

産総研 LINK

技術を社会へつなげるコミュニケーション・マガジン

01
2020

JANUARY

NO.28

CROSS
LINK

P02



インフォマティクスで超高速の材料開発

バイオエタノールから
タイヤゴムをつくる

Fujitani Tadahiro / Choe Yoong-kee / Shinke Yu

NEW
TECHNOLOGY

P08



付着力、手触り、光学特性などを自在にコントロール

表面に“しわ”をつくって
特性を変化させる

Ohzono Takuya / Teraoka Kay

NEW
TECHNOLOGY

P12



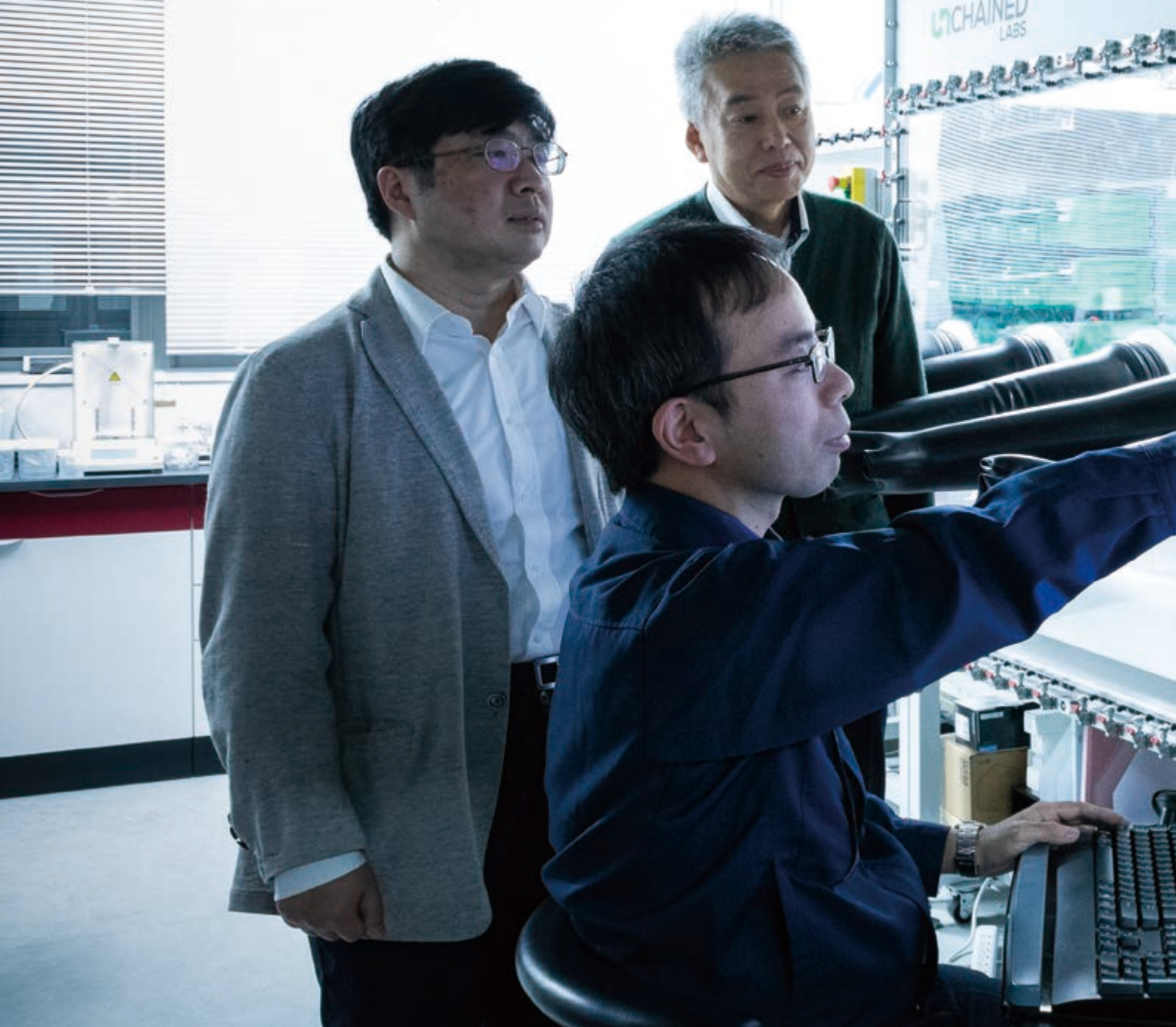
材料の世界に新たな研究分野を生み出す

企業の要望に応えた
窒化物系圧電材料の開発で巨大市場を狙う

Akiyama Morito / Uehara Masato

バイオエタノールからタイヤゴムをつくる

インフォマティクスで超高速の材料開発



KEY POINT



2016年にスタートした「**超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)**」。産総研はこのプロジェクトで、インフォマティクス(情報科学)、計算科学や人工知能技術(AI技術)を活用したアプローチで、新しい機能性材料の超短期間での開発に成功した。2019年には**横浜ゴム**との共同研究により、**バイオエタノールを原料とした合成ゴム**を完成させ、**非石油原料を使ったタイヤ**の実用化が動き出している。



触媒化学融合研究センター
総括研究主幹

藤谷忠博

Fujitani Tadahiro



機能材料コンピューショナル
デザイン研究センター
多階層分子シミュレーション手法開発チーム
主任研究員

崔 隆基

Choe Yoong-kee



先端素材高速開発技術研究組合
(ADMAT)
技術部
出向元・横浜ゴム株式会社

新家 雄

Shinke Yu

材料開発にインフォマティクスを活用

新しい機能性材料を開発するには、一般に、とても長い時間がかかる。どの物質をどう配合し、どのような触媒を使って、どのような条件で反応させるのか。もっと活性の高い触媒はないのか。これまでの化学合成の世界では、そういった原料選び

や条件設定は、すべて技術者の経験や勘に基づいて行われていた。

さまざまな試行錯誤を経てよい反応が起こる物質が見つかって、そこから最適な構造や組成を見いだすまで、少しずつ条件を変えて実験を繰り返し、評価・検証を行っていかねばならない。材料開発は、地道な作業の積み重ねなのだ。一つの

