

JST news

未来をひらく科学技術

特集

革新的な発光材料で
市場の創出を目指す

心を数学で解き明かし
人工知能との
共生社会をつくる

6

June
2018





特集 1

03 革新的な発光材料で市場の創出を目指す

特集 2

08 心を数学で解き明かし人工知能との共生社会をつくる

はかる 第13回

12 固体と液体の界面での原子の動きを解明!

NEWS & TOPICS

14 単層カーボンナノチューブ薄膜の特異な光吸収特性を発見 ほか

さきがける科学人

16 自分が好きなものを研究に

明治大学 総合数理学部 先端メディアサイエンス学科 専任准教授 五十嵐悠紀



表紙解説

「革新的発光材料」の研究に取り組む九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センターの安達千波矢センター長。閃光にも似た「ひらめき」が、やがて革新材料として社会の中で優れた価値を生み出し、新たな市場を創出する。

特集 1



あだち ちはや 安達 千波矢

九州大学 最先端有機光エレクトロニクス研究センターセンター長

1991年 九州大学大学院総合理工学研究科博士課程修了。工学博士。リコー化成品技術研究所、信州大学、米国プリンストン大学、千歳科学技術大学教授などを経て、2010年より現職。九州大学大学院工学研究院応用化学部門教授を兼任。13年よりERATO安達分子エキシトン工学プロジェクト研究総括。

革新的な発光材料で市場の創出を目指す

近年、有機EL(エレクトロルミネッセンス)を応用したディスプレイや照明などの普及が加速している。現在の有機ELの発光材料は、発光原理の違いによって、「蛍光材料」と「リン光材料」に分かれるが、一長一短がある。九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター(OPERA)の安達千波矢センター長は、これらに次ぐ新たな有機EL発光材料を開発している。目指すは市場の創出だ。

発光の鍵を握る「エキシトン」

ELとは物質に電気を加えて、電気エネルギーを光エネルギーに変換する技術のことだ。物質として有機化合物を用いたものを有機ELという。

有機ELは、現在普及している無機化

合物を使った発光ダイオード(LED)と比べて、広い面積で発光できる上、軽量でフレキシブルだ。さらに分子構造を変えるだけでさまざまな波長の光を出せるなど、多くの優位性を持っている。これらの性質を生かし、近年、有機ELを用いた薄型テレビやスマートフォンなどが市場に登場しているが、

発光効率の向上や長寿命化といった課題を抱えている。

また、最近使われるようになってきたリン光材料では、実用化を最初に果たした米国プリンストン大学発のベンチャー企業が関連する特許をほぼ独占している。さらに製品化が進む有機ELディスプレイは、安価で販売する韓国企

経時変化を測定中の有機EL素子

TADF発光材料の模型

編集長：上野茂幸
科学技術振興機構(JST)広報課
制作：株式会社伝創社
印刷・製本：株式会社丸井工文社

業の独壇場となっており、日本企業が市場に参入するのは難しいというのが現状だ。

九州大学最先端有機光エレクトロニクス研究センター(OPERA)の安達千波矢センター長は、この状況を打開すべく、新たな有機EL発光材料で市場の創出に挑んでいる。

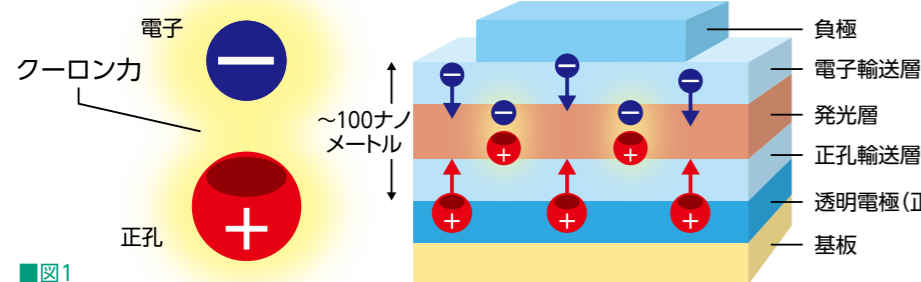
有機ELの発光の鍵となるのが、エキシトン(励起子)だ。有機EL発光材料に光を当てると、安定した低いエネルギー状態である「基底状態」にある電子が高いエネルギーの「励起状態」に移り、基底状態には電子の抜けたプラスの電荷を持つ孔(正孔)が残される。

半導体では、励起された電子と残された正孔のペアがクーロン力で結びついた状態となる(図1)。これがエキシトンだ。通常より高いエネルギーを持つ励起状態は有機化合物にとって不安定で、低いエネルギーで安定した基底状態に戻ろうとする。この時に励起状態と基底状態のエネルギー差が光として放出されるというのが、発光の仕組みだ。

ディスプレイなどで使われる有機ELでは、光を当てる代わりに電流を注入して発光に必要なエキシトンを作り出している。有機化合物の代表のプラスチックは通常は電流を通さないが、極めて薄い膜状にすると電流を通すようになる。そこで、有機物の薄い膜で図2のような構造を作り、正極から負極に電流を流すと、発光層中で電子と正孔がペアになりエキシトンができるのだ。

安達さんは、このエキシトンの原理や特性を明らかにし、自在に制御することで新たな材料を生み出せないかと考えている。

安達さんは、このエキシトンの原理や特性を明らかにし、自在に制御することで新たな材料を生み出せないかと考えている。



■図1 エキシトンの模式図。電子と正孔がペアになり、普通より多くエネルギーを持っている状態。
■図2 有機EL素子の構造

蛍光とリン光

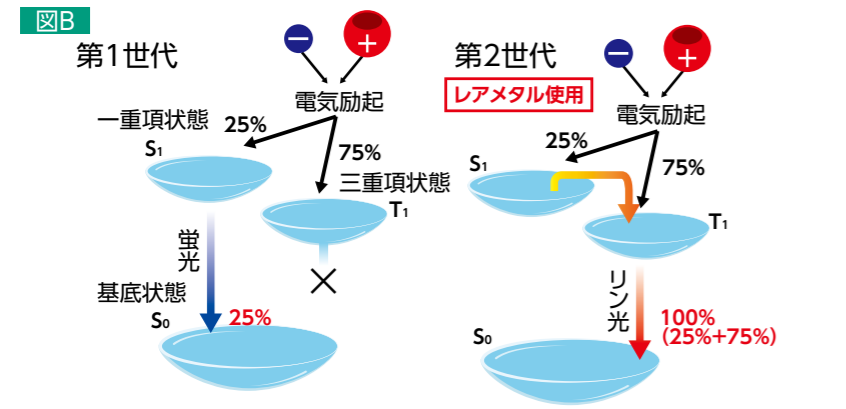
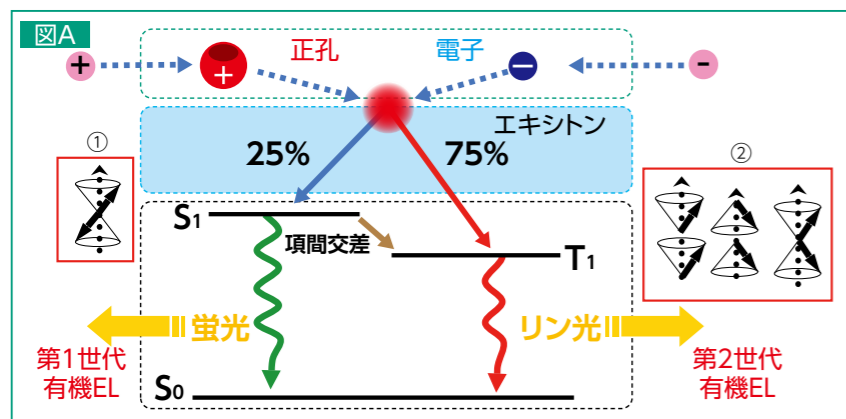
物質を励起したとき、励起を止めた後もしばらく発光が続けるが、この時間が10ナノ秒程度の短いものを蛍光と呼び、数秒から数時間に及ぶものをリン光と呼んでいる。

