



工学研究科地球総合工学専攻教授 今井 克彦 (Katuhiko Imai)

## 木造スペースフレームの開発

スペースフレームは、大空間建築や曲面構造が比較的短尺で小さい断面の部材により容易に設計できるという特徴がある。また、部材にかかる応力が主に軸方向力(圧縮・引張)のみであり、材料にかかる負荷が他の構造形式に比べて小さく単純である。本研究では、間伐材を含む小中径の国産木材をスペースフレームの部材に適用しようと試みた。

### (1) 木材の軸方向特性の検証

間伐材を含む小中径の国産木材は、一般に欠点と言われている節が多く、構造材に適さないとされている。特に節は引張荷重に対して弱いと言われており、極小の試験体(無欠点小試験体)によるデータに大幅な低減係数を乗じることにより材料強度を定義している。しかし、節がどの程度強度に影響を及ぼすかを検証するための実大ベースの実験的研究はほとんど行われていない。これは木材が異方性を有していることから、特に軸方向の高い引張強度に対して放射方向の強度が非常に弱く、そのため試験体接合部の設計が非常に困難であることに起因している。本研究では、材料特性解明に試験法の開発が不可欠であるとの認識より、丸棒や角材の実大引張試験が簡便に行えるジグを開発した。この方法により行った実大引張試験やこれと平行して行った実大圧縮・座屈試験の結果から多くの注目すべき結果を得た。以下に、主なものを列挙する。(1) 節が致命的な構造欠陥にならない、(2) 無等級材でも現行建築基準法による構造材の材料強度を十分に満たす、(3) 引張耐力が圧縮耐力よりも大きいなどである。以上の結果

から、間伐材を含む国産の小中径木が十分構造材に用いることができるということが実証された。

### (2) スペースフレーム接合部の開発

原木から直接丸棒加工した後、乾燥・精密切断した材料に接合部金物を木口にラグスクリューにより定着したものである。木口からの引張接合を採用することにより接合芯と部材の断面重心を一致させ、木材への負荷を軽減している。接合金物は、鋼製とジュラルミン製の2種類を作成した。ジュラルミン製金物は軽量化を意図したもので、小型部材に適用させ、リハビリテーションなどの医療用やイベントなどの展示用ディスプレイなどに用いることができる。現在は、ジャングルジムなどの遊具としての使用も検討しているところである。接合システムにおいて最も弱点となりやすい木材と金物との連結部であるラグスクリュー接合に関しては、度重なる試行錯誤の結果、現在では鋼製のラグスクリューの引張耐力とほぼ同程度までラグスクリュー引抜き耐力を上昇させることに成功した。また、実大レベルの接合部引張・圧縮試験を行い、強度特性の検証及び安全性の保証を行っている。

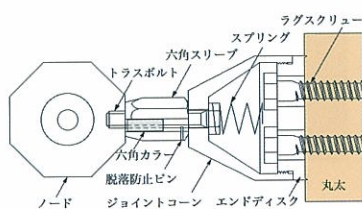
### (3) システムの開発

以上の成果を基にスペースフレームシステムの開発を行った。システムは数件の実施設計を通して改良が施され、現在では丸棒径でφ50の小型モデルから大規模建築を想定したφ210の部材までが含まれている。また、設計者用のデザインマニュアルの作成にも至った。

大阪大学教授1名・特任助教授1名・助手1名



丸棒の実大引張試験



スペースフレーム接合部



接合部の実大実験



アイビードーム(スパン40m)



農産物販売所

工学研究科地球総合工学専攻教授 今井 克彦 (Katuhiko Imai)

## 高性能重ね梁の開発

国産の芯持ち角材を用いた大断面木材の技術開発について述べる。現在、大断面木材は集成材を用いたものが大半を占めており、その原料は外材を利用していることが多い。国産材による集成材は、コストや製造方法、歩留まりの悪さなど様々な問題によりそのシェアの大半を外材に譲っている。そこで、本研究では製材をそのまま積層させることのできる重ね梁に着目した。重ね梁は、国産の芯持ち角材を数段積層させた大断面組立材のことで、集成材と比較して格段に歩留まりが良いことやラミナといった木片に分解することがないため、木材らしい外観を損なわないといった特徴が挙げられる。このような大断面直線材は、中規模建築や住宅などに用いられる一般材として大きな需要があるため、国産木材の大量消費が期待できる重要な技術となりうる可能性が大である。

重ね梁の主材には節や乾燥割れがある普通材を用い、それらを木材表面に出でこない特殊金具により一体化している。金物は2種類作成し、鋭利な歯を持つジベルタイプと円形鋼棒から作成した鋼製ピンタイプである。基本的にはジベルのみで一体化させるが、荷重条件が厳しい時などは、ピンを併用することにより部材耐力を上昇させることができる。部材の組み立ては、油圧ジャッキを用いた簡便な装置により、熟練技術を要さず簡単に行うことができる。組み立て用の装置一式は、トラックなどで簡単に持ち運びができるため、現場での組み立て作業が可能となる。

重ね梁の力学的特性の検証は、接合部押し抜きせん断試験と実大曲げ試験(静的・動的)により行った。接合部押し抜きせん

断試験では、実大サイズの接合部試験体を用いて、接合部の降伏耐力や初期剛性等の基本的な力学的特性を検証し、いくつかの改良を施した。

次に、接合部押し抜きせん断試験の結果に基づき、適切にジベル・鋼製ピンを配置した実大サイズの重ね梁(2、3段)を作成し、静的曲げ試験及び動的載荷試験を行った。さらに進んで接合金物を用いないで角材表面に特殊な加工を長手方向に施し直接角材を接着、段重ねする方法を開発している。過酷な使用条件の橋梁や部材への切り込み加工の多い住宅用に用途が期待できる。

木材市場で一般的な3、4mの定尺材を用いて大断面・大スパン構造を実現させるために、フィンガージョイントを用いた縦継ぎによる長尺化の技術開発も行った。本研究では木口径210mmまで加工可能な小型可搬フィンガー加工機を開発した。フィンガージョイントによる縦継ぎは、移動可能な簡便な装置を用いて15kg/cm<sup>2</sup>程度の低圧で接着接合により行う。接合部の接着性能に関しては、静的曲げ試験により母材破壊に至ることを確認している。接着が難しい桧材においても、接着層での剥離を起こすことなく母材破壊させることに成功している。

以上の研究成果を基に、すでに人道橋や多雪地域にある公民館、スパン17mもの屋内プールの屋根や公園の大型モニュメント等が建設された。

大阪大学教授3名、特任助教授1名、助手1名



接合部の剪断実験



公民館(スパン10m)



温水プール屋根(スパン17m)



重ね梁の実大曲げ実験



芯持ち角材による接着重ね梁の断面



長さ17m重ね梁の集積

工学研究科地球総合工学専攻教授 今井 克彦 (Katuhiko Imai)

## ブレース不要耐震補強工法の開発

耐震補強は、通常ブレースが前提となっているが、本工法は、H形鋼門形鉄骨をRC構造に外付けし、ブレースを不要とした。本工法は、従来不可欠とされてきたブレースを省略しても十分な耐震性能を実現できる他に類を見ない画期的な工法である。現在、国内外でこのような工法は存在しない。庁舎、商業施設、マンション等の耐震改修が進まない最大の理由は、ブレースを省略できないことにあるといっても過言ではない。これまで行った開発と数例の実設計により、従来工法に比べ、建築計画/デザイン性、施工後の使い勝手の良さ、工期、コストで圧倒的優位性があることが判明している。

ブレースを不要としたことにより安く、早く、スマートという三拍子揃った工法が実用化された。緊急に耐震改修しなければならないRC公共建築が数万棟、民間を入れると100万棟にもなるといわれる既存不適格RC建築の耐震改修に貢献できる。特に、民間商業建築、マンションでは、ブレースがネックになって耐震改修が進まないという現実がある。

第一段階の実用化を実現しており、これを基にH17/3/1に(財)日本建築総合試験所の建築技術性能証明を取得した。さらに、適用範囲を広げることを目的とした研究を進めており、より進化したシステムが実現することが期待される。

本工法は、既存RC建築の柱梁と同程度の曲げ剛性を有するH形鋼ラーメン(格子状骨組み)を建物外側からアンカー、スタッドや特殊モルタルを用いて取り付けるものである。建物外側からの工事であるため事務所内の仕事を中断することなく施工できる(居ながら施工)。

本工法は、鋼材のヤング係数がコンクリートの10倍程度である事を利用した点である。従来RC構造に比べて鉄骨ラーメンは、柔らかくて補強にならないと考えられていたが、ヤング係数の差を利用するとRC柱と同じ程度の断面を用いることにより十分補強出来るというのが構造原理である。

ブレースが無いため建物外観の変更が最小限であること、視界、採光が損なわれないことや最も施工例の多い大断面H形鋼による補強のように壁やサッシュを撤去する事無く工事が出来るので産業廃棄物が少ないなど他に無い多くの特長を持っている。

阪大方式と銘打ち現在、ゼネコン数社に技術供与している。施工実施例は、民間工事を中心に6件、設計中10件程度。

大阪大学教授5名、特任助教授1名



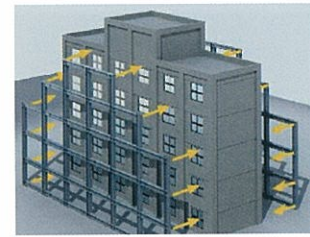
大断面H形鋼による補強例



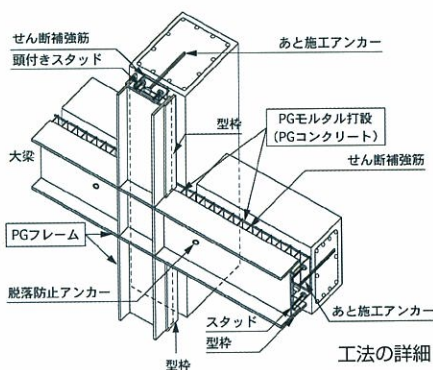
従来型補強(高性能ブレース)



本工法補強例



補強鉄骨の取付イメージ



工法の詳細



事務所ビル施工例



工学研究科地球総合工学専攻助教授 大倉 一郎 (Ichiro Okura)

## アルミニウム橋実現のための基礎研究

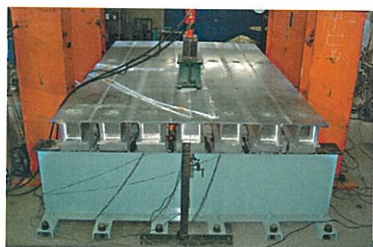
軽量で、耐食性に優れ、リサイクル性に優れているアルミニウムは21世紀の建設材料である。しかし、アルミニウムはこれまで橋の高欄や道路のガードレールなど付属的な用途以外に社会基盤構造物の主要部材として用いられることはほとんどなかった。本研究では、アルミニウムの材料特性、構造特性、製作工程を反映したアルミニウム橋の設計技術を創造することを目標として、自動車の輪荷重を直接支持するアルミニウム床版と、アルミニウム床版を支えるアルミニウム桁を開発した。

押出型材を摩擦攪拌接合で連結することにより、図に示す開閉断面のアルミニウム床版を試作した。ここで摩擦攪拌接合とは、イギリスの溶接研究所で1991年に考案された固相接合法の一種であり、最新の接合技術である。アルミニウム床版に疲労亀裂を発生させる局部応力を調べるために、実際のトラックのタイヤを使って荷重を載荷する装置を開発し、これを用いて局部応力を調べた結果、局部応力は、タイヤ荷重が大きくなっても、ある値以上にはならないことが明らかになった。アルミニウム床版と鋼桁との連結は、鋼桁の上フランジにスタッドを溶植した後、コンクリートを打設し、その上にアルミニウム床版を被せ、押出型材の内側を無収縮モルタルで充填する構造とした。アルミニウムと鋼は線膨張係数が2倍違うので、アルミニウム床版と鋼桁とが連結されると、温度変化によって、アルミニウム床版に応力が発生する。この応力の大きさを明らかにするために、アルミニウム床版と鋼桁との合成桁を製作し、その静的載荷試験を実施し、アルミニウム床版と

鋼桁との合成の程度を調べた。アルミニウム床版の現場継手には摩擦接合用鋼製高力ボルトを使用した。アルミニウム材表面の摩擦係数を確保するために、アルミニウム材表面の粗さを制御した試験片の引張試験を実施し、アルミニウム材表面の粗さと摩擦係数の関係を明らかにした。さらに、アルミニウムのクリープに起因する摩擦接合用鋼製高力ボルトの軸力低下を究明した。摩擦接合用鋼製高力ボルトを用いて、アルミニウム床版の側面および材端の現場継手を試作し、両継手の強度を確認した。アルミニウムは180℃を超えるあたりから強度低下が始まる。したがって通常、舗装材料として使用されるグースアスファルトは施工温度が約250℃あるため使用できない。そこで140℃～160℃で施工できるエポキシアスファルトを採用した。エポキシアスファルトとアルミニウム床版との接着性、ボルト周辺へのエポキシアスファルトの充填性、および、エポキシアスファルト施工後のアルミニウムの強度変化を明らかにした。

最小の断面積で最大の耐荷力を発揮する桁構造として、図に示す等間隔に水平補剛されたアルミニウム桁を試作し、この耐荷力を明らかにした。

大阪大学助教授1名、特任研究員1名、琉球大学助教授1名  
九州大学助教授1名、アルミニウム橋研究会15名



アルミニウム床版



等間隔水平補剛アルミニウム桁

## アルミニウム橋研究会 萩澤 亘保

本研究の重要な課題に、アルミニウムの特徴を活かしたアルミニウム橋の設計・製作・施工法の確立があった。これに対する具体的な回答が、アルミニウム床版と等間隔水平補剛アルミニウム桁である。これらの共通した特徴は、アルミニウム押出型材の使用と、それらの組立てへの摩擦攪拌接合の適用である。隅肉溶接が無いので疲労強度が高い床版では、タイヤ荷重による局部応力の見直しが疲労設計に貢献した。桁では、板厚が薄い軽量化が可能となった。これらの開発過程において蓄積された設計・製作・施工に関する各種の周辺技術は、アルミニウム橋の実現に寄与するものである。これらの成果を踏まえたアルミニウム橋の設計・製作・施工書の充実が望まれる。



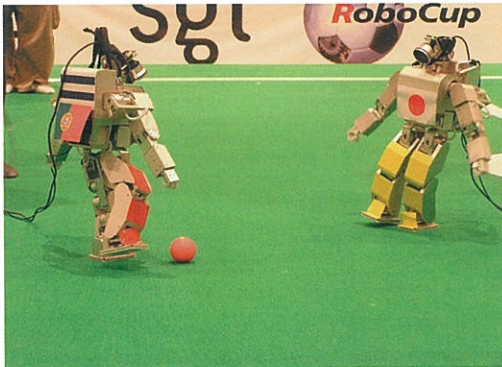
工学研究科知能・機能創成工学専攻教授 浅田 稔 (Minoru Asada)