機能性材料を開発するために10年かかることも珍しくはない。

これまで材料開発は日本の得意分野とされてきたが、他の国が追い上げてくる中、日本が国際競争力を維持し、強化していくには、いかにスピーディーに新しい機能性材料を開発し、確実に実用化につなげていけるかが勝負となる。しかも、常に社会から求められる材料を次々に創出し続けていかななくてはならない。社会の変化が激しい今、これまでのように開発に長い時間をかけているわけにはいかないのだ。

では、どうしたら短期間で新しい機能性材料を開発できるだろうか。現在、期待されているのが、材料開発の分野でインフォマティクス(情報科学)を活用する方法だ。すでに世界中で、計算科学や人工知能技術(AI技術)を用いた新しい材料開発手法の創出が試みられている。

もちろん日本も例外ではない。材料メーカーが個別に取り組んでいるだけではなく、2016年に立ち上がった「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)」*では、産総研と先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)が先頭に立って、3年間、開発手法と機能性材料の実際開発に関して研究を進めてきた。ここで紹介するバイオエタノールからブタジエンを生成する世界最高の生産性をもつ触媒システムも、このプロジェクトが生んだ成果である。

バイオマスから タイヤ用の合成ゴムをつくる

自動車のタイヤに使われるゴムには天然ゴムと合成ゴムがあり、現在はほぼ半々の割合で使用されている。合成ゴムの原料は石油精製時の副産物であるブタジエンという物質で、合成ゴムをつくるには石油系原料を大量に使う必要がある。

「バイオ系原料から合成ゴムがつかれるようになれば、世界で生産されるタイヤの半分以上を、石油系原料を使わず、CO₂も排出しないゴムで製造できることになります。そう考えると需要は大きい。私たちはバイオエタノールからブタジエンをつくることを開発のターゲットと決めました」

プロジェクトで実際に材料を試作するプロセス技術チームの取りまとめ役を担う、触媒化学融合研究センターの藤谷忠博は言う。藤谷はこれまで化学メーカーと共同でバイオエタノールからポリプロピレンを合成するなど、バイオマスから化学製品を

つくる研究を行ってきた。今回、共同でこのテーマに取り組むのは、ADMATに参加している横浜ゴムだ。産総研と新しい機能性材料の超高速開発に取り組んでいるADMATは、18社から出向してきた研究員が集まる組織で、そこから新家雄をはじめ数名の横浜ゴムの研究者が加わった。

「横浜ゴムはタイヤメーカーで、原料開発は主要ビジネスではありませんが、タイヤの材料であるゴムの脱石油化は大きな課題であると考えてきました。原料メーカーの開発を待つだけでなく、まずユーザーである自分たちから動く必要があるのではないかと、これまでもゴムの原料を石油系原料からバイオマス原料へ転換する方法を模索してきたのです」(新家)

バイオマスから化学材料をつくる産総研の技術シーズと、バイオマス由来のゴム原料を開発したい横浜ゴムのニーズがうまく合致したかたちだ。

「自動車メーカーは今、CO₂排出量削減のために車体の一部をバイオプラスチックからつくっています。タイヤもバイオマスからつくることができれば、さらに自動車関連のCO₂排出量を削減することにつながります」(新家)

2016年、地球環境にも貢献する最先端の材料を開発することを目指して、ブタジエンをバイオエタノールから高効率に生成する触媒開発がスタートした。

触媒の候補物質を シミュレーションで短期間で発見

まず行うのはシミュレーションやデータ解析を駆使した物質探索だ。このプロセスは機能材料コンピュータショナルデザイン研究センターの崔隆基が担当した。崔は量子化学の専門家で、長く化学反応のシミュレーションの研究開発に携わっており、触媒候補となる活性物質を探すのにうってつけの人材だった。

「バイオエタノールからブタジエンをつくる触媒であれば、金属酸化物から候補物質が見つかると考えられました。そこで、さまざまな金属酸化物の原子構造や原子の振動エネルギーなど、あらかじめわかっている情報をシミュレーションソフトに入力し、それらのデータをもとにバイオエタノールとそれぞれの金属酸化物の一連の反応を計算、金属酸化物の遷移状態や表面の状態などをシミュレーションし、触媒の反応条件や分子構造を検討していきました」(崔)

触媒反応をシミュレーションしていくと、ディスプレイに反応活性の強弱を示すグラフが現れる。その形状から、触媒としての性能が高いのはどの物質なのかを判断していく。

「このような物質の活性の強弱についての情報は、化学反応の遷移状態の構造を知ることが必要ですが、この情報は実験では決して得られないもので、現在は計算で得られるようになったわけです」

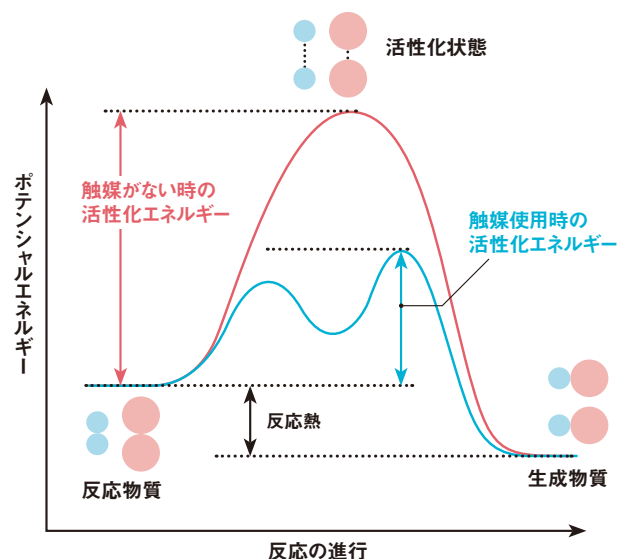
慎重にシミュレーションを進めた結果、触媒としての性能が高そうな物質を複数見いだすことができた。その中で実際にどれを候補とするのかについては、過去の文献なども参照しながら当たりをつけ、成果の出そうないくつかの物質に絞り込んだ。