有機化合物の励起状態には、エキシト

ンを構成している電子と正孔のそれぞれのスピンの組み合わせによって、下図のような4通りの組み合わせがあることがわかっていく。図A①のような組み合わせは一重項状態 S_1 と呼ばれ1通りしか

ない。一方、図A②のような組み合わせは三重項状態 T_1 と呼ばれ3通りの組み合わせがある。従って、 S_1 になるのは全体の25パーセント、一方、 T_1 になるのは残りの75パーセントということになる。基底状態の電子と正孔は一重項状態 S_0 であり、 S_1 から S_0 はスピンの状態が同じなので遷移しやすく、ナノ秒という速い「蛍光」をもたらす。一方、 T_1 から S_0 への遷移は、スピン状態が違うため遷移しにくく、数マイクロ秒から数秒の遅い「リン光」をもたらす。

以前は、蛍光しか利用しなかったが、リン光も利用すれば発光効率を100パーセントにできるはずである。そのため、蛍光材料の方が低コストで作れるにもかかわらず、発光効率の観点からリン光材料を中心に有機ELの開発が進められている。有機EL発光材料では、蛍光材料を第1世代、リン光材料を第2世代と呼ぶ(図B)。室温でのリン光を実現するために、米国プリンストン大学でイリジウムや白金といった貴金属を含む有機金属化合物が開発され、現在、実用化されている青色以外の有機EL材料はこの室温リン光材料となっている。



新たな原理で光を生み出す

次世代の発光材料を目指す安達さんの転機になったのが、蛍光、リン光に代わる新たな発光原理との出会いだ。

「1999年から2年間、プリンストン大学で室温リン光材料を研究しており、この材料があつという間に実用化される様子を目の当たりにしました。しかし、有機金属化合物として使われていたイリジウムや白金は非常に高価です。さらなる普及に向けて、高価な元素を使わずに室温で100パーセントの発光効率を示す新たな発光材料が求められていました。そこで着目したのが、『熱活性化遅延蛍光(TADF)』という発光原理でした」と安達さんは振り返る。

TADFとは、三重項状態 T_1 になったエキシトンが熱によって一重項状態 S_1 に遷移した後に発光する現象だ(図3)。この状態をうまく作ることができれば、蛍光材料の発光効率をリン光材料のようにほぼ100パーセントまで高めることができる。安達さんはこう考え、TADF発光材料の研究開発に着手した。

その中で、TADFが起きやすい有機化合物は、 S_1 と T_1 のエネルギー差ができるだけ小さいものであるということ、理論計算(量子化学計算)により割り出した。そして、そのためには分子の軌道のうち、基底状態の電子軌道(HOMO)と励起状態の電子軌道(LUMO)の重なりを小さくすればよいことに気付いたのだ。

「これは、電子を提供するドナー分子と電子を受け取るアクセプター分子を1つの分子の中に入れてよいことを意味していました。量子力学の教科書にも載っている基礎的な物理学で、私自身も大学の講義で何度も教えてきたことです。それが材料開発に生かせることにこの時に初めて気付きました」。

目指す有機化合物を割り出した安達さんは300種類もの有機分子を合成し、次々に分析していった。そしてついに、 S_1 と T_1 のエネルギー差がほぼゼロ、つまりほぼ100パーセントの発



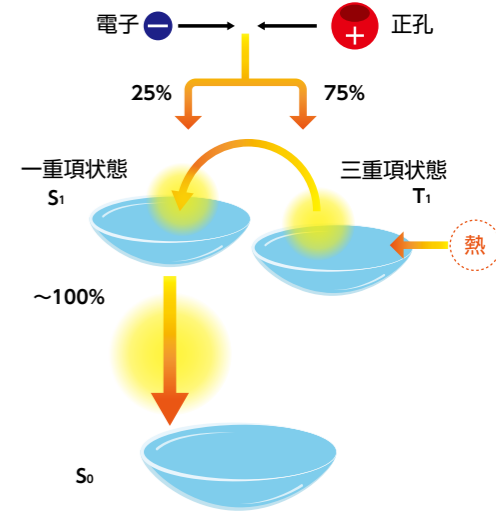
「安達分子エキシトン工学プロジェクト」のメンバー。全員で約60人おり、そのうち外国人は40パーセントに及ぶ。

光効率を有するTADF発光材料を探り当てることに成功した。

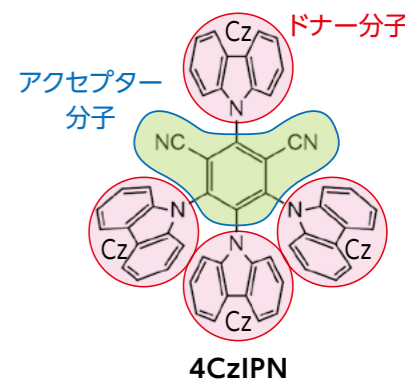
開発したTADF発光材料は、ジシアノベンゼン誘導体と呼ばれる化合物群で、ベンゼン環の6つの水素Hのうち2つがシアノ基CNという官能基に置き換わったジシアノベンゼンを基に、残りの水素がカルバゾール基Czに置き換わった構造をしている(図4)。ジシアノベンゼンが電子のアクセプター分子、カルバゾール基が電子のドナー分子として働く。カルバゾール基の数や位置を変えることで、発光色を変えることも可能だ。この発見により、低コストで高い発光効率を示す新たな有機発光材料が誕生した。

「研究チームに物理学者と化学者の両者がそろっていたことが、成功要因でした。物理学者が理論計算から導き出した化合物の構造を基に、化学者が実験室で実際に化合物を合成することで、求める発光材料を合理的に効率良く創製できたのです」と安達さんは分析する。

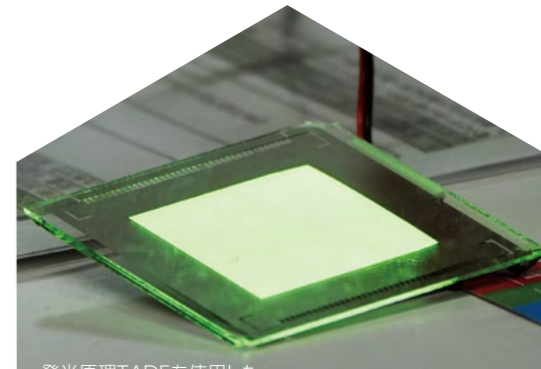
TADF発光材料を最初に探り当てたのは2009年のことだったが、当時の発光効率はたった0.01パーセントだった。「論文を発表しましたが、当時は誰も見向きもしませんでした。しかし、理論という後ろ盾もあり、絶対にいけると確信していました」と安達さん。2010年からは、最先端研究開発支援プログラム(FIRST)で高効率化に取り組んだ。自らを信じて分子構造の改良を続け、2012年にはほぼ100パーセントの発光効率を達成させるに至っ



■図3 発光原理「熱活性化遅延蛍光(TADF)」



■図4 TADF発光材料の構造。ベンゼン環の6つの水素のうち2つがシアノ基(CN)に、残りの4つがカルバゾール基(Cz)に置き換わった構造をしている。



発光原理TADFを使用した有機EL素子

たのである。

有機薄膜レーザーを長寿命化

2013年に始まったERATO「安達分子エキシトン工学プロジェクト」で新たな目標として掲げたのは、エキシトンの基礎原理の確立と、TADF発光材料を中心とする新たな有機発光材料や高性能デバイスの創製だ。

