



# 分子内ホッピング伝導の高効率化に向けた長鎖 分子導線の開発

産業科学研究所 ナノテクノロジーセンター ソフトナノマテリアル研究分野

ナノテクノロジー、単分子エレクトロニクス、有機エレクトロニクス

#### 教授家 裕降

Researchmap https://researchmap.jp/read0105668?lang=ja



#### 研究の概要

分子レベルまで超微小化した単分子エレク トロニクス実現のためには、π共役系分子で 構成される高性能の分子導線の開発が不可欠 である。我々は、一定間隔で分子構造にねじ れをもち、かつ、分子間の相互作用を排除す る構造を持つ数ナノメートルスケールの完全 被覆型分子導線の開発に成功した。単分子の 電気伝導測定を行い、一定間隔でねじれをも たせることで、分子内のホッピングサイトが 均質化し、電気伝導特性が向上することを明 らかにした。

#### 研究の意義と将来展望

究極な素子の微小化に繋がる単分子エレク トロニクスの実現に向けて、この構成ユニッ トの役割を担う高機能な有機分子開発が不可 欠である。本成果から、単分子エレクトロニ クスの実現に向けた分子導線の開発のために は、"高い共役平面性"に加えて"ホッピング サイトの均質化"の指針がホッピング伝導に 有効であることが明らかとなった。本研究で は単分子の電気伝導特性を明らかにするため に、被覆部位を導入しており、単分子エレク トロニクスに向けた分子導線としての機能が 期待される。一方で、本研究で見出だされた "捻じれ"の導入は一般的な有機合成で簡便に 実現できることから、有機薄膜エレクトロニ

クス応用に向けたπ共役ポリマー開発に適用 すると、新機軸の高性能有機半導体材料開発 の実現も期待できる。



特願2005-065947 特開2006-248945、特許4505568号 le, Yutaka: Tada, Hirokazu: Aso, Yoshio et al, Highly Planar and Completely Insulated Oligothiophenes: Effects of  $\pi$ -Conjugation on Hopping Charge Transport J. Phys. Chem. Lett. 10 2019; 3197-3204. doi: 10.1021/acs.jpclett.9b00747 le, Yutaka; Tada, Hirokazu: Aso, Yoshio et al. Improving Intramolecular Hopping Charge Transport via Periodical Segmentation of  $\pi$ -Conjugation in a Molecule J. Am. Chem. Soc. 143 2021; 599-603. doi: 10.1021/jacs.0c1056 参考 URL ーワード 単分子エレクトロニクス、ホッピング伝導、分子導線、π共役分子、有機半導体



プラスチック、包装材料、日用品

ナノテクノロジー・材料



カーボンニュートラル・海洋プラスチック 問題解決に貢献するバイオプラスチック

工学研究科 応用化学専攻

教授 宇山 浩 助教 徐 于懿

Researchmap https://researchmap.jp/yuihsu

https://researchmap.ip/read0168389

#### 研究の概要

近年、マイクロプラスチックによる海洋汚 染が深刻になり、脱炭素社会構築に向けたプ ラスチックの資源循環が社会的に求められて いる。我々はカーボンニュートラルに貢献す るバイオマスプラスチックと廃棄時の環境負 荷を低減する生分解性プラスチックからなる バイオプラスチックの実用化に向けた産学連 携研究を積極的に推進している。植物油脂の 良さを引き出した機能性コーティング材料を 開発し、屋根用塗料として実用化するととも に、植物油脂を基盤とするバイオプラスチッ ク用添加剤を創製し、バイオプラスチックの 耐熱性・耐衝撃性の大幅な向上を達成した。 また、独自開発の熱可塑性デンプンと生分解 性プラスチックのブレンドを基盤とする海洋 生分解性バイオマスプラスチック(MBBP) の開発プラットフォームを立上げ、プラスチッ ク製品を試作している。さらにデンプン単独 の成形技術を構築し、ポリエチレンとの多層 シートを開発した。

#### 研究の意義と将来展望

プラスチック資源循環に不可欠なバイオ プラスチックを早期に社会実装するため、企 業30社以上が参画する MBBP 開発プラット フォームや新たに設立したベンチャー企業(株 式会社 KYU) における活動を積極的に推進す

る。材料開発と成形技術開発の橋渡しを担い、 バイオプラスチック製品の社会実装に貢献する。



植物油脂を利用したバイオプラスチック

デンプン配合バイオプラスチック

許 特許第4942436、特許第5057874、特許第5495360 Uyama, Hiroshi, Functional polymers from renewable plant oils. Polymer Journal. 2018; 50:1003-1011. doi: 10.1038/s41428-018-0097-8 http://www.chem.eng.osaka-u.ac.ip/mbbp/ 参考 URL https://www.kyu-gs.com/ http://www.chem.eng.osaka-u.ac.jp/~uyamaken/ キーワード バイオプラスチック、バイオマスプラスチック、海洋生分解性プラスチック、熱可塑性デンプン

エレクトロニクス、スマートデバイス





基礎工学研究科 物質創成專攻 未来物質領域 助教 大戸 達彦 (Researchmap) https://researchmap.jp/2ru3\_y8\_2d 准教授 山田 亮 (Researchmap) https://researchmap.jp/\_ryoy 教授 夛田 博一 (Researchmap) https://researchmap.jp/read0051974

#### 研究の概要

ナノテクノロジー・材料

人間が作ることのできる最小単位の部品で ある分子1つを電極間に架橋した単一分子接 合は、電子デバイスの小型化や有機物ならで はの電気応答の利用に向けて研究が進められ ている。単一分子の架橋構造を直接視認する ことはできず、電気伝導度の計測を通じて分 子架橋を確認することになるため、単一分子 デバイスの電気伝導特性の計測と評価の手法 を確立することは重要な課題である。我々は、 ブレークジャンクション法と教師なしクラス タリング、第一原理計算を組み合わせること で、架橋構造の特徴に従って電気伝導度を分 類する手法を開発し、3脚型アンカー部位を 用いた分子の架橋構造解析に応用した。