研究開発をスタートしてから有望な候補物質を見いだすまでの期間は約1年半。従来の方法に比べ、この段階で、すでに大幅な時間短縮をはかることができた。

自動触媒合成装置を使い ハイスループットを実現

シミュレーションで導き出された候補物質を高効率の触媒にするためには、実際に装置を使って実験し、触媒ができたら特性を評価するというプロセスに移る。

■ 化学反応における物質のエネルギーの状態と触媒反応



▲ 物質が化学反応を起こすために、反応物質は一旦原子間の組み換えを起こしやすい状態(活性化状態)になる必要がある。触媒を用いると、活性化状態ではなく触媒と反応物質とで反応中間体を形成し、反応中間体を介して反応が進行する。この反応中間体の形成と分解がエネルギーの低い状態で進行するため、活性化エネルギーが下がり化学反応が進行しやすくなる。



▲ 多数の触媒を全自動で合成することができるハイスループット触媒合成装置。一度に数十サンプルの触媒を調製できる。

「シミュレーションによって高い活性が出ると示されたからには、実験して活性が出なかったというわけにはいきません。最適なつくり方を確実に選んで、世界最高レベルの活性を出さなくてはと、かなりのプレッシャーがかかりました」と藤谷は笑う。

触媒の調製と評価のプロセスは、横浜ゴムの新家が担当した。ポリマーの研究者である新家は、ブタジエンからゴムをつくった経験はあるが、触媒を扱うのは初めてだった。

当初、プロジェクトの重点はシミュレーション手法の確立に置かれており、触媒作成は手作業で条件を変えながら行っていた。合成できる触媒は1日1～2個、1カ月にせいぜい20個程度。遅々たる歩みだった。しかし2019年からは、新たに触媒自動合成装置が導入され、これが大いに力を発揮した。

「ロボットが少しずつ条件を変えながら、液体でも固体でも自動計量し、混ぜ、乾燥させるまでの作業を連続的にしてくれるので、1日につくれる触媒は40～50個、月に1000～1500個にも上ります。これだけの触媒を試せるようになり、触媒探索の効率は飛躍的に上がりました」と、新家は喜ぶ。

ハイスループットを実現するための設備投資はそれだけではない。これまでは一度に8個の触媒反応を実験できる装置を使っていたが、2020年2月には一度に16個を反応・評価できる装置を導入する予定となっている。これにより、どのような条件で最も触媒反応が大きくなるかを、さらに短期間で見いだせるようになる。



実験のハイスループット化で AIに大量のデータを供給

ロボットを使った自動合成装置、反応装置を使った触媒探索は、この条件がよさそうだと事前に当たりをつけることなく、0.5 gからという小スケールで、次々と合成しては反応を試していくというものだ。いわば“手当たり次第”なのだが、ここではあえてこのような方法をとっている。そのねらいについて藤谷はこう説明する。

「人間が試せる数には限りがあるので、これまではどうしても、“うまくいきそうなもの”を試していました。しかし、こんな常識的な形から出てくる結果は、どうしてもそれまでの延長上にあることが多くなります。それに対して、数をこなせるロボットであれば、人間が考えもしない組み合わせも次々に試し、次々に失敗することができます。そのような人間が考えもしない中から、これまでとはまったく違う触媒が見つかるのではないかと期待しているのです」

“手当たり次第”の理由はもう一つある。2018年からは人工知能(AI)による触媒の自動探索を進めているが、AIによる予測がよい結果になるかどうかは、学習させたデータの量と質にかかっているのだ。

「AIを使うには大量のデータが必要ですが、成功時のデータだけあってもよい結果を出せません。どのようなときに活性が出て、どのようなときに出なかったか、それぞれの反応は条件によってどう違ったかというデータもなくては、パターンをとらえて分析し、支配因子が何かを見つけることができないわけです。論文からは成功例しか見つからないので、失敗例を蓄積することにも意義があります」(崔)

そのようなプロセスでつくった触媒でよい反応が出たものにつ

いては、すぐに物理的・化学的に解析できるように、赤外分光計、X線回折装置をはじめ、多数の評価・測定装置を用意している。これらの装置で分析した結果と活性の関係などのデータも、すべてシミュレーターやAIに送られる。計算で得られたデータと実際の実験データを組み合わせて評価することが、ここではとても重要となる。

分析装置の中で注目すべきは、DNP-NMRという化学物質の構造を超高感度で解析できる装置だ。まだ日本に2台しかないこの装置は、通常のNMRの6000倍もの高感度である。

「解析時間は1/6000に短縮され、これまで1週間かかっていた分析が1時間で済むほか、今まで見ることはできなかった構造や重合(ポリマーを合成する化学反応)のプロセスも観察できるようになりました。見えなかったものが見えるようになったことで、これから新しい展開も可能になるでしょう」(藤谷)

タイヤで使えるバイオゴムが完成

2019年、新しい触媒を用いてバイオエタノールからブタジエンを効率よくつくり、そのブタジエンを用いてゴムを合成することに成功した。しかし、新家はそれからが大変だったと言う。

「材料というのは、形ができたから“完成”ではありません。これまで使われてきた材料、この場合は従来の石油系の合成ゴムと比較し、同等以上の性能であると実証できなければ、できたとは言えないのです。そうでなければ実際の製品に使えないわけですから」

実験室でつくる触媒はせいぜい数gの量だが、実用化するには大量に合成した場合の評価をする必要がある。500 g、1 kg



と大量に合成したときの活性性能はどうか、そのブタジエンからつくるゴムの性能は十分であるのかを確かめなくてはならなかった。

新家は当初、楽観視していたという。ところが、実験室のスケールでブタジエンからポリマーをつくと、なかなか分子が長くつながらないという課題が出てきた。タイヤに使うゴムには強度が求められるが、ブタジエンが長くつながらなければ十分な強度が出せない。原因の一つは生成したブタジエンに不純物が多量に含まれていたことだったが、よい精製方法がなかなか見つからなかった。