その研究成果の1つが、有機薄膜半導体レーザーの開発だ。有機レーザー活性層に含まれる有機分子を紫外線で励起し、光共振器によって放出された単一波長の光を増幅し発振する。有機薄膜レーザーは既存の無機薄膜

レーザーとは異なり、可視光から赤外光までの広範囲の波長を任意に発振できるのが特徴だ。そのため、光通信やセンシング、ディスプレイなどへの応用が期待されているが、連続発振、すなわち長寿命化が難しく、まだ実用化には至っていない。

安達さんらは、昨年4月に0.03秒の連続発振に成功した(図5)。わずか0.03秒だが、これでも世界最長寿命なのだ。

長寿命化を阻んできた要因はいくつかある。水と酸素によって耐久性が著しく低下すること、有機分子が自ら発振したレーザー光を吸収してしまうこと、発生する熱によって劣化が起

ることなどだ。水と酸素という弱点については、徹底的に排除する環境を用意し完全に封止し克服できた。続いて、レーザー活性層に、発振されるレーザー光を吸収しにくい分子を用いることで、レーザー光の吸収の軽減に成功した。さらに有機薄膜レーザー素子の下層基板に放熱性に優れた単結晶シリコン基板を用いるとともに、上層の保護層に高分子材料の薄膜を接着したサファイアガラスを用いて放熱性を高め、熱による劣化を抑制した。また、光共振器に光学特性が異なる2つの回折格子構造を組み合わせた分布帰還(DFB)構造を取り入れ光損失を低減した。こうして、耐久性の向上、

の通りだ。まず、光を当てると、光を吸収した電子ドナー材料から電子アクセプター材料に電子が受け渡され、「電荷分離状態」が形成される。しかし、電荷分離状態は不安定な励起状態のため、安定な基底状態になろうとする。従来であれば、それによって発光が起こってしまうため、蓄光材料としての役割を果たすことができない。そこで、嘉部さんが工夫したのが、大量の電子アクセプター材料の中に、電子ドナー材料を分散させるという構造だった。それにより、すぐに基底状態に移ることなく、電荷分離状態の長寿命化に成功したのだ。

「電荷分離はドナー材料とアクセプター材料の界面で発生しますが、アクセ

プター材料をより多く使うことで、アクセプター材料が母体材料としての役割も果たしています。そのおかげで、電荷分離状態が安定化し、長寿命化を実現

しているのです。」

ベンチャー企業の創設や国際的な共同研究も

安達さんは、FIRSTやERATOで開発したTADF発光材料と応用デバイスの実用化を目指し、2015年3月には大学発ベンチャー企業のKyulux(キューラックス、福岡市)を設立している。設立後の2016年と今年3月にJSTの研究開発成果の実用化を目指すベンチャー企業を支援する出資型新事業創出支援プログラム(SUCCESS)からの出資を受けた他、昨年には企業主導での実用化開発を行う研究成果最

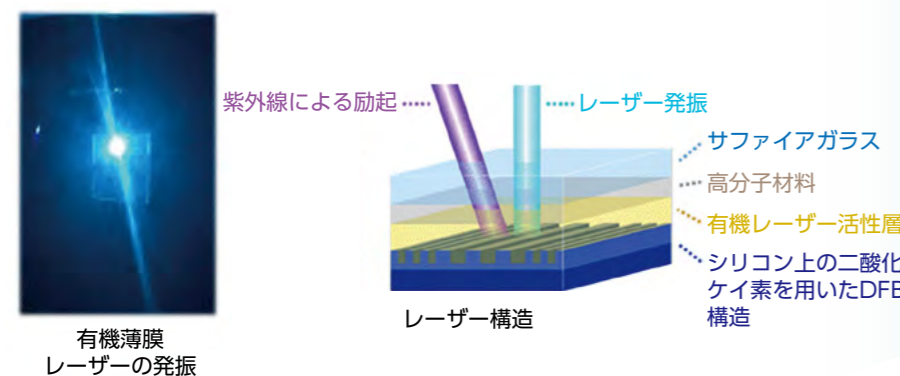


図5 有機薄膜レーザーの光と構造



有機材料を使った蓄光材料を開発した嘉部量太グループリーダー

有機分子の合成を行っている様子



有機EL素子を作るための装置

レーザー発振を阻害する要因の除去、熱劣化の軽減、発振効率の向上を実現したのだ。

「現在は、紫外線による光励起型ですが、実用化のためには電流励起型にする必要があります。ERATOが終了する今年度中には、電流励起型を実現する計画です」と安達さんは意気込む。

世界初の有機蓄光材料

有機薄膜半導体レーザーに並ぶ成果としては、嘉部量太グループリーダーが、昨年10月に世界で初めて開

発に成功した有機材料を使った蓄光材料がある。

蓄光材料とは、太陽光や照明の光を蓄え、数時間にわたって発光できる材料だ。電力を使わず光らせることができるため、現在、時計の文字盤や非常誘導灯などに使われている。

既存の蓄光材料はすべて無機材料で、ユーロピウムなどのレアメタルが使われている。また、合成には、1000度以上の高温処理が必要な上、材料を細かく砕き、粒径のそろった粉にしたり、溶けにくい溶媒に分散したりといった複雑な製造プロセスを必要とする。製造コストがかさむため、用途が

限られているのが現状だ。

それに対し、嘉部さんが開発した蓄光材料はレアメタルを一切含まず、溶媒に簡単に溶けるので、さまざまな基板材料に塗布して使うことができる。透明性を出すことも可能だ。「実用化されれば、塗料や繊維など蓄光材料の新たな用途を拡大できると考えています」と嘉部さんは語る。

作り方も簡単だ。単に電子のドナー材料とアクセプター材料の2つの有機化合物を混ぜ合わせているだけだという。しかし、嘉部さんならではのちょっとしたアイデアが施されている。

この蓄光材料の発光の仕組みは次

適展開支援プログラム(A-STEP)のNexTEP-Bタイプにも採択された。大学で基礎研究を行い、キューラックスで実用化を目指すという体制だ。

「これまで、年間13~14社と産学連携を進めてきましたが、プロジェクトが終了すると開発した技術や知識が分散してしまうという経験を何度もしました。それを避けるため、TADF技術についてはキューラックスに研究開発成果と特許をまとめることにしたのです」と安達さんは説明する。