#### 研究の意義と将来展望

データサイエンスの手法の1つである教師 なしクラスタリングを用いることで、大量の 実験データを物理化学的に意味のある形に分 類し、分子架橋構造の決定に結びつけること ができた。今後は、参照データを用いないク ラスタリングなど、最先端のデータサイエン ス手法を単一分子エレクトロニクスに応用す ることで、より精密な電気伝導特性の評価を 目指していく。加えて電気伝導度を理論的 に評価するための第一原理的手法に量子コン ピューティングを導入することで、単一分子 デバイスの伝導特性に関する精度の高い理論 予測を実現し、新しい分子デバイス開拓と性 能評価を推進していく。



ブレークジャンクション法による測定結果と電気伝導度ヒストグラムのクラス タリング。左上図のようにボリイミドをコートしたリン酸朝基版に全の細線を 蒸着し、基板を曲げることで電極の破断を繰り返しながら電気伝導度を測定す る。得られた電気伝導度ヒストグラムには、2つのビークがみられる。平均の 電流一電圧曲線と個々の電流電圧曲線の類似度をもとにクラスタリングを行うと、 分子架橋の認められる成分としては30種類のビークが存在することがわかった。



第一原理計算による電極間距離に依存した架橋構造の予測。分子が左右対称に電極と接続する構造と、左右非対称に接続する構造を用意し、電極間 距離を変えながらボテンシャルエネルギーを計算する(この曲線をボテン シャルエネルギー面(PES)と呼ぶ)。極小点として現れる構造は実験で も電気伝導度ヒストグラムのビークを与えると考えられる。左右非対称な 構造でのPESには、電気伝導度の異なる複数の架橋構造が出現する。

特	許	
論	文	Ohto, Tatsuhiko; Yamada, Ryo; Tada, Hirokazu et al. Single-Molecule Conductance of a $\pi$ -Hybridized Tripodal Anchor while Maintaining Electronic Communication. Small. 2021; 17: 2006709. doi: 10.1002/smll.202006709
参考	∮ URL	http://molectronics.jp/
+-	ワード	単一分子エレクトロニクス、ブレークジャンクション、第一原理計算、機械学習





水素ステーション、水素自動車、高強度構造材料



# 材料の強さに与える水素の影響の原子論的解明

基礎工学研究科 機能創成専攻

教授 尾方 成信



#### Researchmap https://researchmap.jp/read0185246

#### 研究の概要

水素が材料を脆くする水素脆化現象は古く から知られており、その現象は先端高強度材 料で特に顕著になることがわかっています。 本研究では、実験観察が極めて困難な、変形 や破壊を起こしている材料中での水素の存在 様態や水素の振る舞いを、高精度原子シミュ レーション(分子動力学解析)によって解析 し、水素が材料の欠陥に作用し材料に破壊を もたらすメカニズムの詳細を明らかにしてい ます。これまでの材料中水素シミュレーショ ンのボトルネックであった、原子間相互作用 の精度と計算量の問題を、ニューラルネット ワークを用いることで解消し、これまでにな い精度と規模を両立した原子シミュレーショ ンを実現し、それを可能としました。

#### 研究の意義と将来展望

水素脆化現象の解明は水素社会において水 素を安全に取り扱うために不可欠な課題です。 半世紀以上にわたり水素脆化に対する多くの 実験的研究やシミュレーション研究が実施さ れていましたが、材料中の水素の直接観察が 困難さや、シミュレーション手法の精度と計 算量のバランスの問題から、その解明は未達 成のままでした。本研究では、高精度原子間 相互作用を開発することで従来研究のボトル ネックを取り払い、長年の水素脆化研究にお ける課題を解決し、その解明を可能としまし た。今後、水素に強い材料の材料設計指針を 構築や、耐水素材料の開発の加速が期待され ます。



L. Wan, S. Ogata et al., Int. J. Plasticity (2019)



\$	寺 許	
	斎 文	Wan, Liang; Geng, Wen Tong; Ishii, Akio et al. Hydrogen embrittlement controlled by re- action of dislocation with grain boundary in alpha-iron. International Journal of Plasticity. 2019; 112: 206-219. doi: 10.1016/j.ijplas.2018.08.013 Meng, Fan-Shun; Du, Jun-Ping; Shinzato, Shuhei et al. A General-Purpose Neural Network Interatomic Potential for $\alpha$ -iron and Hydrogen Binary System. Physical Review Materials. 2021; (5): 113606-1-16. doi: 10.1103/PhysRevMaterials.5.113606 Kimizuka, Hajime; Ogata, Shigenobu; Shiga, Motoyuki Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in foc metals from first principles including nuclear quantum ef- fects. Physical Review B. 2019; 100(2): 024104-1-9. doi: 10.1103/PhysRevB.100.024104
Ŕ	参考 URL	https://tsme.me.es.osaka-u.ac.jp/publications.html
1	ドーワード	水麦胎化 変形と破壊 原子シミュレーション 機械学習





#### 物質合成、エネルギー、天体内部探査など先端基礎科学

# 高性能パワーレーザーと高エネルギー密度物質

工学研究科 電気電子情報工学専攻

准教授 尾崎 典雅

ナ

ノテクノロジー・材料

84

Researchmap https://researchmap.jp/read0191201



#### 研究の概要

ハイパワーレーザー用いて実現されるダイ ナミックな超高圧など、極限環境で現れる物 質の未知の姿や振る舞いを明らかにする研究 を行っています。物質の構造や状態の変化と、 それに伴って変化する物性や反応を理解する ことで、新しい物質や材料の設計および合成 に活かすことができます。貴重なリアルタイ ム観察データとインフォマティクス技術を組 み合わせ、先進的なレーザー加工・プロセス 開発にも貢献できると考えています。大型レー ザーだけでなく、X線自由電子レーザーやスー パーコンピュータなど最先端施設・装置を利 用した共同研究を通じて新たな知を生産しま す。