## ロボカップ人間型ロボットリーグへの挑戦

ロボカップは50年後に人間のワールドカップチャンピオンチームに勝利するという目標を掲げ、ロボットにサッカーをする能力を持たせることを通して、ロボットの技術力、知能の向上を目指した国際大会である。本プロジェクトでは、このロボカップ国際大会に、中型機リーグへの参加を通して集団での知能の創発を目指し、ヒューマノイドリーグへの参加を通して身体を持つエージェントの知能の在り方についての研究を行った。中型機リーグでは自律型の車輪型のロボットを使い、1チーム4台から6台のロボットが前半・後半それぞれ10分の試合を行う。本プロジェクトでは全方位視覚、キック機構、全方位移動機構を持つロボットを製作し、中型機リーグに参戦してきた。世界大会では常に上位に入賞する成績を修めてきた。中型機ロボットを使った研究として、マルチエージェント環境下における協調・競合行動の獲得および階層型学習機構による複数タスクの同時学習・タスク分解・状態行動の抽象化等を行ってきた。前者では相手の行動/政策の切替えを状況の変化としてとらえ、それぞれの状況に対して学習器を割り当てる手法を提案し、複数のエージェントが同時に行動を学習することが可能であることを示した。後者では同一構造の学習器を複数使い、これを階層的に自律的に構築することによる行動獲得手法を提案し、実機による実験を通してその有効性を確認している。また、全状態

行動空間を部分空間に分け高いレベルで全体の統合を行うことで、多種多様な論理センサ・アクチュエータを装備したロボットによる学習を行う手法を提案し、実機の実験により有効性を示した。ヒューマノイドリーグでは、歩行速度やキックの精度など個々のロボットの運動能力が競われる。本プロジェクトでは市販のヒューマノイドに改造を加え自立的な動作を実現し、ロボカップにヒューマノイドリーグが設立された当初から参加してきた。研究としては、ヒューマノイドの基本動作の獲得、センサ・モータ写像学習によるパス行動の実現を行った。基本動作の獲得では、生物の歩行で利用されている神経振動子とセンサ入力の関係からヒントを得たリズム歩行の実装を行い、ロボットのモデルを明示的に利用しない動歩行を実現した。また、ロボットの背中に丸い背中を取り付け、脚を振り下げたときに生じる慣性力を利用した動的な起き上がり動作を実現した。センサ・モータ写像学習では、ヒューマノイドの動作を単純な動作パラメータで表現される動作単位からなる階層構造として表現し、画像から得られる視覚情報と動作パラメータを時間的に関連させることによって、ロボットに環境の因果関係をフォワードモデル、逆モデルとして学習させた。このように外界モデルを獲得させることによりヒューマノイドでは初めて2体のロボットによるパス行動学習を実現した。

大阪大学教授1名、助教授1名、助手1名、特任助手1名、学生27名





工学研究科機械工学専攻教授 池田 雅夫 (Masao Ikeda)

## 人に優しいパワーアシストスーツの実用化開発

パワーアシストスーツは、人に装着し、機械的パワーを人のパワーに付加することによって、人の仕事を楽にしたり、人の能力を超える仕事を可能にしたりするものである。付加されるパワーの源は、電動モータによるものが主に考えられている。他には、油圧アクチュエータも考えられる。しかし、本研究では、マッキベン式空気圧アクチュエータを用いている。空気圧アクチュエータは、電動モータや油圧アクチュエータに比べて力が弱く、また可動範囲が狭いという弱点をもつが、それは、人に装着する場合、誤動作が生じた場合の危険が少ないという長所にもなり得る。これが、研究テーマのタイトルに「人に優しい」という語を入れている理由である。そして、本研究では、介護等の状況を考えて、人の力の50%を付加し、1.5倍にすることを目標としている。

マッキベン式空気圧アクチュエータは、ゴムパイプに網をかぶせた人工筋と呼べるものであり、圧力を高めると、人間の筋肉のように太く、短くなる。その短くなる時のパワーを、人のパワーに付加する。このスーツの実用化開発においては、空気圧を生じさせるコンプレッサの小型化と軽量化、エネルギー源である電池の小型化と軽量化、そしてアクチュエータのパワーが有効に働く機械的機構の最適化などがハード面の課題である。

機械的機構の最適化のためには、実現したパワーアシストスーツが、どの程度、人を楽にしているかを計測し、評価することが必要である。人の「楽」という精神的な面を含む指標を計測することは一つの大きな問題である。本研究では、人の筋肉の緊張度をセンサーで

測り、時系列データ処理をすることによって評価する方法を開発した。これによって、機構開発を一層進展させることができる。

また、人の動作意図をどう検知してアクチュエータに伝えるかが、ソフト面も含めた大きな問題である。腕についていえば、人がいま何かを持ち上げようとしているのか、それとも降ろそうとしているのか、それを検知できなければ、パワーアシストできないし、逆のほうに誤検知すると、人の動作の邪魔をするパワーを生じさせてしまう。

人の動作意図を検知する方法は、いくつか考えられる。脳波を計る、筋電位を測る、人がスイッチのオン・オフや音声で示す等である。脳波や筋電位を測るためには、センサーを身体に直接貼り付けることが必要であり、一般の介護者等を実施することは適当でない。また、スイッチや音声で示す方法では、2ないし数段階程度のパワーしか選べず、人の自然な動作の要求に対応できない。そこで、本研究では、筋肉の緊張度を、安価で装着が容易なセンサーで測り、それを情報処理して動作意図を認識し、制御につなげる方法を開発した。

以上より、パワーアシストスーツ本体については、両腕で持ち上げるなどの個別の動作について目標をほぼ達成した。コンプレッサや電池の小型化と軽量化も進みつつあり、実用化に近づいている。安全で安心なパワーアシストスーツを提供するために、今後も企業との共同研究を進めていく予定である。

大阪大学教授1名、特任助手3名、アクティブリンク(株)1名、学生3名



## アクティブリンク株式会社 植田 慶輔

装着性に優れ、安全なパワーアシストスーツの実現を目指し、当社ではマッキベン式空気圧ゴム人工筋を開発のためのアクチュエータに採用した。しかし、マッキベン式空気圧ゴム人工筋は非線形特性を有し、制御が難しいといった問題があった。そのため、非線形制御が専門であり、このアクチュエータを用いて倒立振子を立たせた経験をもつ池田雅夫教授に共同研究をお願いした。研究開発に当たっては、学生も非常に熱心に参加して、センシングおよび評価手法の確立ができ、開発が大幅に進んだ。研究過程において、少し進捗が遅れたところで新たな特任教員の参加を得たことも効果があった。今後、共同で更に研究開発を推し進め、少子高齢化社会の一助となるような製品を世に出していきたいと思う。



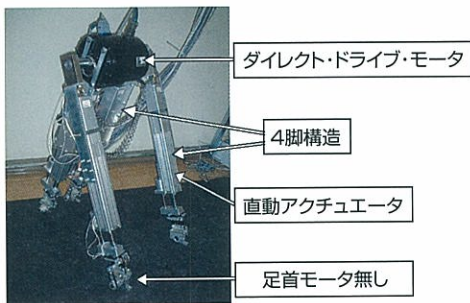
工学研究科機械工学専攻助教授 大塚 敏之 (Toshiyuki Ohtsuka)

## 自由運動を利用した効率の良い歩行機械の開発

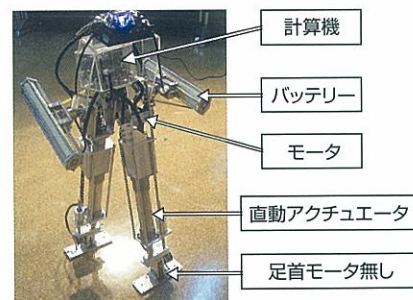
既存の歩行ロボットの多くは歩行運動中常にアクティブ制御されており、本来のダイナミクスを力すくの制御で変更しているといえる。それに対し本研究では何ら力を加えない自由運動を積極的に利用した歩行原理を見つけ出し、その原理に適したメカニズムと制御手法を開発して実験的に検証することを目標とする。まず、歩行原理の基礎として着目したのが自由運動の力学的対称性である。歩行ロボットの両脚を2本の棒が連結されたものだと見なすと、片方の脚が後方で地面を蹴ってから振り出されて前方で地面に着くまでの運動に対称性が見られる。つまり、片方の脚が後方で地面を蹴った勢いで両脚が鉛直線上で重なるまでの軌道が得られれば、その軌道を時間・空間ともに反転させることによって、前方で地面に着くまで残り半歩の軌道が得られる。この運動の間は何ら制御が必要無く、一瞬の蹴りのみで歩行運動が実現できる可能性を示している。このような歩行原理を検証するため、足首と股の関節が自由回転でき、蹴り機構を有する歩行機械を開発した。最初に開発した1号機では、横方向の転倒防止を簡単化するため4脚構造とし、2脚ずつが対になって運動する機構を採用した。股関節にはギアを持たないダイレクト・ドライブ・モータを搭載し、自由回転とトルク入力とを使い分けられるようにした。各脚には直動アクチュエータを搭載し、股関節のモータと共に蹴り動作を行えるようにした。直動アクチュエータは脚が交差する際の躓きを防止するため脚を縮める役割も果たす。1号機の片脚を適当な速度で振り出し、

それが前方に接地すると同時に後方の脚で蹴り動作を行わせると、その後は自由運動によって脚が前方へ振り出され、蹴り動作と自由運動による脚の振り出しとを繰り返すことで歩行が可能なることは検証できた。しかし、1号機の開発では基本原理の検証を最優先し小型軽量化を重視しなかったため、本体のみで重量が30kgあり、その上に制御用コンピュータやアクチュエータ用ドライバ回路、電源を搭載することができず、自立歩行は不可能であった。そこで、次の2号機では全体の小型軽量化に重点を置き、構造とアクチュエータを大幅に見直した。その結果、コンピュータや電源その他の回路すべてを搭載した自立型2脚構造で重量12kgを達成した。さらに、1号機は進行方向の制御機構を何ら持たなかったが、2号機ではステッピング・モータとハーモニックドライブ・ギアによって片脚をわずかにねじる機構を加え、その動作タイミングによる方向制御を可能にした。歩行制御手法としては、自由運動と蹴り動作を用いる点は1号機と同じであるが、次の一步の運動をオンラインのシミュレーションで予測し、最適な蹴り動作を決定するアルゴリズムを新たに開発した。これらの改良を施した2号機によって、自由運動と短時間の蹴りによる完全自立歩行を達成した。今後の展開としては、エネルギー消費の定量的評価とさらなる低減、より一般的な機械系における自由運動を活用した制御原理の確立とが挙げられる。

大阪大学助教授1名、特任助教授1名



歩行機械1号機



歩行機械2号機



産業科学研究所  
 知能システム科学研究部門教授 八木 康史 (Yasushi Yagi)

## 全方位監視システム

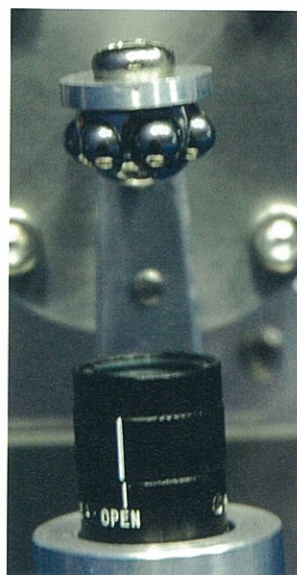
凸面鏡と単一カメラからなる全方位視覚センサは、周囲360度シームレスな観測が同時に可能なことから、自律移動ロボット、テレプレゼンス、バーチャルリアリティ、遠隔監視などの応用分野で注目され活用されてきた。一般に凸面鏡を用いた全方位視覚センサは、単一カメラにより映像を獲得しているため、そのままでは奥行き情報が得られない。しかし、多くの応用場面で奥行き情報は必要とされることから、全方位が観測できるだけでなく、全方位の奥行き情報が瞬時に得られれば、その利用価値は高い。

凸面鏡を用いた全方位ステレオに関する研究としては、複数のカメラを用いる方式と凸面鏡の工夫による方式が開発されている。通常、前者は、システムが大型化することに加え、複数カメラ間のキャリブレーションという問題を持つ。それに対し、後者は、球面または双曲面の反射ミラーの内側にさらに曲率半径の小さな反射部を用意した鏡餅状の凸面鏡を用いる方式で、単一の撮像系で視差画像が獲得できることから、多眼視にありがちなカメラ間での撮像特性(ダイナミックレンジなど)の補正の必要がないという長所を持つ。また、全方位の実時間同時観測を小型のシステムで実現しやすいという利点もある。しかし、実用上は、内側の凸面ミラー部分の映像が小さく、両映像で解像度差があることから、安定な対応探索ならびに視差検出が難しいという問題や、奥行き精度を向上させるために上下ミラーの間隔を広げると、物体深度の関係

からフォーカス調整とセンサの大きさの間に制限が生まれ、小型化にも限界がある。センサの小型化は、セキュリティ、自動車などの大市場での利用が期待でき、その波及効果は大きい。

本研究では、センサの小型化を考慮しつつ、視差検出の安定性を高める新たな全方位ステレオとして、複数の凸面鏡を用いた複眼全方位センサを提案した。本センサは、狭基線長ではあるが、上下視差だけでなく、様々な向きの複数基線をもつマルチベースラインステレオシステムを構成することができる。よって、上下鏡餅状の全方位ステレオに比べ、安定した視差検出が可能な小型センサが実現可能である。ただし、凸面鏡を複数用いた場合、各凸面鏡の射影像が画像中で占める割合が小さくなるため、角度分解能も低い。そのため、安定した特徴抽出ができるとは限らないことから、多眼視間での正確な対応付けを仮定した奥行き知覚の方法は適さない。そこで、本手法では、エピポーラ線上の対応点探索を行わずに、基準距離に対する遠近を判定する手法を新たに開発した。本手法は、任意の一对の凸面鏡像に対し、一方の像面は遠方シーンが映されているとの仮説(無限遠仮説)の基に他方の像面に射影変換することで、画像中での視差を発見する手法で、実時間での物体検出が可能である。

大阪大学教授1名、助手1名



複眼全方位センサとその入力画像





工学研究科応用化学専攻教授 馬場 章夫 (Akio Baba)