さらにブタジエンは沸点が -4°C と低く、すぐに気化してしまうため濃度調整が行いにくい。通常は有機溶剤と混ぜて液体状で冷蔵保存しているが、これを使うとき、濃度が薄いままだとポリマーの長さのコントロールが難しくなることがわかった。試行錯誤の末、適切な精製法と保存状態が見つかり、2019年7月、ついに石油由来の合成ゴムと同等の性能を持つバイオゴムが完成した。

開発期間はわずか3年。インフォマティクスの活用と高機能な装置の導入は、ハイスループットを実現するのに有効であることが実証できた。

「計算からプロセス開発までのすべてを産総研内でできた意義は大きいですね。どのメンバーとも密に話ができて、すぐにフィードバックができる。それがこのような超高速の開発につながったと思います」

藤谷は崔を見ながら、顔をほころばせた。

触媒開発の プラットフォーム化を目指して

バイオエタノールからブタジエンを生成する技術の橋渡しは、すでに完了したといえる。これからは横浜ゴムが中心となって、ブ



タジエンの精製方法の改善などを行い、原料メーカーの参画も得ながら量産化技術の開発を進めていく。横浜ゴムは石油系と同等のコストに抑えるため、触媒のさらなる効率化やバイオエタノールの高効率な製造法の開発も進め、2030年をめどに実用化につなげていく予定だという。

産総研は今後、触媒開発およびマテリアル・インフォマティクスの基盤技術確立し、触媒開発のプラットフォームを構築していく計画だ。

「こんな触媒をつくりたいという企業のニーズに対し、計算で候補物質を見つけ、網羅的に合成して反応を調べ、AIにかけて、より活性の上がる構造を見つける。そのような仕組みを、プロジェクトの残り2年で確実なものとしていき、多くの企業の材料開発で使えるプラットフォームを作り上げたいと思います」藤谷はそう結んだ。

※超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超プロジェクト)
国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)が革新的な材料開発手法の構築を目指して2016年に立ち上げた6年間のプロジェクトで、機能性材料の試作回数や開発期間を1/20に短縮させる基盤技術の開発を目指すもの。2018年までは主に有機系材料を対象に、構造や組成から材料の機能を推測するシミュレーション手法の開発を進め、その後、2021年まではAI技術を活用し、求める機能を実現する最適な構造や組成を導き出す材料探索手法の確立に取り組んでいる。

革新的な材料開発手法の構築を目指し、実際の成果物もできてきました!

先端素材高速開発
技術研究組合(ADMAT)

〒305-8568 茨城県つくば市東1-1-1
つくば中央第5

<https://www.admat.or.jp/page1>

産総研 材料・化学領域
触媒化学融合研究センター

〒305-8568 茨城県つくば市東1-1-1
つくば中央第5

産総研 材料・化学領域
機能材料コンピューショナル
デザイン研究センター

〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1つくば中央第2

<https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/index.html>

表面に“しわ”をつくって 特性を変化させる

付着力、手触り、光学特性などを自在にコントロール



KEY POINT



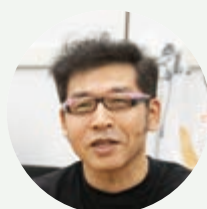
産総研は、**押したり引っ張ったりするだけで付着力や光学特性を一瞬で変えられ、また元に戻せるゴム材料**を開発。簡単な製法・安価な材料でできるこのゴムは、ロボットハンドやスポーツ用品、医療機器など、多様な分野への応用が期待される。



電子光技術研究部門
分子集積デバイスグループ
主任研究員

大園 拓哉

Ohzono Takuya



人間情報研究部門
人間環境インタラクション研究グループ
主任研究員

寺岡 啓

Teraoka Kay

力を加えると瞬時に凹凸ができる “しわゴム”

大園 ゴム製品は私たちの身の回りにあふれていますが、それぞれのゴム部材は、“密着させる”とか“滑りにくくする”といったように、特性が固定されていることが多いです。そこで私たちが考えたのは、その特性が要件や感覚に応じて変えられるゴムができないかということでした。時と場合に応じて、その滑りや付着性を変えられる性質を一つの材料に持たせたいということです。基本アイデアは、材料表面に可逆の凹凸を作ることでした。シリコンゴム表面にポリイミド膜を接着したものが最初の試作品です。

寺岡 押すとしわが簡単にでき、離すとしわがなくなります。この技術の利点は、しわのでき方がある程度予測・設計できることです。

大園 付着力を強める、耐久性を強めるなど、一つの特性を強化したゴムはこれまでも開発されていますが、用途に合わせて可逆的に付着力を変えられるゴムはありませんでした。この可変特性を持つゴムは、ゴム製品の使い方に関する考えを広げることができると思っています。

同じように、表面に凹凸をつくることで摩擦力を下げる材料として、表層にナイロン織布を配したものもつくりました。

寺岡 これは、ゴムをある程度の力で圧縮すると、中に埋まっているナイロン糸の交差部分が表面に飛び出し、くっついた対象との接触面積が減り、一気に付着力が小さくなる、というものです。使う材料も選ばないので、実用化のハードルは低いと思います。

最近では汎用のシリコンゴム表層に径0.1～1.5ミリメートル

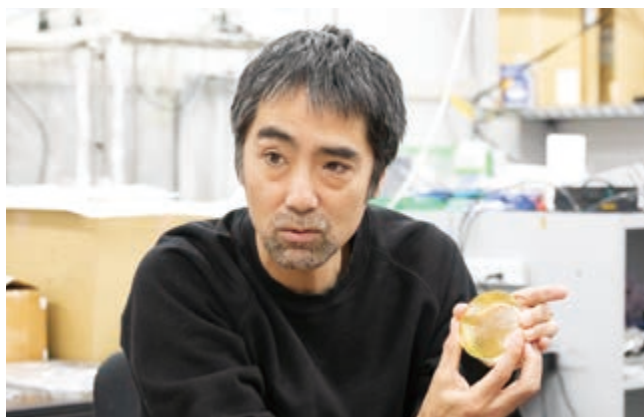
のガラスビーズを複合させたゴムシートも試作しました。このゴムシートを持ち上げたい部材に押し付けると、ペタッとくっついて持ち上げることができますが、両端を少し引っ張るとパッと離すことができます。これはこのゴムが引っ張られた時、ゴムの厚みが減る一方でビーズによって表面に凹凸が生まれ、表面積が減るためです。引っ張るのをやめれば、また元に戻ります。単純な仕組みですが、展示会で発表したところ多くのお問い合わせをいただきました。