一方、プロジェクトでは、共同研究の国際化も進めている。プロジェクトが拠点を置くOPERAには、現在、スタッフや学

OPERA内にある装置の数々



大学や研究機関が成功している理由は、世界中から優秀な人材を集めていることにあります。我々もここ福岡を世界有数の有機ELの研究拠点にしていこう計画です。」

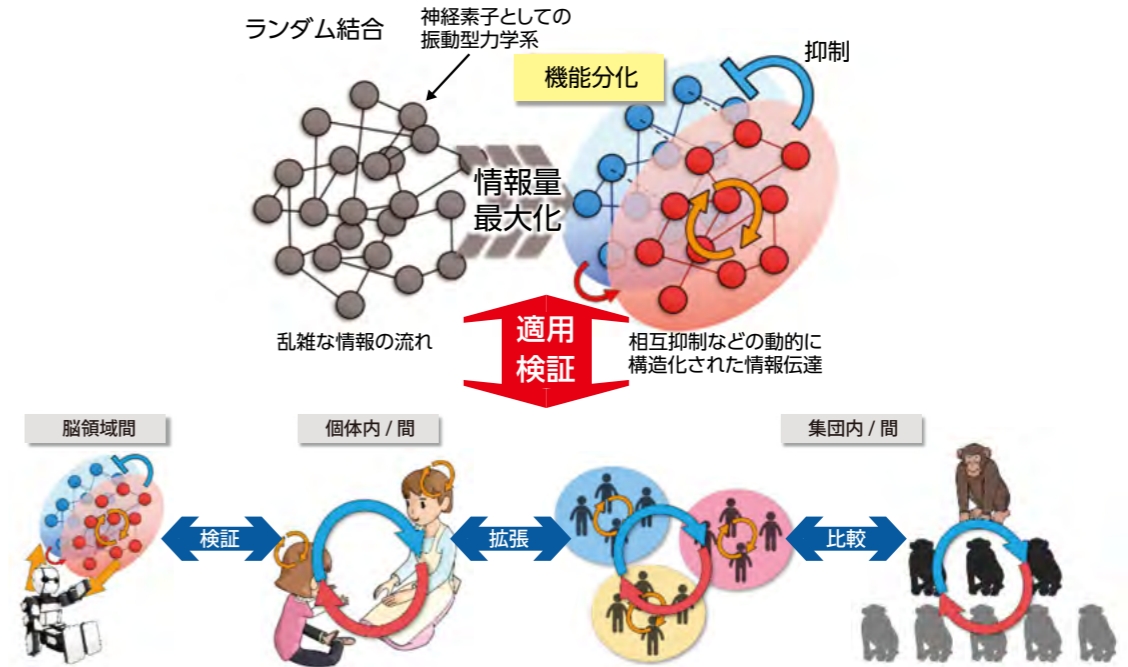
特許で技術や知識の流出を抑える一方で、積極的に国際的な共同研究を推進していくことが日本の科学技術のさらなる発展にとって重要であると安達さんは考えている。

「有機エレクトロニクスの扉はまだ開いたばかりです。有機分子におけるエキシトンの新たな特性を見いだしながら、『分子エキシトン工学』という分野を確立し、次世代の光デバイスにつなげていきたい」と決意を新たにしている。

生を含め約60人が所属しているが、そのうちの約40パーセントが外国人だ。「欧米やアフリカ、アジアなど世界中から優秀な人材が集まっています。米国の

心を数学で解き明かし 人工知能との共生社会をつくる

ロボットや自動運転車など、人工知能と共生する社会の実現が迫っている。通信技術の発達によって急速に複雑化する環境から、人間や人工知能はいかに情報を認識し、機能を発揮していけるだろうか。より高度な人工システムを構築するため、中部大学創発学術院の津田一郎教授は、人間の脳活動や集団行動から機能分化の原理を見いだそうと、2017年10月にCRESTの研究をスタートした。同大の松田一希准教授も研究チームに加わり、解析対象を霊長類の集団行動へと広げ、多様な環境で適応可能な共通原理の探索に挑む。



■図1 脳領域の活動や、個体および集団レベルで人間や霊長類に見られる行動から、複雑な環境に適応して機能分化する原理を探っていく。

脳の機能分化を数理モデル化 複雑な環境に適応するロボットへ

人間の心は数学であると、中部大学創発学術院の津田一郎教授は語る。「古代エジプトやギリシャでは、自分の土地の区画を決めたいという人々の思いを実現するため、土地測量が発達し、図形を調べる幾何学の起源となりました。さらに、土地の広さを知らうとする心から、面積を測る解析学が生まれました。物を分類する心の動きを形にしたのが、1つ、2つと数える代数学です」。

数理科学者である津田さんは、心

をつくる脳の活動を数学で解明することに長年取り組み、その複雑な神経ネットワークの数理モデルを構築してきた。

脳の構成部品である神経細胞は、単独ではその動きに意味がなく、脳というシステムに入って初めて機能する。自転車は、ハンドル、ブレーキ、タイヤなどの部品で成り立つが、部品だけでは機能しない。組み立てられ、自転車というシステムを構成することで、部品の動きが意味を持つ。

脳はシステムとしての目的や条件に応じて部品になるものがすぐさま変わるという点で、自転車と異なる。システム全体に環境からの拘束条件がかかると、部品間の相互作用により、部品レベルで、あるいは、部品システムレベルで、新たな機能が発現(機能分化)する。

「神経細胞同士の自律的な相互作用の結果、部品だけでは持ちえなかった高度な情報処理機能を獲得します。脳が機能分化する条件を明らかにし、数理モデル化すれば、人間との相互作用で瞬時に学習し、適切に振る舞いを変えるロボットの実現にもつながるでしょう」と津田さんは言う。

脳神経細胞の結合を模倣したニューラルネットワークは、深層学習の基盤となり、人工知能を飛躍的に発達させてきた。津田さんは機能分化の数理モデルを導き出し、多様な環境にも適応できる人工システムの設計原理にしたいと考えている。

優れた集合知を生み出す 相互作用を探る

機能分化の鍵を握るのが、相互作用だ。生物は多様なレベルの相互作用を繰り返して、複雑な環境の変化にも柔軟に適応し、生き延びてきた。

「脳の活動変化の他、個人や集団における相互作用を解析します。人間や霊長類の行動から、多種多様な相互作用に共通する適応原理を見だし、数理モデル化していく予定です」と、津田さんは研究の目的を語る(図1)。

その一例として、親子を同時に計測可能な脳磁図を用いて、対面時の脳活動の変化を計測している。子供の脳の発達段階において、他者と接した際の相互作用による機能分化の原理に迫ることが狙いだ。

「三人寄れば文殊の知恵」といわれ

るように、複数の人間が集まることで、個人の能力を上回る知恵が得られることがある。これを「集合知」と呼ぶ。多くの生物は、いわば部品である個体同士の相互作用により、集団としての機能を持つ。しかし、集団内の相互作用がうまく働かず、「烏合の衆」と化することもある。その境目はどこにあるのか。

「通信技術の発達によって、人間を取り巻く環境は複雑化し、相互作用は質的にも量的にも変わりました。うまく相互作用しないと情報を取得できず、生きていけません。個人よりも機能の優れた集合知を生み出し、複雑な環境に適応して能力を拡大できるような相互作用の条件を探りたい」と津田さんは意気込む。

まつだ いっき 松田一希

中部大学
創発学術院 准教授

北海道大学大学院地球環境科学研究科博士課程修了。博士(地球環境科学)。京都大学霊長類研究所特定助教などを経て、16年より現職。専門分野は霊長類学で、東南アジア、アマゾン、アフリカの熱帯林で野生霊長類の生態観察に取り組む。

$$\delta \int_0^T \left\{ C(x, t) + \mu \left(x, \frac{dx}{dt}, t \right) \left(\frac{dx}{dt} - f(x, \lambda) - G(x, t) \right) \right\} dt = 0$$

オスの鼻が大きいほど 群れのメスが増えるテングザル

霊長類学を専門とする中部大学創発学術院の松田一希准教授は、霊長類の集団内、集団間の相互作用の解析を担当している。

10年以上にわたって観察し続けているのが、テングザルだ。東南アジアのボルネオ島に生息し、オスはその名の通り、天狗のように長く大きな鼻を持つ(図2)。

「テングザルは1頭のオスが複数のメスと子で、ハーレム型の群れを形成します。しかも、テングザルは人間と同じ重層社会で、複数のハーレムが集まり、さらに大きな集団を形成しています。人間の社会の成立要因を探るた

めのモデル生物になります」。

通常、天敵の数や餌の量などが拘束条件となって群れを形成する。拘束条件が過酷な環境であるほど、集団を作りやすい。しかし、ボルネオ島は餌が豊富だ。テングザルを襲う捕食動物はいるものの、熱帯の森には身を隠す場所が多く、他にも標的になる動物がたくさんいる。小さな集団でも生きていける環境にもかかわらず、重層社会という大きな群れを作る機能が発現するのは、進化の過程でどのような拘束条件がかかっているのか。