#### 研究の意義と将来展望

極限環境での新物質や新構造の発見は、新 たな物質の多様性を示すものです。極限的高 圧高温下での高速の構造相転移、融解などの 状態変化、液体構造変化や金属化、そしてそ れらの過程に関わる化学反応の速度など、多 くの未解明の謎が存在します。また"金属水 素"や"ポストダイヤモンド"に代表される ような全く新しい多形が、高エネルギー密度 の条件で実験的に発見される可能性がありま す。地球惑星関連物質の構造変化の理解から

は、惑星の内部構造や形成過程の解明に繋げ ることができます。高エネルギー密度科学と 呼ばれる日本の強みを活かした横断的な学術 が進展しており、さらに新たな展開も期待さ れています。



特 許	特開2020-098330, WO2019098330
論 文	Katagiri, Kento; Ozaki, Norimasa; Umeda, Yuhei et al. Shock Response of Full Den- sity Nanopolycrystalline Diamond. Physical Review Letters. 2020;125:185701. doi: 10.1103/PhysRevLett.125.185701 Katagiri, Kento; Ozaki, Norimasa; Ohmura, Satoshi et al. Liquid Structure of Tantalum under Internal Negative Pressure. Physical Review Letters. 2021;126:175503. doi: 10.1103/PhysRevLett.126.175503
参考 URL	https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2020/20201028_1 https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210521_2 https://www.asahi.com/articles/ASN767L0BN6TPLBJ004.html?iref=pc_photo_gallery_bottom https://www.ile.osaka-u.ac.jp/ja/blog/2019/08/21/post-4073/index.html
キーワード	パワーレーザー、新物質、極限環境、X線自由電子レーザー、レーザー加工





医療・ヘルスケア、スマートデバイス



木材由来のナノ繊維による濡れて も割れても機能する回路保護膜

產業科学研究所 自然材料機能化研究分野 博士後期課程·日本学術振興会 特別研究員DC1 春日 貴章 教授 能木 雅也

Researchmap https://researchmap.jp/tkasuga

#### 研究の概要

電子デバイスにとって水が天敵であること はよく知られており、これまで防水コーティ ングやパッキングなど様々な封止技術が開発 されてきました。しかし、どんな封止も一度 損傷してしまえば水の侵入を防ぐことはでき ず、故障は免れません。我々は、電子回路上 に木材由来のナノ繊維をコーティングするこ とで、回路の短絡及び発熱・発火といった事 故を防止できることを発見しました。さらに その短絡抑制効果はコーティングが損傷した 状態からでも発揮され、24時間以上継続し ます。本成果は、吸水によるナノ繊維の再分 散、電気泳動、ゲル化という3ステップを上 手く組み合わせることで実現しています。本 成果により水濡れによる発熱・発火といった 故障を抑制でき、近年開発・普及が進んでい るウェアラブル・ヘルスケアデバイスや、環 境調和型センサデバイスのさらなる安全性向 トが期待できます。

#### 研究の意義と将来展望

本成果のポイントは、電子回路上にナノ繊 維が含まれたコーティング液を塗って乾かす という簡便な手順で、コーティングが損傷し た状態でも機能する回路保護膜が実現できる 点です。既存技術との組み合わせも容易であ り、防水コーティングとナノ繊維コーティン グの積層により、さらなる安全性の向上が期 待できます。電子デバイスの安全性と寿命性 を高める、新たな「最後の砦」として機能す ることが期待できます。



+

既存の防水コーティング

# 特許出願中 Kasuga, Takaaki; Nogi, Masaya et al. Cellulose Nanofiber Coatings on Cu Electrodes for Cohesive Protection against Water-Induced Short-Circuit Failures. ACS Appl. Nano Mater. 2021; 4 (4): 3861–3868. doi: 10.1021/acsanm.1c00267 参考 URL https://www.youtube.com/watch?y=6ENGdrD2vWM&t=105s キーワード セルロースナノファイバー、回路保護膜、ウェアラブルデバイス、SDGs



機能性触媒開発、機能性材料開発



# 量子化学理論と計算機シミュレーションによる C<sub>60</sub>ポリマーナ ノ細孔内の二酸化炭素固定化に関する反応機構解明

基礎工学研究科 物質創成専攻

准教授 北河 康降

Researchmap https://researchmap.jp/read0068726



#### 研究の概要

フラーレンCoo薄膜に電子線照射をするこ とでナノ細孔を有する1次元凹凸C60ポリマー が生じます。このポリマー内でおこる、CO。 とH<sub>2</sub>Oから炭酸イオンが生じる反応のメカ ニズムを量子化学理論に基づいた計算機シ ミュレーション (量子化学計算) により推定 しました。その結果、まずCO。がCeoポリマー をブリッジする形でピン留めされ、構造歪み による LUMO エネルギーの安定化と Cenポ リマー鎖表面の電荷分極の増大により活性化 します。そこに H<sub>2</sub>O が接近することで遷移 状態が安定化し反応が進行している可能性を 示すことに成功しました。

#### 研究の意義と将来展望

量子化学計算は、実験では説明が難しい触 媒反応機構を解明することができるのみなら ず、そこから得られた知見により、化合物の 改良や、ひいては新たな触媒などのデザイン を可能とします。したがって SDGs の達成 に向けた研究を今後さらに加速させることが 可能となります。このように量子化学理論と それに基づくコンピュータシミュレーション は、種々の化学現象の原理解明のための強力 なツールであるのみならず、新規機能性材料 開発においても、極めて有効なアプローチ法 です。