## ナノ構造分子制御をツールとする物質創成

化学の最大の特徴は、まったく新しい物質を創成できる事であり、新しい材料や医薬品などの開発の根源力となる。さらに、その創成手法の開発においても、環境や資源問題まで解決することが必要となっており、高度な化学力が求められる。分子の構造を制御しながら新しい機能を持った物質を作り出すことの実証と、従来の手法ではなしえなかった物質変換を可能とする合成法の開発が本研究の目的である。分子構造、分子間の相互作用を精密に制御することによりさまざまな機能を計画的に持たせることができれば、理想的な物質創成・物質変換が実現できる。これがボトムアップのナノ構造制御であり本研究の基本となる思想である。本研究で具体化しようとしているのは、ナノ構造制御による触媒創成と新物質変換、分子間の相互作用を制御する機能物質の開発、ナノ材料の創成などである。加えて、これらの物質創成法の確立には、前提として環境問題や資源問題に貢献できるプロセスであることが必須条件となる。21世紀の化学技術は、この環境エネルギー問題の克服が大きな使命であり、本プロジェクトでそのきっかけをつかみたいと考えた。

### 1 簡略型分子変換触媒の開発

大量生産されている製品製造プロセスの革新は、資源・エネルギー・安全などの面で大きな負担軽減となるため、環境問題解決の大きな鍵となる。下図には原油からの物質変換を例示したが、材料、ポリマー、燃料、化学製品、燃料などの製造プロセスを一新できる触媒開発が達成できれば、炭素資源の利用は一変する。ナノ構造制御による新触媒開発は、新しい物質創成と未利用物質の活用に

直結した課題である。本プロジェクトでは、多環芳香族化合物の1段合成、炭素化合物の活性化による新規変換プロセス、アルコールやカルボン酸を原料とする直接変換法など、すべて新思想に基づく触媒設計により実現してきている。

### 2 分子配列制御に基づくナノ機能材料の創成

従来の単分子や高分子では発揮することのできない機能を発現するために、分子の相互作用を利用できる分子集団からなる機能材料創成を目指している。分子集団を形成した後に強固な化学結合を形成させる手法で、完全な規則性を持った高分子材料の製造を可能とした。また分子集団そのものの機能を明らかにし、分子間の相互作用の形態をコントロールすることにより、機能を調整する手法を見出して光学的な機能材料への応用展開を試行している。

### 3 新規有機トランジスタなどの開発

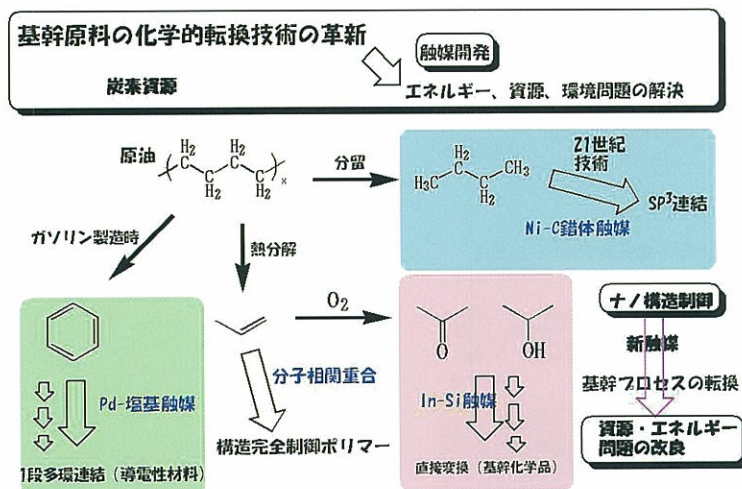
21世紀の材料として期待されている大型フレキシブルディスプレイ実現の鍵となる有機トランジスタの開発を行った。有機材料の創成と有機材料の特性を制御して、その実現化にむけて大きく前進した成果を得た。

### 4 ケイ素ポリマーとの反応を利用したナノサイズ金粒子の形成

ナノサイズの微粒子を材料内に取り込みながら形成させる手法の開発に成功し、その光学的な応用展開を進めている。

上記のほかにも、電気化学、固体材料化学、環境適合型の材料開発など、多くの成果をあげ、マッチングファンドなど企業との連携により多くの化学プロジェクトが成果を挙げている。

大阪大学教授5名、助教授4名、講師1名、助手4名



工学研究科応用化学専攻教授 馬場 章夫 (Akio Baba)

## 1 簡略型分子変換触媒の開発

本プロジェクトでは従来多くの段階を必要としていた分子変換方法を、簡略化し、容易に目的物を得る方法を開発することを目的とした。多段階分子変換反応は手堅い反応であるが、問題点を多く含む。たとえば各段階で反応温度が異なる場合は、上げる場合も下げる場合も、いずれについても多大なエネルギーを要する。また、溶媒を変換する必要がある場合は、環境汚染となる大量の有機溶媒を外界に排出する。酸性から塩基性へと反応条件を変更する場合も排泄物を生み出すことになり、大きな労力を要する。しかしながら多段階反応を簡略化することは単純な操作では達成できない。既存の基質と反応剤を混ぜ合わせるだけでは、目的物が得られないばかりか反応がより複雑となるだけである。簡略化のためには新たな反応剤や触媒を開発する必要がある。そこで我々はインジウム金属から新たに創製した反応剤、触媒を適応することにより、ワンポットでの分子変換反応を目指した。目的反応として水酸基の変換反応とアルドール直接合成を行った。これらの分子変換は医薬品や有機材料の大量合成に直結する必要不可欠な技術であり、簡略化の及ぼす貢献は、特に大きなものが期待される。(図1)

まず水酸基の直接置換反応について述べる。水酸基は反応性が低く、それ自身では分子変換することは難しい。水酸基を一旦、脱離性の高い官能基に変換した後、求核試薬と反応させる必要がある。しかしこの教科書的な反応でも、各段階で反応条件が異なり、多大なエネルギーロス、廃棄物を生じる。そのような背景からケイ

素反応剤—インジウム触媒複合系を見出した。これにより、水酸基の直接塩素化やクロスカップリング反応を達成することができた。本反応は水酸基の直接変換法として画期的なものである。(図2)

次にアルドール合成の簡略化を目指した。本反応も基本的に重要な変換手法である。アルドールを生成するためにはケトンを反応性の高い金属エノラートに変換させた後、より選択性の高い別の金属エノラートに変換分離し、最後にアルデヒドと反応させる。多段階反応であるため、それに伴うエネルギーロス、廃棄物による環境汚染は甚大である。(図3)このような背景から不飽和ケトンとアルデヒドとから直接、立体選択的にアルドールを与える方法を開発した。インジウムヒドリドというオリジナルな金属反応剤が本目的達成に寄与した。この反応剤(還元剤)は反応性の高いアルデヒドに優先してエノンを還元できる特異な官能基選択性をもつ。これにより系中で金属エノラートが発生し、アルデヒドと反応させることができた。改良法としてヒドロシランを水素源に用いると、塩化インジウムが触媒的に作用した。その結果、今までにない高い立体選択性を可能とした。インジウムヒドリドと同じような性質をハロゲン化スズヒドリドに見出すことができ、ハロゲン化スズヒドリドを用いた触媒的な還元アルドール反応については、現在においても研究を展開中である。

大阪大学教授1名、助教授1名、特任助手1名

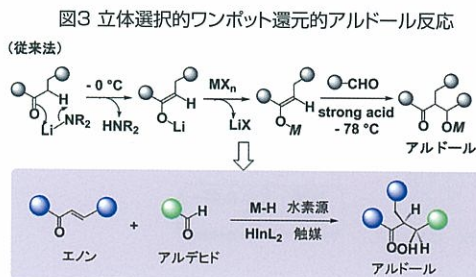
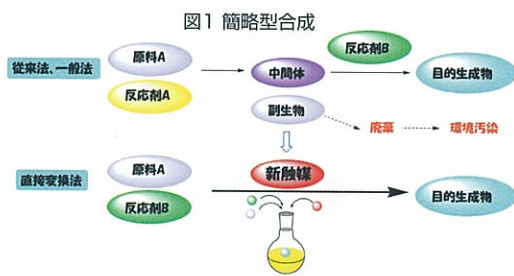


図2 水酸基の直接的クロスカップリング反応の確立





工学研究科生命先端工学専攻教授 宮田 幹二 (Mikiji Miyata)

## 2 分子配列制御に基づくナノ機能材料の創成

日常生活の積み木では、いろいろな部品を自由に組み合わせて、家、自動車、船などの物体を作る。同様に、ナノ環境では、異種の分子を部品として集合させると、分子単独では現れない性質をもつ分子集団を創成することができる(図1)。このボトムアップ手法で、我々は新しいナノ機能物質の合成に挑戦し、材料開発への展開を試みた。例えば、(1)生命の核酸に学ぶ情報複製鋳型重合の開発、(2)医薬品合成に応用できる光学異性体の四点認識型高効率分離法の開発、(3)光電子物性発現に適した有機結晶構造の精密制御法の開発、などの研究を行い、以下にその成果を要約する。

### (1) 生命の核酸に学ぶ情報複製鋳型重合の開発

重合反応はモノマーを取り巻く反応場の環境によりその反応性が大きく変化する。結晶場を利用したトポケミカル重合では、分子の運動性が制御されるため、立体規則性の高い高分子を合成することが可能となる。

我々は本研究の中で共通周期0.5nmをもつ三重層超分子複合体を発見した。この複合体では、高分子鎖、水素結合、ジエンモノマー、アルキル鎖の周期が皆同じで、そのために重合反応がほぼ完全に立体規則的におこる。これにより、鋳型としての距離設計が容易で、キラル炭素の絶対構造の複製転写を調べることができた。したがって今回、生命系のDNA等の鋳型重合に一步近づくことができたと考えられる。今後、さらに複雑な情報転写を目指す(図2)。

### (2) 光学異性体の四点認識型高効率分離法

これまでキラル認識において3つの原子位置が決まれば十分と

されてきたが、本研究において4つの原子の位置を決定しなければならない系があるということを明らかにすることができた。基質が空間に取り込まれ認識される系、すなわち3次元の広がりをもつ認識空間(チャンネル、大きなパンク)では3点を決定しても、残りの1点の方向によってはキラリティを決定することができない。本研究においては、ステロイド誘導体を用いることにより、チャンネル状空間を構築し、その中で4点すべてを決定できる物質の創製に成功した。これにより、医薬品などに用いられる芳香族アルコールなどの化学物質の高効率のキラル分割を達成することができた(図3)。

### (3) 光電子物性有機結晶構造の精密制御法の開発

有機発光体は有機EL素材やオプトデバイスなどへの応用が考えられ、現在大変な注目を集めている。これまでに溶液中における有機発光体の研究は多数報告されており、機能性分子の設計・合成によって物性の向上、新機能の付加が行われてきた。さらに、結晶状態での有機発光体の研究はデバイスへの利用などに直結するため非常に有用である。今回本研究において蛍光物質の結晶状態における立体構造と分子配列を制御することに成功した。これにより、蛍光発光強度と蛍光発光色の変調が可能となった。このような固体状態での物性変調により、構成分子の化学構造だけでなく、その分子の固体状態における分子配列を制御することで、より効果的に行うことが可能であるということを実証することができた(図4)。

大阪大学教授1名、助手1名

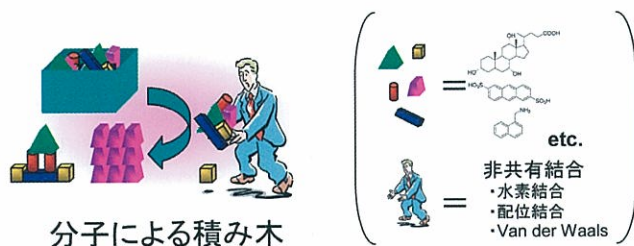


図1

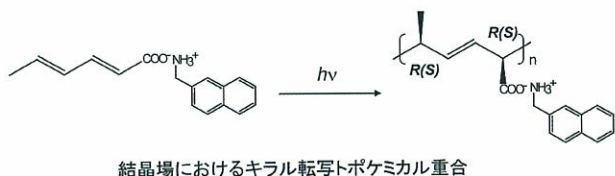
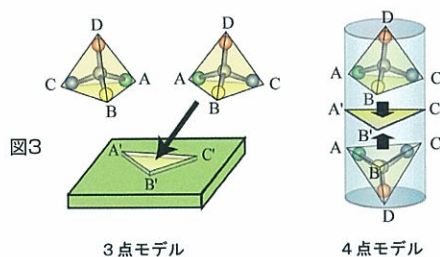
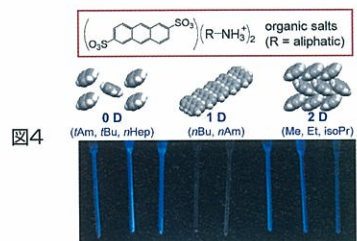


図2



有機塩による固体蛍光発光可変システム



e-mail:miyata@mls.eng.osaka-u.ac.jp [contact us](#)



工学研究科生命先端工学専攻教授 横山 正明 (Masaaki Yokoyama)

## ③ 有機半導体/金属界面の電子トンネル注入にもとづく新規有機トランジスタの開発

有機半導体と呼ばれる一群の有機物質は、これまでに複写機、レーザープリンタの感光体材料として実用化に至り大きな成功を遂げた。現在、これらの有機半導体は有機電界発光素子(OLED)に展開されディスプレイとして実用化が始まっているが、フレキシブルで大面積化が容易な有機材料の特長を活かした電子ペーパー、フレキシブルディスプレイの構築を目指して、有機トランジスタの開発が盛んに行われている。有機トランジスタ研究の主流は、無機半導体で一般的に用いられている電界効果型トランジスタ(FET)構造であるが、この構造はキャリア移動度が低い有機半導体には不向きで、低電圧駆動、高速応答が難しい。

ナノ構造分子化学プロジェクトでは、2003年度テーマの一つとして、上記の課題を解決する試みとして、有機材料の特性を考慮した膜厚方向に流れる電流を制御する新しい原理に基づく「縦型トランジスタ」を探索し、我々が世界に先駆けて見出した有機/金属界面ナノ領域で起こる光電流増倍現象の原理<sup>1)</sup>をもとに、金属電極から有機薄膜への増倍電子トンネル注入に着目した新しいタイプの「電荷注入制御型有機トランジスタ (Charge Injection Control Transistor, CICT)」の開発を取り上げた。CICTのモデルとなった電流増倍現象は、光照射によって生成したホールが有機/金属界面に蓄積して界面ナノ領域に高電界を形成することにより電極から電子が大量にトンネル注入される現象である。この増倍電子注入の引き金となる光生成ホールを有機薄膜中に設けた第3の電極から供給できれば、僅かなホール注入で大量の

電子注入を引き起こすことができる(Fig.1)。そこで、光電流増倍現象を示す有機膜中にストライプ状のホール注入電極を挿入したCICTの作製を試みた。

素子は、ITO電極基板上に真空蒸着によりMe-PTC有機薄膜(上下500nm)とアルミニウム(ストライプピッチ20nm)挿入電極を作製した。増倍電子注入の起こる上部電極をエミッター、挿入電極をベース、下側電極をコレクターと呼ぶ(Fig.2)。ベース電圧印加とともに大きなコレクター電流が観測され、約20倍の電流増幅(注入電流に対するコレクター電流増幅比)と、有機EL素子を駆動可能な $2\text{mAcm}^{-2}$ を超える大きな電流変調、ならびに80Hz程度の応答が観測され、従来の横型FET構造に比べ大電流、高速応答が実現できることを示した(Fig.3)<sup>2)</sup>。しかしCICTで観測される電流増幅率は同じメカニズムの光電流増倍現象に比べ小さいことから、CICTの性能向上を検討した。電流成分解析の結果、その原因がベース-コレクター間を流れる漏れ電流にあることを明らかにし、問題解決のためにベース電極下を全て絶縁層にしたメサ型構造を提案し、リングラフィー技術を用いてSi基板上にメサ型構造のベース電極を作製した。その結果、漏れ電流を大幅に減少し、電流増幅率を600以上に向上させることに成功した。

1) M. Hiramoto, T. Imahigashi, M. Yokoyama, *Appl. Phys. Lett.* 64, 187 (1994).