遺伝的にヒトに近いチンパンジーなどの大型類人猿は単層社会で、最小単位の集団である群れは縄張りを持ち、群れ同士は排他的である。ヒトから遠く離れた系統であるテングザ

ルの社会形成メカニズムが、人間の社会の重層化をひも解くモデルになると期待がかかる。

鼻が大きくなった謎を 生態や形態データで解明

テングザルのオスはなぜ大きな鼻を持つのか。チャールズ・ダーウィンは、動物の世界でオスが派手で装飾的な形態を持つのは、メスをめぐってオス同士が争った結果であると、「性選択による進化」を唱えた。松田さんはこの進化のシナリオを霊長類で初めて実証し、謎の一端を解明した。

2011年から15年にかけて、野生のオス18頭の鼻の長さや幅、体重、睾丸の容量を測定した。また生態調査のデータから、ハーレムを持つオスの鼻の大きさと、所属するメスの数を割り出した(図3)。その結果、鼻の大きなオスほど体重が重く、睾丸の容量が大きく、そしてハーレムのメスが多いことがわかった(図4)。

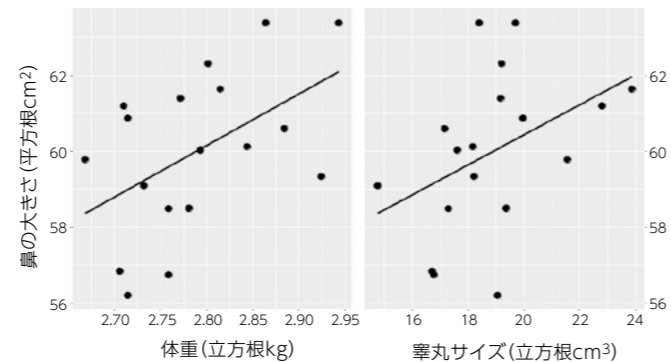
また国内外の動物園で飼育されている7頭の鳴き声を録音し、体重と鼻それぞれの影響を受けている音域を

■図2

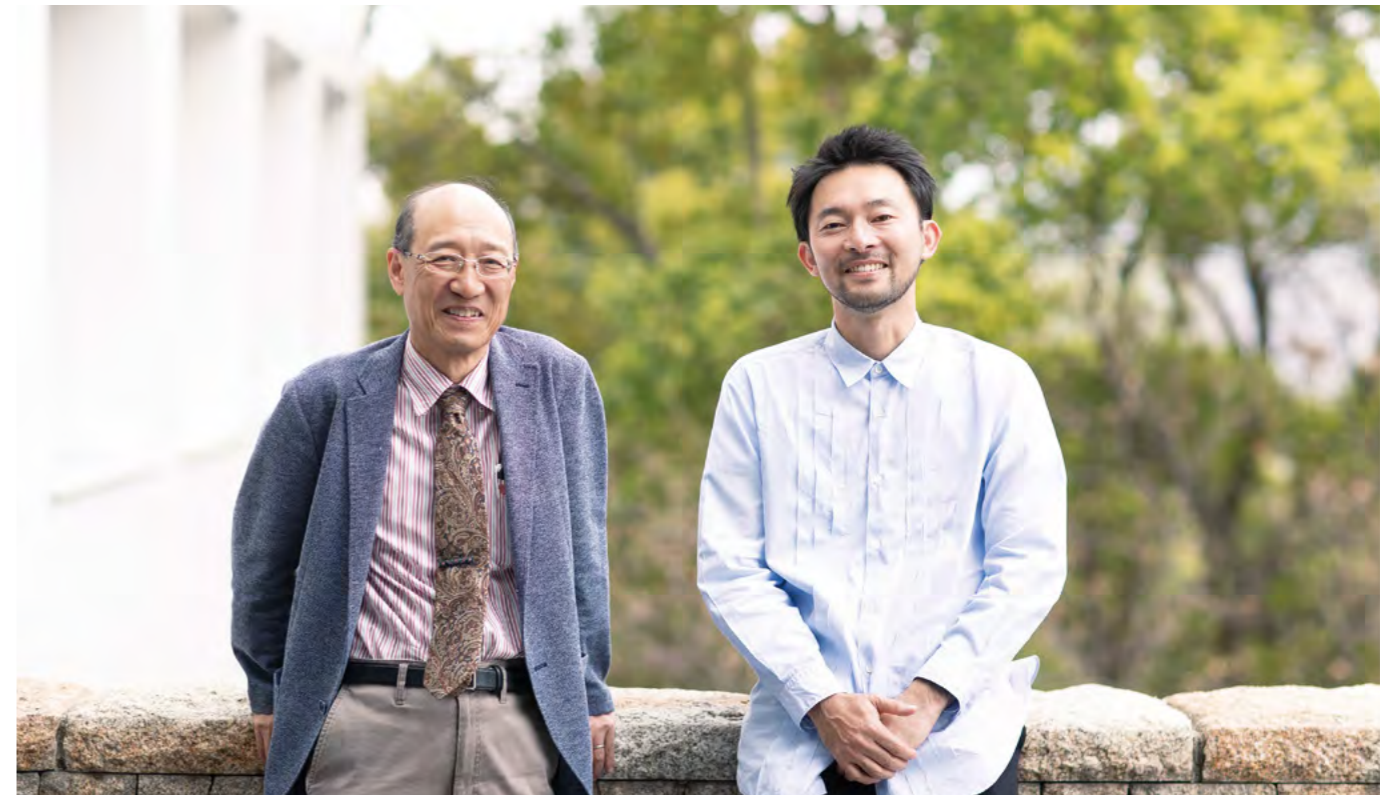
後ろから2番目がハーレムのオス。長く大きな鼻を持つのはオスだけの特徴だ。オスの体重は約20キログラム。メスはその半分くらいの重さしかない。



■図3 テングザルは絶滅危惧種なので捕獲はせず、正面から撮影した顔写真を用いて、パソコンの画像解析で顔に対する鼻の比率を計測した。



■図4 オスの鼻の大きさと、その体重と睾丸の容量を調べたところ、オスの鼻が大きいほど体重が重く、睾丸が大きいことが明らかになった。



松田さん(右)が集めた霊長類の形態や生態データを、津田さん(左)が数理モデル化する。

解析したところ、鼻が大きいほど声が低くなるという相関関係が判明した。すなわち、オスの声の低さは肉体的に強く繁殖能力が高いことの証で、密林で顔が見えない状況でも、オスの鼻の大きさは聴覚的にメスを魅了する指標となっている。

複数のハーレムが集まった重層社会は、外敵から身を守るために非常に有利だ。一方で、必然的にオス同士の距離が近くなり、オス同士の競合は高まるはずだが、鼻という視覚的にわかりやすい強さの指標があるおかげで、無駄な争いをせずに済む。

松田さんはこれまで一方向的な進化モデルを描いていたが、CRESTに参画したことで、形態や社会、音声など全ての生物学的要素が相互作用し、それぞれの要素に機能をもたらしていることに気付いたという。「鼻の形が特殊化し、重層する大きな集団の形成を可能にしたのは、集合知がうまく機能した良い例ではないか」と思い至った。重層社会を作るからこそ、肉体的な強さや繁殖能力の高さを鼻の大きさや声の低さで示すように進化していると、新たなモデルを提案した。

さまざまな生物学的要素がどう相互作用し、テングザルの性選択や群れの形成に影響を与えているのか。鼻の大きさ以外の要因も視野に入れ、松田さんがフィールドワークでデータを集め、津田さんが数理モデル化していく予定だ。

環境に即時適応する原理を 医療の高度化に役立てる

画像診断で明らかになった脳の神経ネットワーク構造を参考に、津田さんは機能分化の数理モデルを構築し、どのように環境と相互作用するのか解析を始めている。

「コンピューター上に再現したヘビ型ロボットに数理モデルを組み込み、数値シミュレーションで検証しています。ヘビが移動する地面の滑らかさを変化させると、体のくねらせ方がどう変わるのかを調べています。これを基に、機能分化の数理モデルをロボットの学習に展開します」。