### 触媒化学、石油化学、カーボンニュートラル

## 低温での二酸化炭素再資源化を 可能にする新触媒技術の開発

工学研究科 マテリアル生産科学専攻

准教授 桒原 泰隆 教授 山下 弘巳



Researchma

https://researchmap.jp/yasutakakuwahara/ https://researchmap.jp/read0118536

#### 研究の概要

二酸化炭素 (CO<sub>2</sub>) は地球温暖化の主たる原 因物質とされており、世界規模でその排出量 削減に向けた取り組みが行われています。一 方で、CO。を還元することによって得られる ー酸化炭素 (CO) は、アルコールやガソリン、 ジェット燃料などの液体炭化水素の原料とな る有用な化学原料です。CO₂を水素(H₂)と 反応させてCOを得る反応(逆水性ガスシフ ト反応)には、従来500℃以上の高温が必要 とされており、低温では低い反応率しか得ら れず非効率という課題がありました。山下研 究室では、モリブデン酸化物に白金(Pt)ナ ノ粒子を担持した触媒を用いると、従来より も低い140℃という低温でも CO<sub>2</sub>と H<sub>2</sub>から CO を高効率かつ選択的に得られることを見

出しました。さらに興味深いことに、触媒に 光を照射すると反応速度が向上することを見 出しました。

#### 研究の意義と将来展望

当研究室の開発した触媒は、調製が簡便で ある、分離・回収の容易な固体触媒である、 廃熱を利用可能な低温(140℃付近)でも駆 動する、など実用化に不可欠な基盤要素を兼 ね備えています。さらに、触媒に可視光を照 射することで、反応速度が向上するという特 徴を有しています。本技術は、今後ますます 排出量削減が迫られる CO<sub>2</sub>を工業的に有用な 物質へと変換するためのクリーンな触媒技術 として期待されます。



省エネルギーで CO。を再資源化するための触媒開発

#### 許 特願2020-093711

Ge, Hao; Kuwahara, Yasutaka; Yamashita, Hiromi et al. Plasmon-induced Catalytic CO2 Hydrogenation by a Nano-sheet Pt/HxMoO3,y Hybrid with Abundant Surface Oxygen Vacancies. Journal of Materials Chemistry A. 2021; 9 (24): 13898-13907. doi: 論 10.1039/d1ta02277f Kuwahara, Yasutaka: Mihogi, Takashi: Yamashita, Hiromi et al, A Quasi-stable Molybdenum Sub-oxide with Abundant Oxygen Vacancies that Promotes  $CO_2$  Hydrogenation to Methanol. Chemical Science. 2021; 12 (29): 9902-9915. doi: 10.1039/d1sc02550c 参考 URL https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210526\_2 キーワード CO。回収利用、CO。再資源化、モリブデン酸化物、表面プラズモン共鳴





教授 近藤 勝義 特任助教 Abdollah Bahador



Researchmap https://researchmap.jp/Abdollah\_Bahador

https://researchmap.ip/kondoh

#### 研究の概要

本研究では高い電気・熱伝導率を有する銅を対象に、それ らの優れた特性を維持しつつ、力学特性の向上を通じて銅製品 の小型・軽量化を可能とする新たな銅合金の開発を目指してい る。一般に強度と延性は相反関係にあり、高強度化に伴う延性 低下は素材の加工性や信頼性の低下を招く。そこで、古典強化 理論に基づき、塑性変形を可能とする十分な延性を維持しつつ、 複数の強化機構を効果的・有機的に発現する新たな合金設計指 針を確立した。具体的には、粉末冶金法を基調とした固相焼結 プロセスを用いて高硬度・高剛性を有するチタン酸化物(TiO。) ナノ粒子を銅素地内に均一に分散し、かつ急速昇温焼結法の適 用により最小限の熱履歴のもとで銅合金を創製した。その結果、 結晶粒微細化に加えて、酸化物粒子と銅素地の接触界面での局 所的な反応領域の形成を通じて高強度と高延性の両立に成功し た。従来の主な金属製造技術である溶解・鋳造法では、銅と酸 化物の比重差により酸化物粒子の均一分散が困難であったが、 非溶解法である固相焼結法の適用により根幹の課題を解決した。 加えて、分散粒子の凝集・偏析現象を解消し、単分散粒子での 効率的なオロワンループ形成による高強度発現を実証した。さ らに、走査型電子顕微鏡内で本開発材料に対して引張変形を付 与した状態での破壊挙動を直接観察し、酸化物粒子と銅素地の 高い結合性により銅素地での優れた変形能が発現することで十 分な延性が得られることを実証した。その結果、例えば、8重 量比率の TiO<sub>2</sub>ナノ粒子が均一に分散する銅系複合焼結材にお いて、純銅の1.7倍以上の引張強さの発現に成功した。

#### 研究の意義と将来展望

銅は高い電気・熱伝導性を有する反面、工業用金属材料

の中で最も比重が大きい。電気自動車をはじめとする車載用 電動化技術の普及に対応すべく、銅製部材の小型軽量化に資 する機械的特性の向上は必須といえる。本成果は、従来の銅 素材に比べて1.7倍以上の強度を有し、塑性加工を可能とす る十分な延性を有する酸化物ナノ粒子分散強化銅系複合材の 開発に成功した。今後は、本材料の製造技術である粉末冶金 法を生産プロセスとして既に確立しているものづくり企業と の連携を通じて、本研究成果の社会実装を促進する。











ナノテクノロジー、スマートデバイス



# 原子層結晶の新奇物理現象解明:次世代量子 デバイス創出への基礎研究

工学研究科 物理学系専攻

教授坂本ーン

Researchmap https://researchmap.jp/read0184558



#### 研究の概要

物質を極限まで薄くした厚さが1から数原 子の2次元原子層物質は、3次元固体にない 物理現象を発現することが知られており、そ れらの現象を用いることで全く新しいデバイ スの創出が可能となる。このような原子層物 質の基礎科学的知見と応用展開をさらなる発 展させるため、我々は固体表面に原子や分子 を吸着させて自然界に存在しない"原子層結 晶"を作製し、そこで展開される新奇物理現 象の起源を独自の測定手法を用いて解明して いる。また、原子層結晶への異種原子・分子 吸着や光照射により、それらの新奇物性の制 御を確立する簡便な手法の開拓も行っている。

