやペーパーデバイスなどへの応用が期待できます。また、どのような形状の窓にも適用できるスマートウィンドウなどの開発も期待されます。

【論 文 Paper】

[1] Appl. Phys. Lett. 107 (2015) 143509(1-6)
[2] Appl. Phys. Exp. 7 (2014) 023201
[3] Adv. Materials 25 (2013) 6430-6435
[4] ACS Appl. Mater. and Inter. 11 (2019) 3224-3230-(1-9)

20
テーマ
Theme

強相関電子系金属酸化物の精密3次元ナノ構造創製

Fabrication of 3D nanostructures based on strongly correlated transition metal oxides

研究分野 Department
ナノ機能材料デバイス
Functional nanomaterials and nanodevices

研究者 Researcher
田中秀和 H. Tanaka
服部 梓 A. N. Hattori

キーワード Keyword
3次元ナノ構造、機能性酸化物、相変化、ナノテンプレート
3D nanostructures, functional oxides, phase change, nano template

応用分野 Application
3次元ナノ機能デバイス
3D nano functional devices

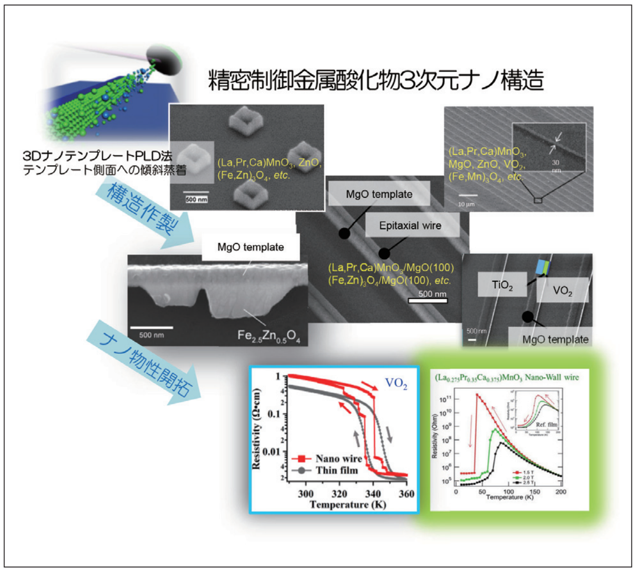
研究開発段階
基 礎 ／ 実用化準備 ／ 応用化

背　景

強相関電子系金属酸化物は、金属-絶縁体相転移に伴う抵抗変化が劇的で10^3-10^5にも及ぶためナノエレクトロニクスへの展開が期待されています。しかし、金属酸化物は一般的に難加工材料のため、100 nmを下回るサイズの構造を作る技術が確立されていません。

概要・特徴

トップダウンとボトムアップを組み合わせた独自のナノ構造創製技術により、サイズ制御精度10nm以下で金属酸化物の3次元立体造形技術を確立しました。



技術内容

傾斜パルスレーザー堆積法（PLD）蒸着により、基板上に作製した3次元テンプレートの側面に成長起点を誘導し、テンプレート側面から分子層厚さ精度でサイズ制御したナノ構造を作製する手法を開発しました。テンプレートの形状、配置情報を正確に転写し、かつリソグラフィー分解能に縛られず分子層レベルでナノ構造のサイズ制御が可能であり、基本的にべての物質に適応できる手法です。

立体基板の側面構造を原子レベルで観察・制御する手法も確立しており、これまでの加工、造形、構造評価技術の次元性と精度を大幅に向上した立体ナノ構造創生技術です。

社会への影響・期待される効果

ナノ細線試料では薄膜に比べて10^3-10^6倍もの急激な金属-絶縁体相転移に伴う抵抗変化を発見し、その起源が制限空間内に閉じ込められた電子集団の生成・消滅挙動に起因することを明らかにしました（ナノ構造増感効果）。

極限ナノ構造によるナノ電子相への直接アクセスの可能性を秘めており、人為的な相転移現象の機能化の方法論確立に向けて研究を進めています。魅力的ではあるが操作が難しく、これまでポテンシャルが充分に引き出せていなかった強相関金属酸化物に対して、機能発現の起源を解明し、物性操作法の確立が期待できます。

【論 文 Paper】
[1] Nano Letters 15 (2015) 4322-4328.
[2] Nano Lett. 19(2019) 5003-5010

21 テーマ Theme

低次元ナノ構造酸化物の構造・機能チューニング

Architecture and Function Tuning for Low-dimensional Nanostructured Oxides

研究分野 Department　先端ハード材料 Advanced Hard Materials

研究者 Researcher　関野 徹 T. Sekino

キーワード Keyword　ナノチューブ、ナノシート、高次機能触媒、エネルギー変換
nanotube, nanosheet, multifunctional catalyst, energy conversion

応用分野 Application　触媒（環境浄化、光、不均一系）、太陽電池、センサー、生体適合材料
catalyst (environmental/heterogeneous/photo), solar cell, sensor, biocompatible material

研究開発段階　基 礎　実用化準備　応用化

背　景

チタニア（酸化チタン）ナノチューブやナノシート材料は、酸化チタンが持つ光化学物性と低次元ナノ構造との相関により、優れた光触 能や特異な選択的分子吸着能の共生など従来材料にない多機能性を示します。

概要・特徴

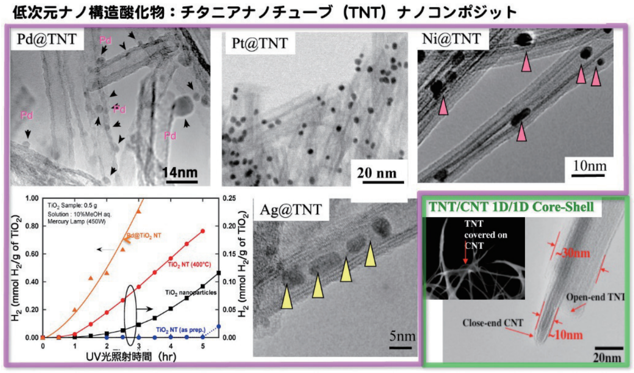
本研究では材料構造と機能の多角的なチューニングで、こうした高次機能を更に向上させ、次世代型の環境浄化機能材料、太陽電池やリチウムイオン電池電極、光および化学センサー、更には多機能型生体適合材料など、様々な応用展開・実用化を志向して研究を進めています。

チタニアナノチューブは通常の酸化チタンにはない優れた選択的分子・イオン吸着能と光触媒 能を併せ持つ（能動型環境浄化機能）など、単材料でありながら物性-低次元構造協奏に基づく優れた多機能性を持ち、広範囲な環境およびエネルギー材料、更にはバイオマテリアル材料への展開が可能です。

技術内容

ごく簡単で環境低負荷な溶液化学プロセスによりナノチューブ構造などの低次元ナノ構造を持つチタニアを高収率で合成することができるほか、金属表面などに直接形成も可能です。さらに、機能性元素固溶やナノ複合化、ポリマーとのナノハイブリッド化など構造修飾を駆使し、物理的光化学的機能を更に向上させることができます。加えて分子レベル構造制御で可視光応答化も可能です。高効率の水分解水素発生光触媒のほか、吸着・光触媒特性の共生と向上、太陽電池電極特性の向上室温ガスセンシング機能化などが可能です。

低次元ナノ構造酸化物：チタニアナノチューブ（TNT）ナノコンポジット



社会への影響・期待される効果

- 環境浄化・エネルギー創製機能材料、室温駆動型高性能ガスセンサー材料としての展開
- 多機能性を同時に獲得した材料デバイス（センサー等）の創出
- 多機能性生体適合性材料、バイオメディカル材料（DDS・PDT等）、衛生機能材料としての応用

【論 文 Paper】
[1] ACS Omega, 5 (2020) 21753.
[2] ACS Applied Nano Materials, 3, (2020) 7795.
[3] RSC Advances, 10, (2020) 41032 .
[4] ACS Appl. Nano Mater., 2 (2019) 6230.
[5] Nano Biomed., 8 (2016) 41.

【特 許 Patent】
[1] 特許第 4868366 号

22
テーマ
Theme

高次機能を集約したマルチタスク型先端セラミックス基複合材料の創製

Development of Multitask-type Advanced Ceramic-based Composites with Integrated Functions

研究分野 Department　先端ハード材料 Advanced Hard Materials

研究者 Researcher　関野 徹 T. Sekino

キーワード Keyword　セラミックス、複合材料、ミクロ/ナノ構造、異方性、機能統合、力学/電気/磁気/光化学機能、室温損傷修復能
ceramics, composite, micro/nanostructure, anisotropy, function integration, mechanical/physical/electrical/photochemical functions, room-temperature crack-healing function

応用分野 Application　機能性構造用材料、易加工セラミックス、損傷修復材料、能動的センサデバイス、デバイス製造装置、人工歯骨
functional structural materials, machinableceramics, crack-repair/healing materials, active sensor, device manufacturing, artificial teeth/born

研究開発段階　基 礎　実用化準備　応用化

背　景

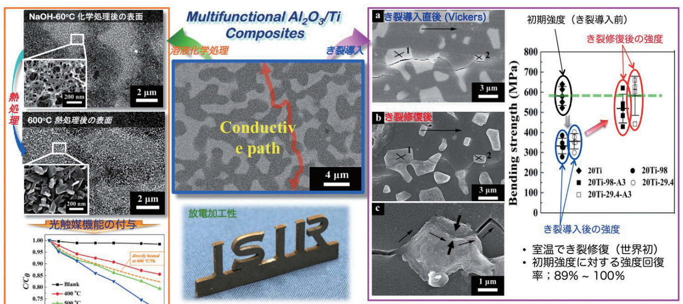
構造用セラミックス材料が持つ力学的・熱的機能を更に向上させると共に、電気的性質や光化学的性質、磁気的誘電的性質などの機能性を同時に共生させることで、ひとつの材料で多様な機能性を獲得し、様々な応用が可能な「マルチタスク型」材料の創製が期待されます。

概要・特徴

構造的機能（力学特性、耐摩耗性、耐熱性）に限定されていた従来の構造用セラミックス材料に、多様な複数機能を共生できます。これにより放電加工性や室温き裂損傷修復機能（世界初の成果）、光触媒機能を同時に備えたマルチタスクに対応可能な新規なセラミックスとして、生体親材料、機能性電極、光電変換材料、セルフセンシング構造材料など、そのものがデバイス型機能を持つパーツ・構造体・デバイスなどへの展開が期待されます。

技術内容

セラミックスを中心としたバルク材料に、ナノ/ミクロサイズ金属や機能性物質を分散複合化し、構造ユニット毎にその異方構造や配列構造（パーコレーション）、界面を設計・制御すると共に、各機能評価と機構解明を通じて先端ハード材料への高次な機能集約を行っています。



ヘテロ複合構造、低次元ナノ構造の制御によるマルチタスクコンポジット
–力学・電気・放電加工・光触媒・室温き裂修復機能の共生–

例えば、アルミナ（Al_2O_3）セラミックスに金属チタン（Ti）をプロセス制御して分散複合化したAl_2O_3/Ti複合材料は、破壊靱性向上に加え、Ti粒子のパーコレーションによる電気伝導性を共生でき、通常のセラミックスでは不可能な放電加工が可能です。さらに、導電性と化学反応性を制御し、室温での処理（世界初）で材料に生じたき裂損傷を修復し、強度を初期値まで回復させることを実証（世界初）しました。加えて、化学的または熱的処理により表面ナノ構造酸化物を形成し、光触媒機能を同時に付与することが可能です。

社会への影響・期待される効果

- 力学的機能と多様な物理化学的機能が融合したセラミックスの創製
- デバイス型機能材料の創製およびシステム小型・軽量・低コスト化
- 室温プロセスによる損傷・き裂修復可能なセラミックス基材料

【論 文 Paper】
[1] J. Alloys Comp., 851 (2021) 156895.
[2] J. Am. Ceram. Soc., 103 (2020) 4573.
[3] Mater. Sci. & Eng. A, 777 (2020) 139066.
[4] J. Am. Ceram. Soc., 102 (2019) 4236.
[5] J. Ceram. Soc. Japan, 126[11] (2018) 877.
[6] J. Am. Ceram. Soc., 101 (2018) 3181.

【特 許 Patent】
[1] 特許第5189786号
[2] 特許第3955901号

材料 Material

23 テーマ Theme

IoT機器用熱電変換電源システム

Energy harvesting for IoT power source

研究分野 Department
エネルギー・環境材料
Energy & Environmental materials

研究者 Researcher
菅原 徹
T. Sugahara

キーワード Keyword
熱電変換、高密度実装、ダイアタッチ、導電性接着剤、焼結接合
thermoelectric, high density packaging, die attach, isotropic conductive adhesive, sinter joining

応用分野 Application
熱電変換、IoTセンサー通信機器用電源
thermoelectric, power source for IoT sensing devices

研究開発段階：基礎 → **実用化準備** → 応用化

背　景

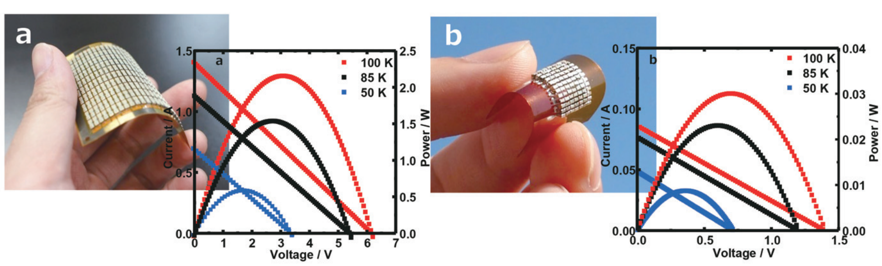
サイバーフィジカルシステム(CPS)はSociety5.0を支える重要なインフラです。CPSにおいて、私たちの生活空間には、各種IoTセンサー通信機器が多数配置されます。これらのIoTセンサー通信機器の良好な稼働性などを支える電源システムとして、熱電変換技術が注目されています。

概要・特徴

熱電変換は、ゼーベック効果を利用したエネルギーハーベスティング技術の一つです。固体(熱電材料)に温度差を加えると半導体の性質で、起電圧を生み出すことが出来ます。この熱電材料を回路として組み合わせることで、給電メンテナンスする必要のない電源(熱電変換デバイス)を創ることができます。

技術内容

熱電変換技術は、熱電半導体を小さく細分化し、pn対を高密度に配列することで、おおきな出力(発電力)を得ることが出来ます。私たちは、高密度実装技術と最新の実装材料を駆使することで、変換効率の高い、フレキシブルな熱電変換デバイスを開発することに成功しました。



pn熱電半導体を大面積に実装した熱電デバイス
(a:Adv.Mater.Tech.18005562018)、超小型フレキシブル熱電変換デバイス(b:投稿中)

社会への影響・期待される効果

- 極低温～150℃温度範囲の温度差環境発電
- 超高密度実装技術と接合材料
- 世界最高の熱電変換効率を有するフレキシブル熱電変換デバイス

【論 文 Paper】
[1] Y. Ekubaru, T. Sugahara, et. al, Adv. Mater. Tech. 5, (5) 1901128 (2020).
[2] E. Yusufu, T. Sugahara, et al., J. Alloys and Compund., 817, 152731 (2020).
[3] T. Sugahara, et al., Adv. Mater. Tech., 4 (2), 1800556 (2019).

【特 許 Patent】
[1] 菅原徹、他、熱電変換モジュール、および、熱電変換モジュールの製造方法、特願2019-038901

24
テーマ
Theme

IoT用ナノセンサーデバイス

Nano sensing devices for IoT

研究分野 Department: エネルギー・環境材料 Energy & Environmental materials

研究者 Researcher: 菅原 徹 T. Sugahara

キーワード Keyword: プリンテッド・エレクトロニクス、金属有機化合物分解法、酸化物半導体 printed electronics, metal organic decomposition, oxide semiconductor

応用分野 Application: 太陽電池、薄膜トランジスタ、センサー、フレキシブル電子機器など photo voltaic solar cells, thin film transistor, sensor, etc.

研究開発段階: 基 礎 ― **実用化準備** ― 応用化

背　景

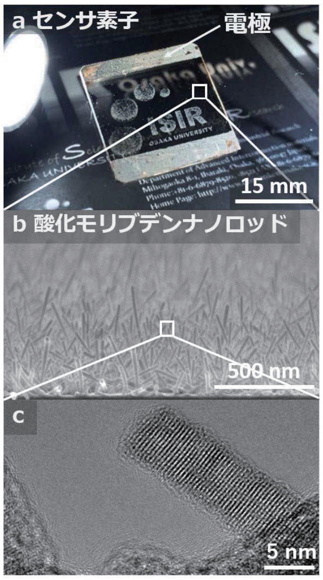
永続的持続可能な人類社会の実現において、低環境負荷に基づく工業廃棄物の削減や低材料資源化、低消費エネルギー化などが世界的に注目されています。印刷法を用いたデバイス作製技術は、プリンテッド・エレクトロニクス(PE)技術とよばれ、真空法やリソグラフィー法を使用しない低環境負荷なデバイス作製プロセスとして、材料とともに研究開発が盛んです。また、近未来のユビキタス社会実現に向けて、PE技術ではウェアラブルを代表とする伸縮性や可塑性、透過性などの付加的価値を持った電子デバイスが積極的に開発されています。

概要・特徴

印刷法を用いたデバイス作製技術は、低環境負荷なデバイス作製プロセスであり材料資源の浪費を削減する大きなメリットがあります。また、金属やセラミックスなどの無機材料は、有機材料と比較しても耐熱性、機械的特性、電気的(半導体)特性が高いため、印刷法で形成することで幅広い領域で電子部品として応用できる可能性があります。

技術内容

金属有機化合物分解法を基軸として、ナノハイブリッドや有機ハイブリッド技術を、PE技術に応用し、半導体および配線用インクとその実装プロセスを開発しています。これまで、有機金属塩を基質とした塩インクや酸化物半導体の前駆体インクを開発し、様々な方法で焼結しています。今後の研究目標は、これらの技術を組み合わせることで、太陽電池、薄膜トランジスタ、ガスセンサーなどの電子デバイスを作製するとともに、それらをアセンブリする回路設計と将来ユビキタス社会の実現に資するエレクトロニクスデバイスを開発することです。



社会への影響・期待される効果

- スパッタなど物理蒸着法で得られる膜と同等の膜平滑性を前駆体塗布法で実現。
- センサーデバイスに向けたナノ材料の基板実装プロセスを簡略化。

将来のユビキタス社会の実現に向けたエレクトロニクスデバイスの開発に貢献します。

【論 文 Paper】

[1] Y. Hirose, T. Sugahara, et al., Materials Chemistry Frontiers, 5, 386-395(2021).
[2] T. Sugahara, et al., ACS Applied Electronic Materials. 2, 6, 1670-78 (2020).
[3] M. Karakawa, T. Sugahara, et al., Scientific Reports, 8, 10839 (2018).
[4] S. Cong, T. Sugahara, et al., Journal of Materials Chemistry C, 2017, 5, 889.
[5] S. Cong, T. Sugahara, et al., Advanced Materials Interfaces, 3, 14, 1600252, 2016.
[6] S. Cong, T. Sugahara, et al., Cryst. Growth Des. 15, 9, 4536, 2015.