しわができれば 手触りも光学特性も変わる

大園 ゴムの消しゴムを指先で押すと縮みますが、ゴムがひずみを吸収するので、押しもしわはできません。しかし、消しゴムの表面にポリマー製ラップなどの消しゴムより硬く薄い膜を貼って押すと、今度はしわが生じます。このしわは、表面の膜と母材であるゴムの弾性が異なるためにできるものです。

私は15年近く物質表面にできる凹凸に関する研究を行い、母材と表面の薄膜の材料の関係や、薄膜の厚みとしわの周期、弾性などの関係の解明に取り組んできました。そのため、どのような条件で、どのようなしわができるかという知見は蓄えており、現在はその応用で、目的に応じた形状や周期のしわを数百ナノメートルから数ミリメートルまでのスケールで制御することが可能です。

寺岡 私は2014年に大園さんと同じグループになる機会を得て、ともに摩擦力を動的に制御するというテーマにかかわるようになりました。



大園 木のテーブルを触ると、表面の木目の凹凸によって木であることがわかりますよね。しかし、テーブルの場合、木目のザラザラを出したいときにだけ出し、その他のときはツルツルにしておくということはできません。私たちの研究の狙いは、まさに出したいときにザラザラを出す、表面に可変性を持たせることにあります。

寺岡 材料の表面の凹凸は、摩擦力や付着特性だけではなく、手触りや光学特性にも関わってきます。例えば、表面にポリイミドの薄膜を貼った透明なシリコンゴムは、押すと数百マイクロメートルオーダーの微細なしわが生じるように設計しており、ツルツルだった表面がザラザラした手触りになると同時に、それまで透けて見えていた向こう側が見えなくなります。



大園 通常のガラスは透明ですが、表面に凹凸をつけたすりガラスだと不透明になる。それと同じ理屈ですが、凹凸を付けるだけで、材料に多様な特性を与えられるのが面白いところです。しかも、すりガラスが透明ガラスに戻ることはありませんが、私たちのつくっている材料の表面は何度でも元に戻せます。これはほかにはない大きな特徴です。

また、シリコンゴムの表面にナノオーダーの厚みの金属薄膜を蒸着すると、ゴムを手で押してできるしわは構造による干渉色

を生み出し、手を離すとまた透明に戻ります。これは意匠性を変えるための、可変な光グレーティング部材として使えます。材料表面のしわを制御することで、このようにいろいろなことが可能になるのです。

ロボットハンドや 医療・福祉分野での応用に期待

大園 この技術を、もう少し皆さんに知ってもらえれば、私はここから新しいものが生まれ、用途が大きく広がる可能性が大いにあると信じています。

寺岡 そう、実際には、表面の特性を瞬時に変えられると便利なのはいくらでもあると思うのです。

大園 例えばロボットハンドです。物をつかむときは強い付着力が必要ですが、離すときには素早く外れる方が、ハンドリングの効率は上がるでしょう。スポーツ用品のグリップでも、強く握ったときと弱く握ったときで摩擦特性が変わり、ペタッとつくときとサラッと離れるときの使い分けができるようになると、握力をあまり使わないゴルフクラブやテニスラケットなどができ、プレーヤーの年齢層が広がったり、新しいスイングなどが開発されたりするかもしれません。

寺岡 まずは実装のイメージを示すことが必要なので、圧縮すると付着力が弱まるゴムシートのロボットハンドへの応用を目指し、現在、電動でゴムを変形させるしわゴム圧縮モジュールの製作を進めています。ホルダーにポリイミド膜を張ったしわゴムをセットし、押し子で押すことでゴム表面に凸をつくって、つかんだものをパッと離せるようにするものです。

ただ、人間が手でゴムを押す力に比べ、小型のアクチュエータは非力なので、ここでは当初開発したゴムよりも軟らかいゴムを使っています。問題は、軟らかいゴムだとゴム表面に滲み出る油分のせいで肝心の薄膜をゴム表面に接合できなくなってしまうのです。現在はこの課題を克服すべく、材料選定や圧縮機構の改善に取り組んでいます。

大園 ロボットハンドはつかむ／離すという動作を、手を開閉する動きで行いますが、もし、電動によるしわのON/OFFに置き換えることができれば、把持機構の小型化・単純化につながるでしょう。

寺岡 ロボットの制御系やスポーツ用品のほか、私は荷物搬送用のベルトコンベアやブロックなどの知育玩具にも応用できていると思っています。

それに、医療や福祉の現場でも使えるのではないのでしょうか。先日、胃のバリウム検査をしたのですが、あの検査ってベッドの上で頭を逆さにされたり、自分で体を回したりしますよね。あれはつらくありませんか？もし、ベッドの表面が可変性のある材料でできていれば、逆さになっているときは付着力が強く、自分で回転するときはスルスルと滑る、こうなれば、もっと被験者は楽になるはずです。介護用のベッドのシートでもこんな機能があれば、体位を変える場合など、ぐっと楽になると思います。

大園 理論的には大型化は可能なので、そのような大型サイズのゴムシートへの応用もできます。

材料の接触面をアクティブにする 新しい分野に挑戦したい

寺岡 2018年に人間情報研究部門に移り、実際にゴムシートを使う側の視点に立った研究に携わるようになりましたが、そこではこれまでの材料研究と異なった指標で評価することが多く、刺激を受けています。例えば、これまで材料の評価をするときは、硬い、軟らかい、強い、弱いなどの性質を調べていましたが、現在は「気持ちよいか」など、感性的な部分での評価が求められ、とても新鮮です。その視点からこの研究を見つめると、手触りが変化するゴムは、より多様な切り口での応用が可能だと思うようになりました。