2) K. Nakayama, S. Fujimoto, M. Yokoyama, *Appl. Phys. Lett.*, 82, 4584-4586 (2003).

大阪大学教授1名、助手1名、学生3名

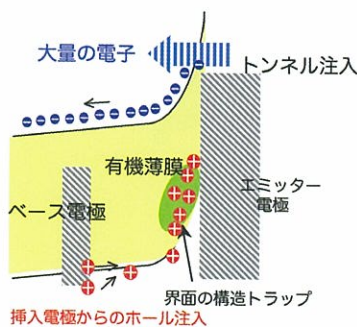


Fig.1 Basic Principle of CICT

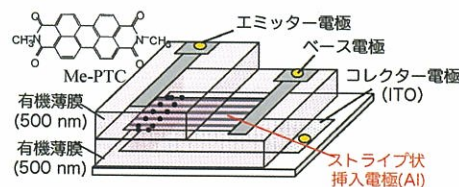


Fig.2 Device structure.

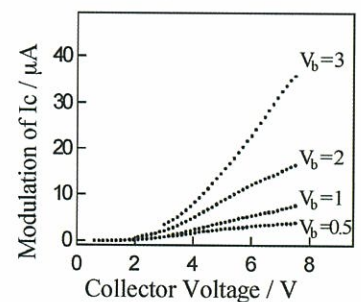


Fig.3 Transistor Characteristics of CICT.

#### 4 ケイ素ポリマーとの特異な反応を利用したナノサイズ金粒子の形成とその応用

従来の炭素系ポリマーと違い、主鎖にケイ素-ケイ素結合を有するポリシランは、主鎖のケイ素連鎖におけるσ共役の特徴付けられる新しい物理的ならびに化学的性質を示す。我々は一連のポリシランの物性研究の過程で、UV光照射ポリシラン膜上に蒸着した金薄膜が加熱によってポリシラン膜中に金コロイドとして取り込まれると云う全く新しい現象を見出し、この金コロイド形成にともなうポリシラン膜の物性変化を活かした応用展開を行った。

金コロイド分散膜の形成過程は、ガラス基板上に形成したポリメチルフェニルシラン(PMPS)膜にUV光を適度に照射し表面を僅かに分解させた後に、Au蒸着薄膜を約10nm形成する。この試料を加熱処理すると、UV未露光部分はほとんど変化を示さないのに対し、UV光前露光部分は約90℃で急激に赤紫色へと変色する。この赤紫色の膜の吸収スペクトルは、520nmにピークを有する金コロイド(微粒子)の表面プラズマ振動吸収帯を示すことから、蒸着薄膜が加熱処理により金コロイドへと変化したと推測される。実際に試料のTEM観察から、平均粒径約10nmの金コロイドが形成されていることを確認した。また、この反応時にPMPS/Au積層膜における表面反射率は約100%から30%まで低下する。このことは光記録媒体への応用の可能性を強く示唆する。

金コロイド形成反応は熱により引き起こされることから、光記録プロセスとして利用するためには、光-熱変換層の導入が必要である。そこで、チタンルフトロシアニン(TiOPc)顔料蒸着膜を基板とPMPSとの間に設けたAu/PMPS/TiOPc積層デバイスを構

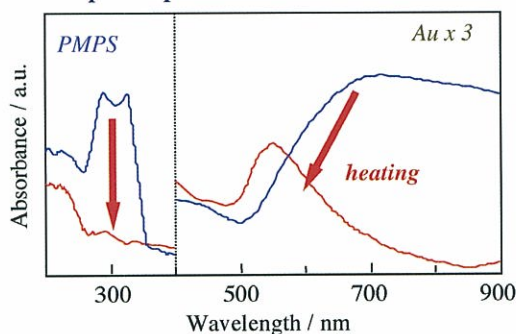
築し、集光した半導体レーザー(波長830nm)による記録特性の評価を行った。レーザー光書き込みにより反射強度の低下が認められ、通常のCD-Rと同様の反射率低下型の記録ビットが形成可能であることが示された。また、感度はPMPS紫外光前露光処理に依存し、記録がコロイド形成反応に伴うものであることが確認された。記録後の試料には、数マイクロメートル径の明確な円形ビットの形成が観察された。さらにPMPS中に分子分散可能な化合物を用いることで、Au/PMPS界面での光吸収を可能とし、記録ビットの縮小化も達成した。

今回観察されたPMPS/Au積層膜における金コロイド形成は、PMPSにUV光を適度に照射した部分でのみ生じる。この選択的な反応を利用した金コロイド分散膜および金薄膜の微細パターンニングを試みた。解像度としては、約2.5μmのラインペアーの形成を達成している。この残存したAu導電ラインは、十分な導電性を示し、隣接間のリーク電流もなく微細電極パターンとして使用可能であることが示された。さらに、この現象により得られた金コロイド分散膜が比較的良好な三次非線形光学感受率( $\chi^3=3 \times 10^{-9}$ esu)を有していることが確認され、微細パターンニングと組み合わせることで光学回路の構築が期待できる。

1) 長山智男, 横山正明, 機能材料, 22(3), 31-39(2002).

大阪大学教授1名, 助手1名, 学生2名

Absorption spectra



Photograph of sample





先端科学イノベーションセンター教授 大森 裕 (Yutaka Ohmori)

## 高効率有機発光材料の開発

将来において有望視されている共役高分子半導体をベースとする高分子系発光素子に着目し、注入電荷の再結合により生成される励起状態エネルギーを高効率で発光として取り出せる新規な金属錯体の探索、高分子と金属錯体の分子レベルでの複合化による発光効率の向上、および高効率・高耐久性高分子発光素子の実現を目指して検討を行った。

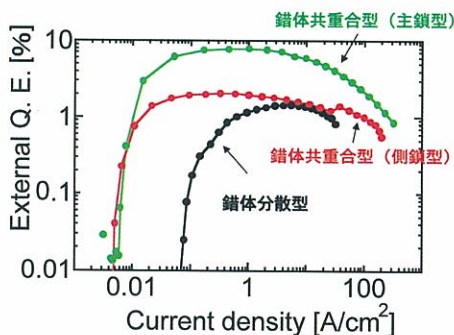
共役系高分子ゲストとして一連の宿主共役系高分子を探索した結果、フェニルカルバゾールを主鎖に持つ共役系ポリマーが最適であることを見出し、これをゲスト高分子として、種々のイリジウム錯体を添加した系についてEL特性を検討した。共役系ポリマーにリン光発光部位であるイリジウム錯体を重合した各種錯体重合ポリマー材料について、EL素子を作製し、発光輝度、効率等の検討を行い、高輝度化・高効率化のための素子構造を検討した。その結果、錯体重合型ポリマーを発光層として用いると、錯体混合型素子に比べて素子は高効率となり、さらにセシウム電極を陰極として用いることにより、錯体重合ポリマー材料素子の効率は大幅に向上した。また、高分子ポリマー中にしめる錯体濃度の

最適化により、効率は向上することがわかった。

これらの検討結果をもとに錯体の重合部位に関して検討した結果、共役ポリマーの主鎖部分に錯体発光部分を重合した主鎖型・末端型においては、非常に高効率となり、末端型では最高輝度14,000cd/m<sup>2</sup>、最大発光電流効率32cd/A、外部量子効率9.7%、主鎖型では素子作製条件の厳密化により最終的には最高輝度12,000cd/m<sup>2</sup>、最大発光電流効率36cd/A、外部量子効率11%が達成できた。図1に共役ポリマーに錯体を分散、側鎖、主鎖に重合した3種類の素子の外部量子効率の比較を示す。このことにより単層型で先に検討した積層構造型と同等の高効率が達成できたことが示される。

これらの成果は、本プロジェクトの最終目標である共役系高分子中にリン光性発光錯体を分子レベルで組み込んだ高効率発光材料の開発のための分子および材料設計指針に関して有用な多くの知見を示唆するもので、今後これらの錯体を組み込んだ高分子発光材料の開発につながる成果が得られた。

大学院工学研究科教授2名、先端科学イノベーションセンター教授1名  
助手1名、特任研究員2名、住友化学(株)4名



## 住友化学株式会社

本共同研究では非常に有意義な研究成果を得ることができました。

阪大FRCでは素子構造などの検討と合成のアドバイスをいただき、明確な役割分担をすることで、素早い研究開発ができました。このような研究開発体制の中で、当時最高の発光効率36cd/A、外部量子効率11%を得ることで、高効率な高分子材料の開発という目標を達成することができました。以上のような大きな成果を得ることができ、弊社における今後の研究開発に大きな弾みとなっております。ありがとうございました。



工学研究科応用化学専攻講師 安田 誠 (Makoto Yasuda)

## 実験と理論の両輪で新金属反応種をつくる

化学反応は極めて複雑である。実験者はフラスコに反応試薬、触媒などを入れ、ある条件を経た後に分離精製し生成物を得る。しかし反応進行中の詳しい分子の様子を見ることはできず、「ブラックボックス」の中である。この中身を実際に「見る」ことができれば、反応を真に理解することになる。本研究では、得られた実験結果を理論計算によりコンピュータを用いて反応を「見る」かのごとく解析し、その情報をもとに即座に実験検討を遂行してきた。このような実験と理論の双方向的検討を繰り返すことで、迅速に新反応の開発を進めることができた。金属と炭素の結合を有する有機金属化合物は反応の制御因子が多岐にわたるため一般に制御は複雑である。本研究を通して有機金属反応のブラックボックスの中身を明らかにした。以下にその詳細を示す。

トリアルキルスズエノラートは合成的に広く利用されているよく知られた化学種である。これは通常4配位構造を有する。このスズエノラートに適切な配位子を添加すると、5配位型の高配位化スズエノラートが発生することを我々はスペクトルにより観測することに成功している。今回、この化学種の性状を計算化学により詳細に明らかにした。これによりスズ金属中心のルイス酸性の低下および、エノラート反応点の極性増大が見られた。またHOMOの準位の上昇が見られた。本研究において、類似金属化学種を含めて、最も高いレベルでの理論計算による有機金属化学種の性状解明が達成された。すなわち有機金属化学分野への基盤的知見を広く与えたといえる。さらに高配位化スズエノラートを触媒的に発生させる

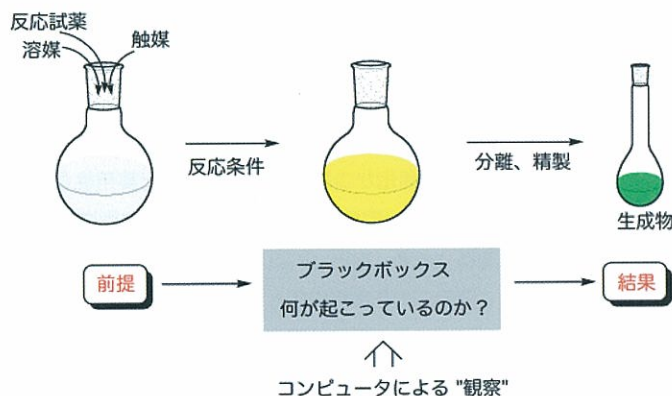
系を新たに構築し、これまで熱力学的に不利なプロセスのため不可能とされてきた触媒的なケトンエノラートの不飽和エステルへのマイケル付加を世界で初めて達成した。計算化学による機構解明により、スズの特異な生成系安定化効果が実証された。

周期表にある金属の種類には限りがあるため、飛躍的な新反応種の開発を目指し、複数金属種の相互作用を利用した反応場の構築を目指した。インジウム (In) とケイ素 (Si) はそれぞれ単独では活性を示さないが、複合することで新しい反応場を供する新反応を見出すことができた。この複合作用を理論計算により詳細に検討を行ない、高いルイス酸性状態を生じうることを証明した。この複合系により、これまで困難とされてきたアルコールの触媒的置換反応を達成した。これらの反応は天然に存在する最も豊富な官能性化学種であるアルコールを出発とするため社会的インパクトが極めて高い。

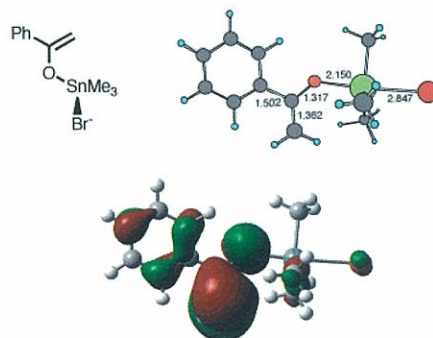
構造的に規制を有するこれまで類例の無いかご型金属化学種を創成し、その性状を明らかにした。計算化学により、LUMO準位の著しい低下が見られ、従来にはない新型のルイス酸として用いる事が可能なる事を明らかにした。

このように、金属環境を精密に制御することを実験と理論の双方向からのアプローチにより、迅速かつ高いレベルで新金属反応種の創成と新規反応開発を行った。この手法は今後さらに発展させていくことが期待できる。

大阪大学講師1名、(株) 菱化システム1名



理論計算によりフラスコの中を「見る」





工学研究科ビジネスエンジニアリング専攻教授 座古 勝 (Masaru Zako)

## 薄膜の力学的物性評価と薄膜デバイスの寿命評価手法の開発

有機フィルムをベースとした薄膜多層回路は、次世代の情報・通信機器に対し注目されているが、製造プロセスで発生する薄膜中の残留応力や薄膜の物性値など、従来技術では計測が困難であり、その計測手法の開発が望まれている。しかし、多くの技術的課題がある。また、設計に対しナノオーダーの薄膜構造に従来の力学を適用するには限界があり、大きな障害となっている。そこで、有機フィルムをベースとした次世代情報・通信機器用薄膜デバイスの力学的特性評価手法の確立を本研究目的とし、実験および数値解析の両面から以下の4項目の研究を実施した。

