



実験とデータ科学を融合した次世代太陽電池の開発

工学研究科 応用化学専攻

教授 佐伯 昭紀



<https://researchmap.jp/a-saeki/>



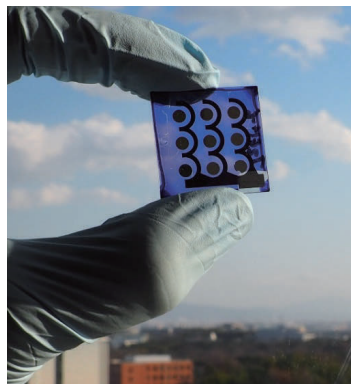
研究の概要

持続可能なエネルギー源として高効率・低コストな次世代太陽電池の開発が進められており、有毒元素を含まない有機太陽電池はその一つです。本研究では、マイクロ波を用いた独自の太陽電池評価法と機械学習（人工知能）を融合した、ハイスループット材料探索と基礎過程の解明を行っています。また、ペロブスカイト太陽電池に代表される有機無機ハイブリッド材料もターゲットにしています。

により、さらに高効率な高分子太陽電池の開発や、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料科学研究において、実験と機械学習を融合した研究展開が大きく期待されます。

研究の意義と将来展望

すでに実用化されているシリコン等の無機太陽電池に対し、有機太陽電池は軽量・低コスト化によってビル壁面や軽量建造物での利用が期待できます。しかし、有機材料の化学構造は無数に設計できるため、新規材料の設計・合成・評価には多くの時間と労力が必要でした。本研究では、高分子と非フラーレン電子アクセプターからなる高分子太陽電池に着目し、実験データに基づく機械学習モデルを構築してハイスループット高分子材料探索を行いました。本モデルで上位にランキングされた新規高分子のうちの4つを実際に合成し、太陽電池素子性能を評価したところ、機械学習の予測と良い一致が得られ、本アプローチの有効性を示すことに成功しました。これ



特 許

論 文

Kranthiraja, K; Saeki, A. Experiment-Oriented Machine Learning of Polymer: Non-Fullerene Organic Solar Cells. Adv. Funct. Mater. 2021; 31: 2011168. doi: 10.1002/adfm.202011168
 Saeki, A. Evaluation-oriented exploration of photo energy conversion systems: from fundamental optoelectronics and material screening to the combination with data science. Polym. J. 2020; 52: 1307-1321. doi: 10.1038/s41428-020-00399-2
 Saeki, A; Yoshikawa, S; Tsuji, M. et al. A Versatile Approach to Organic Photovoltaics Evaluation Using White Light Pulse and Microwave Conductivity. J. Am. Chem. Soc. 2012; 134:19035-19042.

参 考 URL

<http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~saeki/cmpc/>
<https://publons.com/researcher/1310687/akinori-saeki/>

キーワード

太陽電池、機械学習、マイクロ波分光、有機半導体、ペロブスカイト



機能統合戦略に基づく小分子変換触媒システムの創出

工学研究科 応用化学専攻

准教授 近藤 美欧



https://researchmap.jp/mio_kondo

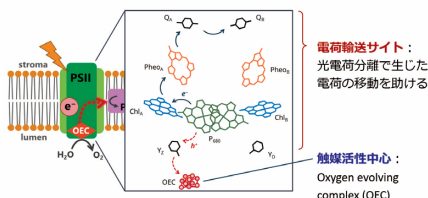


研究の概要

水の4電子酸化による酸素発生反応 ($2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$) は、人工光合成を達成する上で不可欠な反応である。本研究では、天然の光合成系において酸素発生を触媒する酵素の構造に学ぶことで、2つ以上の機能性部位を1つの材料中に融合した「機能統合型」材料の開発を行った。より具体的には、金属錯体触媒を電気化学的に重合することで、触媒活性中心の近傍に電荷移動サイトを導入したポリマー型酸素発生触媒 (**Poly-1**) を構築した。**Poly-1** は、電荷伝達サイトに由来した高い電荷輸送能を示し、その酸素発生反応に対する触媒能が、電荷伝達サイトを持たない錯体と比較して飛躍的に向上することが示された。更に、**Poly-1** の触媒活性を既存の分子性触媒と比較すると、より低い酸素発生過電圧ならびに高いファラデー効率を示し、その活性が良好であることが明らかになった。