25 テーマ Theme

セルロースナノファイバーを用いた土に還るIoTデバイスの開発

Developments of cellulose nanofiber materials for biodegradable IoT device

研究分野 Department　自然材料機能化 Functionalized Natural Materials

研究者 Researcher　能木雅也 M. Nogi

キーワード Keyword　セルロースナノファイバー、生分解性材料、高透明・絶縁・高耐熱性
cellulose nanofiber, biodegradable, high transparency, high insulation, high heat resistance

応用分野 Application　フレキシブルIoTデバイス、透明フィルム
flexible IoT devices, transparent film

研究開発段階　基 礎　→　実用化準備　→　応用化

背　景

私達はセルロースナノファイバーを使い「透明な紙」を発明しました。この材料は、生分解性・表面平滑性・電気絶縁性・耐熱性に優れ、基板材料や層間塗布膜などフレキシブル電子デバイス用部材として優れています。

概要・特徴

- **フレキシブル電子デバイスへの応用に向けて、セルロースナノファイバーと透明な紙（上図）の開発を行っています。**
- **セルロースナノファイバーで作った「土に還る」IoTデバイス（下図）の開発に成功しました。**

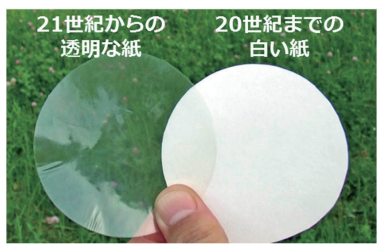
技術内容

【セルロースナノファイバーの開発】

- セルロースナノファイバーとは、木材由来の微細な繊維です。そして、セルロースナノファイバーだけでフィルムを作ると、「透明な紙」になります。
- セルロースナノファイバーは、その製法によって多種多様な性能を発揮します。私達は、そのメカニズムを解明し、用途に応じたセルロースナノファイバー・透明な紙を開発しています。

【土に還るIoTデバイスの開発】

- 透明な紙を基板として、ペーパー太陽電池・ペーパートランジスタなど様々な「紙の電子部品」を開発してきました。
- セルロースナノファイバーを塗布薄膜（誘電層）として用い、ペーパーコンデンサ（従来性能比３倍以上）を開発しました。
- 印刷・塗布プロセスのみを使用してコイル・抵抗・ペーパーコンデンサを透明な紙の上に実装し、雰囲気湿度変化に応じて無線信号が変化するIoTデバイスを作製しました。
- このIoTデバイスは分解を妨げるプラスチック基板や接着剤を使用していないため、土の中で40日後には総体積の95%以上が分解しました。



社会への影響・期待される効果

このデバイスは、市街地のみならず、農地や森林などあらゆるシーンで湿度などの環境情報をモニタリングし、その情報をワイヤレスで発信します。そして、このデバイスは紙（セルロースナノファイバー）と金属、石ころ（鉱物）という自然の恵みだけで作られています。したがって、使い終わった後に自然環境へ放置・流出されても、１カ月程度で「土に還る」という特徴があります。

【論 文 Paper】

[1] Advanced Materials 21 (2009) 1595, DOI: 10.1002/adma.200803174
[2] ACS Appl. Mater. Interfaces, 7 (2015) 22012, DOI: 10.1021/acsami.5b06915
[3] ACS Appl. Mater. Interfaces, 11 (2019) 43488, DOI: 10.1021/acsami.9b13886

テーマ Theme 26

紙のリノベーションによる新奇グリーンデバイスの創製

Renovation of Paper for Green Device Innovation

研究分野 Department
自然材料機能化
Functionalized Natural Materials

研究者 Researcher
古賀大尚
H. Koga

キーワード Keyword
セルロースナノファイバー、機能紙、グリーンケミストリー、グリーンエレクトロニクス
cellulose nanofiber, functional paper, green chemistry, green electronics

応用分野 Application
物質・光熱変換リアクター、サステイナブルデバイス、健康診断
reactor for material and photothermal conversion, sustainable electronic device, medical checkup

研究開発段階
基 礎 ／ **▼実用化準備** ／ 応用化

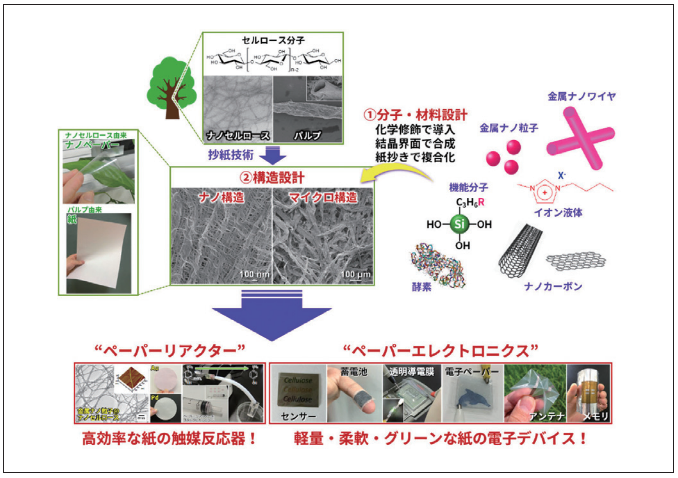
背　景

樹木セルロース繊維・紙や紙抄きといった伝統的な農学系材料・技法の長所を活用して、医・工学分野で注目される先端機能材料を創り出す異分野間の温故知新融合に取り組んでいます。

概要・特徴

伝統と先端を融合した「紙のリノベーション戦略＝ ①分子・材料設計＋ ②ナノ-マイクロ構造設計」で、従来材料より優れた触媒・電子機能に加えて、紙特有のフレキシブル性・リサイクル性・生分解性も発現させることにより、高機能性と環境調和性を両立した真のグリーンイノベーションを目指しています。

技術内容



【紙の反応器「ペーパーリアクター」】

- 紙内部にナノ-マイクロ細孔構造を設計し、物質の効率輸送を実現する反応流路として応用することに成功しました。
- 紙内部のナノセルロース繊維表面に金属ナノ粒子を露出担持させる技術を確立し、高効率なフロー触媒反応や、太陽光-熱変換および海水の淡水化への応用に成功しました。
- 現在、簡易・迅速・非侵襲健康診断への応用展開も進行中です。

【紙の電子デバイス「ペーパーエレクトロニクス」】

- 紙に種々の電子ナノ材料を複合・構造設計することで、高性能・フレキシブル・生分解性の様々な電子デバイスを実現しました。
- 現在、紙自体の電子材料化(ナノカーボン化) も進行中です。

社会への影響・期待される効果

- ガラスや合成高分子ベースの先端材料よりも高性能なリアクターや電子デバイスを実現
- 紙特有のフレキシブル性・リサイクル性・生分解性・ディスポーザブル性の発現にも成功
- 環境調和性と高機能性を両立させた真のグリーンケミストリー・エレクトロニクスに貢献

【論 文 Paper】[1] ACS Appl. Mater. Interfaces, 11, 15044 (2019). [2] ACS Appl. Mater. Interfaces, 9, 40914 (2017). [3] ChemSusChem., 10, 2560 (2017). [4] NPG Asia Mater., 8, e310 (2016). [5] Green Chem., 18, 1117 (2016). [6] Adv. Mater., 27, 1112 (2015). [7] NPG Asia Mater., 6, e93 (2014). [8] Adv. Funct. Mater., 24, 1657 (2014).

【特 許 Patent】[1] 特許6630091号 [2] 特許6144982号 [3] 特許5970915号 [4] 特許5566368号

フッ素化アクセプタユニットの開発

Development of fluorinated acceptor unit

研究分野 Department
ソフトナノマテリアル
Soft Nanomaterials

研究者 Researcher
家 裕隆
Y. Ie

キーワード Keyword
有機半導体材料、光・電子機能材料
organic semiconducting materials, photo and electronic functional materials

応用分野 Application
有機トランジスタ、有機太陽電池
organic transistor, organic solar cell

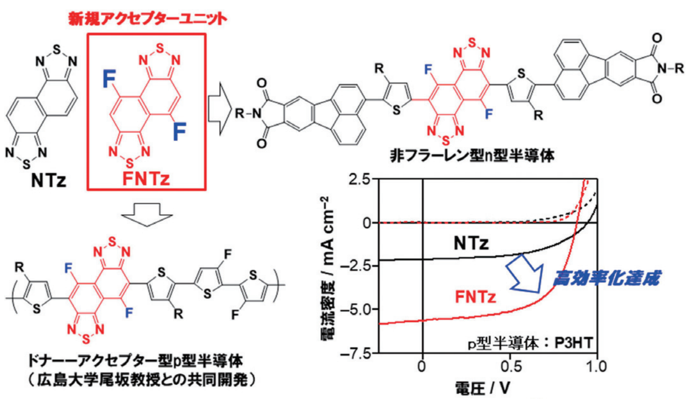
研究開発段階
基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背 景

分子の構造－物性－素子機能の相関を解明しながら、新規な機能材料の創製を行っています。高い機能や新しい機能の創出、および、実用化を目標としています。

概要・特徴

- **高性能有機半導体材料開発の要件：アクセプターユニットの組み込み**
- **強力な課題解決手段：フッ素原子を導入した「ナフトビスチアジアゾール (FNTz)」を開発**
- **有機薄膜型太陽電池のn型、p型半導体材料に活用し、性能向上を確認**



用 途
- ✓ 有機薄膜型太陽電池のp型半導体材料
- ✓ 有機薄膜型太陽電池のn型半導体材料
- ✓ 熱活性化遅延蛍光の鍵中間体
- ✓ 有機半導体材料

技術内容

有機薄膜型太陽電池の半導体材料として用いたところ、性能が大きく向上することを確認しました。各種用途の有機半導体材料に対して、FNTzを導入することで性能が向上することが期待されます。

社会への影響・期待される効果

- 高性能有機薄膜太陽電池への応用
- 熱活性化遅延蛍光の鍵中間体への応用
- 高性能有機半導体材料開発も期待

【論 文 Paper】
[1] Adv. Energy Mater. 2020, in press.
[2] Adv. Energy Mater. 2018, 8, 1702506.
[3] Sci. Rep. 2018, 2018, 8, 17663.
[4] NPG Asia Mater. 2018, 10, 1016.
[5] J. Mater. Chem. A 2017, 5, 19773.
[6] J Mater Chem A 2017 5 3932.

【特 許 Patent】
[1] 特許第 06141423 号 (2017/05/12)
[2] 特許第 06004848 号 (2016/09/16)
[3] 特許第 05987237 号 (2016/08/19)
[4] 特許第 05954814 号 (2016/06/24)
[5] 特許第 05881283 号 (2016/02/12)
[6] 特許第 05792482 号 (2015/08/1

28
テーマ
Theme

被覆型π共役ユニットの開発

Development of insulated unit

研究分野 Department

ソフトナノマテリアル
Soft Nanomaterials

研究者 Researcher

家 裕隆
Y. Ie

キーワード Keyword

電荷輸送材料、光・電子機能材料、分子導線
carrier-transporting materials, photo and electronic functional materials, molecular wire

応用分野 Application

分子エレクトロニクス
molecular electronics

研究開発段階

基 礎　実用化準備　応用化

材料 Material

背　景

分子エレクトロニクス、有機エレクトロニクスに向けた分子開発では、π共役オリゴマーやポリマーは分子長の伸長に伴って、分子間相互作用が増大します。分子構造に基づく物性を利用するためには、“被覆”が重要になります。

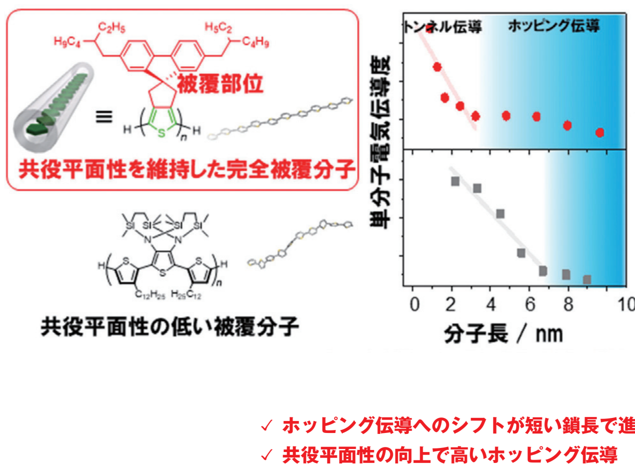
概要・特徴

縮環構造と嵩高い置換基を組み合わせた分子設計により、良好な共役平面性と被覆能の両立を実現しました。

技術内容

有機物質の機能を分子のレベルで理解し制御することで、電子・光機能を有する有機化合物の開発、および、有機・分子エレクトロニクスへの応用研究を行っています。

有機合成を駆使して、新規な拡張π電子共役系に基づく電子／光機能分子材料の分子設計と合成から、物性化学・機能化学、素子応用までの一貫した研究を行います。



社会への影響・期待される効果

①今回開発したユニットを用いると完全被覆型の分子導線が実現できます。(鎖長10nmの被覆分子開発を達成し、π共役系本来の電気特性を解明 (図))。

②分子エレクトロニクス、有機エレクトロニクスに向けた、分子物性を活かした新機軸の分子開発が期待されます。

【論 文 Paper】

[1] J. Phys. Chem. Lett. 2019, 10, 3197.
[2] J. Phys. Chem. Lett. 2019, 10, 5292.
[3] J. Phys. Chem. Lett. 2015, 6, 3754.
[4] Chem. Eur. J. 2015, 21, 16688.
[5] Angew. Chem. Int. Ed. 2011, 50, 11980.

【特 許 Patent】

[1] 特許第4505568号
(2010/05/04)

29
テーマ
Theme

機械学習を用いた結晶シリコン太陽電池の高効率化

Fabrication of high conversion efficiency crystalline Si solar cells using machine learning

研究分野 Department: 半導体材料・プロセス / Semiconductor Materials and Processes

研究者 Researcher: 今村健太郎 / K. Imamura

キーワード Keyword: 結晶シリコン太陽電池、トンネル酸化パッシベーション膜、ヘテロ接合、機械学習 / crystalline Si solar cells, tunnel oxide passivated layer, heterojunction, machine learning

応用分野 Application: 多結晶シリコン太陽電池、単結晶シリコン太陽電池 / polycrystalline Si solar cells, single crystalline Si solar cells

材料 Material

研究開発段階: 基礎 ▼ ／ 実用化準備 ／ 応用化

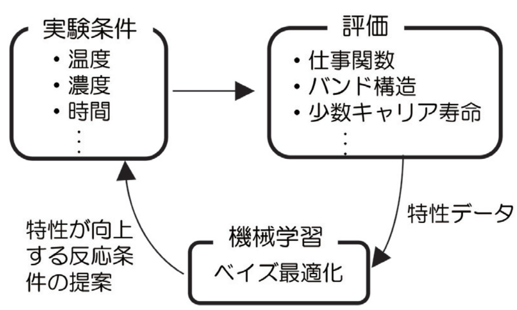
背　景

結晶シリコン太陽電池の高効率化にはキャリア選択層を用いたヘテロ接合が有望であり、近年多くの材料がキャリア選択層として報告されています。最適な材料、プロセス条件を選定することで低コストプロセスのもとで高変換効率の達成が期待できます。

概要・特徴

これまで太陽電池表面の反射率を低減する技術、化学的転写法[1, 2]を開発し、機械学習を用いてプロセス条件の最適化、高効率化を達成してきました。本研究では、より高効率化が期待されるトンネルSiO_2パッシベーション膜を有したヘテロ接合シリコン太陽電池の材料およびプロセス条件の最適化に機械学習を用いて取り組んでいます。

トンネルSiO_2パッシベーション膜を有したヘテロ接合結晶シリコン太陽電池の構造



効率的なプロセス条件最適化のサイクル

技術内容

- 実験→評価→機械学習(ベイズ最適化)のサイクルを繰り返すことで、着目する物性を最大化するトンネルSiO_2膜、ホール輸送層や電子輸送層の複数のプロセス条件を効率的に最適化することに取り組んでいます。
- 最適プロセス条件での物性比較により、すでに報告された多くの候補から、より有望なホール輸送層および電子輸送層の各材料を選定することが期待できます。
- 機械学習によって得られた実験条件と物性、あるいは物性と太陽電池特性の相関から高効率化に重要な実験条件、物性の明確化につながります。