#### 研究の意義と将来展望

現代社会において喫緊の課題となっている、 日々爆発的に増加している情報量とその処理 へ対応するためには、高速処理で長寿命、消 費電力の大幅減少が期待できる量子デバイス の創出が不可欠である。大きなスピン軌道相 互作用と層垂直方向の空間反転対称性の破れ が存在する原子層結晶を材料として用いたデ バイスを再設計することで、デバイス性能の 大きな改善が望めるが、そのためには同結晶 の基礎量子物性をまず理解することが必須で ある。本研究は、構造などを制御することで 原子層結晶の物性を理解し、新しい基礎学術 分野を切り拓くだけでなく、次世代デバイス に不可欠であるスピンの向きと偏極度がコン トロールされた高効率スピン流が流れる量子 材料の創出も期待される。





特 許	
論 文	Kobayashi, Takahiro; Nakata, Yoshitaka; Yaji, Koichiro et al. Orbital angular momen- tum induced spin polarization of 2D metallic bands. Phys. Rev. Lett. 2010 Oct 22; 105(17): 176401. doi: 10.1103/PhysRevLett.125.176401 Sakamoto, Kazuyuki; Ishikawa, Hirotaka; Wake, Takashi et al. Spatial Control of Charge Doping in n-Type Topological Insulators. Nano Lett. 2021 May 26; 21(10): 4415-4422. doi: 10.1021/acs.nanolett.1c01100
参考 URL	http://snp.ap.eng.osaka-u.ac.jp
キーワード	原子層結晶、電子状態、電子スピン、ラシュバ・エデルシュタイン効果、光電子分光



環境浄化、殺菌、エネルギー製造

# 太陽光により H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>から H<sub>2</sub>を製造する 光触媒技術

基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域・附属太陽エネルギー化学研究センター

#### 准教授 白石 康浩

Researchmap https://researchmap.jp/read0054695



#### 研究の概要

過酸化水素(H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)は、漂白剤や消毒剤 として重要な化学物質であるほか、燃料電池 発電の燃料として有望視されるエネルギー キャリアである。しかし、水素ガス(H<sub>2</sub>)を 生成させることは困難であり、水素キャリア としては利用できないと考えられていた。本 研究開発において、リン酸(H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>)とメタ ルフリー粉末光触媒をH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>水溶液に加えて 太陽光を照射する方法により、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>を水素・ エネルギーキャリアとする新エネルギー社会 の実現に向けての社会実装が期待できる。

#### 研究の意義と将来展望

エネルギーキャリアは非化石燃料依存型社 会を実現するための鍵物質と考えられている。 気体であるため貯蔵・輸送の困難なH<sub>2</sub>に代 わり、液体であるH<sub>2</sub>O<sub>2</sub>は有力な候補である が、H<sub>2</sub>を生成させることはできず、水素キャ リアとしては利用できないと考えられてきた。 我々の開発した方法では、古くから安定化剤 として用いられているリン酸(H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>)を H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>水溶液に入れ、安価なメタルフリー光 触媒を加えて太陽光を照射する簡便な操作に よりH<sub>2</sub>を生成させることが可能である。選 択率の向上およびH<sub>2</sub>生成活性の向上が不可 欠であるものの、これまで不可能と考えられ てきた本反応を、 $H_3PO_4$ とメタルフリー光 触媒の添加により進めることができる点は、  $H_2O_2$ の水素キャリアとしての利用可能性を 飛躍的に向上させるはずである。



図1 本光触媒技術による H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>からの H<sub>2</sub>生成メカ ニズム(リン酸は H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>と水素結合することにより H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>を安定化し、励起電子による還元を抑制する)



図2 疑似太陽光照射 ( $\lambda$  >420nm) による照射 時間と $H_2$ 生成量および $H_2$ 選択率の関係 ( $H_2$ は光照 射にともない継続的に生成し、 $H_2$ 選択率もほぼ一 定である)

#### 許 特許6765132号

Shiraishi, Yasuhiro; Takii, Takahiro et al. Resorcinol-Formaldehyde Resins as Metal-Free Semiconductor Photocatalysts for Solar-to-Hydrogen Peroxide Energy Conversion. Nat. Mater. 2019; 18(9): 985-993. doi: 10.1038/s41563-019-0398-0 Shiraishi, Yasuhiro; Ueda, Yuki et al. Photocatalytic Hydrogen Peroxide Splitting on Metal-Free Powders assisted by Phosphoric Acid as a Stabilizer, Nat. Commun. 2020; 11(1): 3386. doi: 10.1038/s41467-020-17216-2
 参考 URL https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2020/20200707\_1
 \* 光触媒、太陽光、過酸化水素



光触媒材料、太陽電池





#### 研究の概要

半導体や金属のナノ粒子は、光触媒、太陽 電池などに用いる光機能材料として注目され ている。光を用いる走査型顕微鏡(走査型近 接場光学顕微鏡)を用いれば、このような試 料の光学特性を反映した画像を取得できるが、 これまで原子スケールの分解能での観察は実 現されていなかった。

研究チームは、光照射により発生する力(光 圧)を計る顕微鏡(光誘起力顕微鏡)を用い て、高性能な光触媒材料として設計された複 合ナノ粒子の近接場光を1ナノメートル以下 の分解能で画像化することに世界で初めて成 功した(図1~2)。超高真空中での観測を実 現し、かつ光照射による熱の影響を除去する 独自の工夫を加えたことが高分解能観察の鍵 となっている。複合ナノ粒子を複数の波長の 光を用いて観測し、複合ナノ粒子が設計通り の化学的性質を持つことを原子分解能に迫る 光圧画像で確認し、光圧の3次元ベクトル像 を取得することにも成功した(図3)。機能性 ナノ材料の設計・評価のための新しい基盤技 術として期待される成果である。

#### 研究の意義と将来展望

本技術を用いれば、ナノ構造の近接場光を 原子分解能で観測することができるため、新 しいナノ材料合成のための設計・評価が格段 に高度化する。このため本技術は今後、画期 的な光触媒材料や太陽電池材料を実現するための新しい基盤技術になると期待される。