また、これまでお付き合いのあった企業とは別の業種の企業と接するようになり、しわが寄るゴムの使用用途が違う方々の目に触れる機会が増えています。そこで受ける想定していなかった



用途の提案に可能性を感じ、今後、さまざまな応用につながることを期待しています。

大園 材料の組み合わせでしわがどうできるか、という知見は蓄積されています。このような用途に使用したいということがあれば、材料の組み合わせや薄膜の厚さなど、ニーズに適したものを提案できます。企業の皆さまには私たちのつくったさまざまなしわを触りにきていただき、ぜひ、応用のアイデアを聞かせていただければと思います。

また、摩擦力の変わるゴムだけではなく、透明と不透明の切り替えができるゴム、平滑な面と溝ができる面を切り替え、表面に液体を保持したいときだけ溝をつくる、といったニーズにも対応できますし、塗装などの際にしわが生じてしまう原因を探ることもできます。物の表面に何かが起きた場合には、必ずお役に立てますので、ぜひ相談にいらしてください。

寺岡 この研究のポイントは「接触面をアクティブにする」ということなので、いずれはスマートフォンやウェアラブルデバイスの触り心地を変えるようなことにも応用できるかもしれません。これまでとは異なる切り口でのこの技術の活用にも、ぜひ、一緒にトライしてみませんか。

物の表面の特性をいろいろと変えたい! そんなお悩みにお答えします。

**産総研 エレクトロニクス・製造領域
電子光技術研究部門**



〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 つくば中央第2



<https://unit.aist.go.jp/esprit/>



esprit-sec-ml@aist.go.jp

**産総研 情報・人間工学領域
人間情報研究部門**



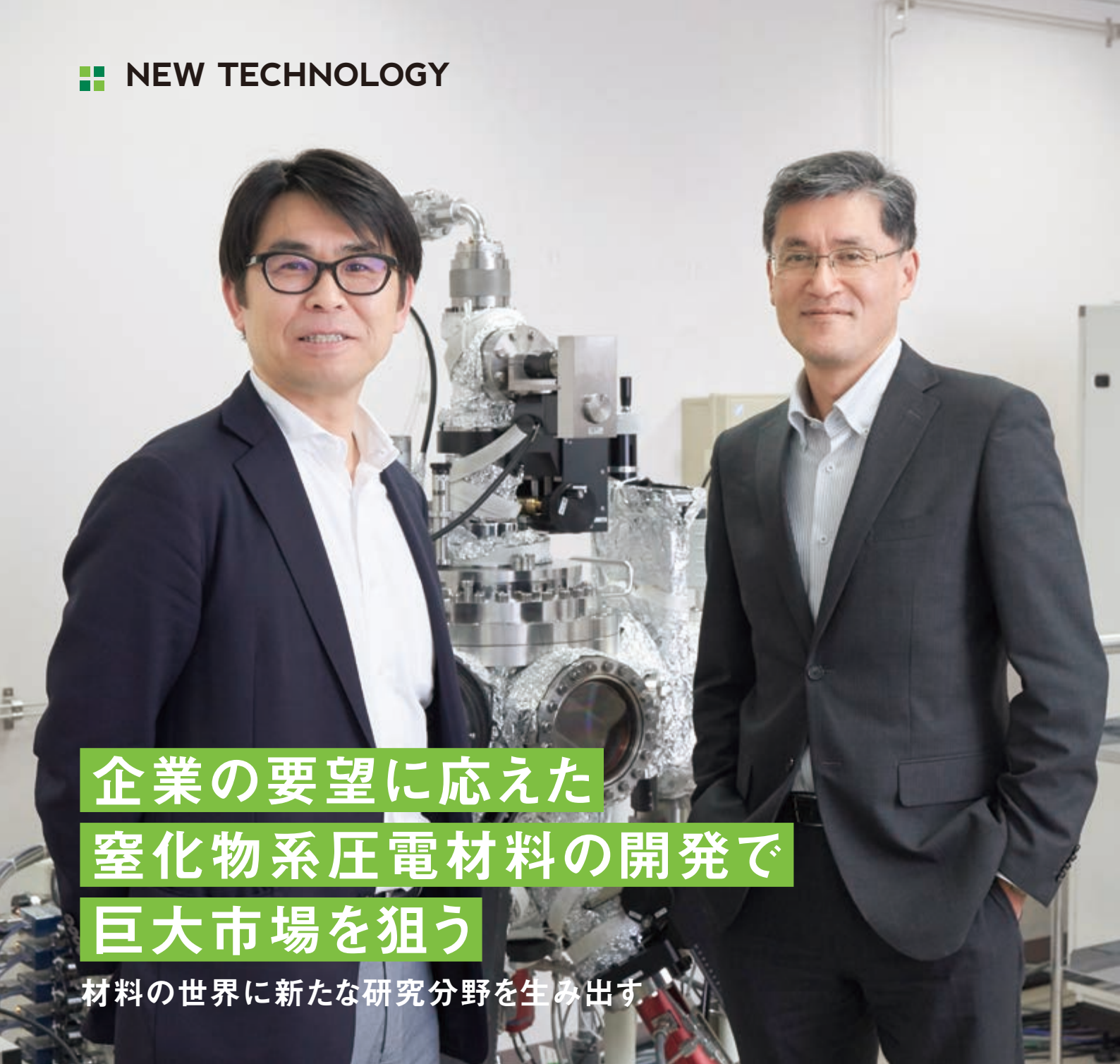
〒305-8566 茨城県つくば市東1-1-1 つくば中央第6



<https://unit.aist.go.jp/hiri/>



hiri-web-inquiry-ml@aist.go.jp



企業の要望に応えた 窒化物系圧電材料の開発で 巨大市場を狙う

材料の世界に新たな研究分野を生み出す

5G実用化を可能にする部品と材料

2020年、日本でも新しい通信規格5Gのサービスが開始される。5Gになると、使われる周波数が4Gより高い周波数帯になるため、一定時間内の振動数が多くなり、電波に乗る情報量が増えるため、これまでと同じ時間でより多くの情報が送れるようになる。この30年間で情報通信速度は約10万倍になっているのだが、4Gに比べて5Gの通信速度は100倍と桁違いになる。そしてこれらを実現するためには、材料と部品の高性能化が必要不可欠である。