社会への影響・期待される効果

- 結晶シリコン太陽電池の高効率化、低コスト化
- 効率的な太陽電池開発方法の提案、着目すべき物性の明確化

【論 文 Paper】

[1] K. Imamura, Y. Onitsuka, S. Kunieda, H. Kobayashi, Effective passivation for nanocrystalline Si layer/crystalline Si solar cells by use of phosphosilicate glass, Solar Energy, 169 (2018) 297-301

[2] S. Kunieda, K. Imamura, and H. Kobayashi, Surface structure chemical transfer method to fabricate low reflectance multicrystalline Si wafers produced with fixed abrasive machining technology, AIP Advances 9 (2019) 05224-1-6

シリコン/黒鉛シート複合体を用いたリチウムイオン電池負極の創製

Fabrication of anodes with Si/graphite sheet composites in Li Ion batteries

研究分野 Department
半導体材料・プロセス
Semiconductor Materials and Processes

研究者 Researcher
松本健俊
T. Matsumoto

キーワード Keyword
リチウムイオン電池、シリコン、切粉、黒鉛シート
Li ion battery, Si, swarf, graphite sheet

応用分野 Application
リチウムイオン電池、電動移動体、シリコン加工、黒鉛加工
Li ion battery, electric vehicle, silicon processing, graphite processing

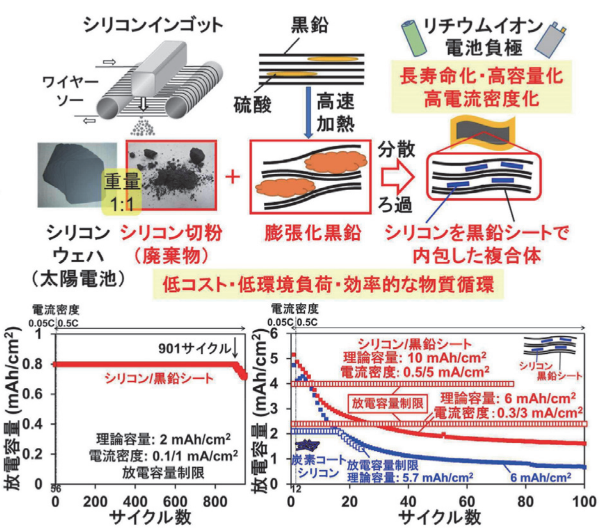
研究開発段階
基 礎 → **実用化準備** → 応用化

背　景

次世代のリチウムイオン電池の高容量負極の材料として、シリコンが研究されています。しかし、充放電時の体積変化が大きく、破壊されやすい欠点があります。破壊を抑制するために、シリコン粒子のサイズを小さくする方法もありますが、高コストになる課題もあります。

概要・特徴

シリコンインゴットをスライスする時に発生するシリコン切粉を解砕し、極薄黒鉛シート間に分散させた複合体を用いることで、シリコン負極の充放電特性が向上します。



技術内容

- シリコン負極の反応メカニズムを研究し、高容量負極を開発しています。
- 切粉を解砕したフレーク状シリコン粒子を、極薄黒鉛シートと溶媒中で分散、ろ過し、シリコンを黒鉛シート間に分散した状態で内包した複合体を作製しています。
- シリコン/黒鉛シート電極は、低い内部抵抗を示します。
- シリコン/黒鉛シート電極を十分に充電し、放電容量を制限することで、サイクル寿命が大きく向上します。
- 厚い電極と放電容量制限を用いることで、高容量・高電流密度で充放電でき、電池の軽量化・低コスト化も可能です。

社会への影響・期待される効果

シリコン切粉は、主に廃材として扱われ、世界で年間約10万トンも発生します。砥粒が混入しないシリコンインゴットのスライス法と水ベースの冷媒の利用が主流になり、水洗だけでシリコン切粉を利用できるようになっています。高温プロセスで作製されたシリコンの廃材と、短時間加熱で作製する膨張化黒鉛や黒鉛シートの副産物を原料とし、室温でシリコン/黒鉛シート複合体を作製します。これを用いてリチウムイオン電池の負極を製造することで、コストや環境負荷を低減でき、循環型経済への寄与も期待されます。

【論 文 Paper】
[1] J. Electrochem. Soc. 168 (2021) 020521-1-14. (DOI: 10.1149/1945-7111/abdd7e)
[2] J. Alloys Compd. 720 (2017) 529-540. (DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.05.228)
[3] J. Electrochem. Soc. 164 (2017) A995-A1001. (DOI: 10.1149/2.0361706jes)
[4] Sci. Rep. 7 (2017) 42734-1-10. (DOI: 10.1038/srep42734)

【特 許 Patent】
[1] 特願2020-002263.

金属酸化物メソ結晶の開発

Synthesis of metal oxide mesocrystals

研究分野 Department
励起材料科学
Material Excitation Chemistry

研究者 Researcher
藤塚 守
M. Fujitsuka

キーワード Keyword
金属酸化物、半導体、メソ結晶、ナノ粒子、超構造体
metal oxide, semiconductor, mesocrystal, nanoparticle, super-structure

応用分野 Application
光触媒、半導体デバイス、太陽電池、センサー、触媒
photocatalysis, semiconductor device, solar cell, sensor, catalyst

研究開発段階
基礎　実用化準備　応用化

背景

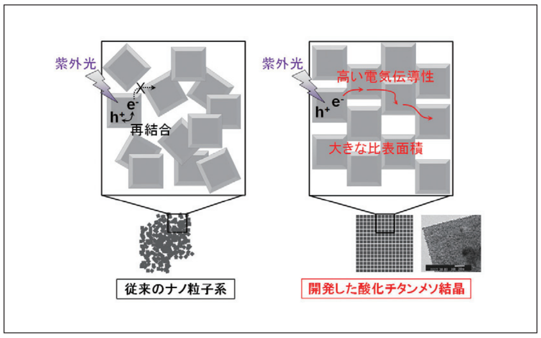
メソ結晶とは、結晶性ナノ粒子を高密度かつ規則的に集積させた結晶性ナノ粒子集合体のことです。金属酸化物メソ結晶は、結晶性ナノ粒子が規則的に並び粒子同士が一定に接していることから高効率な電荷輸送が可能と考えられています。そのため新たな機能性材料として環境浄化や水分解を目的とした光触媒、太陽電池等の光電変換素子、リチウムイオンバッテリー、センサー、触媒、触媒担体などの幅広い産業応用が期待されています。

概要・特徴

開発した金属酸化物メソ結晶は、従来のメソ結晶と比べ大きな比表面積を有しており、また、光触媒活性も同程度の比表面積のナノ粒子系と比べ２倍以上高いことがわかりました。これは、紫外光照射によって生じた電荷がメソ結晶中を高効率に移動することに起因しています。

技術内容

我々は、反応溶液を基板上で焼結させるだけで、ナノメートルサイズの様々な金属酸化物ナノ結晶が高密度かつ規則的に集積したマイクロメートルサイズの多孔質金属酸化物メソ結晶を合成することに成功しました。様々な２成分系の金属メソ結晶も合成できます。



社会への影響・期待される効果

- 光電変換素子における光・電気エネルギー変換プロセスの高効率化
- 環境浄化や水分解を目的とした光触媒、太陽電池、リチウムイオンバッテリー、センサーなどの幅広い産業応用

【論 文 Paper】
[1] Nat. Commun. 2014, 5, 4038/1-4038/9.
[2] J. Phys. Chem. Lett. 2012, 3, 1422-1427.

【特 許 Patent】
[1] 特願2012-018148 酸化チタンメソ結晶，出願日H24(2012)1.31.
[2] 特願2012-110679 貴金属ナノ粒子担持TiO2メソ結晶，出願日H24(2012)5.14.
[3] 特願2013-017258 金属酸化物メソ結晶及びその製造方法，出願日H25(2013)1.31.

32
テーマ Theme

一重項酸素を検出する蛍光プローブ

Fluorescence probe of singlet oxygen

研究分野 Department　励起材料科学 Material Excitation Chemistry

研究者 Researcher　藤塚 守 M. Fujitsuka

キーワード Keyword　一重項酸素、蛍光プローブ、光線力学的療法、生細胞イメージング
singlet oxygen, fluorescence probe, photodynamic therapy, live cell imaging

応用分野 Application　一重項酸素センサー、光線力学的療法、抗癌治療、セラグノーシス
singlet oxygen sensor, photodynamic therapy, tumor treatment, theragnosis

研究開発段階　基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

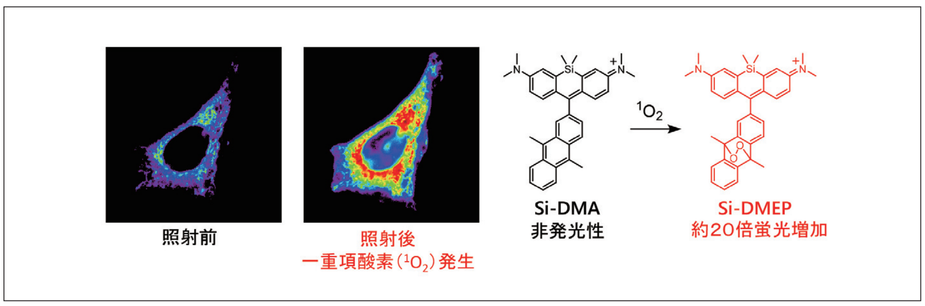
光線力学的療法 (PDT) は、光照射によって活性酸素種(特に、一重項酸素)を発生する光増感剤を体内に導入し、がん細胞のような有害組織を除去する治療方法です。活性酸素種の発生及び拡散と細胞毒性メカニズムの関係が分子レベルまで究明できれば、PDT効率の向上及び抗がん治療以外へのPDTのさらなる一般化が期待できます。また、電子デバイス、ナノ材料においても、一重項酸素の発生と反応がそれらの性能を決定する重要な因子となっています。

概要・特徴

一重項酸素を高感度検出できる蛍光プローブSi-DMAを開発。様々な材料、化学反応や、PDT中で発生する一重項酸素の蛍光イメージングが可能。

技術内容

一重項酸素の蛍光プローブとして、ケイ素を含んだローダミンとジメチルアントラセン誘導体を連結した化合物Si-DMAを開発しました。Si-DMAはPDT療法の主要な細胞内小器官のターゲットであるミトコンドリアに浸透し、その内膜で共存している光増感剤から発生する一重項酸素を場所選択的に可視化に成功しました。



社会への影響・期待される効果

電子デバイス、ナノ材料、光線力学的療法などで発生する一重項酸素の検出による、より高性能のデバイス、材料や、高信頼性の抗癌治療法の開発。

【論 文 Paper】
[1] J. Am. Chem. Soc, 136 (33), 11707-11715 (2014).
[2] Chem. Commun. 51 (58), 11580-11583 (2015).

【特 許 Patent】
[1] 特願2014－124543 蛍光プローブ, 一重項酸素検出剤, 又は一重項酸素検出方法, 出願日H26(2014) 6.17.

テーマ Theme 33

スピロ型キラル配位子SPRIXを活用する不斉触媒反応応用

Development of Asymmetric Catalysis Using SPRIX Ligand

研究分野 Department 機能物質化学 Synthetic Organic Chemistry

研究者 Researcher 笹井宏明 H. Sasai　滝澤 忍 S. Takizawa

キーワード Keyword 触媒的不斉合成、スピロ型キラル配位子、光学活性化合物 asymmetric catalysis, chiral spiro ligand, optically active compound

応用分野 Application ファインケミカルズ、医薬品、農薬、香料 fine chemicals, medicines, agrochemicals, perfumery

研究開発段階 基礎 ▶ **実用化準備** ▶ 応用化

背　景

「光学活性化合物」は、医薬品や農薬など現代社会に必要不可欠な幅広い製品に利用されています。本研究では、少量のキラル源から大量の光学活性化合物を産出でき、効率性・環境調和性にも優れている触媒的不斉合成技術の革新を図っています。

概要・特徴

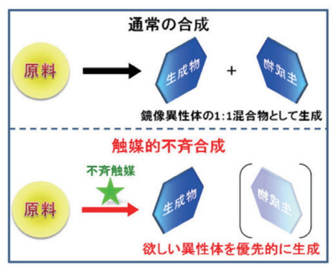
他に類例のないイソオキサゾリンを配位部位として持つスピロ型キラル配位子SPRIXを活用する触媒的不斉合成研究を展開します。

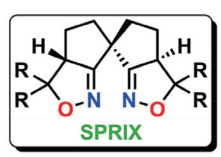
SPRIXは、「剛直なスピロ骨格」と「低いσドナー性」に由来する特徴的な反応性を中心金属に与えます。特に、多様な反応に触媒活性を示すパラジウムとの親和性は高く、既存のキラル配位子では促進されない不斉触媒反応を可能とします。

技術内容

遷移金属錯体による触媒的不斉合成の研究開発において、特に重要となるのは触媒活性と立体選択性の制御です。これらを決定的に左右するものはキラル配位子であり、その電子的・立体的性質を精密にデザインすることにより、不斉認識能や反応活性の飛躍的な向上を実現できます。

本研究では、2つの環が1つの原子を共有したスピロ骨格が形成する特異的な不斉環境に世界に先駆けて着目し、スピロ型キラル配位子SPRIXを活用する触媒的不斉合成研究を展開しています。





社会への影響・期待される効果

- プロセスの省資源化・省エネルギー化
- 新規な光学活性化合物開発における有用な合成手法

【論 文 Paper】

[1] Bull. Chem. Soc. Jpn. 2009, 82, 285.
[2] J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 3452.
[3] Org. Lett. 2011, 13, 3506.
[4] Chem. Commun. 2013, 49, 11224.
[5] Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 4675.
[6] Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 9572.
[7] Chem. Commun. 2017, 53, 6887.
[8] Org. Lett. 2018, 20, 6827.
[9] Adv. Synth. Catal. 2020, 362, 1537.
[10] Adv. Synth. Catal. 2020, 362, 3558.

酸ー塩基型有機分子不斉触媒の開発とキラルビルディングブロックの創出

Development and Application of Chiral Acid–Base Organocatalysts

研究分野 Department　機能物質化学 Synthetic Organic Chemistry

研究者 Researcher　笹井宏明 H. Sasai　滝澤 忍 S. Takizawa

キーワード Keyword　触媒的不斉合成、有機分子不斉触媒、光学活性化合物
asymmetric catalysis, chiral organocatalyst, optically active compound

応用分野 Application　ファインケミカルズ、医薬品、農薬、香料
fine chemicals, medicines, agrochemicals, perfumery

研究開発段階　基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

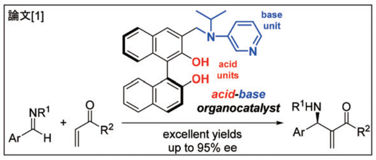
「光学活性化合物」は、医薬品や農薬などの現代社会に必要な幅広い製品に利用されています。本研究では、少量のキラル源から大量の光学活性化合物を産出でき、効率性・環境調和性にも優れている触媒的不斉合成技術の革新を図っています。

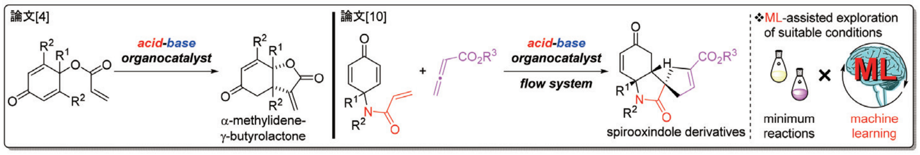
概要・特徴

有機酸と有機塩基の２つの触媒機能を人工の不斉骨格に任意に導入した有機分子不斉触媒の開発を行っています。このような触媒は、同一分子内にある酸部位と塩基部位が協調的に働くことで、高毒性で高価なレアメタルを用いずとも基質を活性化でき、汎用性の高い医薬品中間体の環境低負荷型供給の実現を可能とします。

技術内容

この酸ー塩基型有機分子不斉触媒を用いると、安価で入手容易な不飽和カルボニル化合物から反応性の高い光学活性な求核種が発生します。これを連続反応へ応用すれば、下図のような付加価値の高い複雑な分子骨格も簡便に合成できます。





社会への影響・期待される効果

- プロセスの省資源化・省エネルギー化・環境低負荷化
- 新規な光学活性化合物開発における有用な合成手法

【論 文 Paper】

[1] J. Am. Chem. Soc. 2005, 127, 3680.
[2] Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 9725.
[3] Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 5423.
[4] Org. Lett. 2013, 15, 4142.
[5] Org. Lett. 2014, 16, 4162.
[6] Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 15511.
[7] Org. Lett. 2017, 19, 5426.
[8] ACS. Catal. 2018, 8, 5228.
[9] Chem. Commun. 2020, 56, 1259.
[10] ACS. Catal. 2021, 11, 1863.

【特 許 Patent】

[1] 特開2006-28021.
[2] Patent No. US 2006-009646.