成触媒システムの開発に新たな戦略を提供するものである。

天然の光合成系



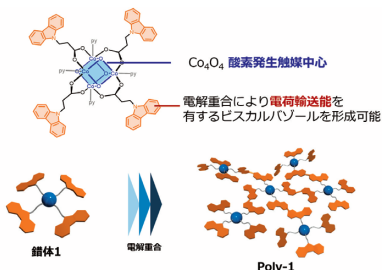
物質変換を担う活性中心に加え

電子/ホールの巧みな輸送によって効率の良いエネルギー変換を達成

物質変換能と電荷輸送能を併せ持つ触媒システムの構築が鍵

研究の意義と将来展望

天然の光合成反応においては、触媒活性中心の構造のみならず、その周りの環境（反応場）がその良好な活性の発現に重要な役割を果たすことが知られている。しかしながら、既存の人工的な酸素発生触媒の開発においては、触媒活性中心の構築に主眼が置かれてきた。本研究で得られた成果は、人工的な触媒系の構築にあたって、反応場の制御が重要であることを明示しており、今後の人工光合



電解重合により触媒分子を配列させ、酸素発生能/電荷輸送能を統合

特 許

論 文

参 考 URL

キーワード

Iwami, Hikaru; Kondo, Mio; Masaoka, Shigeyuki et al. Electrochemical Polymerization Provides a Function-Integrated System for Water Oxidation. Angew. Chem. Int. Ed. 2021; 60: 5965-5969. doi: 10.1002/anie.202015174

https://www.chemistryviews.org/details/ezone/11284936/Artificial_Water_Oxidation_System.html

人工光合成、金属錯体、小分子変換反応



有用特化代謝産物を微生物や植物で持続生産させる

工学研究科 生物工学専攻

准教授 関 光



<https://researchmap.jp/read0152753>

教授 村中 俊哉



<https://researchmap.jp/bio>



研究の概要

薬用植物カンゾウの地下部に含まれるグリチルリチンは、肝臓疾患改善薬などの医薬品原料のほか、砂糖の約150倍の甘さを持つことから天然甘味料としても使用されています。甘草はほぼ全量、海外からの輸入に頼っていますが、優良品の減少や価格の上昇が問題となり、持続的な代替製造法の開発が求められていました。わたしたちは、カンゾウにおけるグリチルリチン生合成遺伝子の単離・機能解析に取り組んできました。2019年に2糖目の糖転移酵素 (UGT73P12)、2020年に1糖目の糖転移酵素 (CSyGT) を、そして、2021年にグリチルリチン産生/非産生カンゾウの分子メカニズムを解明しました。さらに合計7つの遺伝子を発芽酵母に導入することにより、酵母でのグリチルリチン産生に成功しました。

研究の意義と将来展望

今回発見した遺伝子群を導入した酵母や植物を用いたグリチルリチンの工業生産への道が拓かれ、ひいては自生カンゾウの乱獲防止、生態系の保全にも役立つことが期待されます。植物は、100万種類とも言われる多種多様な特化（二次）代謝産物を産生します。グリチルリチン以外の多くの特化代謝物においても、合成生物学、ゲノム編集などの新技術を活用することにより、医薬品原料、機能性食品、工業原料などに使われる、環境にやさしく持続的な物質生産システムを構築することが期待できます。