### (1) 薄膜の基本的特性評価手法の開発

実測と数値解析手法を組み合わせ、製造プロセスを考慮した薄膜構造の力学的物性値ならびに薄膜応力を同定する手法を構築した。具体的には、基板の反りの実測値と有限要素解析から膜の応力分布ならびに機械的特性・熱的特性を同定するものである。特に、厚みの異なる2種類の積層体を用いることにより、成膜時に生じる残留応力と薄膜物性値同定を高精度かつ簡便に実現することを可能としている。その成果を特許出願・公開している。

### (2) 薄膜デバイスに特化した装置開発、試験実施

薄膜デバイスの最大の特徴はフレキシブル性を有する構造にある。引張りや曲げ(片振り・両振り)、ねじれが繰り返し作用する場合の変形状態ならびに疲労寿命を評価する試験機は皆無であった。そこで、ステッピングモータとリニアロータリープッシュを組み込んだ両振り曲げ・ねじれ方式の機械的疲労試験機的设计・製作

を行った。さらに、破壊プロセスの解明を目的に、疲労試験機に観察装置(レーザ顕微鏡)を組み込み、損傷進展のその場観察を可能とするクラック測定装置を設計・製作した。動作確認を行うとともに試験機として有効である成果を得ている。

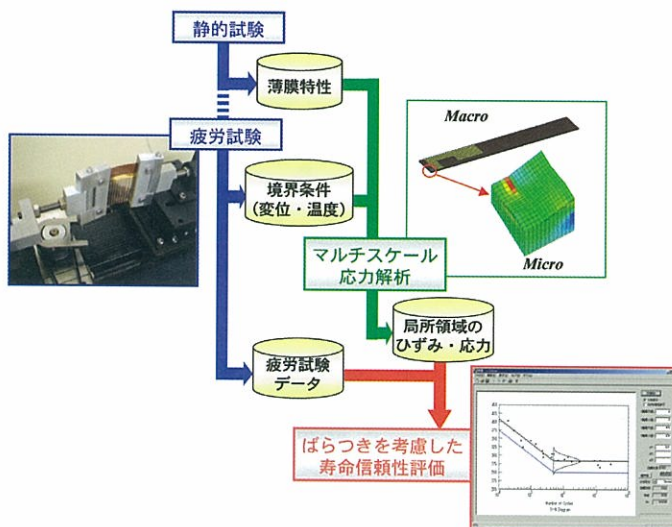
### (3) マルチスケール解析による局所応力評価手法の開発

薄膜デバイスは、全体構造(基板)と局所領域(薄膜素子)とのスケール差が著しく、強度評価に要する時間や解析コストが膨大になる問題点がある。そこで、マクロとミクロの領域を階層的に重ね合わせ微細領域の挙動を評価する数値解析手法の構築を行った。特に、マクロ、メゾ、ミクロの異なる領域における有限要素メッシュを多段階に重ね合わせ、巨視的な変形状態と微視的な力学的挙動の把握を可能とする有限要素解析プログラムを開発した。本手法を薄膜抵抗体構造に適用し、薄膜デバイスの局所応力評価が可能である知見を得るなどの成果を得ている。

### (4) 設計への信頼性工学適用

薄膜デバイスのフレキシブル構造に起因する変形状態および疲労寿命を評価するため、開発した片振り・両振り曲げ負荷式の疲労試験機を用いて、薄膜デバイスの疲労寿命データの取得を実施した。さらに、信頼性工学に基づいて強度のばらつきを確率変数とし、小標本の疲労試験結果を基に、曲げ疲労における設計基準の評価を実施した。本手法により、破壊確率および信頼水準を考慮した設計強度の評価が可能となる成果を得ている。

大阪大学教授1名、助教授1名、学生3名、松下電器産業6名



## 松下電器産業株式会社 松浪 隆夫

薄膜実装デバイスでは、応力や変形の評価部位の非常に小さく、実験でも測定困難な場合がある。また、研究開発の期間およびコストが膨大となる問題点がある。これに対し、本研究のマルチスケール解析設計技術は、従来の煩雑な解析手法に比べ、簡易化かつ高精度化を促すなど実用性が考慮されており、ミクロ現象がマクロ特性に及ぼす影響の解明などが期待される。また、少ない回数かつ簡便な実測を行うだけで薄膜応力を推定可能とする点や、信頼性工学に基づき少ない試験片での実験結果より設計用S-N曲線を決定できる点など、極めて有用性が高い。開発されたシステムを既に使用しており、実製品を通じて社会への貢献を促進するものと考えている。





工学研究科マテリアル生産科学専攻教授 馬越 佑吉 (Yukichi Umakoshi)

## ナノ複合化による新材料創製

ナノ寸法への極限化は超高強度をもたらすが、靱性劣化・材料信頼性低下といったように、時として他の要素特性を劣化させる場合がある。また、機能性薄膜の多層複合化、単層膜内での複合配列化により単層膜の特性を遥かにしのぐ複数機能を有する高機能材料の創製が期待できる。これらナノマテリアルの力学物性、機能物性、材料信頼性は、ナノレベルの格子欠陥の構造、運動挙動ならびにナノ組織と密接に関係する。また、優れた機能、物性を有していても、実用化を視野にいれると、ナノレベルからメゾ・マクロレベルへの形状付与が必要となる場合が多々ある。本研究班では、固有の極微細構造・組織、ナノ物質特有の機能の制御およびその創製プロセスの開発のみでなく、実用レベルのスケールのメゾ・マクロまで発展させ、複数の優れた要素特性を備えた複合機能化ナノマテリアルを創製するための複合化、材料協調設計の確立を行う。また、これらナノマテリアル材料のナノ欠陥計測から機能・特性とその信頼性評価ならびに新たな評価法の開発を行う。具体的には、以下のテーマに取り組んでいる。

### 1 高機能多層膜複合マテリアルの創製

機能性薄膜の多層複合化による新たなスイッチングセンサーの開発、トンネル磁気抵抗効果の発現、量子細線の創製、配列磁性体の新しい物性発現と超高集積メモリスルへの応用展開を目指す。

### 2 汎用新陽電子消滅計測システムの開発

水素吸蔵合金、カーボンナノチューブ等の機能性材料から、金属間化合物等の構造材料について、原子空孔、水素等の侵入型元素等の

挙動ならびにナノ欠陥の観察を可能にするための陽電子消滅装置の開発と、ナノ欠陥観察による材料信頼性評価法の確立を目指す。

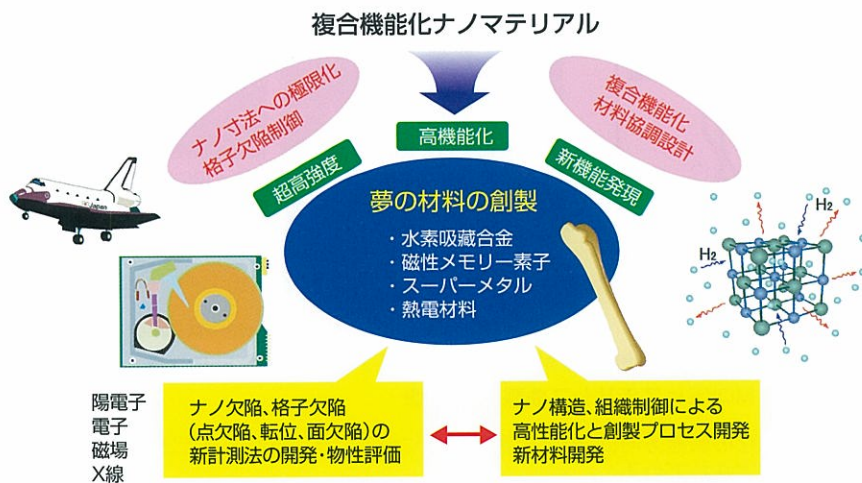
**3 原子レベルでの構造揺らぎの制御、ナノ構造解析と力学特性、信頼性評価**  
高分解能電子顕微鏡によるナノ領域の構造揺らぎ観察ならびに力学特性との相関関係の解明と、ナノ組織制御による高強度、強靱化を達成する。また、電子線照射による非晶質の結晶化過程制御によるナノコンポジット組織創製と高機能化を図る。

**4 強磁性形状記憶合金におけるナノ構造の磁場制御**  
強磁性形状記憶合金における磁氣的ドメインと結晶学的ドメインとを結合・融合させ、それらを磁場により制御することで、磁場に高速応答して巨大歪を発生する新機能性材料の創製を目指す。

**5 高性能ナノコンポジット熱電変換材料の創製**  
メカニカルアロイング、粉末焼結によるナノコンポジット組織制御と微量元素注入による高性能熱電変換材料の創製と実用レベルの部材への加工、成型技術の開発ならびに多元化による単相化促進効果による高性能化を実現する。

**6 ナノマテリアル構造健全性評価のための第一原理構造解析法の開発**  
ナノマテリアル創製に必要な不可欠な第一原理計算の実用的な大規模化のための方法論の確立、ナノオーダーの欠陥場観察成果と直接的な比較検討を通じての方法論の妥当性の検証ならびにナノマテリアル構造健全性の評価を行う。

大阪大学教授6名、助教授4名、講師2名、助手7名、九州大学助手1名





工学研究科マテリアル生産科学専攻 山本 雅彦 (Masahiko Yamamoto)

## 1 高機能多層化複合ナノマテリアルの創製

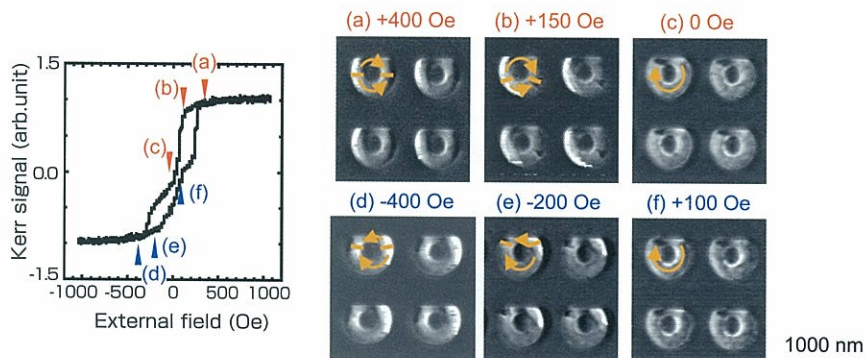
近年の科学技術の進歩にともない、より高次元の機能を有する電子デバイス技術の実現が要求されている。我々は、上記のような新機能デバイスの要素技術を確認するために、ナノメートルスケールの厚さを有する磁性材料からなる多層膜、ナノメートルスケールの平面的スケールを有する微小磁性体の創製と、それらの材料物性の検討を行ってきた。要素技術としては、(1)超高密度磁性メモリ基本技術、(2)極限磁気記憶素子基本技術、(3)超高感度センサ基本技術、(4)新機能デバイス基本技術、である。

(1)は、磁性材料の磁化の向きを情報媒体とした磁性メモリに関する研究である。磁性メモリは、情報の不揮発性、高速書き込み・読み出し、耐衝撃性などの特長を有している。超高集積化が可能な情報メモリデバイスに向けた磁性メモリ基礎技術について詳細な検討を行い、(i)漏洩磁界のないリング型磁性メモリセルを提案し、(ii)リングの一端を切除して非対称リング型メモリセルとすることで、磁化の向きを制御することに成功した。その結果、磁化の時計回りと反時計回りを情報の「1」ビットと「0」ビットに対応させることが出来ることを示し、次世代用の新型のリング型磁性メモリセルとして提案した。(iii)さらに、リングの底に円板を組み合わせたカップ型磁性メモリセルを考案して、スイッチング磁界を低減することに成功した。これにより、低い磁界での情報の書き込みを可能とし、

消費電力の低減に寄与する磁性メモリセルを構築した。(iv)これらの開発と並行して、磁性メモリセルの磁化状態、磁化過程の詳細を、磁気力顕微鏡による観察、マイクロ・マグネティクス・シミュレーションによる解析などにより、ナノ磁気物理の観点から明らかにした。

(2)は、原子スケールのステップを有する基板上での、磁性体の自己組織化現象を利用して、不連続、かつ規則的なナノ構造を有する磁性体の集合組織を作製し、次々世代の磁気記憶素子の基本技術の構築を目指す研究である。これまでに、3nm以下の超薄膜領域での磁性薄膜の結晶成長、その結果起こる表面構造と磁気物性の対応関係を、成長温度、膜厚などの因子を中心に詳細に明らかにし、ナノ構造及び磁性制御を可能にする因子を解明した。(3)と(4)は、磁性層と希土類金属層・半導体層・絶縁体層との積層化による新機能の創出とそれをを用いた新デバイスの提案を目指した研究である。磁性層と希土類金属層との積層複合化では、水素を吸蔵させることによって磁性層間の磁氣的結合状態を変化させることに成功した。また、ワイドバンドギャップを有する半導体であるAlNに磁性元素(Cr, Mn, V, Co)を添加した薄膜では、添加量と磁性の関係を明らかにして、超高感度センサー、機能デバイスに向けた基礎データを得ることが出来た。

大阪大学教授2名、助手2名、大学院学生(13)



強磁性/反強磁性 非対称リング型磁性メモリセルの磁化状態、MOKEヒステリシス曲線とMFM像

磁化の回転方向は、磁場の掃印方向に依存せず、時計回りであり、固定されている。

▶反強磁性層により、磁化の向きの制御が可能になった。



工学研究科マテリアル生産科学専攻教授 白井 泰治 (Yasuharu Shirai)

## 2 汎用新陽電子消滅計測システムの開発

電子材料・構造材料を問わず、ほとんどすべての実用材料の機能は、ナノスケールの原子配列とその乱れによって支配されている。しかし、このナノ欠陥を計測可能な手法はきわめて限られている。特に、内部のナノスケールの欠陥を非破壊でしかも高感度で検出できる方法は、陽電子消滅以外にはないと考えられる。

陽電子消滅法の優れた点として、

- 1) 非破壊でサブナノスケール即ち原子スケールの局所構造が計測できる。
- 2) 表面に限らず、界面や物質内部のナノ計測ができる。
- 3) ナノ欠陥の種類・構造を識別し、その量を知ることができる。
- 4) 感度が極めて高く、1ppmでも検出できる。
- 5) 金属・半導体・セラミックスを問わずすべての物質材料に適用できる。
- 6) 高真空や磁場など、特殊な条件を一切必要としない。