35
テーマ
Theme

不斉水素借用反応の開発と天然化合物の触媒的不斉合成

Asymmetric hydrogen borrowing reaction and application for the catalytic asymmetric synthesis of natural products

研究分野 Department
総合解析センター
Comprehensive Analysis Center

研究者 Researcher
鈴木健之
T. Suzuki

キーワード Keyword
イリジウム、不斉触媒、酸化反応
iridium, asymmetric catalyst, oxidation

応用分野 Application
ファインケミカルズ、医薬品、農薬、香料
fine chemicals, medicines, agrochemicals, perfumery

材料 Material

研究開発段階 基礎 ／ 実用化準備 ／ 応用化

背景

酸化、還元は合成化学の基盤技術であり、これらに関わる新規不斉触媒反応の開発により、環境負荷の低いグリーンプロセスの構築を目指しています。

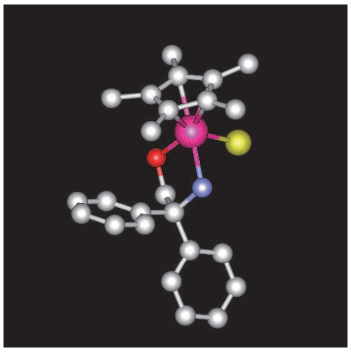
概要・特徴

酸化や還元プロセスに関わる新規不斉触媒反応を用いて有用天然化合物の高効率触媒的不斉合成を行います。

- **対称化合物の非対称化による複数のキラル中心を有する有機化合物を合成**
- **高原子効率の化学変換による環境調和型触媒反応を実現**

技術内容

- 不斉金属錯体の合成
- 不安定中間体の構造決定
- 光学異性体の分離、純度決定
- 有機化合物の構造決定
- 光学異性体の絶対配置決定



Cp*Ir 錯体触媒の X 線構造

社会への影響・期待される効果

- 従来にないレドックスニュートラルな不斉触媒反応の実現
- 有用天然化合物の高効率合成

【論 文 Paper】

[1] T. Suzuki, Chem. Rev. 2011, 111, 1825-1845.
[2] T. Suzuki, in Comprehensive Chirality, Vol. 5 (Eds.: H. Yamamoto, E. M. Carreira),Elsevier 2012, pp. 502-533.
[3] T. Suzuki, K. Ghozati, T. Katoh, H. Sasai, Org. Lett. 2009, 11, 4286-4288.
[4] T. Suzuki, Ismiyarto, Y. Ishizaka, D. Y. Zhou, K. Asano, H. Sasai, Org. Lett. 2015, 17, 5176-5179.

36
テーマ
Theme

シンクロトロン放射光角度分解光電子分光による固体電子の様々な相互作用の検出

Probing of the electron-interaction in solids by means of angle-resolved photoelectron spectroscopy with synchrotron radiation

研究分野 Department
励起物性科学
Excited solid-state dynamics

研究者 Researcher
田中慎一郎
S. Tanaka

キーワード Keyword
グラフェン、ARPES、シンクロトロン放射、電子格子相互作用
graphene, ARPES, synchrotron radiation, electron-phonon interaction

応用分野 Application
新機能デバイス開発
development of new-functional devices

研究開発段階
基 礎　実用化準備　応用化

材料 Material
解析 Analysis

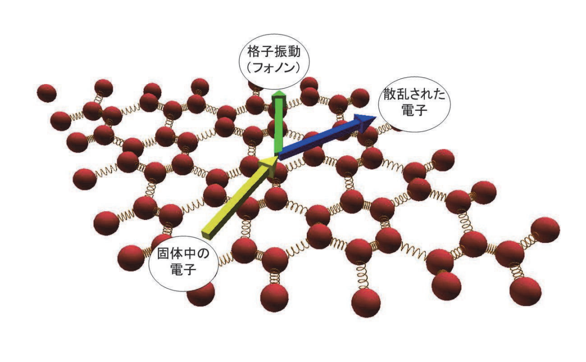
背景

固体内の電子は、第一近似としては、原子核や電子の作るポテンシャルを平均化して、その中での電子一つの（平均場一電子近似）波動方程式を解くことで理解されます。しかし、実際の固体の性質は、原子によって作られる格子の運動による擾乱（電子格子相互作用；図参照）や、光による電磁波による励起など、さまざまな相互作用によって決定されます。

概要・特徴

最先端の計測技術を用いて、グラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドなど低次元系における電子のダイナミクスを研究し、新機能物質開発のための指針を打ち立てます。

技術内容



これらの相互作用を分光学的に調べることは、固体の電子物性の理解に役立ち、将来の新機能デバイス開発のためのしっかりとした指針の形成につながります。

現在は主として、新奇デバイス候補として、さらに最も基本的な2次元物質として注目を集めるグラフェンや遷移金属ダイカルコゲナイドなどの物質について研究しています。

角度分解光電子分光(ARPES)は、電子の運動量とエネルギーを直接検出できる非常に優れた実験手段です。しかし、電子格子相互作用などの擾乱を調べるためには、励起光の波長や偏光などを自由に制御し、しかも明るく高分解能(<10meV)で測定しなければなりません。このため、シンクロトロン放射光施設を利用し、多くの他機関の研究者とも連携して研究を進めています。さらに、高分解能電子エネルギー損失分光（HREELS）や、電子電子コインシデンス分光法(EECOS)など、先進的なさまざまな電子分光法も用いています。

社会への影響・期待される効果

- 物質の電子物性における基礎過程の解明
- 新機能物質開発のための指針の確立

【論 文 Paper】
[1] S. Tanaka, M. Matsunami, and S. Kimura, Sci. Rep. 3, 3031 (2013).
[2] P. Ayria, S. Tanaka, A. R. T. Nugraha, M. S. Dresselhaus, and R. Saito, Phys. Rev. B 94, 075429 (2016).

37
テーマ
Theme

動作中のナノギャップ電極の表面観察

Atomic scale analysis of the surface structure in working nanogap electrodes

研究分野 Department
ナノ構造・機能評価
Nanocharacterization for Nanostructures and Functions

研究者 Researcher
末永和知 K. Suenaga
吉田秀人 H. Yoshida
神内直人 N. Kamiuchi

キーワード Keyword
金属ナノ構造、ナノギャップ、環境制御型透過電子顕微鏡
metal nanostructure, nanogap, environmental transmission electron microscopy (ETEM)

応用分野 Application
表面化学、ナノデバイス
surface chemistry, nano device

材料 Material
解析 Analysis

研究開発段階
基礎 実用化準備 応用化

背景

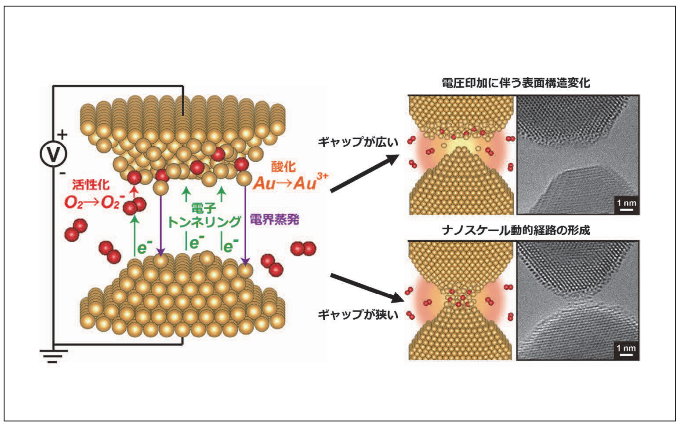
固体表面の構造は電子励起によって変化するが、その反応メカニズムの解明には実時間、実空間、実環境での観察が必要となります。高い空間分解能と時間分解能を有する環境制御型透過電子顕微鏡を用いることにより、動作中の金属ナノギャップ電極表面の原子スケールの構造変化をその場観察で捉えることができます。

概要・特徴

環境制御型透過電子顕微鏡と高速カメラを使用することにより、動作中の金属ナノギャップ電極において、電極表面の構造が原子スケールで連続的に変化する現象を初めて可視化しました。

技術内容

金は化学的に不活性な金属であり電極材料として広く利用されてきましたが、実際に動作中の電極表面の原子スケールの構造はこれまで明らかにされていませんでした。今回、電子顕微鏡内で金ナノギャップ電極に電圧を印加し酸素ガスを導入することで、正極表面の結晶構造が乱れることを明らかにしました。さらにナノギャップ間を金原子が移動する様子をその場で可視化することに成功し、その連続的に変化する構造が金の酸化物であることを解明しました。酸素ガス中における異方的な構造変化がトンネル電子とガス分子との反応によって引き起こされることを世界で初めて明らかにした成果です。



社会への影響・期待される効果

本研究成果により、ナノギャップ電極におけるトンネル電子とガス分子との反応メカニズムが解明され、この反応を利用した新たなナノ材料の開発に繋がると期待されます。

また、金ナノギャップ電極だけでなく、ナノデバイスに用いられる様々な金属電極表面の反応メカニズムを解明する手がかりになり、実環境ガスや実用電極材料を選択することで、電子を利用した新たなナノ材料の開発に繋がると期待されます。

【論 文 Paper】

[1] T. Tamaoka, H. Yoshida, and S. Takeda, RSC Advances 9 (2019) 9113-9116.
[2] T. Tamaoka, R. Aso, H. Yoshida, and S. Takeda, Nanoscale 11 (2019) 8715-8717.
[3] R. Aso, Y. Ogawa, T. Tamaoka, H. Yoshida, and S. Takeda, Angew. Chem. Int. Ed. 58 (2019) 16028-16032.

38
テーマ
Theme

機能中の触媒表面ダイナミクス解析

In situ observation of active nanostructures in solid catalysts under reaction environments

研究分野 Department

ナノ構造・機能評価
Nanocharacterization for Nanostructures and Functions

研究者 Researcher

末永和知 K. Suenaga
吉田秀人 H. Yoshida
神内直人 N. Kamiuchi

キーワード Keyword

金属ナノ粒子触媒、CO酸化反応、環境制御型透過電子顕微鏡
metal nanoparticulate catalysts, CO oxidation, environmental transmission electron microscopy (ETEM)

応用分野 Application

触媒化学、ナノデバイス
catalytic chemistry, nano device

研究開発段階

基 礎　実用化準備　応用化

背　景

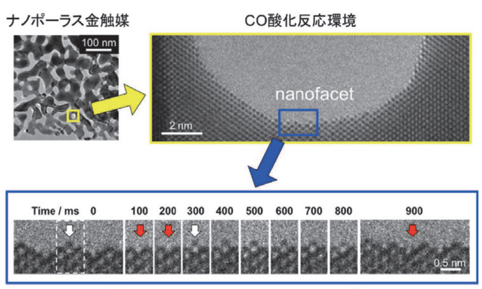
触媒は化学反応を促進するために、様々な化学反応に用いられますが、多くの場合、その活性構造は明らかになっていません。触媒の性能向上には、機能発現中の活性構造の正確な理解が必要です。環境制御型透過電子顕微鏡 (ETEM) は様々なガスを試料周辺に導入することができる強力な分析手法です。

概要・特徴

環境制御型透過電子顕微鏡と高速カメラを使用することにより、化学反応条件で起こる触媒表面ダイナミクスを明らかにしました。

技術内容

有害ガスである一酸化炭素を無害化するナノポーラスAu触媒の活性構造を原子スケールで初めて明らかにしました。Auは化学的に不活性で錆びない金属であるにも関わらず、ナノサイズの孔を持つスポンジ状にすると触媒として働くことが報告されてきました。しかしながら、その活性構造やメカニズムは、これまで明らかにされていませんでした。今回、高性能の環境制御型透過電子顕微鏡によるその場解析を行い、化学反応中に残留元素を含む特徴的なナノ構造(図)ができること、触媒表面を複数の原子が激しく動き回り触媒として働くことを明らかにしました。また、ab initio計算を行うことにより、触媒の活性に寄与する本質的なナノ構造には、Auだけでなく、触媒中に残留するAg成分が関与することを明らかにしました。



ポーラス金触媒表面のダイナミクス

社会への影響・期待される効果

この研究成果は、Au触媒だけでなく、工業的に用いられる様々な固体触媒の反応メカニズムを解明する手がかりになり、新たな高性能触媒の開発に繋がると期待されます。

【論 文 Paper】

[1] H. Yoshida, Y. Kuwauchi, J. R. Jinschek, K. Sun, S. Tanaka, M. Kohyama, S. Shimada, M. Haruta, and S. Takeda, Science 335 (2012) 317-319.
[2] Y. Kuwauchi, S. Takeda, H. Yoshida, K. Sun, M. Haruta, and H. Kohno, Nano Lett. 13 (2013) 3073- 3077.
[3] H. Yoshida, H. Omote, and S. Takeda, Nanoscale 6 (2014) 13113-13118.
[4] S. Takeda, Y. Kuwauchi, and H. Yoshida, Ultramicroscopy 151 (2015) 178-190.
[5] N. Kamiuchi, K. Sun, R. Aso, M. Tane, T. Tamaoka, H. Yoshida, and S. Takeda, Nat. Commun. 9 (2018) 2060.

解 析 Analysis

39
テーマ Theme

極短パルス電子線によるダイナミクス計測

Investigation of reaction kinetics induced by ultra-short electron beams

研究分野 Department　ナノ極限ファブリケーション Advanced Nanofabrication

研究者 Researcher　吉田陽一 Y. Yoshida　楊 金峰 J. Yang　菅 晃一 K. Kan　神戸正雄 M. Gohdo

キーワード Keyword　量子ビーム誘起超高速現象、フェムト秒光パルス・電子ビーム、放射線化学
quantum-beam-induced ultrafast phenomena, femtosecond electron beam/laser, radiation chemistry

応用分野 Application　材料評価、リソグラフィ materials evaluation, lithography

研究開発段階　基 礎 ▼　実用化準備　応用化

解析 Analysis

背　景

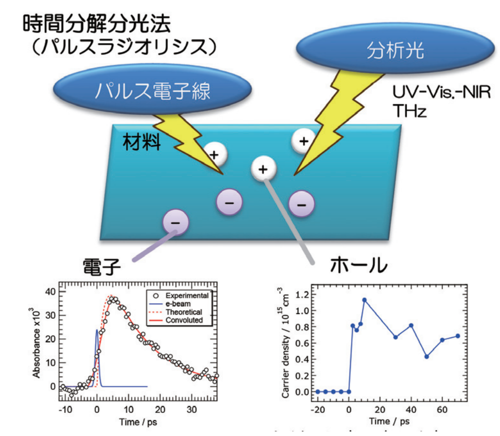
極限ナノファブリケーションを実現するために材料中に量子ビームが誘起する基礎過程の解明を目指しています。そのためのツールとして、世界最高時間分解能を有するフェムト秒・アト秒パルスラジオリシスシステムの研究開発を行っています。

概要・特徴

フェムト秒極短パルス電子ビームを時間分解分光法に適用し、量子ビーム誘起反応による過渡種（ホール、電子、ラジカル）のダイナミクスを実測する装置と測定法を開発・運用しています。電子ビームによる分析光の発生により、THz光も使えるようになり、測定対象、現象に合わせた測定が可能です。パルス電子線の短パルス化と、時間分解分光法の高時間分解化の実現に注力しています。

技術内容

我々は、量子ビームが誘起する超高速反応の基礎過程の解明を目指し、極短パルス電子線によるダイナミクス計測を行っています。フェムト秒・アト秒パルスラジオリシスでは、試料に量子ビーム(電子線) を照射し、分析光(紫外・可視・近赤外・遠赤外) の吸収・透過率の解析により、反応ダイナミクスの計測を行っています。この計測により、電離放射線の利用が検討されている次世代ナノファブリケーション、放射線治療、原子炉水化学等における量子ビーム誘起による超高速反応の知見の提供が可能となります。図にはエタノールやシリコンに電子ビームを照射した直後に起きるピコ秒オーダーの反応の観測例を示します。



エタノール中の溶媒和前電子の生成と減衰の実時間観測例（観測波長 1400 nm）

シリコン中のホールと準自由電子の実時間観測例（観測周波数 1 ± 0.5THz）

社会への影響・期待される効果

放射線場や宇宙空間での材料の劣化や、材料中の電荷キャリヤの動き、EUVリソグラフィー等の次世代半導体微細加工技術の基礎過程の解明に役立つ知見を与えます。これらの知見の材料へのフィードバックが極限空間での活動を支える材料や、次世代材料の開発の契機となることを期待します。

また、極短パルス電子ビームは、物質を高密度にイオン化・励起できる可能性があり、新たな材料プロセスの可能性を秘めています。

【論 文 Paper】

[1] T. Toigawa, et al., Radiat. Phys. Chem. 123, 73-78 (2016); T. Kondoh, et al., Radiat. Phys. Chem. 84, 30-34 (2013); T. Kondoh, et al., Radiat. Phys. Chem. 80, 286-290 (2011); 80, 286-290 (2011).
[2] I. Nozawa, et al., Phys. Rev. ST Accel. Beams 17, 072803 (2014).
[3] K. Kan, et al., Rev. Sci. Instrum. 83, 073302 (2012); J. Yang, et al., Nucl. Instr. Meth. A 629, 6-10 (2011).