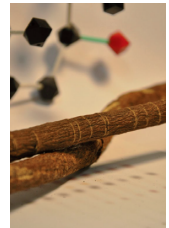


図1. カンゾウの根（甘草）

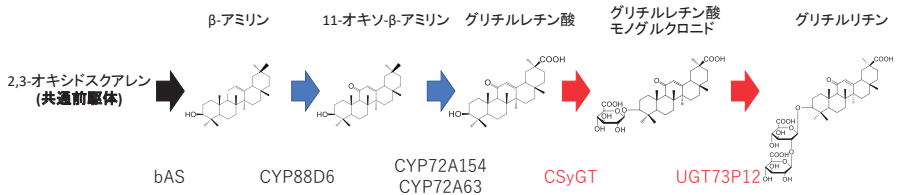


図2. グリチルリチンの生合成経路および生合成酵素

特 許	JP6344774, PCT/JP2020/39175
論 文	Fanani, M.Z.; Sawai, S.; Seki, H. et al. Allylic hydroxylation activity is a source of saponin chemodiversity in the genus Glycyrrhiza. Plant Cell Physiol. 2021; 62(2): 262-271. doi: 10.1093/pcp/pcaa173 Chung, S.Y.; Seki, H. et al. A cellulose synthase-derived enzyme catalyzes 3-O-glucuronosylation in saponin biosynthesis. Nat. Commun. 2020; 11(1): 5664. doi: 10.1038/s41467-020-19399-0. Nomura, Y.; Seki, H. et al. Functional specialization of UDP-glycosyltransferase 73P12 in licorice to produce a sweet triterpenoid saponin, glycyrrhizin. Plant J. 2019; 99(6): 1127-1143. doi: 10.1111/tj.14409.
参考 URL	http://www.bio.eng.osaka-u.ac.jp/pl/index.html
キーワード	ゲノム編集、合成生物学、植物特化代謝、代謝工学、薬用植物



半導体 R & D 支援テラヘルツ放射顕微鏡

レーザー科学研究所

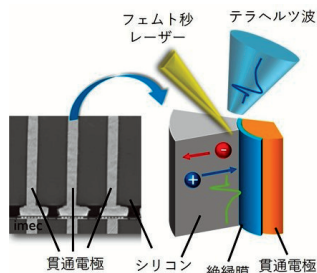
教授 斗内 政吉

<https://researchmap.jp/read0051752>

研究の概要

フェムト秒レーザーを用いて物質中に光電荷を励起すると、その電荷は内部電界などにより加速され、その場から高速で移動します。その速度変化に伴ってテラヘルツ電磁波が放射されます。斗内研究室では、そのテラヘルツ波放射を用いて、電荷の時空間移動をダイナミックに分析観測する独自技術—テラヘルツ放射顕微鏡 (LTEM) —の開発に取り組んでいます。今回 LTEM が、シリコン貫通電極 (TSV) ならびにワイドギャップ半導体などの先進半導体開発支援技術として有効であることを証明しました。

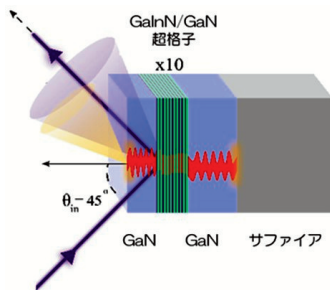
る LTEM は、その課題を解決するために重要なイノベーションをもたらします。



研究の意義と将来展望

TSV は、3次元集積回路開発の重要な要素技術で、その深さ方向の内部分析は困難となっています。また、ワイドギャップ半導体は、まだ不明な物性が多数存在し、ウェファースケールでの物性評価は極めて重要です。

今回の成果は、本研究で示した TSV やワイドギャップ半導体量子井戸構造の評価にとどまらず、半導体製造プロセスに非接触試験を可能にする統合計測ソリューションを提供することが期待されます。生産歩留まりを最大化することは、省エネルギーと廃棄物の最小化に不可欠であり、3次元化・微細化により研究開発・生産の複雑さはますます増すなか、非破壊・非接触で分析・検査を可能とす



特許

論文

斗内政吉 テラヘルツ時間領域分光, 内田老鶴園. 2021. ISBN978-4-753-2318-1
 Jacobs, K. J. P. et al. Characterization of through-silicon vias using laser terahertz emission microscopy. Nat Electron. 2021; 4: 202-207. doi: 10.1038/s41928-021-00559-z
 Mannan, A. et al. Ultrafast Terahertz Nanoseismology of GaInN/GaN Multiple Quantum Wells. ADVANCED OPTICAL MATERIALS. 2021; 9(15): 2100258. doi: 10.1002/adom.202100258