などが挙げられる。

1970年前後に、陽電子が物質のナノ構造とその電子・原子構造を極めて精度よく抽出することが明らかとなり、主にアカデミックな研究に用いられてきたが、産業利用はほとんどその例がなかった。この最大の原因は、従来の測定法では、試料を交換するたびに放射性物質を扱う必要があり、放射線業務従事者が法律で定められた管理区域内でしか利用できない制約があったからである。これに対して、我々のグループでは、全く新しい測定原理によって、一般の測定装置とまったく同様に、通常の実験室で誰もが簡単に陽電子寿命スペクトルを測定できるシステムを、以下の2つのタイプに大別して開発を進めた。

### (1) デスクトップマシンの開発

前記の優れた点を生かし、真に汎用的なナノ計測装置を開発した。具体的には、

- 1) 陽電子をビームとして取り出し、普段は陽電子線源を扱う必要をなくした。
- 2) 効率を上げ、法規制対象外の弱い線源で測定できるようにした。
- 3) 大きさは光学顕微鏡程度にまとめた。
- 4) 測定温度を低温から高温まで任意に選べるようにした。

この結果、通常の実験室で利用可能となり、また使用者は試料交換だけで簡単に測定できるようになった。

### (2) オンサイトマシンの開発

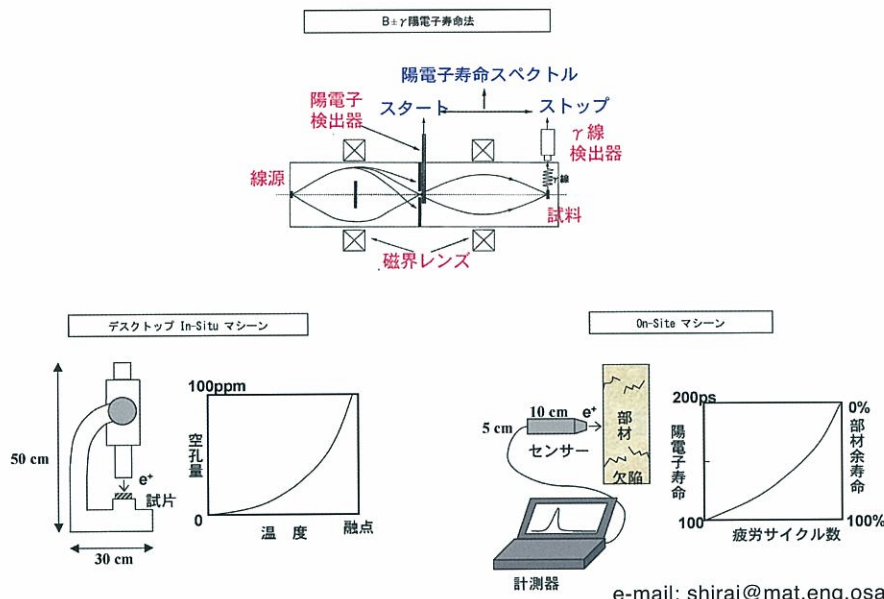
使用中の重要部品の経年劣化(ナノ構造変化)を、現場で非破壊で検知し、その余寿命を診断する装置を開発した。具体的には、

- 1) 半導体素子(APD)による透過陽電子の検出に世界で初めて成功し、検出器の劇的な小形化に成功した。
- 2) 従来のアナログ計測機器を一掃し、小形のデジタルシステムに置き換えることに成功した。
- 3) 検出器の大きさをきわめてコンパクトにまとめた。
- 4) 計測器全体をポータブルにした。

この結果、まさに聴診器を当てる感覚で、材料の劣化を現場で正確に診断する装置を実現した。

これらの手法を用いて、酸化半導体、水素吸蔵合金、形状記憶合金、アモルファス合金、航空機材料などのナノ計測に適用し、その有用性を実証しつつある。

大阪大学教授1名・助教授1名・助手1名



e-mail: shirai@mat.eng.osaka-u.ac.jp [contact us](#)



工学研究科マテリアル生産科学専攻教授 馬越 佑吉 (Yukichi Umakoshi)

## ③ 原子レベルでの構造揺らぎの制御、ナノ構造解析と力学特性、信頼性評価

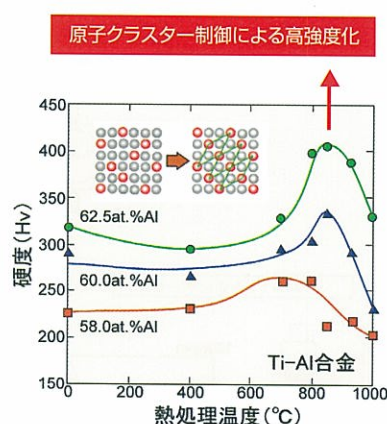
新たな先進的構造材料として、Al系、Si系をはじめとする様々な金属間化合物が注目されている。金属間化合物は、異種元素の規則原子配置を特徴とすることから、定比の化学量論組成をベースにこれまで研究がすすめられてきた。しかしながら、近年、定比組成から外れた非化学量論組成の化合物において、高温強度の著しい増大、疲労硬化・軟化をはじめとする特異現象が、見出されるようになってきている。この異常な振る舞いは、結晶内での空孔、アンチサイト原子といった点欠陥の生成、さらにはそのクラスター化や構造揺らぎと深く関わっているものと考えられる。したがって、非化学量論化合物全般において発現する諸現象とナノ格子欠陥との相関を系統的、包括的に理解することが急務である。さらに、両者の相関を踏まえた上でのナノレベルでの原子・点欠陥の制御、構造解析は、材料特性の改善に直接的につながる。以上から、本研究では特にアンチサイト原子による構造揺らぎ、ならびにクラスター化に対する制御法の確立を行うとともに、電子顕微鏡イメージングシステム、ナノ構造解析システムによるアンチサイト原子の直視解析法を確立する。その結果得られる知見をもとに新構造材料の開発を行う。

また、材料のナノ構造を制御する有効な手法として、アモルファス合金を出発材料とした結晶化が挙げられる。例えば、Fe-Zr-B系アモルファス合金では、結晶化挙動を巧みに制御することでアモ

ルファス相中に10nmオーダーの $\alpha$ -Fe粒子が分散したナノコンポジット組織が形成され、 $\alpha$ -Fe粒子同士の強い交換相互作用により極めて良好な軟磁気特性が発現する。さらに、電子線照射により結晶化を制御すれば、通常の熱処理法では得られないナノ組織を構築させることが可能である。本研究では、電子線照射により材料をナノコンポジット化し、その力学特性、機能特性の飛躍的な向上を目指す。

構造材料の力学特性および信頼性は、ナノレベルの格子欠陥ならびに析出物から強い影響を受ける。とりわけ、材料のサイズがナノレベルにまで達した場合、その影響は計り知れない。したがって、ナノ材料の実用化にはナノ組織を解析する手段が必要不可欠である。当グループでは、磁気を利用したナノ構造の非破壊検査に注目している。強磁性体の磁化過程は転位、面欠陥ならびに析出物といったナノレベルの組織に極めて敏感であり、例えば強磁性体を変形すると、結晶中に導入された転位や面欠陥により、自発磁化、保磁力といった磁気パラメーターが変化する。したがって、逆に磁気パラメーターの変化から材料のナノ構造に関する情報を非破壊で得ることができる。本研究では、磁気特性とナノ構造の相関関係を利用して、構造材料中のナノ構造ならびにナノ格子欠陥を非破壊で解析する手法を確立し、新規構造・機能材料の開発ならびに信頼性評価に繋げることを目的としている。

大阪大学教授1名、助教授2名、助手2名、九州大学助手1名





工学研究科マテリアル生産科学専攻教授 掛下 知行 (Tomoyuki Kakeshita)

#### 4 強磁性形状記憶合金におけるナノ構造の磁場制御

物質の形状は、温度・応力はもちろんのこと磁場付加によっても顕著に変化する。すなわち磁場印加により歪が生じる。この磁場誘起歪発現の機構として、スピン・軌道相互作用を通じた格子の弾性歪と磁気転移による体積磁歪が良く知られている。特に前者は磁歪と呼ばれており、アクチュエータなどとしても利用されている。最近になり、上述した機構とは全く異なる磁場誘起歪が強磁性形状記憶合金において見出された。その歪の大きさは従来の磁歪材料に比べ1桁から2桁大きく、その機構解明と応用に関心が寄せられている。一例として著者らが測定した強磁性形状記憶合金における磁場誘起歪の結果を図1に示す。強磁性形状記憶合金の磁場誘起歪は組織(ナノ構造)が変化することに由来する。まず、強磁性形状記憶合金のマルテンサイト相は図2(b)に示すように幾つかのバリエーションから構成された組織になっている。零磁場下では、これらのバリエーション間にエネルギー差は無いが、磁場下では、磁場方向と結晶軸の関係によりバリエーション間にエネルギー差が生じる。このバリエーション間のエネルギー差のために、図2(c)に示すように、エネルギーの高いバリエーションがエネルギーの低いバリエーションへと再配列され大きな歪が発生する。このように、磁場によりバリエーション再配列がおきる理由は定性的には理解されているが、実際に、磁場によりバリエーション再配列が起きる合金種は少なく、また磁場方向と結晶方位の関係によりバリエーション再配列が起きる場合と起きない場合がある。さらに、多結晶においては磁場によるバリエーション再配列

は殆ど生じない。本研究では、これらの挙動を説明するため磁場によるバリエーション再配列が起きる条件を定量的に評価することとした。

磁場によりバリエーション再配列が起きることより、磁場により双晶面に磁気的な剪断応力  $T_{mag}$  が働くと仮定した。この  $T_{mag}$  の値が双晶変形に必要な応力  $T_{req}$  を超えればバリエーション再配列が起きると考えることができる。磁気的な剪断応力の大きさ  $T_{mag}$  は、単位体積当たりのバリエーション間の磁気的なエネルギー差  $\Delta U_{mag}$  と双晶変形の剪断量  $s$  を用いて、 $T_{mag} = \Delta U_{mag} / s$  で表せると考えられる。 $\Delta U_{mag}$  の最大値は磁場印加方向と磁場強度に依存するが、その最大値は一軸結晶磁気異方性定数  $|Ku|$  である。したがって、 $T_{mag}$  の最大値  $T_{mag}^m$  は  $|Ku| / s$  で表せる。この  $|Ku|$  の値は、磁化困難軸方向の磁化曲線と磁化容易軸方向の磁化曲線の面積として求め、剪断量  $s$  の値はマルテンサイトの格子定数  $a, c$  より求めた。また、双晶変形に必要な応力  $T_{req}$  の値は、単結晶試料を用いた引張試験より求めた。このようにして  $T_{mag}^m$  と  $T_{req}$  の値を求め、それらを比較した。その結果、磁場によりバリエーション再配列が起きる場合は、 $T_{mag}^m > T_{req}$  の関係が成り立ち、起きない場合は、この関係が成り立たないことが明らかとなった。また、一連の研究より、強磁性形状記憶合金において、磁場により発生可能な応力は、数MPa程度であることが明らかとなった。

大阪大学教授1名、講師1名、助手1名

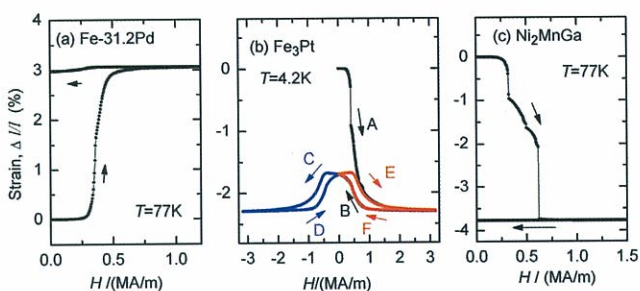


図1 強磁性形状記憶合金における磁場誘起歪

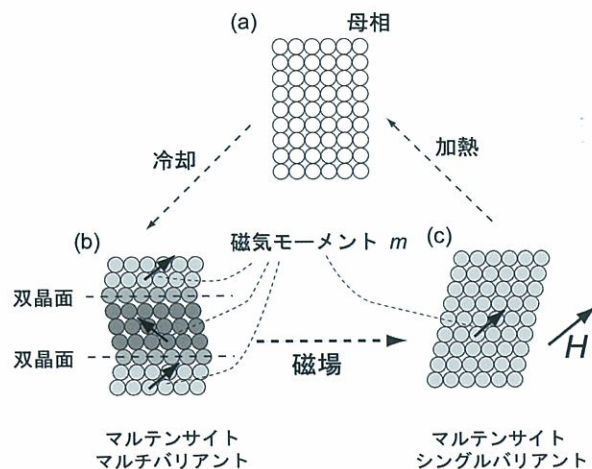


図2 磁場によるバリエーション再配列の様子

e-mail: kakeshita@mat.eng.osaka-u.ac.jp [contact us](#)



工学研究科マテリアル生産科学専攻助教授 勝山 茂 (Shigeru Katsuyama)

## 5 高性能ナノコンポジット熱電変換材料の創製

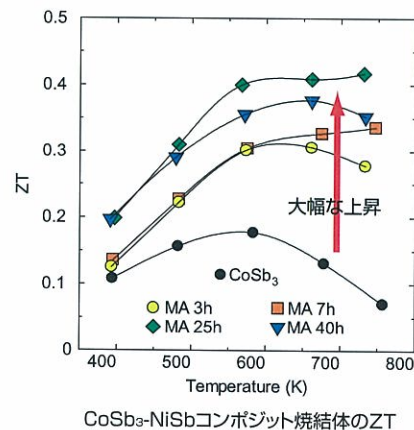
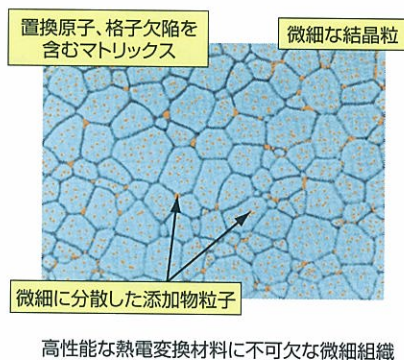
エネルギー・環境問題への関心の高まりから、近年、熱エネルギーと電気エネルギーを直接相互変換できる熱電変換材料が注目されている。熱電変換材料の性能は無次元性能指数 $ZT(=S^2T/(\rho \times \kappa))$ により示される。 $S$ は材料のゼーベック係数、 $\rho$ は電気抵抗率、 $\kappa$ は熱伝導率、 $T$ は動作温度である。 $ZT$ が大きいほど熱電変換材料としての性能は高いことになるが、そのためには $S$ が大きく、 $\rho$ および $\kappa$ が小さいことが必要である。これらのうち、 $S$ および $\rho$ は物質のキャリア密度と密接な関係があり、また、 $\kappa$ はフォノン散乱の程度に強く影響される。そのため、高性能な熱電変換材料の創製には、組成制御により適度なキャリア密度を保ちつつ、組織制御によりフォノンの散乱を激しくさせ、熱伝導率を抑えることが必要である。フォノンは結晶中の格子欠陥、置換原子、結晶粒界、析出不純物などによって散乱され、その散乱の頻度はこれらの密度に比して大きくなるため、格子欠陥、置換原子を結晶中にランダムに導入する、結晶粒を微細化させる、析出不純物をマトリクス中に微細分散させることなどが熱伝導率の低減に有効である。すなわち、下図に示したような微細組織の実現が高性能な熱電変換材料の創製に不可欠である。材料の微細組織の制御方法として本研究ではメカニカルアロイング(MA)法および錯体重合法を採用した。MA法は原料粉末と硬質のボールを円筒状の密閉容器に入れ、機械的回転や振動を加えることにより長時間の粉砕処理を行う方法である。錯体重合法は金属原子とクエン酸とのキレート錯体にエチレングリコールを加えて脱水エステル化重合