40
テーマ
Theme

超高速電子顕微鏡・電子線回折

Ultrafast electron microscope with relativistic femtosecond electron pulses

研究分野 Department
ナノ極限ファブリケーション
Advanced Nanofabrication

研究者 Researcher
吉田陽一 Y. Yoshida　楊 金峰 J. Yang　菅 晃一 K. Kan　神戸正雄 M. Gohdo

キーワード Keyword
超高速電子顕微鏡、フェムト秒電子線パルス、電子線回折
ultrafast electron microscope(UEM), femtosecond electron beam, electron diffraction

応用分野 Application
構造ダイナミクスの解明、新物質の創製、タンパク質結晶構造解析
ultrafast structural dynamics, creation of new materials/devices, protein crystal structure analysis

研究開発段階
基 礎　**実用化準備**　応用化

背　景

新しい物質創製・新物性発現には、実時間 (～fs) と実空間 (～Å) での原子･分子の動きや構造変化のダイナミクスを直接的に観察し理解することは必要不可欠です。一方、汎用の電子顕微鏡では高時間分解能がなく、フェムト秒・ピコ秒の早い時間領域での構造変化の観察がまだ不可能です。

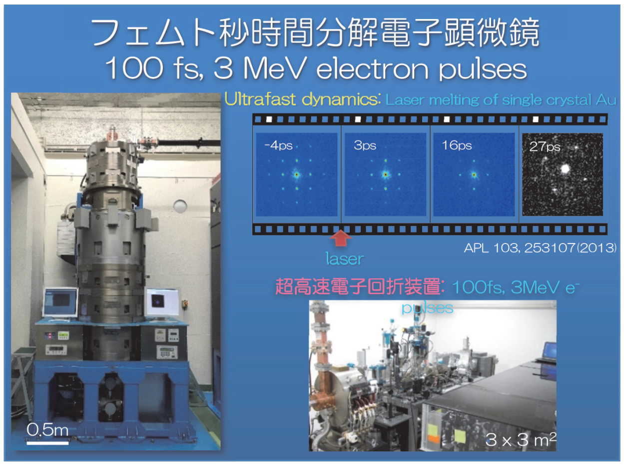
概要・特徴

最先端加速器技術を用いて、エネルギーが 3 MeV、パルス幅が 100fs の高輝度電子線パルスを発生し、フェムト秒時間分解能を有する「超高速電子顕微鏡」を世界に先駆けて開発し、原理実証に成功しました。

技術内容

我々は、物質科学の研究力を高め、新たな学際領域を切り拓き、革新的製品開発の核となる新知見を創出するために、物理、化学、生物学など幅広い科学分野に利用可能な、時間的にフェムト秒、空間的にオングストロームの分解能を有する「超高速電子顕微鏡」を開発し、実証実験を試みました。

超高速電子顕微鏡では、高周波電子銃技術を用いてエネルギー3MeV、パルス幅100fsの高輝度電子線パルスを発生し、相対論的フェムト秒電子線パルスを用いた電子顕微鏡像の測定に成功しました。電子回折の観察では、単一電子線パルスによる測定や、フェムト秒時間分解構造変化の観察に成功しました。これにより、今まで測定できなかった不可逆な構造ダイナミクスの解明を可能にしました。



社会への影響・期待される効果

相転移等のトリガーに始まる構造変化等の拡大現象や、金属中の転移滑り現象の観測、化学反応における分子構造変化等のダイナミクス解明を目指しています。これにより新しい物質相・新物性の探索、化学反応から生成される様々な中間種の発見が期待されます。

また、様々なタンパク質の構造決定において、ビームダメージよりも早く回折像を取得し、構造決定する手法の確立を目指しています。これにより創薬等への貢献が期待されます。

【論 文 Paper】
[1] J. Yang, et al., Electronics and Communication in Jpn, 98, No. 11, 50-57(2015); J. Yang, Microscopy, 60, No.3, 157-159(2015).

解析 Analysis

テーマ Theme 41

量子ビームによる材料の反応解析

Analysis of reactions induced in materials using quantum beam

研究分野 Department 量子ビーム物質科学 Beam Materials Science

研究者 Researcher 古澤孝弘 T. Kozawa

キーワード Keyword レジスト、微細加工、リソグラフィ、量子ビーム resist, nanofabrication, lithography, quantum beam

応用分野 Application 半導体リソグラフィ、レジスト材料 semiconductor lithography, resist materials

材料 Material

研究開発段階 基礎　実用化準備　応用化

背景

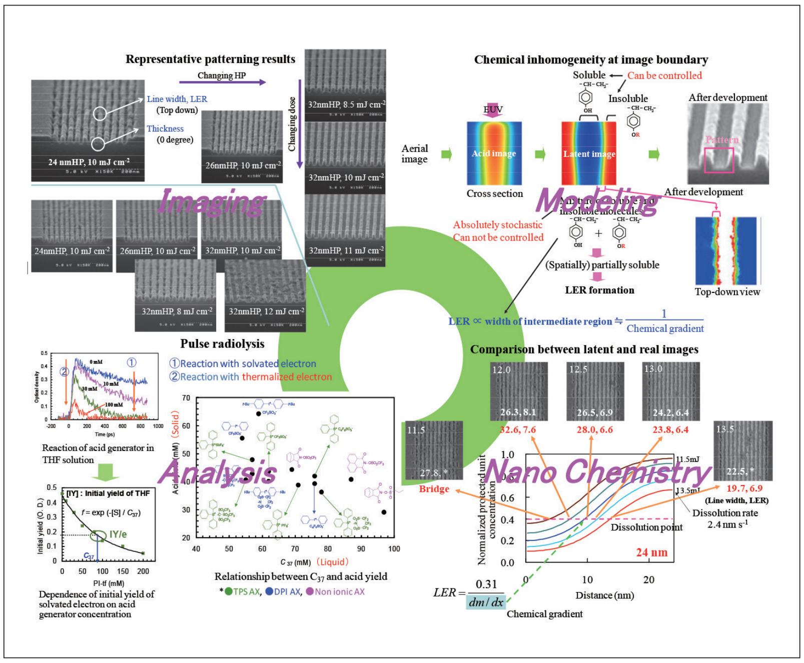
半導体製造における極端紫外光リソグラフィ、粒子線ガン治療等、今後電離放射線領域にある量子ビームの利用が大きく展開して行くことが予想されます。

概要・特徴

短パルス量子ビームを活用した高時間分解過渡吸収分光システムは他に類を見ない装置であり、モデリングに威力を発揮します。

技術内容

最先端の量子ビーム（電子線、極端紫外光、レーザー、放射光、X線、ガンマ線、イオンビーム）を利用して、量子ビームが物質に引き起こす化学反応と反応場の研究を行っています。量子ビームによる物質へのエネルギー付与から、化学反応を経て、機能発現に至るまでの化学反応システムの解明、得られた知見から新規化学反応システムの構築を行い、産業応用分野としては、特に半導体リソグラフィ材料をターゲットとして、反応解析、材料設計指針を得るための研究を行っています。



社会への影響・期待される効果

- レジスト材料の反応解析
- 新規材料の設計指針の取得

【論 文 Paper】

[1] T. Kozawa and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys.（Invited Review）49（2010）030001.

[2] T. Itani and T. Kozawa, Jpn. J. Appl. Phys.（Invited Review）52（2013）010002.

42
テーマ
Theme

量子ビームを用いた極限状態下の誘起反応化学

Study on radiation induced chemical reactions at extreme conditions

研究分野 Department: 量子ビーム物質科学 Beam Materials Science

研究者 Researcher: 室屋裕佐 Y. Muroya

キーワード Keyword: 量子ビーム、放射線化学、高温高圧流体、超臨界状態、軽水炉水化学
quantum beam, radiation chemistry, high temperature and pressure fluids, supercritical state, water chem

応用分野 Application: 環境科学、軽水炉水化学
environmental science, water chemistry in nuclear engineering

研究開発段階: 基 礎 → 実用化準備 → 応用化

背　景

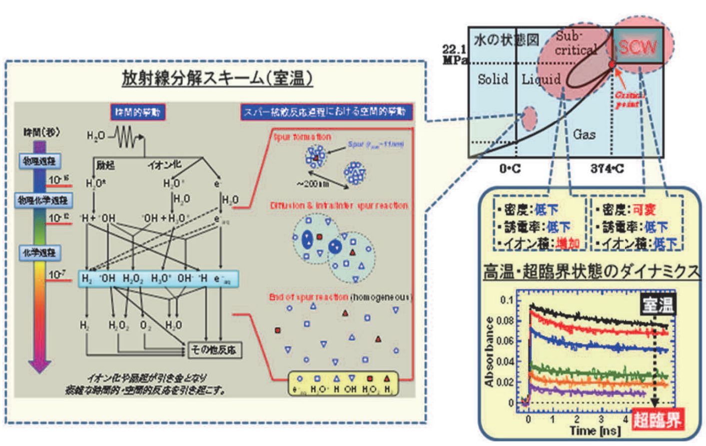
量子ビームはガン治療、半導体加工、環境有害物質の無害化や難分解性物質の分解といった幅広い分野に利用されています。照射によって物質中に生成するイオンやラジカル、電子といった反応活性種をうまく活用することが鍵となりますが、これらの反応性は高温下で著しく増大することから強力且つ効率的な反応場を創製できることが期待されています。一方で原子力工学においてこれらの反応活性種は構造材料の腐食促進の原因となり、バルクー材料界面における化学雰囲気の制御が長期安全性に関わる課題となっています。

概要・特徴

ピコ秒～ナノ秒～マイクロ秒といった極めて短時間に進行する放射線反応を素過程から解明し、これを基に反応システムの把握や制御の研究を行います。

技術内容

電子線、ガンマ線、極紫外光といった様々な量子ビームを用いてバルクや溶液－固体界面において誘起される反応を追跡し、シミュレーションも併用することにより反応機構の解明や新たな反応場創製のための指針を得ることを目指します。



社会への影響・期待される効果

- 高温高圧溶媒の放射線分解反応過程の解明
- 亜臨界・超臨界水を用いた新しい反応場の創製
- 放射線照射下における溶液・固体表面相互作用の解明
- 量子ビームを用いたナノ粒子生成と界面の振る舞いの解明
- 放射性廃棄物処理における化学環境評価

【論 文 Paper】

[1] "Supercritical pressure light water cooled reactors", Springer, ISBN: 978-4-431-55024-2, pp.347-375 (2014).
[2] Chem. Phys. Lett., 657 (2016) 102-106.
[3] Phys. Chem. Chem. Phys., 19 (2017) 23068-23077.
[4] Phys. Chem. Chem. Phys., 19 (2017) 30834-30841.
[5] Nat. Commun., 10 (2019) 102.

43
テーマ Theme

レーザープラズマ駆動高エネルギー電子加速の開発

Development of laser-plasma-driven electron acceleration

研究分野 Department
量子ビーム物理
Beam Physics

研究者 Researcher

細貝知直 T. Hosokai
松門宏治 K. Matsukado
金 展 J. Zhan
水田好雄 Y. Mizuta
A. ジドコフ A. Zhidkov
N. パサック N. Pathak

キーワード Keyword
レーザー加速、プラズマ、超短パルスレーザー
laser-driven particle acceleration, plasmas, ultra-short pulse lasers

応用分野 Application
高エネルギー加速器、卓上加速器、超高速イメージング
high-energy accelerator, table-top accelerator, ultra-fast imaging

研究開発段階
基 礎 — 実用化準備 — 応用化

解 析 Analysis

背　景

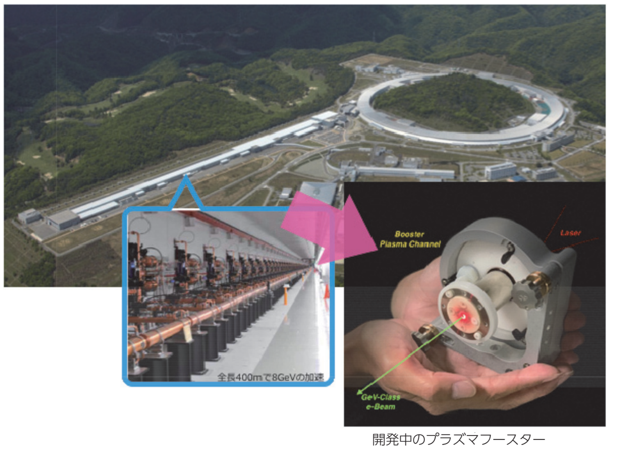
高強度レーザーパルスとプラズマとの相互作用で励起される電子プラズマ波（レーザー航跡場）を用いて電子を加速するレーザー航跡場電子加速は、従来の高周波加速の1000倍以上の超高加速電場を生成可能であることから高エネルギー加速器の飛躍的な小型化が期待されています。

概要・特徴

GeV(ギガ電子ホルト)級の大型加速器を超コンパクトにするレーザープラズマ加速器の実現を目指します。

技術内容

GeV級の超高エネルギー加速器を卓上サイズ で実現可能と期待され、そのGeV級加速の原 理実証もなされたレーザープラズマ加速ですが、ビームの安定性／再現性、品質、制御性等の粒子加速器としての性能指標の現状は、プラズマの制御の難しさから従来加速器に遠く及ばず、これらの確立がレーザー航跡場加速器実現の喫緊の課題となっています。プラズマ中の粒子加速機構の詳細な理解をベースにこれらの課題に取り組み、レーザー加速器の実現を目指します。



開発中のプラズマフースター
-5cmiJJGeV 級レーザー加速装置

社会への影響・期待される効果

本研究の高エネルギー電子加速の劇的な小型化技術を用いて、卓上サイズの自由電子レーザーや放射光装置の実現を目指した研究開発が進められています。同時に、レーザープラズマ加速の周辺技術は医療応用、材料科学への応用等への展開も検討されています。

【論 文 Paper】

[1] A.Zhidkov et al., Phys. Rev. Res., 2, 013216 (2020).
[2] Z.Jin et al., Scientific Reports, 9, 20045 (2019).
[3] N. Pathak et al., Phys. Plasmas, 25, 1, 013119 (2018)
[4] Y Sakai et al Phys ReV STAccel Beams 21 10 101301 (2018)

【特 許 Patent】

[1] US 10,104,753 B2 (米国)
[2] GB 2559676 B (英国)
[3] 特許第6319920号「光導波路形成法」
[4] 特許第5611699号「電子ビームパルス出射装置」

44 テーマ Theme

大強度テラヘルツ波の発生とその利用

Generation and applications of high-intensity terahertz wave

研究分野 Department　量子ビーム物理 Beam Physics

研究者 Researcher　入澤明典 A. Irizawa

キーワード Keyword　遠赤外、テラヘルツ、自由電子レーザー、大強度コヒーレント光
far infrared, terahertz (THz), free electron laser (FEL), high-intensity coherent radiation

応用分野 Application　材料加工、医療、バイオテクノロジー、ナノテクノロジー、非破壊分析
material science, medical procedure, biotechnology, nanotechnology, nondestructive analysis

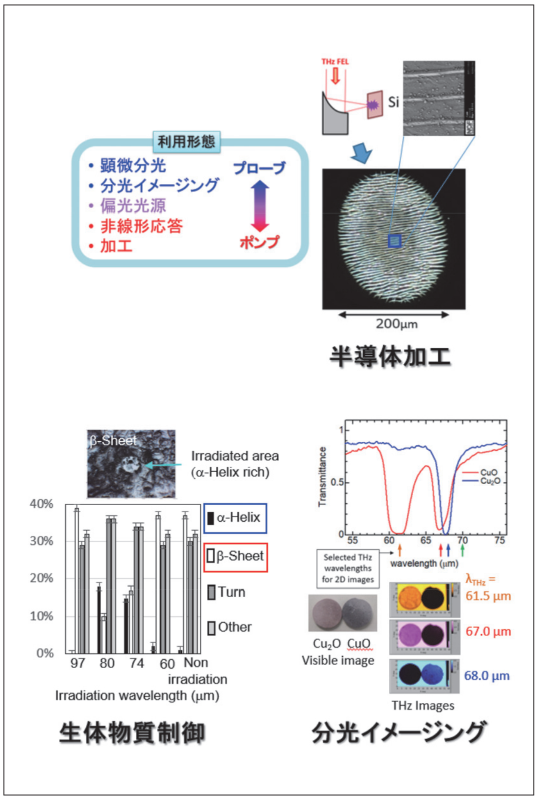
研究開発段階　基 礎 — **実用化準備** — 応用化

背　景

遠赤外線・テラヘルツ波領域の高強度・高輝度コヒーレントパルス光である自由電子レーザーを用いて、無機固体物質の非線形応答や生体・有機物質の非熱的照射効果など、電磁波と物質の新しい相互作用を探索しています。また、高輝度・単色性を生かした非破壊のテラヘルツ高感度高速赤外分光イメージングが実用段階になりました。

概要・特徴

半導体シリコン表面に回折限界を超える超微細構造の形成や金属表面への大強度遠赤外線の影響を調べることに成功しました。また、アミロイド繊維を波長選択的に非熱　分解することに成功しました。任意波長での様々な物体の分光イメージングおよび回折限界に近い領域での顕微分光測定を実現しました。



技術内容

- 3MV/cmを超える振動電場を発生するTHz-FELを照射することにより、半導体シリコン単結晶表面に回折限界を大きく超える超微細構造(波長の約1/25)を制御・作製することに成功しました。
- アルツハイマー病の原因物質でもあり、強固な立体構造(βシート)を持つアミロイド繊維に対し、THz-FEL照射によって波長選択的に非熱的解離・分解を行うことに成功しました。
- 既存の光源では非常に困難だった高速高分解遠赤外分光イメージング・顕微分光測定を実現しました。

社会への影響・期待される効果

<u>遠赤外・テラヘルツ領域の電磁波と物質の新しい相互作用の発見・利用</u>

- 半導体の超微細加工・大電場金属表面効果 [1, 4]
- 生体・有機物に優しい医療手法の開拓 [2]
- 産業構造物や文化財の内部調査・考古学的資料の分析研究 [3]

【論 文 Paper】

[1] A. Irizawa et al., Appl. Phys. Lett. 111, 251602 (2017)
[2] H. Kawasaki, A. Irizawa et al., Sci. Rep. 9 10636 (2019)
[3] A. Irizawa et al., Condens.　atter 5(2) 38-1-14 (2020)
[4] S. Macis, A. Irizawa et al., Condens. Matter 5(1) 16-1-10 (2020)

特 許 Patent】

[1]「国際成立特許」撮像システム及び撮像方法、14/183548

解 析 Analysis

45
テーマ
Theme

超高感度ナノポアウイルスセンサー

Ultra-sensitive nanopore virus sensor

研究分野 Department: バイオナノテクノロジー Bio-Nanotechnology

研究者 Researcher: 谷口正輝 M. Taniguchi　筒井真楠 M. Tsutsui　田中裕行 H. Tanaka　小本祐貴 Y. Komoto

キーワード Keyword: ウイルス、ナノポア virus, nanopore

応用分野 Application: ウイルスセンサー virus sensor

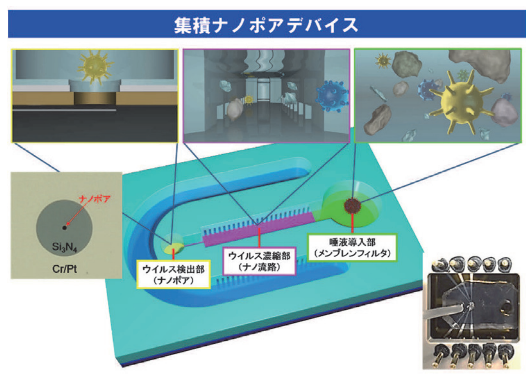
研究開発段階: 基 礎 ― **実用化準備** ― 応用化

背　景

従来、インフルエンザの型判定は、イムノクロマト検査キットに現れるマーカーの有無を、熟練者が目視で判断する形式で行われており、ウイルス数が少ない感染初期の段階では判定が難しいだけでなく、その的中率は個人の能力にも依存していました。

概要・特徴

極薄窒化シリコン膜中に開けられたナノ細孔（ナノポア）を通るイオン電流を計測するナノポア法を用いて、インフルエンザウイルスを1個レベルで検出しました。



技術内容

我々は、ナノポアセンシングの単一粒子検出能という究極の感度を用いて、インフルエンザウイルスの検出を行いました。さらにそのシグナル解析では、従来利用されてきた波形の高さや幅だけではなく、シグナルの立ち上がり角度や尖り具合(尖度)などの特徴量を利用しました。この高次元解析を、AI技術を用いることにより、人間の目ではもはや判別不可能なシグナルのわずかな違いも判別できるようになり、今回の成果へと繋がりました。

インフルエンザウイルス粒子1個で72%,20個以上の検出で95%以上の精度で型判定が可能であることを実証しました。これにより、検査者の能力に依存しない、感染初期でのインフルエンザウイルス型判定の実現が期待されます。

社会への影響・期待される効果

本研究成果により、判定する人の能力に依存しない、感染初期でのインフルエンザの型判定が可能になり、患者の負担軽減やウイルス感染の拡大抑止が期待されます。また、本手法はインフルエンザのみならず、あらゆるウイルス種への応用が可能な原理を有しており、従来の1種類のウイルス同定のみに限定されている現状の検査キットの性能を大きく超える、多項目ウイルス検査の実現が期待されます。

【論 文 Paper】
[1] Sci. Rep. 7 (2017) 17371.
[2] ACS Nano, 10 (2016) 803.
[3] Appl. Phys. Lett., 104 (2014) 163112.
[4] Sci. Rep. 3 (2013) 01855.
[5] Appl. Phys. Lett., 103 (2013) 013108.
[6] "Scientific Reports" on Friday, November 2. (2018.).