参考 URL

<https://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/THP/>

キーワード

半導体 R & D 支援分析技術、テラヘルツ時間領域分光、シリコン貫通電極、ワイドギャップ半導体、LTEM



光触媒とスズ化合物の協働による炭素－フッ素結合の変換反応を用いたパーフルオロアルキル化合物の高付加価値化

工学研究科 応用化学専攻・先導的学際研究機構 触媒科学イノベーション研究部門 (ICS-OTRI)

准教授 西本 能弘



<https://researchmap.jp/nishimoto123>

教授 安田 誠



<https://researchmap.jp/read0185253>



研究の概要

光触媒存在下、パーフルオロ化合物と有機スズ化合物との反応が可視光の照射により進行し、特定の炭素－フッ素結合が炭素官能基へと変換されることを見出した。本反応は高付加価値化したパーフルオロ化合物の実用的な合成手法となりえる。実験と理論の両面から、光触媒とルイス酸であるスズが協働することで、強固な炭素－フッ素結合の変換が加速されることを明らかにした。

研究の意義と将来展望

温和な反応条件下で非常に強い炭素－フッ素結合を変換することができる本手法は、入手容易ながらも変換が困難であったパーフルオロ化合物を高付加価値化合物へと変換するための新たな合成戦略として有機合成化学において大変意義がある。フッ素は医薬品において重要な元素であり、多くの低分子医薬にフッ素原子が含まれている。本研究結果により、これまで合成不可能であった高付加価値パーフルオロ化合物が簡便かつ短工程で合成できるようになったことから、含フッ素医薬の創薬シード化合物のライブラリの拡大につながるかと期待される。



医薬品として有望な含フッ素化合物の合成に成功

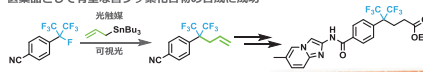


図1

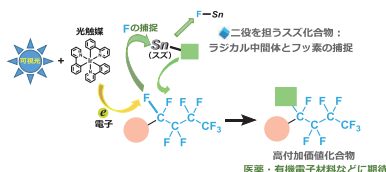


図2

特 許

論 文

Sugihara, Naoki; Nishimoto, Yoshihiro; Yasuda, Makoto et al. Photoredox-Catalyzed C-F Bond Allylation of Perfluoroalkylarenes at the Benzylic Position. Journal of the American Chemical Society. 2021; 143(25): 9308-9313. doi: 10.1021/jacs.1c03760

参 考 URL

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.1c03760>
https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210602_1
<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20210602-2/index.html>
<https://www.eurekalert.org/news-releases/628997>
<https://www.chem-station.com/blog/2021/08/c-f.html>

キーワード

光触媒、スズ、フッ素化合物、炭素－フッ素結合活性化



自動離着棧技術に関する研究

工学研究科 地球総合工学専攻

准教授 牧 敦生

Researchmap https://researchmap.jp/atsuo_maki

研究の概要

本研究では、船舶の自動での離着棧技術について検討を行っています。自動離着棧とは、車でいう自動での車庫入れ問題に対応しています。船は車のようにタイヤで地面に拘束されず、風により岸壁に押し付けられたり、逆に引き離されたりします。その結果、外乱下での離着棧は、船員の腕が試される場所でもあり、自動化の妨げとなってきました。この研究室では、そのような難しい大型船舶の離着棧を自動化するための研究を行っています。

研究の意義と将来展望

自動離着棧は岸壁の近傍で行われ、岸壁・棧橋との衝突は絶対に許されない反面、岸壁ぎりぎりまで船を自動誘導する必要があります。また、船のアクチュエータはそれほど強いものではないため、先を読んだ制御を常に行う必要があります。よって、この問題は必然的に難易度が高くなり、離着棧の自動化を実用化レベルまで引き上げることは、これまで困難とされてきました。ここでは、制御理論や最適化技術、また機械学習なども取り入れつつ、この問題に取り組んでいます。