ヘビ型ロボットが地面の状態に最適な動きを速やかに獲得できれば、その数理モデルは環境に適応する原理と

して有効だといえる。

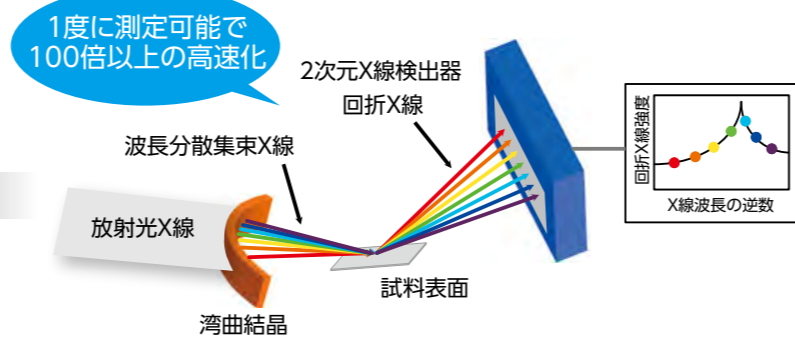
複雑な環境に即時適応する原理は、こうした人工システムの開発にとどまらず、多様な用途に活用できると、津田さんは説明する。

「数理モデル化の延長として、体内の複雑な環境と、そこで起こるさまざまな生命現象を規定する要因も見いだせると期待されます。例えば、全国の病院の診断と治療行為、さらには治療結果のデータを集めれば、体内の代謝ネットワークに影響を及ぼす拘束条件を解明できるはずで、未病状態の推測や治療効果の予測もできるようになるでしょう」。

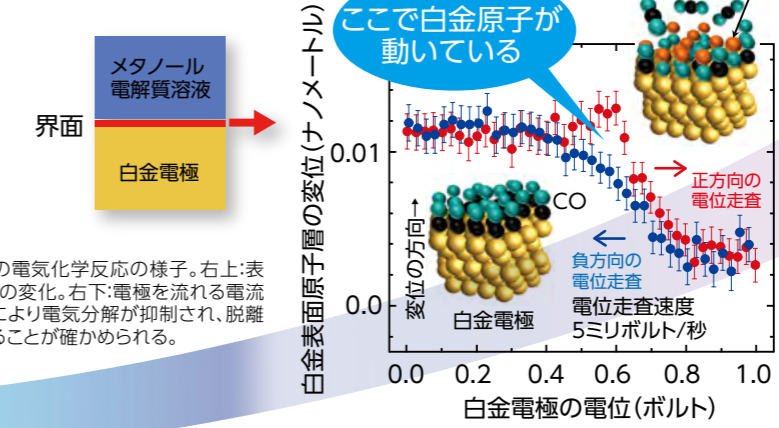
約30年前、津田さんは脳の連想記憶メカニズムに関連する2つの数理モデルを提案した。それぞれのモデルが正確であることが、昨年引き続き今年3月、海外の数学者らのコンピューターを用いた数理解析によって厳密に証明された。津田さんは脳科学における数学的分析の先鞭をつけてきた。次はどのような数式で人間の心が表現されるのだろうか。新たな数理モデルがまた、生まれようとしている。

第13回 原子の動きをリアルタイムではかる

固体と液体の界面での原子の動きを解明！



■図1 単一の波長のX線ではなく、いろいろな波長が混じった「白色X線」を用いる。湾曲結晶に照射すれば、プリズムに当たった可視光のように波長の異なるX線を異なる入射角で試料の1点に当てられる。



■図2 メタノール電池の電気化学反応の様子。右上:表面の原子の位置の変化。右下:電極を流れる電流からCOの吸着により電気分解が抑制され、脱離により促進されることが確かめられる。

環境負荷の低減やエネルギー問題の解決に向け、高効率の燃料電池や蓄電池の新技术が注目されている。開発には、電池内部の電気化学反応の深い理解が不可欠だ。このため、固体の電極や触媒と液体の電解質が触れ合う固液界面において、原子レベルでの構造変化を電池の動作状態に近い時間スケールで追跡することが求められる。産業技術総合研究所物質計測標準研究部門の白澤徹郎主任研究員は、新しいX線回折法の開発に挑み、固液界面の構造のわずかな変化を従来の約100分の1に当たる1秒以下の時間スケールで捉えることに成功した。

物質表面の化学反応をリアルタイムで観察したい

物質の構造を原子レベルで調べる方法として、X線回折がある。X線を入射角 θ で結晶に当たった時、X線の波長を λ 、隣り合う原子面の間隔を d とするとブラッグの法則の式「 $2d\sin\theta=n\lambda$ 」が成り立つ時に強く反射する。これは「回折」と呼ばれる現象だ。通常の実験室にあるX線装置は単一の波長 λ しか使えない。そこで試料を動かしてX線の入射角 θ を変えながら回折のピークを探し、いくつかのピーク位置の角度から対応する間隔 d を求め、結晶構造を決定する。

しかし、化学反応で起こる表面構造のわずかな変化は、ピークとピークの間に見られる極めて弱い反射X線の中に潜んでいる。その強度は回折線のピーク強度の100万分の1以下と弱く、従来の方法で捉えることは困難だ。また、測定には数十秒かかるため入射角度を

変えて測定する間に化学反応が進んでしまうので、反応中の変化をリアルタイムで捉えることはできなかった。

白澤さんは、この難題に挑んだ。単一波長のX線ではなく、波長が連続的に分散している「白色X線」を用いれば、入射角度を変えずに、一度の照射で回折線の分布を同時に得られると考えたのだ(図1)。原理的にはごく短時間での測定が可能になり、反応が進む過程を知ることができる方法だ。

「3種の神器」をどうやって手に入れるか

白澤さんによると、X線回折法には「3種の神器」が必要だという。「光源、光学系、検出器」の3つです。この3つがうまくそろって初めて、新しいX線回折法の開

発ができるのです。光学系で最も重要な部品となるシリコン湾曲結晶は、すでに別のX線分光の分野で広く使われていた。白澤さんはこれをX線回折に応用しようと考えた。これは誰もやっていない試みだった。

「一方、光源となる強い白色X線源も高感度のX線検出器も研究開始当初にはありませんでした。この2つをどうするかが課題になりました」と白澤さん。

光源については、回折X線の強度分布を正確に捉えるために、波長に対して強度が滑らかに分布する白色X線が必要だ。求めるX線を作り出せる施設が日本に1つだけあった。高エネルギー加速器研究機構のシンクロトロンPF-ARだ。電子を光速に近いところま

で加速させ、多くの磁石を並べた「アンジュレーター」という装置にくぐらせて、電子を何回も蛇行させながら放射光を発生させる。放射光は一般に赤外線から可視光、紫外線、加えてX線などさまざまな電磁波を含むが、PF-ARでは、他の施設にはない滑らかな波長分布を持つ白色X線を取り出せる。これを光源とすることにした。

「一番ハードルが高かったのは検出器でした。表面のわずかな原子位置の変化を捉えるには、回折X線のピークの裾野部分を正確に測定しなければなりません。その強度はピーク強度の100万分の1しかありません」。家庭で使うカメラのレンズに強い光が入るとハレーションを起こすように、強いX線のごくわずかな変化を捉えられる検出器はまだなかった。

しかし幸運なことに、研究に着手した頃にピクセルアレー検出器(PILATUS)が開発されていた。X線を検出するCMOS半導体素子をいくつも縦横に並

べて画像として検出するという技術だ。世界最高性能の放射光を生み出せる理化学研究所の大型放射光施設「Spring-8」で使用して実績を積み、ハレーションを起こすことなく測定できていた。白澤さんは、すぐにこれを使うことを決めた。