【特 許 Patent】
[1] 特願2012-017325
[2] 特願2012-286115
[3] 特願2013-047373

46
テーマ
Theme

１分子DNAシークエンサー

Single molecule DNA sequencer

研究分野 Department
バイオナノテクノロジー
Bio-Nanotechnology

研究者 Researcher
谷口正輝 M. Taniguchi
筒井真楠 M. Tsutsui
田中裕行 H. Tanaka
小本祐貴 Y. Komoto

キーワード Keyword
マイクロRNA、がん診断、１分子技術
microRNA, cancer diagnosis, single molecular technologies

応用分野 Application
次々世代DNAシークエンサー
next generation DNA sequencer

研究開発段階
基 礎　実用化準備　応用化

背　景

これまで、マイクロRNAによるがん診断は、乳がんや肺がんなどの早期診断を可能にすることが知られていました。マイクロRNAによるがん診断を行うためには、数種類のマイクロRNAの塩基配列とその量比を同時に決定する定量解析が必要ですが、これまでの解析方法では定量解析が不可能でした。

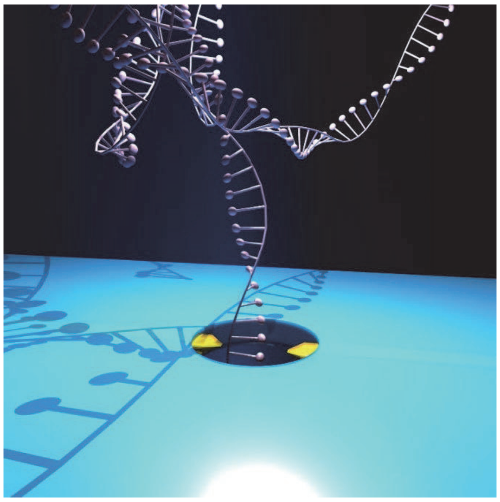
概要・特徴

次々世代DNAシークエンシング法を用いて、１分子レベルで２種類のDNAの塩基配列と量比を同時に決定する１分子定量解析法を世界で初めて開発しました。

技術内容

次々世代DNAシークエンシング法は、１塩基分子の電気抵抗の違いをトンネル電流で読み出す方法であり、DNAやマイクロRNAの塩基配列、ペプチドのアミノ酸配列を直接解読できる方法です。今回、当研究グループは、次世代DNAシークエンシング法で解読できる塩基長を長くすることにより、がんの診断マーカーである２種類のマイクロRNAに対応するDNAの塩基配列と量比の決定に成功しました。これにより、マイクロRNAを利用した乳がんや肺がんなどの早期診断が期待されます。

これまで開発してきた次々世代DNAシークエンサー法の読取り塩基長を長くすることにより、がん診断に用いられる２種類のマイクロRNAに対応するDNAの塩基配列と量比を同時に決定する定量解析に成功しました。この結果は、マイクロRNAの直接計測による定量解析が可能であることを示しています。



社会への影響・期待される効果

本研究成果により、マイクロRNAによる乳がんや肺がんなどの早期診断が期待されます。また、本DNAシークエンシング法は、マイクロRNAをそのまま１分子レベルで定量解析でき、マイクロRNAをDNAに逆転写してDNAを増幅する操作が不要となるため、低コストかつ迅速ながん診断が期待されます。

【論 文 Paper】
[1] "Scientific Reports" (online) on Monday, June 4, 2018. “Quantitative analysis of DNA with single-molecule sequencing”

バイオ Bio

化学発光タンパク質を利用したオンサイト検出法の開発

Development on-site investigation system by chemiluminescent proteins

研究分野 Department
生体分子機能科学
Biomolecular Science and Engineering

研究者 Researcher
永井健治
T. Nagai

キーワード Keyword
化学発光タンパク質、オンサイト診断、スマートフォン
chemiluminescent protein, on-site diagnosis, smart devices

応用分野 Application
医療、環境調査、食品検査
clinical use, environmental investigation, food evaluation

研究開発段階
基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背　景

我々の研究室では、肉眼でみえるほど明るく、多色な化学発光タンパク質を開発してきました[1]。この明るさを利用して、様々な検出技術への応用を展開しています。

概要・特徴

化学発光タンパク質とスマートフォンを組み合わせて、様々な物質を高感度・迅速・オンサイトで検出可能なシステムを開発しました。

技術内容

化学発光タンパク質を利用したバイオセンサー①②を開発しました[2][3]。対象となる分子の濃度を発光波長の変化、つまり色の変化により計測します。これらのセンサーは非常に明るい発光を示すため、その色変化をスマートフォンなどのカメラを用いて検出することが可能です。

①血中ビリルビンバイオセンサー「BABI」極微量の血液から、新生児黄疸の原因分子であるビリルビンを高感度に検出できます(図1)。

②水硬度バイオセンサー「LOTUS-W」調査したい水を一滴垂らすだけで、発光色の変化から硬度(軟水、硬水)について測ることができます(図2)。

図1. BABIによる血中ビリルビンの測定。ビリルビンの濃度に応じて、血液を通した発光色が青から橙に変化する。スマートフォン搭載のカメラで撮影し、色成分を解析することで濃度が計算できる。

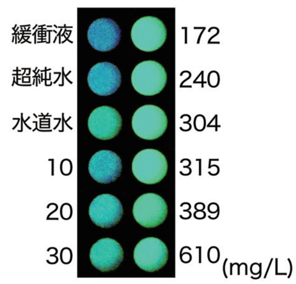


図2. LOTUS-Wによる水硬度の測定結果。水道水や市販されている飲料水の硬度が、青から緑への発光色の変化によって示される。数字は硬度の指標である炭酸カルシウム濃度を示す。

社会への影響・期待される効果

化学発光タンパク質を利用したセンサーは特別な装置を用意する必要なく、その場で簡便に、迅速にシグナルを得ることができるため、オンサイト検出の実現に適したツールです。

スマートフォンなどの汎用的な機器を用いた検査方法を確立することで、誰もが気軽に健康診断ができる社会が実現されます。また、通信機能と組み合わせることで、検査結果を医療機関へ送り診断を仰ぐ、といった在宅医療の新しい形が期待されます。

【論 文 Paper】
[1] Suzuki et al., Nat. commun. 7, 13718, 2016
[2] Hossain et al., Sensors, 20(11), 3164, 2020
[3] Itoh et al., ACS Sensors, 7, 2020 published.

【特 許 Patent】
[1] 特願2017-013463「生体物質の検出方法、それに用いる化学発光指示薬」
[2] 特願2018-565519「デバイス、及びそれを用いた判定システム」
[3] 特願2019-006110「水の硬度の測定」

48
テーマ
Theme

化学発光タンパク質エンジニアリングによる生理機能センサーの開発

Development of biosensing tools by engineering of luminescent proteins

研究分野 Department

生体分子機能科学
Biomolecular Science and Engineering

研究者 Researcher

永井健治
T. Nagai

キーワード Keyword

化学発光、計測、生理機能
chemiluminescent protein, on-site diagnosis, smart devices

応用分野 Application

バイオセンシング、バイオイメージング、顕微鏡
biosensing, imaging, physiological function

背　景

ホタルやウミシイタケは、発光基質を代謝することで、化学エネルギーを光エネルギーへ変換し発光することができます。遺伝子工学を利用して化学発光タンパク質を改変し、生きた細胞内の生理機能の変化に応じて発光シグナルが変化するセンサータンパク質を開発しました。

概要・特徴

高光度な化学発光タンパク質を開発してセンサーへ応用することで、生きた個体内での生理活性をリアルタイムに観察できる検出系を開発しました。

技術内容

- ヒオドシエビから単離された発光タンパク質と様々な蛍光タンパク質とを組み合わせることで、高光度のシアン、緑、黄緑、橙、赤色に発光するタンパク質enhancedNano-lanterm（増強型ナノ・ランタン）を開発しました（図1）。
- 発光タンパク質と蛍光タンパク質を膜電位感受性タンパク質により繋げることで、細胞の膜電位変化を計測可能な、世界初の化学発光膜電位センサーLOTUS-Vを開発しました。実際に活動しているマウス脳の電位変化をリアルタイムに検出しました（図2）。

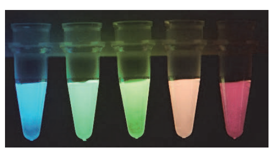


図 1.　5色の増強型ナノ・ランタンが発光する様子

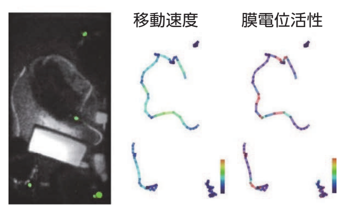


図 2.　複数の生きたマウス脳の膜電位をLOTUS-V で経時的に可視化した様子

社会への影響・期待される効果

開発した発光タンパク質から生じる高光度な光は、生体深部におけるセンサーの動態観察を可能にします。標的毎に生体センサーを開発することで、多くの疾病の原因究明が期待されます。

外部からの光照射によって生体機能を操作する「光遺伝学」技術と併用することで、生体活動を人為的に誘導してその反応を発光シグナルで追跡する、といった複合的な解析が可能となります。

【論 文 Paper】

[1] Nat. Commun. 7 (2016) 13718
[2] Sci. Report 7 (2017) 42398
[3] Sci. Report 9 (2019) 7460

【特 許 Patent】

[1] PCT/JP2019/022198「発光蛋白質、その基質、及びそれらの使用」

バイオ Bio

49 テーマ Theme

ヒト嗅覚システムを再現した匂いセンサーの開発

Development of odor sensor mimicking human olfactory system

研究分野 Department　生体分子反応科学　Biomolecular Science and Reaction

研究者 Researcher　黒田俊一 S. Kuroda　立松健司 K. Tatematsu

キーワード Keyword　匂いの数値化、ヒト嗅覚受容体、嗅覚受容体アンタゴニスト
smelldigitization, human olfactory receptor, odorant-receptor antagonist

応用分野 Application　AI調香師、消臭剤、仮想現実
AI perfumer, deodorizer, virtual reality

研究開発段階　基 礎　実用化準備　応用化

背　景

食品、香粧品等の広範な製品開発において匂いの官能試験は非常に重要ですが、試験士の資質に大きく依存するため、再現性やスループット性が低く、しかも他者との情報共有が困難でした。一方、化学系匂いセンサーは特定の匂いしか検出できず、官能試験との連携は不可能でした。

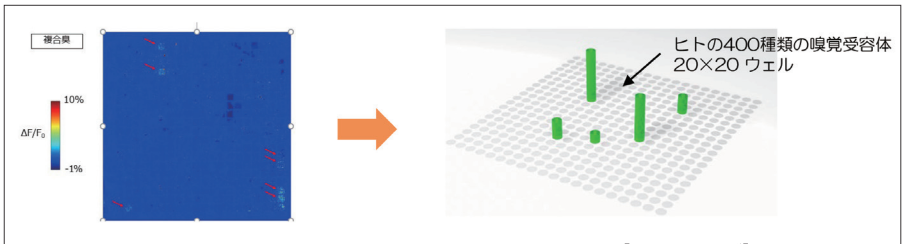
概要・特徴

ヒト嗅覚受容体全て（約400種類）を用いた嗅覚受容体センサーを作製し、ヒトの感じる匂い全てを定量することに成功しました。

技術内容

人間の視覚や聴覚の情報はデジタル化され「情報の正確な記録と再現」が可能となっており、映像作品や音楽として商業的に活用されています。一方で、嗅覚情報は「匂いの基準」となるものが存在せず、匂いを正確に表現することが困難でした。

私たちはヒトの約400種類の嗅覚受容体を発現する細胞からなる嗅覚受容体センサーを開発しました(特許技術、図左)。この匂いセンサーはヒトの嗅覚受容体を網羅的に発現させたものであり、ヒトが匂いを感じる仕組みをアレイ上で再現したものです。各嗅覚受容体の応答は細胞内カルシウムイオンの濃度変化を蛍光強度に変換し、約400種類の嗅覚受容体の応答を一括測定することができます。これにより、約400種類の嗅覚受容体の応答をまとめた匂いの基準「匂いマトリックス」の作成、すなわち嗅覚情報のデジタル化が実現されます(図右)。



嗅覚受容体センサー応答画像　　匂いマトリックス【概念イメージ】

社会への影響・期待される効果

これまで匂いのデジタル化そのものが困難であったため、当技術の市場展開が匂い関連製品にパラダイムシフトを起こす可能性があります。具体的には、遠隔地への匂い情報の転送と再構成（匂いが伝わるテレビや映画）、嗅覚受容体応答情報の医療への応用（アロマテラピーの発展型等）が想定されます。

【論 文 Paper】
[1] 生産と技術72 (2020) 78-80
[2] Aroma Research 20 (2019) 38-39
[3] Scientific Reports. 6 (2016) 19934

【特 許 Patent】
[1] 特許出願2019-536790

バイオ Bio

50 テーマ Theme

多剤耐性細菌に有効な情報伝達阻害型薬剤の開発

Development of antibiotics targeting signal transduction of multi-drug resistant pathogens

研究分野 Department

生体分子反応科学
Biomolecular Science and Reaction

研究者 Researcher

岡島俊英 T. Okajima
内海龍太郎 R. Utsumi

キーワード Keyword

多剤耐性菌、二成分情報伝達系、ヒスチジンキナーゼ
multi-drug resistant bacteria, two-component signal transduction system, histidine kinase

応用分野 Application

多剤耐性菌感染症治療薬、新規抗生物質
drug for infection of multi-drug resistant bacteria,novel antibiotics

研究開発段階

基 礎 ― 実用化準備 ― 応用化

背 景

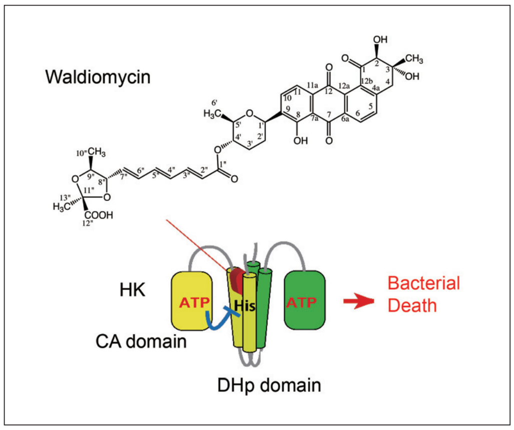
既存の複数抗生物質が効かない多剤耐性菌の院内感染あるいは市中での蔓延は、公衆衛生上の大きな問題となっています。これまでの抗生物質が改良されても、新たな耐性菌が直ちに出現する状況にあり、新しいコンセプトによる抗生物質の開発が望まれています。

概要・特徴

細菌の情報伝達系を阻害することによってMRSAやVREなどの多剤耐性菌にも抗菌作用を示す新規な薬剤を開発することに成功しました。

技術内容

細菌の主要な環境応答システムである二成分情報伝達系(TCS) は、細胞膜に存在するヒスチジンキナーゼ(HK) と転写因子レスポンスレギュレーター(RR) から構成されています。HKは環境シグナルに応答して、自己のHis残基をリン酸化し、そのリン酸基をRRへ転移します。リン酸化RRは遺伝子発現を制御し、各種の重要な生理過程に関わります。TCSはヒト細胞に存在せず、動植物病原菌の病原性、増殖、薬剤耐性等にも関与するため、抗菌薬の新規かつ重要な標的と考えられています。これまでに我々はHKに特異的に作用する阻害剤を放線菌から発見し、特許化している。そのひとつwaldiomycinは、HKの自己リン酸化部位周辺の保存領域に対して特異的に結合します。その結果、MRSA(メチシリン耐性黄色ブドウ球菌)やVRE(バンコマイシン耐性腸球菌)等の多剤耐性菌の情報伝達を阻害して、抗菌作用を示します。