ナノテクノロジー・材

料

図1 (a) 光照射された走査型顕微鏡のプロー ブ先端と試料の間に働く力(光圧)を読み取る 光誘起力顕微鏡の模式図。(b)(c) 二種の光波長 (600nm,520nm)で得られた光誘起力顕微鏡像。(d) 光誘起力像の断面図。光触媒として設計された電子 エネルギー構造が反映されている。



図2 (a) 試料の原子間力顕微鏡像(拡大図)。(b) 試料の光誘起力顕微鏡像(拡大図)。(c)光誘起力顕 微鏡像の断面図。1nm を切る分解能が得られてい ることが分かる。

#### 特 許 論 文 参考 URL キーワード

Yamanishi, Junsuke; Ishihara, Hajime; Sugawara, Yasuhiro et al. Optical force mapping at the single-nanometre scale. Nature communications. 2021 Jun 23; 12(1): 3865. doi: 10.1038/s41467-021-24136-2

参考 URL https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2021/20210623\_2

キーワード 光誘起力顕微鏡、光圧、近接場光学、ナノ粒子





# シリコンナノ共振器による巨大非線形光散乱

光エレクトロニクス、全光スイッチ、超解像イメージング

工学研究科 物理学系専攻

教授 高原 淳一

Researchmap https://researchmap.jp/read0185115

#### 研究の概要

単結晶シリコン(Si)のナノ光共振器にお いて自然のバルク値と比べて10万倍(5桁) もの極めて大きな非線形光学散乱がおきるこ とを見出し、本効果がミー共振による熱光学 効果によっておきることを明らかにした。こ れにより超短パルス光を用いることなく連続 光でシリコンの非線形性を利用することが可 能となる。本成果はシリコンフォトニクス素 子における全光スイッチ素子や超解像イメー ジング等への応用が期待される。

#### 研究の意義と将来展望

Si は産業のコメともよばれエレクトロニク スの中心材料であるが、近年ではフォトニク スにおいてもその重要性が増しており、シリ



コンフォトニクスとよばれている。本研究は 熱により Si が本来もつ自然な非線形光学定 数を桁違いに増幅するものである。これまで も超短パルス光をマイクロメートルサイズの マイクロ共振器やフォトニック結晶に入射す ることにより非線形性を増大できることが実 証されてきたが、本成果の値は単純な箱型構 造でありながら、それを大きく超えるもので ある。

従来、熱光学効果は応答速度が遅いと考え られてきたが、本効果の緩和時間はナノ(10<sup>-9</sup>) 秒オーダーであることが確認されたことから、 将来は10GHzで高速動作させることができる。 本成果はシリコンフォトニクスにおける光・ 光スイッチをはじめとする光制御デバイスや 超解像イメージングなどへの応用が期待され る。



Tang, Yu-Lung: Yen, Te-Hsin; Nishida, Kentaro et al. Mie-enhanced photothermal/ thermo-optical nonlinearity and applications on all-optical switch and super-resolution imaging [Invited]. Opt Mater Express. 2021; 11(11): 3608-3626. doi: 10.1364/ 論 OME.431533 Duh, Yi-Shiou: Nagasaki, Yusuke et al. Giant photothermal nonlinearity in a single silicon nanostructure. Nature Commun. 2020; 11: 4101. doi: 10.1038/s41467-020-17846-6 参考URL キーワード ミー共振器、カー効果、シリコンフォトニクス、全光スイッチ

<u>ナノテクノロジー・材料</u>



# 二次元半導体を用いた光活性化ガスセンサ の開発

医療・ヘルスケア、環境モニタリング、スマートデバイス

工学研究科 電気電子情報通信工学専攻

#### 助教田畑博史

Researchmap https://researchmap.jp/read0156510



#### 研究の概要

遷移金属ダイカルコゲナイド (TMDC) に代 表される2次元半導体物質は、その高い表面 体積比のために、ガス分子の吸着に対して電 気特性が敏感に変化する。そのためガスセン サのセンシング材料として注目されている。 一方で、この TMDC は可視光領域において シリコンやゲルマニウム等のバルク半導体の 約10倍もの高い光吸収係数を持つなど、光 との強い相互作用を持つ。今回の研究では、 この TMDC の一種である二硫化モリブデン (MoS<sub>2</sub>)に注目し、この単層膜を用いた電界 効果トランジスタ型ガスセンサの二酸化窒素 (NO<sub>2</sub>) ガスに対する応答に及ぼす光照射の 効果を調査した。その結果、MoS。のバンド ギャップ(1.8 eV)以上の光子エネルギー を持つ可視光を照射すると、センサの応答感 度や応答・回復特性が大幅に改善されること を明らかにした。

#### 研究の意義と将来展望

本研究の意義は、2次元半導体物質とガス 分子との相互作用に光という第三の要素を加 えることで、応答特性を制御することができ るという点にある。光照射によって室温で優 れたセンサ性能を得ることができることから、 マイクロ LED 等の高効率微小光源と組み合 わせることにより、IoT センサに求められる 超低消費電力なガスセンサへの展開が期待で きる。さらに、照射する光の波長選択や強度 変調などによって、生体ガスの検知等に必要 な高度な分子識別が可能になると期待される。



図1

センサ測定の様子

MoS.-FFTガスセンサ







パワーデバイス、EV・HEV、ドローン、宇宙航空、5G・6G通信

# AE センシングによる WBG パワー デバイス初期劣化診断技術の開発

産業科学研究所 フレキシブル3D実装協働研究所

特任准教授 陳 伝彤 特任教授 菅沼 克昭

(O) Researchmap

https://researchmap.ip/chenchuantong https://researchmap.jp/ksuganuma

#### 研究の概要

これからの WGB 半導体は、200℃~ 300℃の環境下で動作することが求められる が、WBG 半導体を用いたパワーモジュール は実使用環境下で室温~300℃近辺の温度プ ロセスが何度も繰り返されるため、金属接合 部材とセラミック部材との熱膨張率の差によ り繰り返し熱疲労の影響を受け、接合部破断、 配線部の断線などによる故障が生じやすいと いう問題があった。従来の方法では、電圧変 動や熱抵抗変動などのパラメーターで故障を 検知できるが、いずれも断線故障が生じるま での変化が少なく、このデータだけでは故障 直前の時期を判別することが難しい状況であっ た。一方、本研究では AE (Acoustic-Emission)のデータにより、断線故障時期に近づ くに従い計測数が増加していることがわかる ため、この AE データをセンシングすればリ アルタイムで初期き裂の発生、進展と故障に 至る寿命の時期がかなり正確に判断すること ができる。結果的に、パワーデバイスの「故 障予測|「寿命予測|が可能となる高精度、 高品質の劣化検知システムが実現できた。

