

# 工学研究科発 デザイナー マテリアル

大阪大学大学院工学研究科  
精密科学・応用物理学専攻 教授

笠井 秀明

## 1. はじめに

澁刺とした有能な若者たちに囲まれて、教育・研究に携わることができ、日々幸いである。これも有能で献身的なスタッフがいてこそ、大いに感謝している。我々の研究室では、現在どのような研究を行っているのか、報道発表を引用しつつ、紹介させていただくことにしたい。

## 2. 貴金属フリー自動車排ガス浄化触媒

2012年2月、貴金属フリー自動車排ガス浄化触媒に関する研究成果について、各記者を招き報道発表を行ったところ、我が研究室における研究成果関連記事が、多数の新聞紙面に掲載された（読売新聞、朝日新聞、日本経済新聞、産経新聞<sup>1)~4)</sup>。ここでは、日本経済新聞の記事を英訳（要約）したものを紹介しよう。

### Exhaust gas purifying catalyst free from rhodium

Daihatsu motor corporation and Osaka University announced the development of a new catalyst technology without the use of expensive precious metal rhodium.

For the purification of exhaust gas of gasoline powered vehicles.

It is expected that the demand for precious metal catalyst will rise in the expansion of automobile production and purification of exhaust gases.

Reducing the cost of environmental friendly vehicles is a common issue for automobile companies. Research teams made advancement in the commercialization of these catalysts by making improvements such as improved durability.

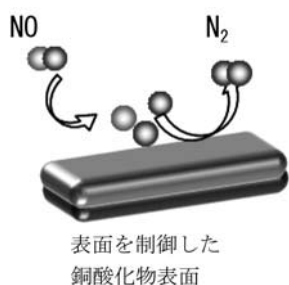


図1 NOの表面反応の概要図

The conventional exhaust gas purification catalyst is composed of platinum and palladium in addition to rhodium and these are too expensive w/c hinders massive production.

The team said, “ the time has come when we can now realize the use of non-noble metal catalyst.”

The new catalyst will be used instead of rhodium.

Daihatsu motor corporation tested the catalyst while the molecular structure and its properties were investigated theoretically by the group of Hideaki Kasai (Osaka University) The performance of the new catalyst is comparable to rhodium which has been tested in the experiment and has been confirmed theoretically. This system is currently applied for a patent.

(Nikkei Shinbun 8 Feb.2012)

上記は、元素戦略プロジェクト<sup>5)</sup>の研究成果の一部であり、自動車業界、触媒・化学業界などが関連する研究成果である。実はこの報道発表から遡ること半年前には、抵抗変化メモリに関する研究成果について報道発表を行っており、日刊工業新聞<sup>6)</sup>、読売新聞<sup>7)</sup>にて紙面で取り上げられた経緯がある。その時の読売新聞記事の概略（英語訳）を次に紹介したい。

## 3. 抵抗変化メモリ

### A step closer towards commercialization of next generation memory devices

A group of researchers in Osaka University headed by Prof. Kasai clarified the mechanism behind the resistive switching in non-volatile resistance random access memory (ReRAM) devices, which is considered as a promising next generation memory device that can be used in mobile phones to record videos and images using digital signals. The

mechanism leads to the production of memory devices efficiently.

The flash memory device that is popularly used creates digital signals through electron movement in composite semiconductor parts and records it as 0 and 1. On the other hand, on ReRAM, digital signals are created by controlling the electrical resistive state of a semiconductor by application of sufficient voltage.

This mechanism promises a larger capacity than that of the flash memory with recording speed up to 1,000 to 10,000 times faster. The mechanism of electron flow, which has not been well understood until now, is also simple.