社会への影響・期待される効果

Waldiomycinは広範なTCSを同時に阻害するため、抗菌特性を示すばかりでなく、同時に薬剤耐性や病原性も抑え込むマルチな機能性をもつ次世代型抗菌薬のシードとなり得ます。

【論 文 Paper】

[1] 化学と生物57 (2019) 416-427
[2] J. Antibiot. (Tokyo) 70 (2017) 251-258
[3] J. Gen. Appl. Microbiol. 63 (2017) 212-221
[4] J. Antibiot. (Tokyo). 66 (2013) 459-64

【特 許 Patent】

[1] 特許第5686981号

51
テーマ Theme

遺伝子の迅速検査技術

Development of rapid, accurate, and cost effective technology for gene analysis

研究分野 Department 精密制御化学 Regulatory Bioorganic Chemistry

研究者 Researcher 中谷和彦 K. Nakatani

キーワード Keyword 遺伝子、ウイルス、診断 genome, virus, diagnosis

応用分野 Application 遺伝子検査キット diagnosis kit for genetic analysis

研究開発段階 基 礎 → 実用化準備 → 応用化

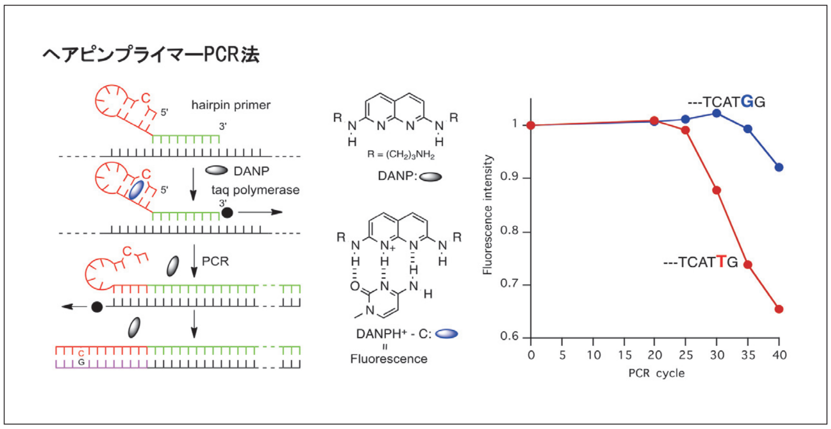
背 景

実用的な迅速且つ高精度なウイルス検出を目指し、簡便な遺伝子検出法の開発を行います。

概要・特徴

DNAのシトシンバルジに特異的に結合し蛍光を発する低分子リガンド(DANP)を化学修飾したプライマーを用い、特徴的な蛍光強度変化から遺伝子検査を行うヘアピンプライマーPCR法を開発しました。

- **遺伝子を迅速、簡便、安価に検査、検出する技術**
- **基本はポリメラーゼ連鎖反応(PCR)を用いる**
- **ウイルスの迅速な確定検査技術としての実用化を検討中**



技術内容

PCRのプライマー3'側にシトシンバルジをもつプライマーを使います。低分子リガンドDANPはシトシンバルジに結合すると蛍光を発します。PCR前はプライマーが大量に有るため、DANPの結合により蛍光強度が高い。PCRが進行するとプライマーのヘアピン構造が解消し、DANPが結合することができず蛍光強度が低下します。PCR前と後の蛍光強度により、PCRの進行(プライマーの消費)度合い、即ち、検査する遺伝子の量や存在の有無が判ります。

社会への影響・期待される効果

- コスト従来比1／10
- 従来技術に比べて圧倒的な簡便性
- ウイルス増殖を待つ必要の無い、初期感染時期での検査が可能

【論 文 Paper】

[1] Secondary Structure-Inducible Ligand Fluorescence Coupled with PCR, Takei, F.; Igarashi, M.; Hagihara, M.; Oka, Y.; Soya, Y.; Nakatani, K. Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 7822-7824.

[2] Competitive Allele-specific Hairpin Primer PCR for Extremely High Allele Discrimination. Takei, F.; Igarashi, M.; Oka, Y.; Koga, Y.; Nakatani, K. ChemBioChem 2012, 13, 1409-1412.

【特 許 Patent】

[1] 特開2008-125425

[2] 特願2010-054658号

[3] 特願2012-51551号

バイオ Bio

医療 Medical

核酸標的低分子創薬基盤技術開発

Development of research tools and molecules accelerating research toward small-molecule drugs targeting nucleic acids

研究分野 Department: 精密制御化学 Regulatory Bioorganic Chemistry

研究者 Researcher: 中谷和彦 K. Nakatani

キーワード Keyword: 低分子、核酸、DNA、RNA、創薬 small molecule, nucleic acids, DNA, RNA, drug development

応用分野 Application: 創薬リード創出、スクリーニング技術 drug lead development, screening technology

研究開発段階

基 礎 — 実用化準備 — 応用化

背　景

ヒトゲノムの3／4を占める非翻訳RNAなど、機能を有する核酸を標的とした低分子創薬に大きな期待が寄せられています。欧米の研究速度に負けない、創薬研究の加速を支援します。

概要・特徴

- **標的を標識せずに、化合物ライブラリーを混ぜるだけの簡便な「蛍光ディスプレイスメントアッセイ」。既に創薬企業２社が採用。**
- **表面プラズモン共鳴 (SPR) を使った、標的DNA・RNA結合分子の探索技術**
- **世界で唯一無二のハンチントン病 (CAGリピート)、脆弱X症候群 (CGGリピート) 結合分子開発実績**

技術内容

1) HTS対応蛍光ディスプレイスメントアッセイ
2) 疾病関連DNA、RNA結合分子探索・開発技術
3) 創薬候補低分子に結合するRNAの探索

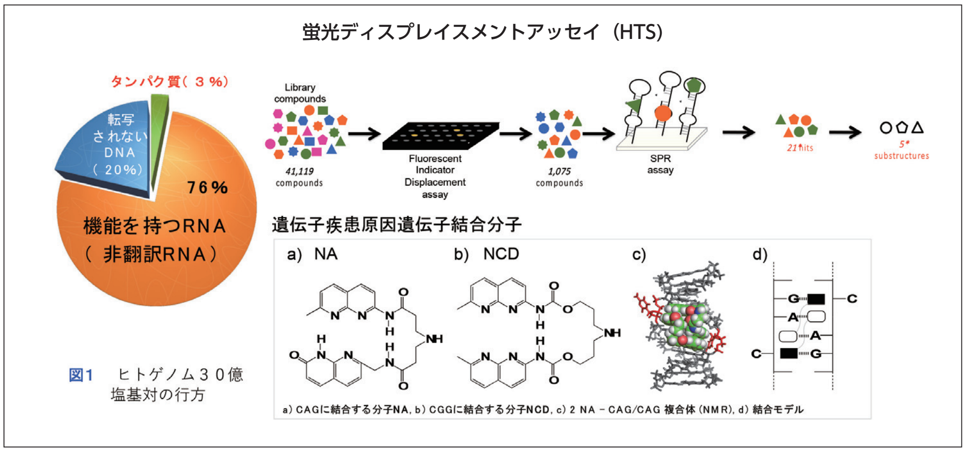


図1　ヒトゲノム30億塩基対の行方

a) CAGに結合する分子NA, b) CGGに結合する分子NCD, c) 2 NA − CAG/CAG 複合体 (NMR), d) 結合モデル

社会への影響・期待される効果

- 核酸を標的とした低分子創薬開発
- 企業における核酸標的低分子創薬の加速、参入障壁低減

【論 文 Paper】

[1] Scanning of guanine-guanine mismatches in DNA by synthetic ligands using surface plasmon resonance assay, Nakatani, K.; Sando, S.; Saito, I. Nat. Biotechnol.2001, 19, 51－55.

[2] Small-molecule ligand induces nucleotide flipping in (CAG)n trinucleotide repeats, Nakatani, K.; Hagihara, S.; Goto, Y.; Kobori, A.; Hagihara, M.; Hayashi, G.; Kyo, M.; Nomura, M.; Mishima, M.; Kojima, C. Nature Chemical Biology 2005, 1, 39-43.

【特 許 Patent】

[1] PCT/IB2017/054932（平成29年8月12日）他

53
テーマ
Theme

エピジェネティクスの化学的制御に基づいた医薬品創製

Development of therapeutic agents based on epigenetics

研究分野 Department
複合分子化学
Complex molecular chemistry

研究者 Researcher
鈴木孝禎
T. Suzuki

キーワード Keyword
エピジェネティクス、阻害剤
epigenetics, inhibitor

応用分野 Application
医薬品、生物試験用試薬
therapeutic agents, reagents for biological studies

研究開発段階
基 礎　実用化準備　応用化

背　景

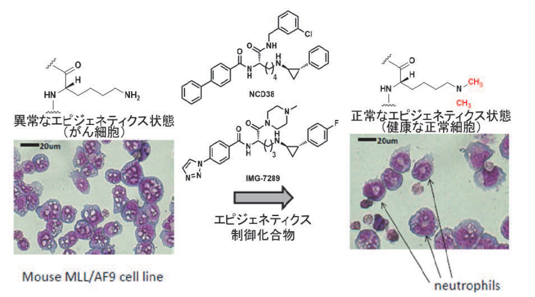
DNAの塩基配列に依存しないで遺伝子の発現を制御する機構「エピジェネティクス」の異常は、がんなどの疾病に関与する。エピジェネティクスをコントロールする化合物は、抗がん剤などの治療薬として応用することが期待できます。

概要・特徴

疾患に関与するエピジェネティックタンパク質の阻害剤を創製し、それらの阻害剤が疾患細胞を正常細胞に変化させることを示しました。

技術内容

- 標的誘導型合成やフォーカスドライブラリーのスクリーニングなどの独自の創薬手法を用いて、エピジェネティック阻害剤を創製しました。
- エピジェネティック阻害剤は、疾患細胞中の異常なエピジェネティクス状態を正常なエピジェネティクス状態に変えることで、疾患細胞を正常細胞に分化させる作用(例：白血病細胞を好中球などの正常細胞に分化させる作用）を示しました。
- 動物実験（マウスがんモデル、マウスうつ病モデル）においても、エピジェネティック阻害剤は、少ない副作用で、高い治療効果を示しました。



エピジェネティクス制御によるがん細胞の分化

社会への影響・期待される効果

がんは、1981年以降死因の第1位であり、最近では、総死亡数の約3割を占めています。また、認知症の患者数は約500万人ですが、その数は増加の一途をたどり、2025年には730万人に達すると予測されています。さらに、うつ病などの精神疾患の患者数も約500万人であり、精神疾患による自殺者の増加は著しく、それに伴う損失額は年間2.7兆円と推定されています。これらの疾患治療は、喫緊の課題です。

これらの疾患には、エピジェネティクスの異常が関与していることが分かっており、エピジェネティック阻害剤は、これらの疾患の根本治療に役立つと期待されます。

【論 文 Paper】
[1] ACS Catal. 10 (2020) 5383-5392
[2] J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 21-26
[3] J. Med. Chem. 62 (2019) 5844-5862
[4] [4] Chem. Sci. 7 (2017) 6400-6408
[5] Leukemia 31 (2017) 2303-2314

【特 許 Patent】
[1] 特許第6238908号
[2] 特願2018-08464「ヒストン脱アセチル化酵素阻害剤」
[3] 特願2019-106166「KDM5C阻害剤及び抗うつ剤」

バイオ Bio
医 療 Medical

54 テーマ Theme

標的タンパク質分解誘導剤の創製

Development of targeted protein degraders

研究分野 Department: 複合分子化学 Complex molecular chemistry

研究者 Researcher: 伊藤幸裕 Y. Itoh　鈴木孝禎 T. Suzuki

キーワード Keyword: プロテインノックダウン、分解誘導剤、ユビキチン protein knockdown, degraders, ubiquitin

応用分野 Application: 医薬品、生物試験用試薬 therapeutic agents, reagents for biological studies

研究開発段階: 基礎 / 実用化準備 / 応用化

背景

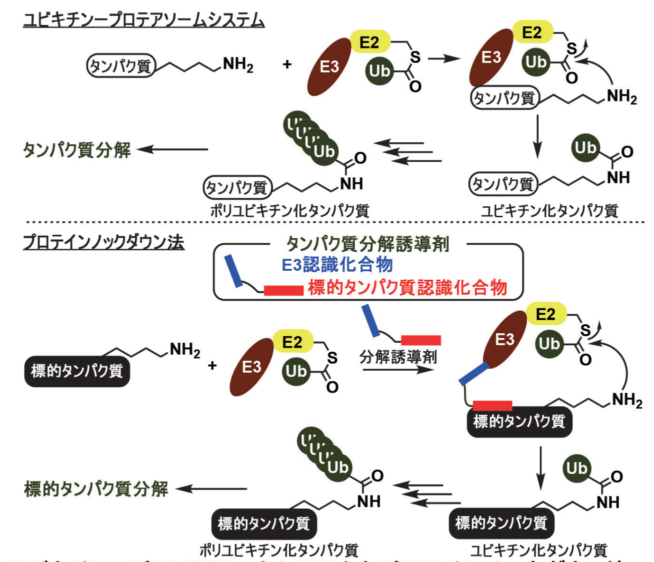
プロテインノックダウン法は、標的タンパク質を分解する新しい技術として注目を集めています。プロテインノックダウン法で用いるタンパク質分解誘導剤は、抗がん剤をはじめとする様々な医薬品として期待されています。

概要・特徴

標的タンパク質を特異的に分解する技術を確立し、疾患に関連するタンパク質を標的とする種々の分解誘導剤を創製しました。

技術内容

- 生体内のタンパク質分解機構であるユビキチン―プロテアソームシステムをハイジャックし、狙ったタンパク質を特異的に分解する技術を確立しました。
- 本技術が様々なタンパク質に適応できることを明らかにしました。
- 神経芽細胞腫や前立腺がんの生育に関与するタンパク質など、種々のタンパク質を分解する分解誘導剤を創製しました。
- タンパク質分解誘導剤は、酵素阻害薬などの従来のタンパク質制御化合物とは異なる作用を示します。



ユビキチン―プロテアソームシステムとプロテインノックダウン法

社会への影響・期待される効果

プロテインノックダウン法で用いるタンパク質分解誘導剤は、狙ったタンパク質を特異的に分解し、その細胞内存在量を減らすことができます。病原性タンパク質を標的とする従来の医薬品の多くは、受容体アンタゴニストや酵素阻害薬であり、それらはタンパク質の特定の機能を阻害します。一方、タンパク質分解誘導剤は、標的タンパク質を分解するため、特定の機能のみならず、そのタンパク質が持つあらゆる機能を阻害できます。このように、タンパク質分解誘導剤は、これまでの医薬品とは異なる新たな創薬モダリティとして期待できます。実際、本技術ならびに分解誘導剤は世界中の創薬研究で利用されており、その中には臨床研究に進んでいるものがあります。

【論 文 Paper】
[1] ChemMedChem in press (DOI: 10.1002/cmdc.202000933).
[2] Chem. Rec. 18 (2018) 1681-1700.
[3] J. Am. Chem. Soc. 132 (2010) 5280-5286.

バイオ Bio　医療 Medical

55
テーマ
Theme

細菌薬剤排出ポンプの機能と制御に関する研究

Regulation and Function of Bacterial Drug Efflux Pumps

研究分野 Department

生体分子制御科学
Biomolecular Science and Regulation

研究者 Researcher

西野邦彦 K. Nishino　山崎聖司 S. Yamasaki　西野美都子 M. Nishino

キーワード Keyword

発現制御、トランスポーター、化学療法、細菌感染症
regulation, transporter, chemotherapy, bacterial infection

応用分野 Application

感染症治療
treatment of infection

研究開発段階

基 礎　実用化準備　応用化

背　景

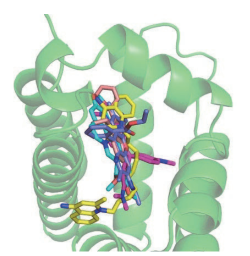
膜輸送体は、全ての生物に保存されている因子であり、細菌においては、恒常性維持や抗菌薬耐性に関与しています。

概要・特徴

私達の研究室では、細菌膜輸送体制御機構をシステムバイオロジーの観点から明らかにし、病原性や多剤耐性における役割を理解した上で、新たな感染症治療戦略の開発に取り組んでいます。

技術内容

ポストゲノム解析とシステムバイオロジー的手法を駆使して、これまでに細菌ゲノムに潜む数多くの膜輸送体遺伝子と、その制御ネットワークを同定してきました。これらの同定された因子は、多剤耐性を克服する新たな薬のターゲットとして期待されています。さらには、病原性発現と多剤耐性の両方に関与する制御因子の構造を明らかにしました。この因子に対する阻害剤を用いることによって病原性を軽減させながら、細菌の多剤耐性化を抑制する新たな感染症治療が可能になります。



薬剤排出ポンプ制御因子による抗菌薬認識

社会への影響・期待される効果

- 新規薬剤排出ポンプ制御機構の解明
- 感染症新規治療戦略の確立

【論 文 Paper】

[1] Commun. Biol. 2 (2019) 340. Phylogenetic and Functional Characterisation of the H. influenzae multidrug efflux pump AcrB.
[2] Nature Commun. 9 (2018) 124. Multiple Entry Pathways within the Efflux Transporter AcrB Contribute to Multidrug Recognition.
[3] Nature Commun. 4 (2013) 2078. The Crystal Structure of Multidrug-Resistance Regulator RamR with Multiple Drugs.
[4] Nature 500 (2013) 102-106. Structural Basis for the Inhibition of Bacterial Multidrug Exporters.
[5] Nature 480 (2011) 565-569. Structures of the Multidrug Exporter AcrB Reveal a Proximal Multisite Drug-Binding Pocket.
[6] J. Biol. Chem. 283 (2008) 24245-24253. AcrAB Multidrug Efflux Pump Regulation in Salmonella enterica Serovar Typhimurium by RamA in Response to Environmental Signals.
[7] Mol. Microbiol. 59 (2006) 126-141. Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Systems of Salmonella enterica Serovar Typhimurium.
[8] Science 307 (2005) 864. Bacterial Multidrug Exporters: Insights into Acquisition of MDR.