船舶輸送は、その他の輸送手段に比べ、CO₂排出量を低く抑えることができます。また、トラックの運転手が高齢化等により将来不足する可能性があることも指摘されています。よって、自動運航船の普及と共に、モーダルシフトを進めることで、より地球環境にやさしく、住みやすい社会を造り出すことができると考えられます。

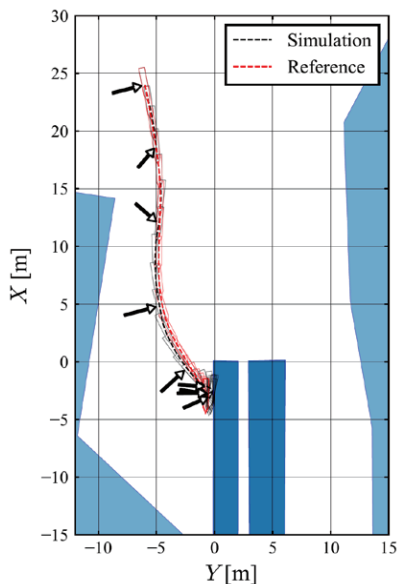


図1. 自動離着棧の計算結果



図2. 実験池における模型船の様子

特 許

論 文

参 考 URL

キーワード

Maki, A.; Sakamoto, N.; Akimoto, Y. et al. Application of optimal control theory based on the evolution strategy (CMA-ES) to automatic berthing. *Journal of Marine Science and Technology*. 2020; 25: 221-233. doi: 10.1007/s00773-019-00642-3.

<http://www.naoe.eng.osaka-u.ac.jp/naoe/naoe5/jp/>

自律運航、自動離着棧、制御理論、大域的最適化、機械学習



イオン結晶を用いた希土類 クラスターの結晶内形成

理学研究科 化学専攻

准教授 吉成 信人

<https://researchmap.jp/read0151149>

教授 今野 巧

<https://researchmap.jp/takumikonno>

教授 中澤 康浩

<https://researchmap.jp/thermo102>

研究の概要

希土類水酸化物クラスターは、分子中に多数の希土類イオンが集積していることから、磁性材料、発光材料、触媒材料などへの応用が期待されています。しかしながら、希土類水酸化物は、容易に無限構造へと変換されてしまい、孤立したクラスターの状態にとどめておくことは一般には困難です。そのため、希土類水酸化物クラスターを得るためには、綿密に設計された厳密な反応条件下での合成が必須となっています。

今回、我々の研究グループは、以前に我々が開発した水和カリウム超イオン伝導体の結晶を希土類イオン溶液に浸すだけで、単結晶性を保ったまま、結晶内部にキュバン構造をもつ希土類水酸化物クラスターが形成されることを見出しました。キュバン構造の形成が確認された希土類イオンは、重ランタノイドと呼ばれる $Gd^{3+} \sim Lu^{3+}$ の8種類です。また、得られた結晶が、希土類クラスターに特有の磁気冷凍効果および農薬モデル化合物の分解反応を示すことも確認されました。

研究の意義と将来展望

本研究成果により、綿密な合成条件の設計を行わずとも、イオン結晶を用いた結晶内合成により、希土類水酸化物クラスターを簡便かつ効率よく合成できることが示されました。今回の手法により合成される希土類クラスターは、希少資源であるヘリウムを使わない