BAWフィルターの性能は 圧電材料で決まる

5Gに使われる通信機器に欠かせない部品の一つに高周波フィルター(必要な周波数帯域を効率よく通し、そうでない帯域は遮断する)がある。そのうち高周波対応に優れているBAWフィルターの性能は、圧電材料によって決まると言っても過言ではない。

圧電とは物質に圧力(機械的な刺激)を加えたときに、圧力に比例して表面電荷が現れる現象のことで、機械的エネルギーを電気エネルギーに変換したり、逆に電気エネルギーを機械的エネルギーに変換する性質をもつ物質を圧電材料という。時計や

KEY POINT



2020年、日本でも次世代通信規格5Gの運用がスタートするが、高度な通信機器に欠かせない**バルク弾性波 (BAW) フィルター**に使われているのが**高性能圧電材料**である。現在の高性能圧電材料には窒化アルミニウムにレアアースが添加されているが、産総研では**レアアースを使わなくても、高い性能が出せる圧電材料の開発に成功**。将来は通信機器のBAWフィルターだけでなく、指紋認証などのセンサーネットワークなどへの利用が期待される。



製造技術研究部門
首席研究員

秋山守人
Akiyama Morito



製造技術研究部門
センシング材料研究グループ
主任研究員

上原雅人
Uehara Masato

コンピュータ、通信機器などには不可欠なもので、1つの端末の中には圧電材料が使われた部品がいくつも入っている。

「BAWフィルターは、シリコン基板の上に下部電極と圧電材料、上部電極を積層するというシンプルな構造をしており、改良の余地があるのは圧電材料だけ。そのため、よりよい圧電材料ができれば、それだけでフィルターの性能が向上するのです」

そう話す製造技術研究部門の秋山が上原や企業とともに開発した圧電材料が、今、世界から大きな注目を集めている。レアアースを使わず、安価で入手しやすい元素を用いて世界最高水準の圧電性を実現した「マグネシウム／ニオブ添加窒化アルミニウム」だ。

新しい圧電材料が スマートフォンに採用された

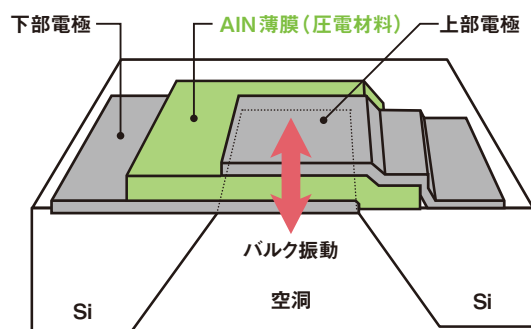
話は2000年代に遡る。秋山はもともと窒化物圧電材料の研究で、2000年代前半から自動車部品メーカーと自動車用燃焼圧センサーの共同研究に取り組んでいた。その中でメーカーから出されたのが、「窒化アルミニウム薄膜の圧電性を向上させることはできないか」という要望だった。

「当時、圧電性が高いといえば酸化物が一般的で、窒化物の圧電性向上に関する研究などほとんど誰も手がけていませんでした。依頼されたときは、本当にそんなことができるのかと、不安半分、期待半分でした」

内心、無謀だと思いつつも、秋山らは圧電性向上の研究を開始した。ほとんど先行研究もない中で、どの元素を、どのような条件で窒化物に添加すれば物性が上がるのか見当もつかず、考えられる元素をしらみつぶしに探していった。

「一般の元素ではなかなかよい結果が出ず、試すものがなくなって、将来の実用化を考えると使いたくなかったのですが、レアアースであるスカンジウムを試してみました。すると、スカンジウムを窒化アルミニウムに添加することで圧電性が大幅に向上したのです。それまで6 pC/Nだった圧電定数が28 pC/Nにまで向上したのです」

BAWフィルターの構造





2007年のことだった。よい材料が見つかり共同研究企業も喜んでくれたが、結局、この材料の自動車部品への採用は今だ実現されていない。

しかし2013年、ドイツのフラウンホーファー研究機構が追試を行い、秋山らの実験と同様の結果が得られたと国際学会で発表したことで、この材料が改めて世界から注目を集めることになった。

後にこの研究に参加する上原は、「これにより世界中の研究者の視線が、スカンジウムを添加してできた材料そのものについてだけでなく、窒化物圧電材料のポテンシャルにも注がれることになりました。秋山の発見は、材料の世界に一つの新しい研究分野を生み出したといえます」と評価する。

当時、5Gに向けた技術開発にしのぎを削っていた通信業界が、これに目を付けた。電子部品メーカーは早い時期にBAWフィルターに使う材料としての可能性を見出し、産総研と共同研究で特性評価を始めた。そこでスカンジウム添加窒化アルミニウム薄膜の高い圧電性が確認できたことから、実際にBAWフィルターを試作し、2013年、期待通りの性能が出ることを国際学会で発表した。

すると、BAWフィルターで大きな世界市場を持つ電子部品メーカーがこの材料を自社のBAWフィルターに採用。これにより、産総研の開発した材料はスマートフォンに搭載されることになる。

BAWフィルターは1つの機能部品につき20個弱入っており、その部品が1台あたり4つ入っている。つまり、スマートフォンに使われているBAWフィルターは、1台で70～80個にも上る。

「スマートフォンの販売台数は世界で14億台ですから、当該電子部品メーカーの市場が5割とすれば、昨年だけで約500億個ものBAWフィルターが生産されました。世界の人口が77億人

ですので数字上は全世界の人々の手に6個のフィルターが渡ったことになります。材料は主役にはなれませんが、これだけ多くの人が持つものになります。これこそ材料の力ですね」(秋山)