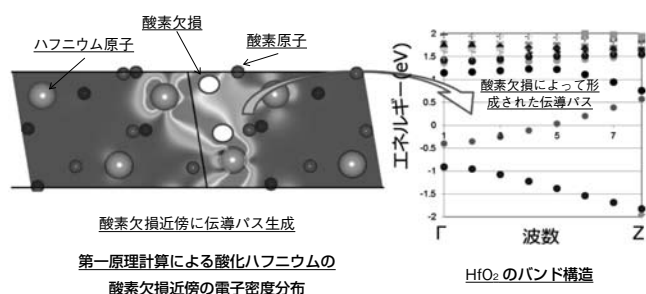


図2 抵抗変化メモリの概要図

Prof. Hideaki Kasai used computational techniques to elucidate the mechanism of how electricity flows in semiconductors used in ReRAM. Their results show that a line of oxygen vacancies within the semiconductor provides the path for electron to flow. Prof. Kasai further says, “The results and the mechanism proposed make it easier to study and determine the most appropriate semiconductor and parts to use. This is a big step towards practical use.”

(Yomiuri Shinbun 10 Oct. 2011)

これは、NEDO のナノテク先端部材プロジェクト<sup>8)</sup> の研究成果の一部であり、半導体・情報・家電業界が関係すると考えられる。このように、異なる業界に影響を与える研究成果を得ることができたことを幸運に思う。

ここで、大学で実施する研究開発の役割についてご紹介させていただこう。とくに、物性物理学をベースとする計算機材料デザインについて紹介したい。

#### 4. デザイナー マテリアル

大阪大学出版会から出版させていただいた著書、「固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計」2008年4月初版<sup>9), 10)</sup>から、その書き出し部分を記載しよう。

「21世紀に入り、科学技術の進歩は目覚ましく、これまで未来絵巻として描かれていた新規デバイスや新規材料が次々と開発されている。その一方で、従来の手法では解決できないような問題も浮上してきている。例えば、ナノテクノロジーの発展は目を見張るばかりだが、新規デバイス開発がナノメートルオーダーやそれ以下の微細領域に及ぶにつれ、量子効果を考慮しなければならなくなっている。また、効率よく新規材料を開発するためには、計算機シミュレーションで予測してから実験を行う必要がある。このような状況において、今日、量子力学に基づき、実験に頼らない高信頼性シミュレーションが求められている。

これらの要望に応える計算手法である第一原理計算は、量子力学から導かれる密度汎関数理論に基づいており、実験値等の経験的パラメータに頼らない物性予測が可能である。第一原理計算手法の開発と、最近の計算機性能の飛躍的な発展により、第一原理を根幹とした計算機材料デザイン (CMD) が現実性を増しており、このCMDによる知的設計が産業へ応用展開されることが期待される。特に、CMDによる先行特許出願についても、その戦力的重要性が高まるものとして期待される。」

「図3は、第一原理計算を産業へ応用する際の設計プロセスを明示し、具体的なモデルとして提唱されているCMDエンジンを示している。CMDエンジンは、量子シミュレーション、物理機構の演繹、および仮想物質の推論の3つの主要部分から構成される。まず、

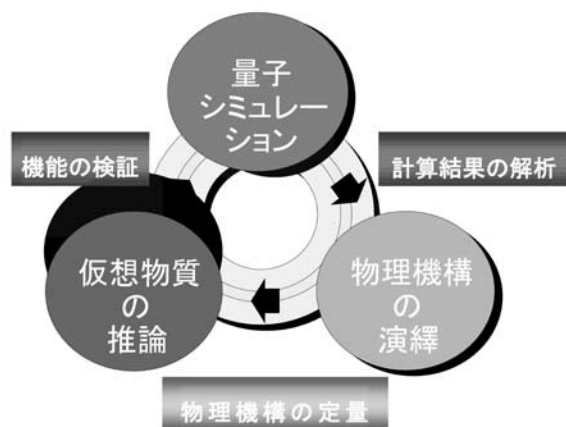


図3 計算機材料デザインエンジンの概要図

所望の物性を持つ候補となる物質を考案し、その構造に基づいてシミュレーションを行う。次に、シミュレーション結果から、仮想物質を持つ物質を定量的に評価する。その後、得られた定量的評価に基づいて仮想物質を推論し、それが所望の物性をもつかどうかを検証するために、再度シミュレーションを行う。その結果、所望の物性をもたない場合はその原因を考察し、これまでの処理を再帰的に行うことにより、仮想物質の物性を所望のものに近づけていく。このようなシミュレーションに基盤を置く新規デバイスや新規材料の開発は、実験による検証が必要となる。しかしながら、研究開発の上流から実験のみに頼るアプローチに比べて、研究開発の方向性が明確となり、設備投資費や材料費等のコスト削減に貢献できるという点で優位性をもつと考えられる。」