#### 研究の意義と将来展望

本研究成果により、パワーモジュール動作 中に故障する問題を回避することができ、ま たシステム冗長性を低減することもできるの で、全体として軽量・低コスト化するだけで はなく、SiC や GaN が広い範囲で使われる

ことで、あらゆる電力変換機器の損失を低減 することが可能となる。そのため、EV 車の 普及にもつながり、市場の拡大とともに前回 中のエネルギーロスの削減にもつながるため、 小型化や低消費電力化に貢献できる。



図1. SiC パワーモジュールの断面とパワーサイク ル試験後に配線の劣化



図2. AE(Acoustic-Emission)の圧電センサでパ ワーモジュール配線接合部疲労による劣化検出技術

# 論 文

Choe, C; Chen, C; Nagao, S et. al. Real-time acoustic emission monitoring of wear-out failure in SiC power electronic devices during power cycling tests. IEEE Transactions on Power Electronics. 2021; 36 (4): 4420-4428. doi: 10.1109/TPEL.2020.3024986. 参考URL https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2020/20201015\_1

ナ

キーワード パワーエレクトロニクス、AE センシング、故障診断、Ag 焼結接合



ナノテクノロジー、材料、エネルギー

ナノテクノロジー・材料



# 環境調和型高性能熱電変換ナノ材料の開発

基礎工学研究科システム創成専攻電子光科学領域

教授 中村 芳明

Researchmap https://researchmap.jp/research\_nakamura



#### 研究の概要

エネルギー消費量のうち60%は廃熱とし て捨てられており、この莫大な廃熱をター ゲットとした熱電変換が新たなクリーンエネ ルギーとして注目されています。従来の熱電 材料は、高性能化のために高価・有毒な重元 素が主に用いられるのが課題でした。我々は、 原子レベルで制御した独自のナノ結晶構造形 成技術を駆使して、高熱電性能化のための至 上命題であった電気と熱の独立制御を達成し、 Ⅳ 族元素を中心とする軽元素のみで構成した 環境調和型高性能薄膜熱電材料を開発しまし た。本研究は、ナノ構造物理に基づいた電気・ 熱の輸送学理を新規構築するとともに、IoT センサ電源等といった社会応用も可能にする 学術面・社会面の両面に貢献するものと言え ます。

#### 研究の意義と将来展望

本研究は、ナノ構造形成技術を駆使して熱 と電気の独立制御を可能にする学術的意義の 高いものです。これは、環境調和型の軽元素 材料を熱電材料の主役に引き上げる産業・ 社会的意義の高い研究でもあります。現在、 COVID-19や高齢化社会により遠隔通信を ベースとした新たな生活様式に移行しつつあ ります。こうした社会の流れに対して、我々 はナノ構造を用いた高性能薄膜熱電電源をセ ンサに組み込むことで、新たな生活様式を支 えるための遠隔通信サービスを可能にします。 これにより、医療・農業を含む幅広い社会分 野を支えることを目指します。



Si ナノドット連結構造を用いた熱電材料



ナノワイヤを用いた透明熱電材料





有機半導体、有機EL、創薬化学

# 炭素を埋め込み輪をつくる 新しいカップリング反応の実現

工学研究科 応用化学専攻

講師 西井 祐二

Researchmap https://researchmap.jp/y nishii



#### 研究の概要

有機分子中に含まれる炭素 – 水素結合を金 属触媒によって切断し、2炭素ユニットを組 み込み新たな環構造を組み上げる斬新なカッ プリング反応 (ビニレントランスファー法) を開発した。安価な固体試薬である炭酸ビニ レンが、アセチレンガスの合成等価体として 機能することを世界で初めて実証し、炭酸(水 +二酸化炭素)のみを副生するクリーンな化 学変換を実現した。本反応の開発によって、 機能性材料の基礎骨格として広く用いられて いる、様々な縮環芳香族化合物を迅速に構築 することが可能となった。

#### 研究の意義と将来展望

「置換基を持たない」多環構造は、有機合 成分野におけるターゲット構造として良く見 られるものではあり、本研究で開発したビニ レントランスファー法は、その最もシンプル かつ革新的な構築手法を提供するものである。 多環芳香族化合物は「機能の宝庫」と呼べる ほど様々な機能性材料に利用されており、特 に、有機 EL や薄膜太陽電池などの有機エレ クトロニクス分野に高い利用価値があると考 える。また「環化カップリング反応でしか構 築できない| 分子骨格が多数あることを踏ま えると、今まで見過ごされてきた分子の価値 を再発見することで、創薬・超分子化学・マ テリアルサイエンスなど関連分野に波及効果 が期待できる。





本手法により構築した有機分子の例(ハイライト部分が埋め込んだ炭素)









# 芳香環を密に接近させたπクラスターシステム の構築とその物性の解明

理学研究科 化学専攻

助教 西内 智彦

Researchmap https://researchmap.jp/t-nishiuchi



#### 研究の概要

ベンゼン環を基本骨格に持つ多環芳香族炭 化水素 (PAH) は様々な分子骨格を持つもの がこれまでに合成され、その一部は有機半導 体や有機発光ダイオードに代表される有機デ バイスの開発にも展開されている。本研究で は、多様な分子骨格を有する PAH が存在す る今日において、複数の芳香環の面同士を炭 素のファンデルワールス半径の和である3.4 Åよりも接近させたπクラスターシステムに 注目し、芳香環が密集することで初めてみせ る独特な物性の解明を目的としている。