安価なマグネシウムとニオブで レアアースフリーの圧電材料を開発

スカンジウムを添加した窒化アルミニウム薄膜は、数多く採用されたが、一つ問題が残されていた。スカンジウムはレアアースだということだ。性能はよいが、コストや安定供給の面で不安があり、企業からは別の元素を用いた圧電材料の開発が要望された。

この声に応えるため、産総研ではさまざまな元素をあらゆる条件で添加しては、物性を評価し続けた。しかし、なかなかスカンジウムを超える物性が出ない。超えるどころか、大幅に低いというのが現実だった。

そんなとき、日本の電子部品メーカーが、窒化アルミニウムにマグネシウムとジルコニアという2つの元素を同時に添加することで、これまでと比べ、とてもよい圧電性を出すことに成功した。とはいっても、圧電定数は約12 pC/Nで、スカンジウムの28 pC/Nにはおよばなかった。しかし、それまで試みられた他の元素に比べてかなり高い数値なのは事実だった。

「驚かされたのは、2つの元素を同時添加するという発想でした。マグネシウムもジルコニアも、単独ではよい数値が出なかった元素で、共添加でここまで物性が上がるとは予想していませんでした」(秋山)

これに刺激を受けた秋山らは、早速、共添加による材料探索を企業とともにスタートさせた。

早い段階で、共添加する材料の1つはマグネシウムでよいとの判断がでた。もう一つの元素の選択には時間がかかった。第4族の遷移金属であるジルコニアに対し、第5族の金属元素をターゲットにすることに決め、ニオブを選択。この選択は間違っていなかった。三次元同時反応性スパッタリング法という手法を用いて、マグネシウムとニオブを窒化アルミニウムに共添加したところ、圧電性は飛躍的に向上したのだ。

圧力や温度、2つの元素の組成比などを変えながら、最適な作製条件を探し、2016年、上原らはマグネシウムとニオブの添加量の合計が約0.65のときに、圧電定数はスカンジウムに迫る22 pC/Nまで向上することを見出した。

「安価な元素を使って高い圧電性が出せたことで、レアアース

を使わない窒化物圧電材料の応用がいよいよ視野に入ってきたといえます」(上原)

圧電性を高め用途を拡大

圧電材料の用途は、BAWフィルターだけではない。例えば、マイクロフォンだ。現在のマイクロフォンの主流は静電容量式だが、今後はより高感度で消費電力も低い圧電式が伸びていくと考えられている。すでに米国では圧電式のマイクロフォンの販売が始まっている。産総研では今後の市場性が大いに期待できるマイクロフォン用材料もターゲットにしていく。

もう一つの主要ターゲットが指紋センサーだ。すでにスマートフォンなどに搭載されている認証技術であるが、現在主流のセンサーは指紋を画像として認識し、認証を行っているため、高精度な写真を使うだけで認証が破られてしまう危険がある。

「そのため、指紋の凹凸を超音波で読み取って3Dマップを作成し、三次元情報として処理してセキュリティ性を高める研究が進められています。このような用途にも私たちの圧電材料を応用できると考えています」(秋山)

圧電性が向上し、振動などから電気エネルギーを効率よく生み出せるようになったことも、圧電材料の用途を拡大するための大きなポイントとなる。

「今、工場の生産設備や土木インフラなど、多くのセンサーを接続したネットワークによる設備の異常診断が行われていますが、そこで問題となるのがセンサー用の電源です。何百、何千もあるセンサーの電源を一つひとつ管理するのは手間がかかりますし、人がメンテナンスできる場所にセンサーがあるとも限りません。例えば、自動車のタイヤ圧センサーはタイヤの内部に装着されるので、電池



交換は困難です。圧電材料を使い、振動エネルギーから電力が得られれば、大きなメリットとなるでしょう」秋山はそう期待をかける。

酸化物と窒化物の境界を超え、高性能な圧電材料を開発できたきっかけは、先にも述べたように自動車部品メーカーからの要求だったが、そんな企業の要望が産総研の背中を押してくれた。2つの元素を同時添加するという発想も企業から学んだことだ。

「企業の皆さまのご意見は私たちの刺激となり、大きな推進力となります。実際に企業からの要望で共同研究が始まり、窒化スカンジウムアルミニウムが生まれ、現在注目されるようになりました。社会や市場で何が起きているのか、何が問題になっているのか、どのようなところで困っているのかを、ぜひお聞かせください。全力で応えていきます」(上原)

「企業の皆さまに信頼していただくために、私たちも技術力、研究力を高め続けていきます。ぜひ、よい信頼関係を築き、一緒に研究を進めていきましょう」(秋山)

日本発の技術である窒化物圧電材料を、日本から世界に広めていきたい。2人はその思いを胸に、これからも圧電材料の探索や性能向上に取り組んでいく。

窒化物系圧電材料を使ってみよう! こんな圧電材料を探している! という方はぜひ一度ご相談ください。

産総研 九州センター
エレクトロニクス・製造領域 製造技術研究部門

〒841-0052 佐賀県鳥栖市宿町807-1
webmaster-am-ri-ml@aist.go.jp
<https://unit.aist.go.jp/am-ri/>

YouTube

産総研チャンネル

「世界最高性能の窒化ガリウム圧電薄膜をRFスパッタ法で作製」も御覧ください

LINKの先にあるのは「技術を社会へ」
そんな思いをのせたコミュニケーション・マガジン
「産総研LINK」をお届けします

産総研LINK

検索

産
総
研
LINK
技術を社会へつなげるコミュニケーション・マガジン

産総研LINK No.28 2020年1月発行

編集・発行 国立研究開発法人 産業技術総合研究所
問い合わせ 企画本部 広報サービス室 出版グループ
〒305-8560 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第1
TEL : 029-862-6217
E-mail : prpub-ml@aist.go.jp

産総研LINK次号予告

» 2020年3月号は、RD20特集号です。低炭素社会の実現を目指す最新の研究をご紹介します。



産総研チャンネル



バックナンバー