させ、その後熱処理することにより、均質なセラミックス粉末を作製する方法である。

MA法による組織制御として $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>系、スクッテルタイトCoSb<sub>3</sub>系について検討した。n型 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>系熱電変換材料としては最も高い性能を示すFe<sub>0.98</sub>Co<sub>0.02</sub>Si<sub>2</sub>に0~6mass%のY<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Nd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、Gd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>などの希土類化合物粉末を加え、20時間のMA処理を施した後ホットプレスにより焼結させてコンポジット焼結体を得た。このコンポジット焼結体では無添加に比べ $\rho$ は若干増加したものの、 $S$ および $\kappa$ の改善が見られ、Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>2mass%添加した試料で無添加のものを上回る最大0.06の $ZT$ が得られた。また、CoSb<sub>3</sub>に20mass%のNiSbを加え、25時間のMA処理を施し、同様にしてコンポジット焼結体を得たところ、 $\rho$ および $\kappa$ が大きく改善され、731Kで最大0.42の無次元性能指数が得られた。この値は無添加の最大値0.18を大きく上回るものである(下図参照)。

また、錯体重合法ではZn<sub>1-x</sub>AlxO系について検討を行った。錯体重合法により得られた粉末から作製した焼結体の結晶粒径(1 $\mu$ m以下)は、固相反応法によるもの(10 $\mu$ m程度)に比べ非常に微細であった。また、 $\kappa$ は固相反応法による試料とそれほど大きな差は見られなかったが、試料中へのキャリアの注入が、より容易になされていることが確認できた。

大阪大学助教授1名、助手1名





工学研究科機械工学専攻教授 渋谷 陽二 (Yoji Shibutani)

## 6 ナノマテリアル構造健全性評価のための第一原理構造解析法の開発

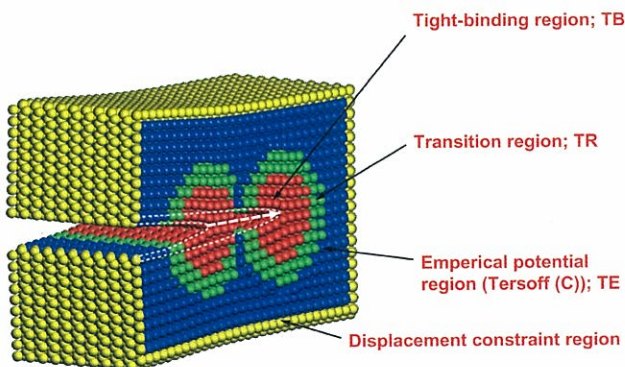
ナノスケールの欠陥場をより正確に実体的な情報として取得するため、新たな実験観察手法が種々提案されている。しかしながら、それらは断片的な2次元(あるいは画像処理による3次元)のスナップショットの描像であり、**欠陥場の生成・発展のダイナミクス**を時間発展的に求める計算力学手法の発展も、同様に必要不可欠である。本テーマでは、ナノスケールからマイクロスケールに至る、**欠陥場の力学的な作用場での生成と多様な集団化過程の相互作用**をとらえるための、第一原理計算を主体とする新たなナノマテリアル構造健全性評価のための計算力学手法の開発に主眼を置いている。

き裂の先端や結晶粒界のように、材料の内部構造の不均質さに基づくひずみの集中部は、典型的な破壊や局所変形の起点と考えられている。したがって、そのような部位の強度評価に関する高精度化は、昨今のダウンサイジングに伴う**材料内部構造健全性評価**には欠かせない重要な因子である。従来からの評価手法として連続体力学に基づく破壊力学の強度評価があるが、特異場であり種々の物理的素過程が複雑に相互作用を呈しているき裂の先端場の

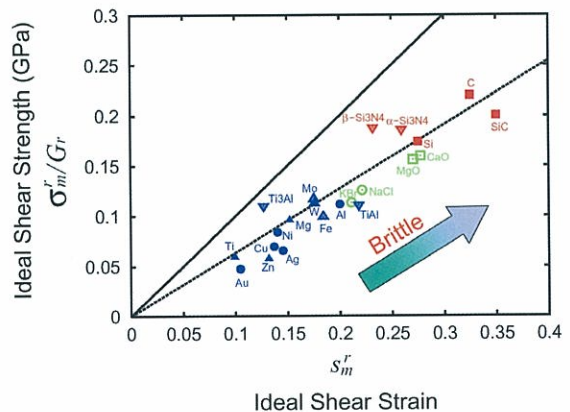
挙動には、そのような連続性を仮定した力学理論では対応できないことは明白である。き裂の先端場では何が生じているのかを物理的に解明するためには、適切な外部負荷の下で、き裂の先端場を構成している原子・電子論的な描像からのより厳密な力学挙動を求めなければならない。平面波基底に基づく第一原理計算では、計算条件から設定される近似の下での厳密な電子状態が得られ、それによる原子間相互作用場が決定される。しかしながら、力学的に適切な外部負荷を実現するために必要な空間領域の確保が、現状の計算機環境では著しく困難である。したがって、エンジニアリング的な視点の下で、それらを解決するための一手法として、電子場と古典系力学場との連結を行ったコンカレントモデリングを提案した。また、様々な材料により構成されるナノマテリアルの構造健全性評価に対応するために、平面波基底の第一原理電子状態計算を用いて、結晶材料の強度や変形特性を本質的に支配するパラメーターが材料の理想せん断強度であることを理論的に証明し、それによって各種材料の強度や脆性・延性を予測評価する手法を確立した。

大阪大学教授1名、助教授1名、助手1名

TB-MD Concurrent Modeling



Ab-initio Prediction of Deformation Properties



e-mail:sibutani@mech.eng.osaka-u.ac.jp [contact us](#)



工学研究科生命先端工学専攻助教授 高野 和文 (Kazufumi Takano)

## 未来デバイスを目指すバイオクリスタルデザイン

ポストゲノム研究の中心の一つであるタンパク質構造解析に必須であるが、ボトルネックとなっているタンパク質結晶育成技術を改善するため、さらにタンパク質結晶による未来デバイス材料の実現を可能するため、新しい溶液状態制御機構を利用して、大型かつ高品質タンパク質結晶の創製システムの開発に取り組む。従来の概念を打ち破ることで、タンパク質結晶育成技術のブレークスルーを目指す。これにより、今日の構造ゲノム科学や創薬研究に大いに貢献することが期待される。またデバイス化のためには、結晶を自由に加工できる技術が必要とする。タンパク質結晶は不安定、微小かつ柔らかいため、非熱的な光などによる高速超微細加工が望まれる。本研究では特殊レーザー光を用いてこの問題解決に取り組む。本成果は医用工学技術の向上も導く。さらに、結晶複合体の創成およびその特性解析などの未来材料開発の先駆的研究を行う。

本研究ではこれまでに、世界に先駆けて、溶液状態制御による結晶育成技術および光ソフトプロセッシングによる結晶加工技術の開発に成功してきた。そして、これら育成および加工技術をさらに発展させ、研究を独創させると共に、タンパク質結晶の特性を世界で初めて評価することで、次世代デバイス化への道を切り拓いている。

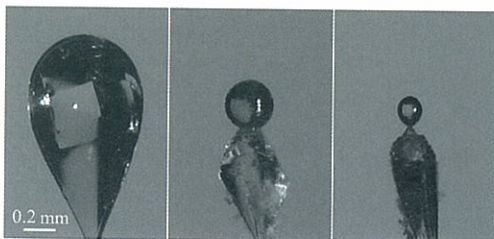
結晶育成においては、これまで結晶化が困難であったタンパク質の高品質結晶の作製に、これまでに確立した溶液攪拌法を適用し、成功した。この結晶を用いて高分解能構造解析を行い、解かれた構造により、これまでよりも1000倍高い機能を持つ化合物のデザインを可能とした。これらは製薬企業との共同研究であり、その成果は創薬事業に貢献している。この成功を受けて、さらに他の創薬対象タンパク質についても高品質化依頼があり、同様に溶液攪拌法により取り組んだところ、宇宙における結晶化実験よりも高品質な結晶が得られ、高分解能構造解析に成功した。また、結晶育成においては、温度条件を簡易にスクリーニングできる装置を開発した。特殊な機構により(特許出願済)、広範囲な温度領域を直線的な勾配で温度を設定できる装置を作製することで達成した。

結晶加工においては、実際の構造解析で使用される低温下での加工を実現させるため、低温加工機を作製した(特許出願済)。その有効性を示すと共に、一般販売に向けたデモ機、および、製品を作製した。また、結晶加工においては、加工結晶を種結晶にした結晶成長に取り組み、加工結晶を種結晶にした結晶再成長実験に成功した(特許出願済)。

デバイス応用探索としては、タンパク質結晶の電気特性を初めて測定することに成功した。

大阪大学助教授4名、助手1名

### 非接触・低損傷のタンパク質結晶の微細加工



全固体193nmレーザーによるタンパク質結晶の微細加工技術。多結晶や損傷部分から単結晶を切り出す。

### 複数企業との共同研究だからこそ 生まれる新しい可能性

未来デバイスを目指すバイオクリスタルデザインの研究は、従来の1研究室-1企業ではなく、複数の大学の研究室と複数の企業との共同研究で推進しています。

タンパク質の結晶化技術の実用化の部分は、株式会社創晶、結晶加工機の部分では、株式会社ニコン、結晶育成温度制御機の部分では、株式会社キノテック、また、結晶化スクリーニングロボットの部分では、謙徳産業株式会社というように、各々の技術、ノウハウを活かし、新しい可能性をつくりだしました。





工学研究科応用化学専攻教授 平尾 俊一 (Toshikazu Hirao)

## $\pi$ 共役系材料の次元制御に基づくSupramolecular Materialsの創製

有機エレクトロニクス材料は、主にディスプレイへの応用を目指して注目を集めており、素子のデモンストレーションも報告されている。しかし、まだ十分に実用的な半導体材料は知られておらず、特性の改良を目指して新規材料探索が進められている。本研究は、有機ELや有機TFTへの応用を目指した新規有機半導体材料の合成に関するものである。

通常は絶縁体である有機物が導電性を得るためには、 $\pi$ 共役系分子に配列した構造を取らせることが重要である。そのために、平面性の高い分子を用いて自発的に配向させることが研究されているが、高い特性を安定に得るためにはさらに積極的な構造制御が必要である。

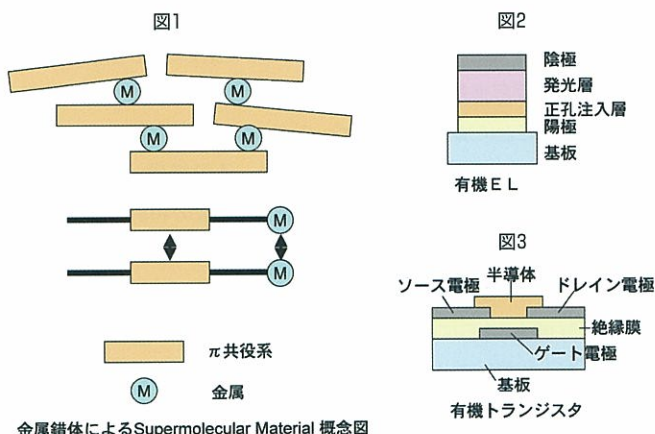
金属との結合は通常の分子間相互作用（ファンデルワールス相互作用）よりも強いので、固体構造を制御する手法として活用できると考えられる。また、金属を $\pi$ 電子共役系の中に取り込むことにより、特異な相互作用も期待される。以上の観点から、有機合成の手法と組み合わせることで、金属錯体を含む新規な $\pi$ 共役系材料の開発に関する研究を行った（図1）。

ポリピロールとパラジウムやバナジウムなどの遷移金属の錯体を合成した。これらの錯体では、ピロール環の配位部位との配位

結合が形成された。また、溶媒に可溶で、塗布による製膜が可能であった。この材料を陰極表面に塗布したものは、駆動電圧を低減させるとともに、駆動寿命も改良できることが判明し、有機EL用正孔注入層材料として非常に良好な特性を示した（図2）。共役系高分子鎖が金属を介したネットワークを形成していることが良好な特性に関係していると考えられる。本研究の成果は有機ELとして工業的にも有用で、日経産業新聞の一面に掲載された。

さらに、低分子半導体の金属錯体を種々合成し、その有機トランジスタ特性を調べた（図3）。有機金属触媒を用いたカップリング反応により、金属と配位可能な含窒素ヘテロ環（ピリジン、ピリミジン、ピコリン酸誘導体）や芳香環（ベンゾニトリル、安息香酸誘導体）からなる $\pi$ 共役系分子を良好な収率で合成した。次いで、対応するパラジウム、ルテニウムなどの金属錯体を合成し、単位ユニットである共役錯体の次元設計が可能であることを明らかにした。金属錯体の強い分子間相互作用のために溶解性が低下が見られ、製膜性を向上させるための方策を考慮した材料設計が今後望まれる。

大阪大学教授1名、講師1名、博士研究員2名、三菱化学(株)3名



### 三菱化学株式会社

本共同研究では、金属錯体による構造制御の可能性を検討して頂きました。有機材料の種類は非常に幅広く、企業内で合成検討するものは限界があります。難しい技術を大学との共同研究でチャレンジするのは、大学と企業の協力のあり方の一つとして重要であり、本共同研究はそのような視点からスタートしました。有機半導体・導電体の金属錯体による構造制御は検討されていない分野であり、その可能性を平尾先生の合成技術を利用して検討していただきました。未来材料としての、金属錯体材料の可能性を明らかにすることができました。

工学研究科応用化学専攻教授 平尾 俊一 (Toshikazu Hirao)