こうして「3種の神器」を使った実験装置で測定を開始したのだ。

電極の表面の変化をリアルタイムで捉えた

この研究はさきがけに採択され、専用の測定装置を作製できた。それまでのように実験のたびに装置を組み立てる必要がなくなり、使用時間が限られた放射光施設でも着実に研究を進められた。そして、ついに2017年秋にゴール。従来の方法より100倍以上の高速化に成功し、1秒以下の短時間でのデータ取得が可能になった。

重要な反応をリアルタイムに調べられるこの方法は、燃料電池電極の劣化過程や蓄電池の界面反応過程の追跡

への応用が期待されている。

白澤さんは、手始めに燃料電池の一種であるメタノール電池の電極表面付近の構造変化を調べた。この電池の問題として、反応の過程で一酸化炭素(CO)が白金の触媒電極を覆って反応を止めてしまう「CO被毒」がある。電極に正方向の電荷を流すとCOは剥がれ、反応が復活することは知られていたが、電極表面でどのような変化が起こっているかは分かっていなかった。

今回、構造のリアルタイムでの観察により、電位の変化に伴って表面原子の位置が変化することや、COが電極表面に吸着したり剥がれたりする様子が明らかになった(図2)。この知見を用いればさらなる課題を解決に導けるはずだ。液体を使わない全固体電池の研究開発への応用など、ここから開発のブレークスルーが生まれることが期待されている。

「ただし、この方法は物質の表面が平らなモデル材料にしか適用できません。電池の触媒などでは、表面積を増やすために粒状の材料が使われるので、そういった材料も測定できるように実験手法を検討していきます」と、白澤さんは先を見つめる。将来は、物質の変化をさまざまな空間スケールや時間スケールで段階的に捉えられる計測技術を開発したいという。

物質表面で繰り広げられる原子の構造変化をより詳しく知る計測法を得たことで、物質世界に入る新しい扉が開かれようとしている。

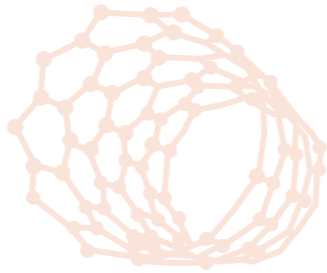
しらすわ てつろう
白澤 徹郎
産業技術総合研究所
物質計測標準研究部門 主任研究員
表面科学、表面回折学を研究領域とし、X線回折をベースとした計測技術の開発に取り組み。相界面の動的構造変化の観察を可能にし、材料開発に役立てたいと語る。13年よりさきがけ研究者。
(右:湾曲結晶の位置を示しながら装置の説明をする白澤さん)



湾曲シリコン結晶
「この湾曲結晶が肝です」と白澤さん。PF-ARの強い放射光から得た連続する分散波長X線を、絶妙に湾曲させたシリコン結晶に照射し、試料の表面の1点に収束、回折させる。さまざまに回折したX線は強度の範囲がとて広く検出が難しいが、新しく開発された検出器は全てを一度に捉えられる。

研究成果

戦略的創造研究推進事業CREST
研究領域「ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出」
研究課題「フレキシブルマテリアルのナノ界面熱動態の解明と制御」

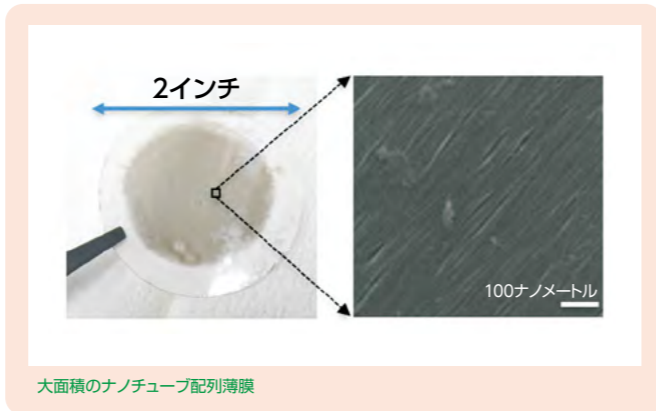


単層カーボンナノチューブ薄膜の特異な光吸収特性を発見

産業から出る排熱の約70パーセントは200度以下です。有効利用の方法がなく大量に環境中に放出されています。今後IoT社会を実現するためにも、環境から効率良く熱エネルギーを取り出せる、柔軟で、伸縮性を備えた高性能な熱電変換素子の開発が求められています。半導体型単層カーボンナノチューブ自体は優れた熱電変換特性を持つことが知られていますが、電気特性の制御された大面積のフレキシブルな薄膜として利用することは困難とされてきました。

首都大学東京の柳和宏教授らは、米ライス大学の河野淳一郎教授らと作製した単層ナノチューブが一方向に配向した直径2インチに及ぶ大面積薄膜

を用いて高密度に電子を注入する実験を行いました。偏光を用いて薄膜の光吸収特性を観測したところ、ゲート電圧を加えることによって高密度の電子が注入され、ナノチューブに平行な偏光では光が吸収されず、垂直な偏光では強い吸収が起きるといった新たな現象がわかり、ナノチューブが配向していることと、電気的に制御できることを検証しました。



大面積のナノチューブ配列薄膜

配列したナノチューブ薄膜の性質は未知な点が多くあり、今後、配向カーボンナノチューブ薄膜の熱電特性を解き明かし、高性能なフレキシブル熱電変換素子の実現を目指します。

研究成果

研究成果展開事業 研究成果最適展開支援プログラム(A-STEP)
フィジビリティスタディステージ 探索タイプ
研究開発課題「解凍精液から元気な精子だけをオンサイトで簡便に得るための技術開発」

直進よりも蛇行が良い
泳ぎ方で繁殖に有利なウシの精子を選別

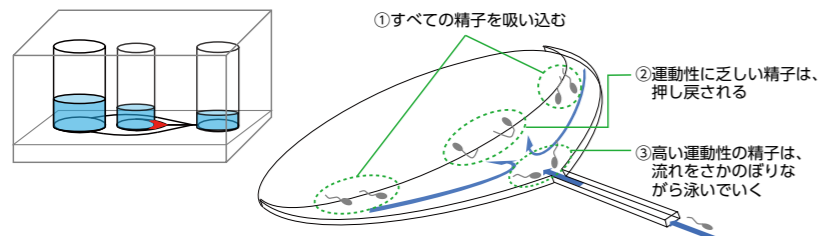
日本では、家畜用の牛の繁殖の主流は人工授精ですが、受胎率が低下傾向にあり、繁殖性の改善のためにさまざまな試験研究が行われています。人間の不妊治療では運動性を失った精子を取り除くなど、活発な精子を集めるといった前処理がされていますが、家畜の繁殖では凍結した精液がそのまま用いら

れています。また、従来の活発な精子を集める技術では集められる精子の数が少なく、体外受精はできても処理後そのまま人工授精に用いることはできません。産業技術総合研究所の山下健一研究グループ長らは、精子が流れをさかのぼるように運動することに注目し、より健全な精子を多く集められる選別器具を

開発しました。また、直線に泳ぐよりも、蛇行しながら泳ぐ精子の方が、受胎率が高いことも見いだしました。

開発した選別器具は3つの筒状の液だめ構造を持ち、液面の高低差で精液を送り出します。さらに中央にある液だめの底面に三日月型の構造を設置し、運動性の高い精子だけを誘導する流れになるよう設計しました。この選別器具で集めた精子の質を調べたところ、DNAに損傷を持つ精子の割合が処理前ではおよそ7パーセントだったのに対し、処理後は約0.4パーセントへと大幅に改善されました。