56
テーマ
Theme

脂溶性生理活性物質の輸送体の同定と輸送体を標的とした創薬

Discovery of a drug that is targeting a novel lipid mediator transporter

研究分野 Department
生体分子制御科学
Biomolecular Science and Regulation

研究者 Researcher
西 毅
T. Nishi

キーワード Keyword
免疫抑制剤、リンパ球、輸送体、阻害剤、脂質メディエーター
immunosuppressant drug, lymphocyte, transporter, inhibitor, lipid mediators

応用分野 Application
自己免疫疾患治療、がん転移抑制、感染症治療
treatment of autoimmune diseases, suppression of tumor cells metastasis, treatment of infection

研究開発段階
基 礎 / 実用化準備 / 応用化

背 景

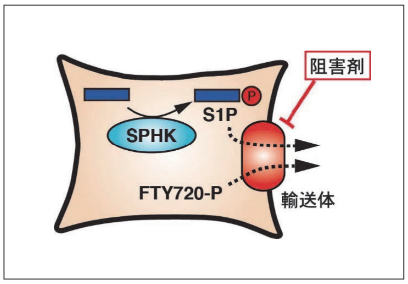
脂溶性の生理活性物質（脂質メディエーター、ステロイドホルモン、ビタミン等）の細胞内外での輸送機構が様々な細胞機能に必須であることがわかってきました。

概要・特徴

我々は生理活性脂質であるスフィンゴシン１リン酸（S1P）をモデルとして、細胞外への放出輸送体SPNS2やMFSD2Bを同定し、これら輸送体の活性を測定する細胞系を開発しました。S1P輸送体の阻害剤はこれまでに無い新しい作用機序で副作用の少ない免疫抑制剤や抗がん剤のターゲットとして有効であると考えられます。

S1Pを細胞内に蓄積する細胞を構築し、そこに輸送体を発現させせることで輸送活性を測定できる系を確立しており、この系を用いて阻害剤のスクリーニングが可能です。またこの系は、新しい輸送体や異なる生理活性脂質の輸送系の探索にも応用可能です。

技術内容



S1Pはヒトでは免疫細胞の血管移行に中心的な役割を果たします。そのためS1P受容体は免疫抑制剤の開発の標的となり、FTY720などの薬が開発されました。しかし、受容体の多様性などから依然として副作用が存在し、S1P受容体の欠損マウスは胎生致死となります。我々はS1Pの細胞外への供給に関わる輸送体を同定し、この輸送体の欠損マウスでは他に顕著な異常を示すことなく、血液中へのリンパ球の移行のみが特異的に抑制されることを見いだしました。このことからこの輸送体の阻害剤がこれまでに無い新しい作用機序で副作用の少ない免疫抑制剤や阻害剤のターゲットになります。測定系が確立しており阻害剤の探索はすぐにでも開始できます。

社会への影響・期待される効果

- 副作用の少ない免疫抑制剤の実現
- トランスポーターオリエンティッドな新しい作用機序を持つ創薬の実現

【論 文 Paper】
[1] Science 323, 524-527 (2009)
[2] J Biol Chem. 286, 1758-1766 (2011)
[3] PLoS ONE 7(6): e38941 (2012)
[4] J Lipid Res 57: 2088-2094 (2017)
[5] Sci.Rep. 8 (1), 1-11(2018)

【特 許 Patent】
[1] 特許第5373346号スフィンゴシン１ーリン酸の新規トランスポーター分子

バイオ Bio
医療 Medical

57
テーマ Theme

超分子マテリアルの創製

Construction of Supramolecular Materials

研究分野 Department

ユシロ化学工業
ポリマーゲル共同研究部門
Supramolecular Science Group

研究者 Researcher

原田　明 A. Harada
高島義徳 Y. Takashima
大崎基史 M. Osaki
高橋宏明 H. Takahashi
白川瑛規 H. Shirakawa

キーワード Keyword

自己修復、 高靭性高分子、 伸縮性高分子、超分子
self-healing, tough polymer, elastomr, supramolecules

応用分野 Application

コーティング、接着剤、臓器モデル、エラストマー
coatings, Adhesives, organ Model, Elastomer

材料 Material

研究開発段階

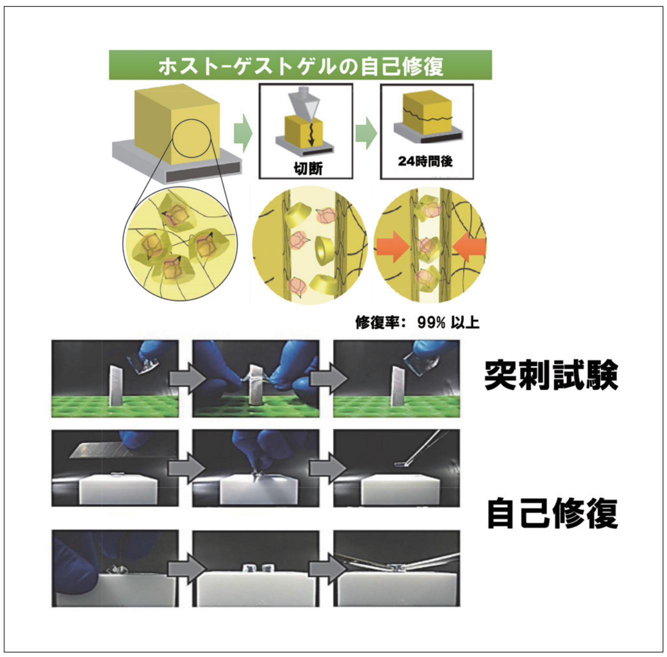
基 礎 → 実用化準備 → 応用化

背　景

近年、環境への適合や安全性の観点から、より軽量で高靭な材料が求められている。高分子 材料はその軽量でソフトな性質から、広く利用されているが、さらに高靭性や自己修復性の 付与が期待されている。

概要・特徴

本研究により、軽量でソフトな高分子材料に、超分子構造を組み込むことにより、高靭性や自己修復性を付与することが可能になった。



技術内容

- シクロデキストリンモノマーとゲストモノマーと水溶性モノマーとの共重合により、高靭で自己修復が可能なヒドロゲルを得た。
- シクロデキストリンポリマーとゲストポリマーとの混合により、高靭性で自己修復が可能なゲルを得た。
- 疎水化したシクロデキストリンモノマーとゲストモノマーと疎水性モノマーとの共重合により、高靭性で自己修復が可能なエラストマーを得た。
- 疎水化したシクロでキストリンモノマーとゲストモノマーの組み合わせに、セルロースや他のポリマーを組み入れることにより、強靭で自己修復可能な新たな高分子材料を得ることに成功した。

社会への影響・期待される効果

これまでの高分子材料に欠けていた高靭性や自己修復性を付与することができたので、壊れにくく再生可能な高分子ゲルが実現した。

さらに高分子ゲルだけではなく、疎水性のシクロデキストリンモノマーと疎水性のゲストモノマーを用いることにより、超分子エラストマーを得ることができた。この超分子エラストマーを利用することにより、これまでの高分子材料に、高靭性や自己修復性を付与することができ、これまで実現できなかった丈夫で壊れにくいソフトマテリアルを実現することができた。

【論 文 Paper】

[1] Macromolecules 52 (2019) 2659.
[2] Adv.Mater. 32 (2020) 2002008.
[3] Eur. Polym. J. 134 (2020) 109807.
[4] ACS Appl. Polym. 2 (2020) 1553.

【特 許 Patent】

共同知財
●特願2015-199945

先端高密度3D実装材料・プロセス・信頼性評価技術開発

Development of 3D Systemintegration technology

研究分野 Department

フレキシブル3D実装協働研究所
Flexible 3D Systemintegration Laboratory

研究者 Researcher

菅沼克昭 K. Suganuma　陳 伝トウ C. Chen　張 政 Z. Zhang　末武愛司 A. Suetake
謝 明君 M.-C.Hsieh　岩城 文 A. Iwaki　劉 洋 Y. Liu

キーワード Keyword

エレクトロニクス実装、パワーエレクトロニクス、接合・接着、フレキシブル、ポスト5G、高密度実装
electronics packaging, power electronics, interconnection, flexible, beyond 5G

応用分野 Application

パワーエレクトロニクス、フレキシブルデバイス、ポスト5G半導体高密度実装
power electronics, flexible devices, post 5G advanced semiconductor, 3D interconnection

研究開発段階

基 礎 — 実用化準備 — 応用化

背　景

近未来先端半導体は、車載機器からポスト5GのAI/IoT領域全ての電子機器に普及する。そのエッジからデータセンターまでを支える実装技術は、日本の高度な材料・製造技術と信頼性技術を必要とする。F3D（フレキシブル3D実装協働研究所）では、WBGパワーエレクトロニクス、ポスト5G/先端AI機器の3D高密度実装の開発をオープンなプラットフォームにおいて推進している。

概要・特徴

鉛フリーはんだから金属焼結接合を新たに提案し、WBGパワーと先端AI機器実装で世界の物造りの流れ導いている。それぞれの学術基礎を示すことで、世界を納得させる信頼性の高い技術実現を目指している。

技術内容

- WBGパワーエレクトロニクス実装に幅広く取り組み、世界初の銀焼結接合の提案、DBA基板開発などを提案している。
- 先端電子機器で大きな課題となる熱問題を解決するため、新材料と計測技術を開発提案し、デジュール、デファクトとして国際標準化を目指している。
- 3D高密度実装で大きな課題となっているマイクロビアの「隠れた脅威」現象の解明から、「Mooreの法則」の限界を超えるため、ポスト5G／AI実現に必須の先端半導体高密度実装技術を開拓している。
- 接合の基礎科学から接着技術の再開拓を目指し、産業界で必要な要素技術の基礎を提供していく。

社会への影響・期待される効果

AI/IoT更には電気自動車の自動運転が拡大するこれからの世界で、日本が得意とする摺り合わせの物造り基礎を証明・構築し、「絶対に壊れない」機器を製造するためのノウハウを蓄積することで、日本の物造り産業の糧とする。決して過剰品質を日本製品の特徴とするのではなく、IECやISOで開発技術・基準を国際標準化することで、国際ビジネスの基本的な流れを導く。

【論 文 Paper】

[1] IEEE Trans. Power Electron., 36(2021), 4420.
[2] J. Alloy. Compd. 834[5](2020), 155173.
[3] Introduction to Printed Electronics, Springer(2014)
[4] SiC/GaNパワー半導体の実装と信頼性評価技術、日刊工業新聞社(2014.12).
[5] Wide Bandgap Power Semiconductor Packaging - 1st Edition, Elsevier(2014)

【特 許 Patent】

[1] 特許 2008-007582号「導電性ペースト」
[2] 特願 2016-213000「接合構造体の製造方法」

産研研究分野全体のSDGsマップ

9 産業と技術革新の基盤をつくろう

材料技術
3次元ナノ構造
CNF
環境触媒
宇宙用バイオ材料
磁気冷凍
低次元構造酸化物
自己修復材料（セラミックス、ナノAg）
メタマテリアル
シリコン製剤
触媒（AI材料開発）
核酸標的創薬
植物照明

4 質の高い教育をみんなに
AI教育
ペーパーディスプレイ
音声対話先生ロボット
マルチモーダルプレゼン支援

デバイス技術
量子技術
Mott-FET
DNAメモリ
相変化Tr
スピン・マグネト新センサ
新型ジャイロ
プリンテッドデバイス/IoT

プロセス技術
MI
AI
薄膜新プロセス
量子ビーム材料改質
量子ビーム材料開発
薄膜機能のバルク発現
超微小信号計測
医薬・有機物省エネ製造
AI活用スマート工場

システム技術
量子コンピュータ（最適化）
量子暗号通信
量子ビーム解析
マルチモーダル対話ロボ
パターン認識/人物認証（画像解析）
音声認識/人物対話
映像からの人流推定
国際標準化（実装技術）

12 つくる責任 つかう責任

材料技術
環境触媒
MIレアメタル削減
AI新材料創出
レアメタルフリースピントロ/磁気冷凍
低次元酸化物環境浄化
CNF使い捨てセンサ
CNFサスティナブル材料
自己修復セラミックス/ナノAg
Si製剤（副作用無し）
リサイクルSAM膜
触媒リサイクル
薬剤耐性（細胞コンタミ防止）
CNF複合材料
レーザー改質材料
自己修復ポリマー

システム技術
酵素水ナノミストの
　農作物リサイクル
ナノポア環境汚染検査
微小信号測定値保障
故障予知センシング
衣料品ジャストフィットセンサ

11 住み続けられるまちづくりを

デバイス技術
インフラ用センサ
　（フレキシブル）
インフラ用センサ（スピントロ）
衣料品ジャストフィットセンサ
5Gインダクタ
CNF透明窓
非破壊モニタリング磁気センサ
ワイヤレス通信デバイス

システム技術
ウイルスクラスタ発見
　（ナノポア、Grセンサ等）
磁気冷凍式空調
交通渋滞解析
量子センサネットワーク
動解析認知症発見
歩行解析高齢者検出
人物解析高齢者見守り

10 人や国の不平等をなくそう / 2 飢餓をゼロに / 1 貧困をなくそう

システム技術
歩容解析による乳牛疾病検出
食品鮮度可視化
光合成量推定
食物疾病検出

材料技術
機能性酵素食品
1細胞育種
ゲノム編集
Si製剤による畜産

15 陸の豊かさも守ろう

フードロス改善
食物鮮度保持
1分子計測種の保存
CNF利活用
植物成長推定
植物疾病検出

プロセス技術
MI/AIによる省エネ材料開発
省エネ薄膜合成プロセス
レーザー表面改質
AI自動運転による省エネ化

システム技術
省エネ量子コンピュータ
光/動き解析による省エネ化

3 すべての人に健康と福祉を

医用デバイス技術
ペルチェ冷えピタ
磁気冷凍冷えピタ
1分子シーケンサ
ナノポアセンサ
圧電ヘルスセンサ
薄膜呼気センサ
量子センサネットワーク
ウエアラブルスピンメカセンサ
グラフェンバイオセンサ
脳波センサ
心電センサ
筋電センサ
バイオセンサ
匂い・香りセンサ
ペプチドバイオセンサ
発光タンパク生理機能センサ

診断技術
フェムト秒放射線（治療）
超高速イメージング
超小型加速器
ヘアピンプライマーPCR
医療AI応用機器
医療機器・デバイス高信頼性実装

医療機器技術
老化・健康の可視化
歩容解析（認知症診断）
動き解析（認知度推定）
容体解析（体調診断）
画像解析（異常検出）
感染症AI診断
腸内フローラ計測・改善
発光タンパクによる診断
イメージング診断・検査

介護/介助
音声対話介護ロボ
音による見守り
表情読み取り
認知症予防センサ

医用材料技術
MI材料開発
抗菌・抗ウイルスセラミック
シリコン製剤
CNF細胞培養基材
CNFバイオリアクタ材料
レーザー改質
量子化学計算創薬
創薬用触媒
バイオナノDDS
次世代抗菌薬
核酸標的創薬

8 働きがいも経済成長も

Ft秒反応の自動・遠隔検出
MI活用研究効率化
Si製剤で健康に働く
量子活用金融、商取引
自動音声応答
マルチモーダル就活支援
動線解析による仕事効率化
歩容解析による疲労度判定
脳波センサ体調管理
機能性酵素食品
要内フローラで健康維持
生体イメージング健康管理

6 安全な水とトイレを世界中に

システム技術
スマートトイレ
（腸内フローラ計測）

材料技術
ナノポア分離膜
重金属吸着
低次元酸化物
抗菌セラミックス
CNFフィルター
有用微生物単離

デバイス技術
重金属センサ
大腸菌センサ
電気化学センサ
細菌検出
水硬度センサ

ナノミスト食品腐敗防止
ヘルスケア
感染症予防
呼気センサ
農業IoTバイオセンサ
太陽電池僻地電源供給
脳波センサ、電気化学センサ

16 平和と公正をすべての人に

1分子検出テロ防止センサ
太陽電池非常電源
レーザ短波長光源
不審者検出（音、動き、歩容解析）
Gr.危険物センサ
バイオナノ粒子センサ

材料技術
ナノ固体触媒省エネ化学品製造
ナノ熱電材料/電池材料
磁気冷凍
低次元酸化物太陽電池/電極材料
Siによる体内水素発生
Liイオン電池電極用Si
発光植物
省エネ創薬プロセス用触媒
波長選択型
有機半導体

7 エネルギーをみんなにそしてクリーンに

デバイス技術
Ft秒反応解析半導体省エネ
ナノ立体構造機能増幅
ナノ固体触媒省エネ化学品製造
ナノ熱電材料/電池材料
省エネスピントロニクス
MIによる省エネ材料開発
無電源メカニカルレジスタ
磁気冷凍（フロン削減）
相変化省エネTr
高効率Si太陽電池
CNF使い捨てセンサ
Mott-FET
フレキシブルセンサ
振動発電
環境発電デバイス
新奇CPLデバイス
パワーデバイス
波長選択型太陽電池

13 気候変動に具体的な対策を

材料技術
低次元酸化物CO2吸収
CNF新材料
化石資源代替のCNF
夜間発光植物CO2吸収

デバイス技術
Mott-FET
防災IoTデバイス

システム技術
Approx.コンピュータ
量子コンピュータ
災害予測

索引・キーワード

Keyword Index

産学連携

産学

大阪大学

ISIR
OSAKA UNIVERSITY

産業科学研究所

〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘8-1

TEL.06-6879-8448

● E-mail

air-office@sanken.osaka-u.ac.jp

● ホームページ

www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/air/

● 企業リサーチパークホームページ

www.sanken.osaka-u.ac.jp/research-park/

2021.4