皆様はこの書き出し文を読んで、いかがな印象を持たれたであろう。

先に記載した新聞記事及び上記の引用文は、すべて、物性物理学をベースとする研究分野に関わっており、研究成果が、結果として、広くは環境・エネルギー分野の次世代産業の創生に繋がる可能性を秘めている。計算機マテリアルデザインはその様々な可能性を実現しうる先駆的手法であると考えている。

実は、本著執筆中の2012年9月30日、読売新聞にて当研究内容である脱レアメタルに関する記事が再掲載された。ダイハツと大阪大学の共同研究が、「挑戦脱レアメタル」「代替品に安価な酸化銅」として取り上げられ、我々の到達した、酸化銅がレアメタルと同じ働きをするという結論は「脱レアメタルの実現に向けた大きな一歩となる」と記事にて締められている。

今尚、このように多くの期待と関心を受けていることを誇りに感じるとともに、身が引き締まる感を受けた。

インパクトのある研究成果を上げるには実力ある実験グループの協力が不可欠であり、これらの研究連携から研究者・技術者として育ち、イノベーション創生を担う有望な学生・院生達の成長に期待している昨今である。

## 5. おわりに

メラニン生成過程の解明やその太陽電池への応用、エチレン生成・分解反応制御による果物の遠隔地移送、初期癌検出用超高感度ガス・センサなど、研究課題は山積しており、デザイナー マテリアルのターゲットです。

皆様には、我々の研究分野に少しでもご興味をもっていただけたら幸いです。

最後に、関係者の皆様に感謝申し上げます。

### ー引用文献ー

- 1) 読売新聞 2012年2月8日付朝刊2面
- 2) 朝日新聞 2012年2月8日付朝刊33面
- 3) 日本経済新聞 2012年2月8日付朝刊9面 (大阪本社発行企業総合面より英訳を引用)
- 4) 産経新聞 2012年2月8日付朝刊24面
- 5) 元素戦略プロジェクト〈平成19-24年〉  
文部科学省委託事業・キーテクノロジー研究開発の推進事業 代表者：西畑保雄  
「脱貴金属を目指すナノ粒子自己形成触媒の新規発掘」  
研究主幹：独立行政法人日本原子力研究開発機構 量子ビーム応用研究部門放射光科学研究ユニット  
参画機関：独立行政法人日本原子力研究開発機構 Spring-8、ダイハツ工業株式会社、北興化学、大阪大学
- 6) 日刊工業新聞 2011年9月8日付朝刊19面
- 7) 読売新聞 2011年10月10日付朝刊17面 (大阪本社発行科学面より英訳を引用)
- 8) ナノテク先端部材プロジェクト〈平成17-19年〉  
ナノテク・先端部材実用化研究開発事業 代表者：秋永広幸  
「遷移金属酸化物を用いた超大容量不揮発性メモリとその極微細加工プロセスに関する研究開発」  
研究主幹：独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)  
参画機関：シャープ株式会社、株式会社アルバック、独立行政法人産業技術総合研究所、大阪大学
- 9) 「固体高分子形燃料電池要素材料・水素貯蔵材料の知的設計」  
笠井秀明・津田宗幸著 大阪大学出版会 2008年4月初版
- 10) 燃料電池実用化研究プロジェクト〈平成16-22年度〉  
固体高分子形燃料電池システム技術開発事業、固体高分子形燃料電池要素材料技術開発等事業  
代表者：笠井秀明  
「固体高分子形燃料電池の電極における原子スケール・ダイナミクスの研究」  
研究主幹：独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)

(応物 昭和49年卒 51年修士 56年博士)