## 高分子反応による新規機能性材料の創出

高分子反応を利用したポリマーの機能化は、例えばブチルゴムのハロゲン化、ポリエチレンのクロロスルホン化やポリプロピレンの無水マレイン酸変性のように、機能性ポリマーの工業的な合成手段として非常に有用である。一方、機能性ポリマーの1種であるフッ素樹脂はフッ素元素の特異的な性質を利用して、撥水/撥油性・低屈折率性・摺動性・耐薬品性等の特性を有するポリマーとして様々な用途に応用されているものの、成形性が悪いなどの欠点もある。そこで、我々は、新しい高分子による機能性材料を創出する方法として、高分子を出発物質とし、何らかの機能性を付与できる機能化剤との反応による新規機能性材料の創出を目的として本共同研究を開始した。代表的な汎用樹脂であるアクリル系樹脂を出発物質として選択し、フッ素系アルコールと反応させることにより、アクリル系樹脂の透明性・耐水性・良成形性を維持したまま、フッ素元素の特異的な性質を付与することを考えた。合成手段として、アクリル系樹脂とフッ素系アルコールのエステル交換による反応を検討した。具体的には、反応条件の確立、量産化の可能性の目処付け、生成物の特徴づけを行った。

検討開始当初、モデル化合物(低分子エステル化合物)によるフッ素系アルコールとの反応進行を確認した。その後、モデル化合物での知見を基に、本研究の目的である高分子(アクリル系樹脂)とフッ素系アルコールとの反応を試みたが反応せず、触媒、反応溶媒、反応温度、フッ素系アルコールなどの幅広い条件検討を行うことにより、特定の条件下で反応が進行することを見出した。さらに詳細な条件の最適化を図り、反応効率の向上も達成した。

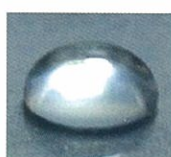
共同研究先では、実用化の可能性に関するスケールアップ検討により、産業化可能なレベルでの結果であることを明らかにした。さらに検討開始時に想定した特性が発現されるかの評価も併せて行った結果、撥水性に特徴を見出し、出発物質より大きく性能が向上することを確認した(下図)。

本成果により、安価な汎用樹脂を出発物質として、適切な機能化剤を導入することにより、出発物質が有する特徴とともにさらなる性能付与が可能になることを見出した。実用化も視野に入れられるまでのレベルを達成したと考えている。今後、本技術のさらなる展開を図りたい。

大阪大学教授1名、大阪府立大学教授1名、  
特任助手1名、(株)カネカ4名



出発物質  
(アクリル系樹脂)  
水の接触角:67°



フッ素系樹脂  
(ポリフッ化ビニリデン)  
水の接触角:90°



本検討による生成物  
水の接触角:112°



フッ素系樹脂  
(ポリテトラフルオロエチレン)  
水の接触角:120°

## 株式会社 カネカ

FRCを活用する本共同研究により、当社における予備検討では反応進行を確認できなかった反応を開発することができたことに加え、そのスピーディーな対応(想定以上の短期間での達成)にも協力頂きました。その結果、多くの実験データの蓄積を進め、それに基づく多数の特許出願(外国出願を含む)の実施、さらには学会・論文発表も行う機会を得ることができました。これらは平尾先生および特任助手の許博士、さらには貴学関連部署の方々のご協力による結果だと認識しています。今後は本研究成果を実用化に結びつけるべく検討を継続していきます。

工学研究科応用化学専攻教授 平尾 俊一 (Toshikazu Hirao)

## 有機金属エレクトロニクス材料の創製

当研究室では、ナノ空間を有機的に形成し、システム化することにより、マクロ空間では見られない、概念的に新規なレドックスシステムを創製し、有機合成や材料合成において電子移動を伴う動的機能を実現させるための研究を展開している。

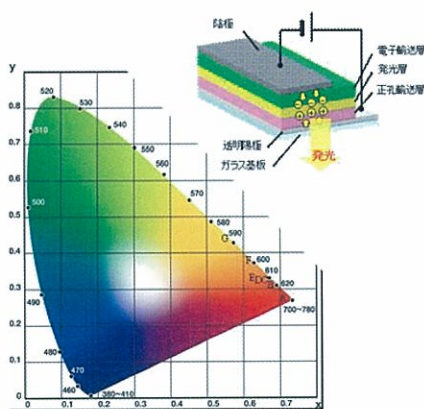
本研究では、高機能有機エレクトロニクス材料を創製することを目標とした。有機金属分子の一般的特質である多様な構造制御機能に着目し、有機金属化学に立脚する「ボトムアップ型」のナノ構造体構築手法を用い、新材料の創製に取り組んだ。また、本プロジェクトでは、独自の研究拠点を構築し、効率的な研究環境を整備するとともに、広く国内外から様々なバックグラウンドを持ったスタッフを集め、多様性の高い研究チームを編成して研究に取り組んだ。以下に、本研究の主な成果を示す。

1. ディスプレイの性能がめざましく向上し、デジタル技術による高画質映像の普及が進んでいる現在、ディスプレイの魅力を左右するポイントとして、色彩の再現力・表現力の重要性が大変強まってきている。本研究では、究極の純赤色発光が可能な有機ELデバイスの実現を目的として分子設計を行い、キノキサリン配位子を有する新規なイリジウム化合物を創製した。また、新規なキノキサリン誘導体の簡便な合成法を開発した。ジフェニルキノキサリン配位子を有する本有機金属化合物では、ピーク波長680 nmの純赤色のりん光発光が得られ、純赤色発光材料としてはトップクラスとなる50%を超えるPL発光量子収率が得られた。

本有機金属化合物の有機ELデバイスへの応用により、CIE色度  $x=0.70$ ,  $y=0.28$  の純赤色発光が得られ、600 cd/m<sup>2</sup>を超える高輝度時にも純赤色の鮮やかさが低下することはなかった。下図に、本研究で得られた純赤色発光デバイスのCIE色度座標(A)と、従来の有機ELデバイス、各種ディスプレイの色度座標との比較を示す。NTSC規格(C)、sRGB規格(D)、ブラウン管(E)、従来の有機ELデバイス(B、F、G)の色度と比較して、本研究成果により、究極的に鮮やかな純赤色発光が実現された。さらに、次世代の超高画質ディスプレイへの応用が強く期待されている。

2. キノリンアミン系の新規な三座配位型の有機金属化合物を創出した。パラジウム化合物では溶液・固体状態の双方で発光が得られなかったのに対し、ジフェニルキノリンアミン配位子を有する白金化合物の微結晶では波長672 nmの赤色発光が得られた。希薄溶液中で波長600 nmの赤色発光が得られ、濃厚溶液中では分子間水素結合による強い相互作用に起因すると考えられる波長740 nmの赤色発光が得られた。今後デバイスへの応用が期待される。

大阪大学教授1名、助教授1名、講師1名、  
博士研究員3名、スタッフ2名、三洋電機(株)2名



共同研究で得られた純赤色発光デバイス(上図)の色度座標(A)と従来のディスプレイの色度(B~G)との比較(下図)

## 三洋電機株式会社 藤井 祐行

本共同研究プロジェクトでは、平尾教授、櫻井英博助教授、森内敏之講師のご指導の下、有機金属化学的合成手法に基づき、新しい機能を発現できる有機金属エレクトロニクス材料の創製を目的として、マッチングファンドを活用し、オリジナルな構造の有機金属分子の構築に取り組みました。

本共同研究により、従来は困難であった極めて鮮やかな純赤色発光デバイスの実現に初めて成功し、日経BP社等により報道されるなど、新しい産業分野への応用が大いに期待される価値ある成果が得られています。

弊社は、今後も産学連携のより一層の強化を通じ、エレクトロニクス分野において、最先端のマテリアル、デバイス、システムの創出に取り組んで参ります。



鳥海 実

工学研究科精密科学・応用物理学専攻教授 増原 宏 (Hiroshi Masuhara) (リーダー)  
工学研究科フロンティア研究機構特任教授 鳥海 実 (Minoru Toriumi)

## 半導体用レジスト材料開発の新技術

半導体産業は現代の情報化社会を支えるコンピューターやエレクトロニクス・デバイスを供給している。この半導体デバイスの製造技術がリソグラフィ技術であり、盛んに研究・開発されている。特に、感光性高分子材料であるレジスト材料はリソグラフィの解像度を左右するキー・マテリアルであり、高性能なレジストが求められている。高性能レジストを開発するには、露光および現像過程におけるレジスト材料の特性把握が重要である。例えば、レジスト材料を量産プロセスで評価できるためには、量産用の露光装置でレジスト材料を評価することは不可欠であるが、レジスト材料の試作段階あるいはレジストの構成成分の評価には、量産装置はオーバースペックである。むしろ、レジスト材用評価の為に特化した露光評価技術が必要である。同様に、現像過程に関しても量産の現像装置ではレジスト材料開発に必要な情報を得るのは難しい。材料開発のための露光および現像評価のための新技術の開発が必要である。そこで、レジスト材料開発に必要な物理量を的確に測定でき、材料開発を加速させる技術を開発することを目的に本プロジェクトを開始した。

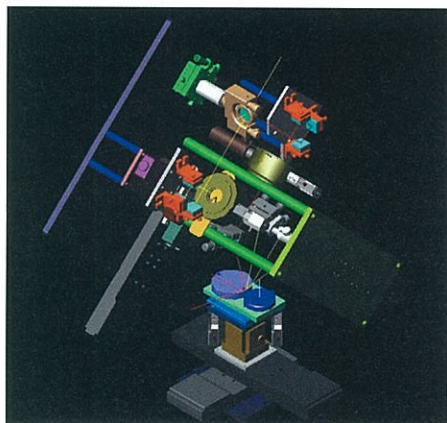
露光評価技術としては、二光束干渉を用いて、その交差角度を任意に変えることができる機構を設け、所望の線幅のパターンを容易に評価できるようにした。これにより、高価なマスクを作製する時間と費用を省くことができ、入射角度80度で線幅50nmのパターン露光が可能な技術を確認した。また、レジストに高い解像性を持たせるためには露光コントラスト評価が必要不可欠である。

従来の高価な量産装置では露光コントラストを変えることはできない。そこで、二光束の光強度を調整し、露光コントラストを変える機構を設けた。この技術により、最先端の解像限界の条件で露光特性を評価することが可能になった。これらの技術は高性能レジスト材料を開発する上で、有用な評価手法となると期待される。これらの新規機構を付加した露光装置を試作し、その有用性を確認した。

従来の現像評価技術として光干渉法があるが膜厚分解能が悪く、現像評価には適用できない。一方、水晶振動子マイクロバランス法は膜厚分解能が高いが、時間分解能が悪いという欠点があった。そこで、本プロジェクトでは、高速周波数計と水晶振動子マイクロバランス法を組み合わせることにより、高い時間分解能を有する現像評価技術を開発することをもう一つの目的とした。高速周波数計および制御機構の開発により従来より2桁高い時間分解能で現像速度を測定できるようになった。この技術により、評価が難しかった未保護の可溶性樹脂の開発や次世代リソグラフィ技術で重要な液浸溶媒とレジストとの相互作用を精密に評価することも可能になった。

本プロジェクトで確立されたこれらの技術は複数の材料メーカーから彼らのニーズに特化させた技術への展開を打診されており、その有効性が判断できる。更に、半導体リソグラフィのみならず、ナノテクノロジーなどの新規産業分野を支える基盤技術としても重要な役割を果たすと考えられる。

大阪大学教授1名、特任教授1名、特任助教授1名、旭硝子(株)3名



二光束干渉露光評価技術



水晶振動子マイクロバランス現像評価技術



工学研究科生命先端工学専攻助教授 小西 毅 (Tsuyoshi Konishi)

## 生物モデルにおけるフィードバック効果の工学的応用

生物は一種の最適化されたシステムと考えられ、生命活動における持続的な機能を発現している。この生物の持つ持続的な機能(特にそのフィードバック的な機能)を効果的に工学に応用することにより、低コストかつ低消費エネルギーの環境に優しいナノ光機能素子を実現することが期待できる。

本研究では、我々の目の中にも存在する光受容性たんぱく質をとりあげ、その持続的な機能の検討を進めた。光受容性たんぱく質は、光の色(波長)の違いによりその形を変化させ(光異性化)、いくつかの異性化の過程を経て、元の形に戻ることを持続的に繰り返す。特にサンプルとして用いたバクテリオロドプシンは、全ての生命の“生命力のみなもと”とされているATP合成酵素自体を合成するための持続的なプロトンポンプ機能を光異性化のアシストを得て実現している本研究の目的に非常に適したものである。この生命のしくみと密接に関わる持続的な光異性化の反応を中心に、環境としての多色光の存在下での光受容性たんぱく質の生み出す現象について生物の振る舞いと複雑系の関係に着目して検討を行った。

低速な過程については、各異性化過程の確認に成功した。また、一部の光異性化過程については、制御に成功した。一連の光異性化サイクルについて、持続的な光の吸収の振動現象を確認した。

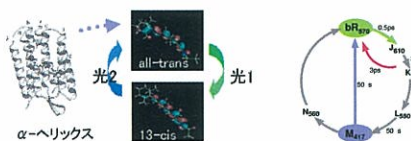
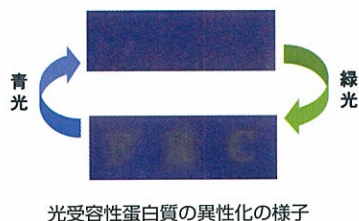
また、高速な過程での光異性化について、その異性化反応開始の検討実験を行い、開始条件を確認した。高速な過程での光異性化について、その応用の検討を行った。さらに、生物の個体数の推移の解析に利用されているフィードバック型の生物数理モデルをもとに、持続的な光異性化機能の時間的挙動の解析を検討し、持続的な挙動の基本的なメカニズムを確認した。さらに、カオス的な振動を発生するモデルなどの適用を行い、実際に得られている実験結果の精度の高い理解を進めている。

大阪大学教授1名、助教授1名、講師2名、助手1名、学生3名

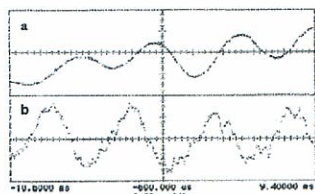
### 研究の方向性



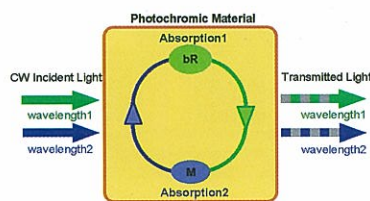
理想的なシステムとして工業的な利用が可能...



光受容性蛋白質の異性化とフォトサイクル



発生した振動現象の結果  
(約5ms周期の振動現象)



振動現象発生メカニズム