極低温の実現および農薬分解による水環境の浄化に役立つと期待されます。

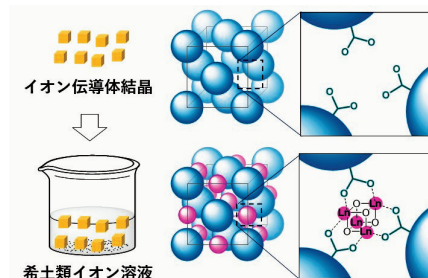


図1. 希土類水酸化物クラスターの結晶内合成の模式図

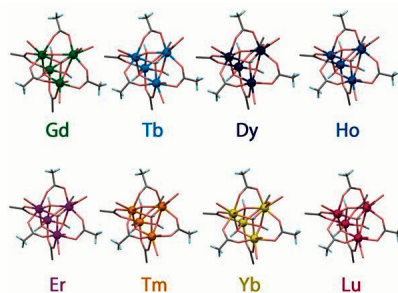


図2. 合成された希土類水酸化物クラスターの構造

特 許 特願2020-122934, PCT/JP/2021/02679

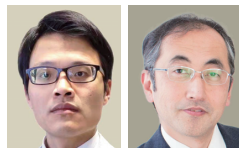
論文 Yoshinari, Nobuto; Konno, Takumi et al. Single-Crystal-to-Single-Crystal Installation of $Ln_4(OH)_4$ Cubanes in an Anionic Metallosupramolecular Framework. Angew. Chem. Int. Ed Engl. 2020; 59(41): 18048-18053. doi: 10.1002/anie.202008296

参考 URL <http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/konno/index.html>

キーワード 希土類元素、金属クラスター、磁気冷凍、不均一触媒



ヒトの巧のある作業動作の ロボットへの直感的な教示



基礎工学研究科 システム創成専攻

准教授 万 偉偉



<https://researchmap.jp/weiweiwan>

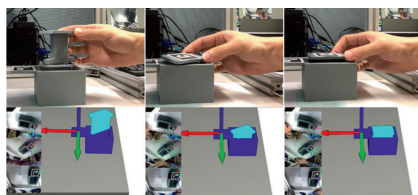
教授 原田 研介



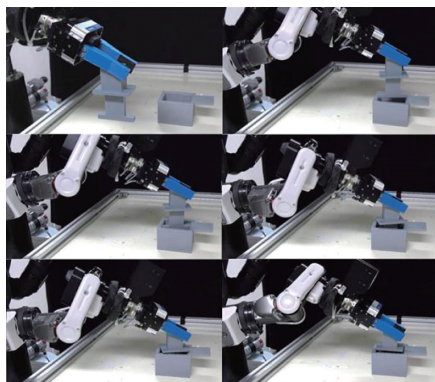
<https://researchmap.jp/kharada>

研究の概要

ヒトの生産作業には巧みのある動作が幅広く存在する。これらの動作のロボット化は難しく、従来の動作計画や模倣の手法でこのような動作と類似するロボットの動作を生成するのは困難である。これらの問題を解決するため、本研究では動作計画とヒトの教示軌跡の再利用を見分けて動作を生成する手法を開発した。流れとしては、まず、ビジョンで認識を利用して対象物の動作軌跡を追跡する。次に、教示軌跡の微分で動作のキーポーズあるいはキーポーズの行列を抽出する。そして、計画用と模倣用の軌跡を切り分ける。最後に、動作計画とヒトの教示軌跡の再利用をそれぞれ区切った軌跡に適用することによって巧のある動作の直感的な教示と生成を実装する。



追跡した対象物の軌跡



提案手法で生成したロボットの作業動作

研究の意義と将来展望

現在流行っている協同ロボットの直接教示方式（ダイレクトティーチ）は直線動作に最適であり、細かい作業や巧のある動作などへの拡張は難しい。本研究で実装した内容は細かい作業や巧のある動作の難題を解決することができ、ダイレクトティーチと結合することでロボットの導入がさらに簡単になることを予想する。ロボットとヒトの同じように雇用されるRaaS産業を推進することが期待される。

特 許

論 文

参 考 URL

キーワード

Wang, Yan; Harada, Kensuke; Wan, Weiwei. Motion planning of skillful motions in assembly process through human demonstration. *Advanced Robotics*. 2020; 34(16): 1079-1093. doi: 10.1080/01691864.2020.1782260.
Wang, Yan; Beltran-Hernandez, Cristian C; Wan, Weiwei; Harada, Kensuke. Hybrid Trajectory and Force Learning of Complex Assembly Tasks: A Combined Learning Framework. *IEEE Access*. 2021; 9: 60175-60186. doi: 10.1109/ACCESS.2021.3073711.
<https://www.youtube.com/watch?v=xHLCCh4Y2IO>
<https://www.youtube.com/watch?v=B75rBqCLYRQ>

ロボット動作計画、動作模倣、強化学習