今後、健全性の高い家畜繁殖用精液の大量生産や、精子の生化学分析の前処理技術としての活用を目指します。



運動性精子選別器具の概略図(左上)と三日月状構造部内での流れの様子(右)

研究成果

戦略的創造研究推進事業さきがけ
研究領域「熱伝送のスペクトル学的理解と機能的制御」
研究課題「生体高分子の階層的な集合化を利用したナノスケール熱動態の理解と機能制御」



簡便な方法でウイルスでできた熱伝導フィルムの開発に成功

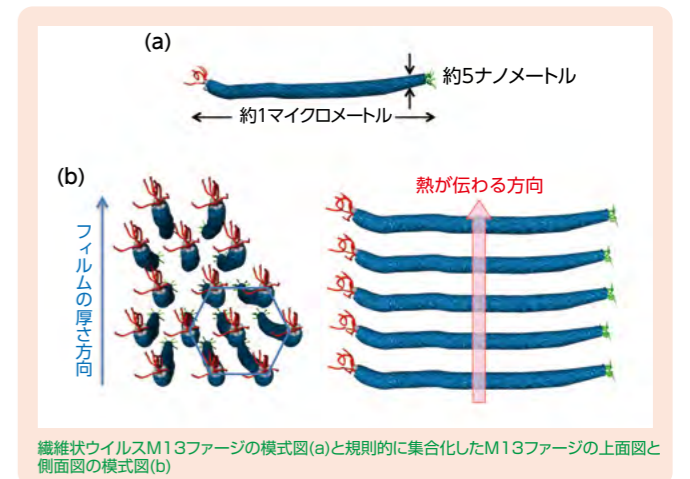
電気製品や電子機器の小型化を受けて、優れた熱伝導材料の開発が求められています。電気を絶縁し、柔らかく簡単に加工できる優れた材料として、有機系高分子材料が有用であると考えられています。しかし、金属やセラミックスと比較すると熱伝導率が2~3桁低い点が問題となっており、有機系高分子材料の熱伝送効率を向上させる簡便な手法の開発が求められていました。

東京工業大学の澤田敏樹助教授らは、M13ファージという無毒でひも状の構造を持つウイルス(繊維状ウイルス)を集めて作ったフィルムが、熱伝導材として機能することを発見しました。分子が溶解した水溶液を乾燥する際、端の部分に効率良く集積する「コーヒーリング

効果」を応用したところ、この「ウイルスフィルム」は、端部において無機材料のガラスに匹敵する高い熱拡散率を示し、階層的に集まる生体由来素材が、熱伝導材として有用であることを見いだしました。

今後、有機系高分子材料に簡単な手法で高い熱伝導性を持たせたり、新しい熱伝送の機構を解明したりするだけでなく、ウイルス以外

のさまざまな天然由来素材のデバイス材料としての開発にもつながると期待されます。

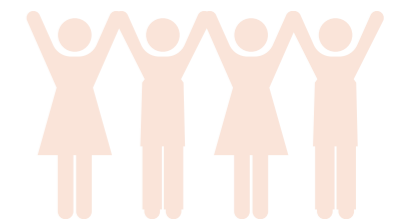


繊維状ウイルスM13ファージの模式図(a)と規則的に集合化したM13ファージの上面図と側面図の模式図(b)

開催報告

ダイバーシティ推進室

女性研究者の活躍促進に向けた取り組みを議論



シンポジウム「女性研究者と共に創る未来」が4月14日、一橋講堂(東京・千代田)で開かれ、約150人が参加しました。

講演では、人工知能(AI)の研究開発におけるダイバーシティの重要性(浅川智恵子氏)、女性研究者が過小評価されている現実と無意識の偏見の存在(鳥居啓子氏)や九州大学で教員の女性枠

採用を行った結果、論文数が同大学の男女の各平均より多かったこと(若山正人氏)、男女混合チームから生み出された特許の経済価値が男性のみのチームより平均約20パーセント高いこと、さらには女性の参画で男性研究者が活性化するデータが示されました(餅友佳里氏)。

パネル討論の第1部では、課題の解決方法に男女差があるため研究開発に

も男女混合チームが重要であることや効果的なチーム作りの方策、評価や人事の適正化のためには経営層への女性登用が必要であることなどが活発に議論されました。第2部では、学生向けなど、日本にはない多彩なファンディングや研究者への投資、海外における女性、若手研究者の活躍を支える仕組みが紹介されました。

海外の日本人女性研究者間、および日本の女性研究者とのネットワーク作りや海外との共同研究に対する研究投資など、多くの提案がされました。

JSTでは本シンポジウムでの議論を踏まえ、女性研究者の参画が増えるような取り組みを検討し実施していく予定です。



講演、パネル討論、あいさつで登壇した参加者

Profile

神奈川県出身。2010年 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了、博士(工学)。日本学術振興会特別研究員を経て、15年より現職。16年4月より情報処理推進機構(IPA)未踏事業プロジェクトマネージャー、同年10月よりさがけ研究者。趣味は手芸、ピアノ。専門はコンピューターグラフィックスおよびユーザーインターフェースで、子供を対象としたITのワークショップ講師を務める。3児の母であり、男女共同参画活動にも力を入れている。



自分が好きなものを研究に

明治大学総合数理学部
先端メディアサイエンス学科
専任准教授

五十嵐悠紀

Yuki Igarashi



◎ 研究テーマを一言でいうと?

▲ 初心者向けの手芸設計支援システム

例えば初心者がオリジナルのぬいぐるみを作ろうとしたとき、縫い合わせて立体になる型紙をデザインすることは、専門知識がないと難しい作業です。そこでコンピューターグラフィックス(CG)を使って、描かれたスケッチを基に型紙を生成してくれるシステムを作りました。手足や耳などをスケッチに書き足していくたびに、物理的制約をシステムが計算して型紙を生成していきます。ビーズ作品やステンシルといった他の手芸用支援システムも研究開発しています。これらのシステムを子供たちに実際に使ってもらうワークショップも開催し、そこから得られた知見を基に、改良を重ねています。

今後は、各家庭からネットワークを通じてワークショップに参加できるようにしたり、発展途上国の方々の重要な収入源である工芸品製作を支援したりすることも考えています。



◎ 研究者になったきっかけは?

▲ 小さい頃からの憧れと情報科学との出会い。

子供の頃から算数や理科が好きでした。自動車会社で働いていた父がよく自宅でプログラミングをしている姿を横で見っていました。一方、母は被服学を学んでいて私のワンピースやかばんを作ってくれました。現在の研究は、まさに両親の要素を融合したような内容です。研究者への道を選んだきっかけもCGと手芸を組み合わせたら、まだ誰も研究していないことがたくさんあったからです。

また、大学卒業後には大学院があると父から聞いて、将来は何かを極めたい、博士号を取りたいと思うようになりました。大学は数学科に進もうと考えていたのですが、オープンキャンパスで、大好きな「数学」と「物理」と「コンピューター」が使える情報科学という分野があることを知り、迷わず進学を決めました。

◎ 研究者を目指している女性にアドバイスを。

▲ 自分だからこそできることを大切に。

情報系は身近で面白い分野ですし、技術はどんどん進歩しています。「その技術をこう使えば、もっと面白いことができる」というような発想の転換を大切にしてほしいですね。

日本では女性研究者はまだ少ないです。でも、私の「CGと手芸」というテーマのように、自分だからこそ気付けることもたくさんあると思います。例えば遠隔コミュニケーション支援の研究は昔から多く行われていますが、その中で「遠距離恋愛」をテーマにしている女性研究者もいます。「自分だからこそできること」を大切に、楽しみながら研究に取り組んでいきたいと思っています。