#### 研究の意義と将来展望

複数の芳香環を密集させると、芳香環同士 のπ電子軌道が相互作用することでその芳香 環が一枚の時とは全く異なる物性、例えば吸 収・発光挙動の変化や電子供与性・受容性の 変化、さらには光照射による分子骨格の異性 化やその固体をすり潰すといった物理的刺激 を与えることによる分子骨格の変化に伴う吸 収・発光色の変化など多様な挙動を示す。す なわち芳香環を密接させるという単純なコン セプトで様々な物性を引き出すことが可能と なる。一方で芳香環を密集させた分子は、合 成の際に低収率で得られるなど困難が伴う場 合が多く、その分子骨格は限られていた。そ こで効率よくπクラスターシステムを構築す

ることにも注力して分子骨格の多様化を行っ ており、様々な用途に使用できる汎用性の高 い機能性材料としての展開も見据えている。





将	寺 許	
Ĩ	<b>京</b> 文	Nishiuchi, Tomohiko; Kisaka, Kazuki; Kubo,Takashi. Synthesis of Anthracene-Based Cyclic $\pi$ -Clusters and Elucidation of their Properties Originating from Congested Aromatic Planes. Angew. Chem. Int. Ed. 2021; 60(10): 5400-5406. doi: 10.1002/anie. 202013349 Nishiuchi, Tomohiko; Sotome, Hikaru; Kubo, Takashi et. al. Optical nature of non-substituted triphenylmethyl cation: Crystalline state emission, thermochromism, and phosphorescence. Aggregate. 2021; 2(6): e126. doi: 10.1002/agt2.126
붛	診考 URL	http://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/kubo/
-		タ珊芸禾族岸化水麦 ヵクラフター 対郭訓邀応答性 発光特性 クロミブム特性



#### 研究の概要

機能性・構造材料の多くは、微細な結晶粒 から構成された多結晶体として使用されてい る。結晶粒の間に形成される結晶粒界(以下、 粒界と呼ぶ)は、物質の結晶構造とは異なる 電子・原子配列を有する。したがって、示す 性質も様々であり、結果的に機械的、電気的、 熱的特性など、多岐に渡る巨視的材料特性に 大きな影響を及ぼす。もし粒界構造と巨視的 特性の相関を解明出来れば、材料中の微視的 構造に基づいた新奇の材料設計が可能になる。 本研究では、原子レベルの計算科学手法を用 いて多様な MgO 粒界の熱伝導度を評価した。 そして、得られたデータに対して種々の機械 学習を行うことで、粒界の原子配列からその 熱伝導性を直接予測可能なモデルを構築した。 つまり、モデル材料 MgO について、粒界構 造と熱伝導度の相関関係を初めて定量的に解 明した。

#### 研究の意義と将来展望

本研究で開発した予測手法を他の実用材料 に応用すれば、熱電変換材料など、遮熱・放 熱に関連する機能性材料全般の材料設計に役 立つ指針が得られる。また、粒界エネルギー の構造依存性へと研究を展開すれば、多結晶 体中に形成されやすい粒界構造を把握するこ とができ、材料プロセスの最適化に繋がる。 さらに、熱伝導度以外の巨視的特性の構造依 存性も併せて解明すれば、複数特性の同時制 御を粒界分布によって実現でき、多機能性を 有する新規材料の開発に繋がる。



Atomic thermal conductivity (Brighter contrast indicates higher value)



# 特許 許 時間 Fujii, Susumu; Yoshiya, Masato et al. Quantitative prediction of grain boundary thermal conductivities from local atomic environments. Nature Communications. 2020; 11(1): 1854. doi: 10.1038/s41467-020-15619-9 Fujii, Susumu; Yokoi, Tatsuya; Yoshiya, Masato. Atomistic mechanisms of thermal transport across symmetric tilt grain boundaries in MgO. Acta Materialia. 2019; 171: 154-162. doi: 10.1016/j.actamat.2019.04.009 Sekimoto, Wataru; Fujii, Susumu; Yoshiya, Masato. Direct numerical analyses of nanoscale thermal transport near MgO edge dislocations. Scripta Materialia. 2021; 202: 113991. doi: 10.1016/j.scriptamat.2021.113991 参考 URL http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/index\_j.html キーワード 計算材料科学、機械学習、ナノ構造、格子欠陥、熱伝導





レオロジー、アモルファス物質

# ジャミングの物理における普遍性

サイバーメディアセンター

准教授 吉野 元

Researchmap https://researchmap.jp/read0076565

#### 研究の概要

最もシンプルなガラス状態である剛体球ガ ラスに対して、圧縮やシア(剪断)をかける 数値シミュレーションをスーパーコンピュー ター用いて行いました。その結果、様々な密 度と異方性をもつ膨大な数のジャミング状態 を生成することに成功しました(図1)。これ らのジャミング状態について解析すると、力 学的にマージナルな安定状態であり、すべて 同一の臨界性を持つことが明らかになりまし た。例えば、粒子の中心から距離rにある他 の粒子の平均的な数(図2)を見ると、様々な ジャミング密度のiを持つ配置で共通する普 遍的な振る舞いになっています。左図から平 均配位数は6であり、力学的にぎりぎりの安 定状態にあることがわかります。また右図か ら、ほとんど接触しかけている粒子の数は、 普遍的な指数で特徴づけられるベキ分布に 従っていることがわかります。これはある種 の臨界状態にあることを示唆します。本研究 の成果により、身近にありながら結晶に比べ て多くの未解決問題をもつガラスの基礎物理 の理解が進展すると期待されます。

#### 研究の意義と将来展望

本研究成果により、結晶とは異なり、乱れ たまま固体となったガラスの基礎的理解が進 むことが期待されます。また将来的には、身 近な工業材料や食品において重要なコロイド など、高密度のソフトマターの制御に役立つ と期待されます。



図1 ジャミング密度近傍にある高密度の剛体球ガラス



図2 粒子の中心から距離 r にある他の粒子の平均的な数

