

コンピュータシミュレーションによる新しい創薬・ものづくり

教育推進機構自然科学教育センター ○矢城陽一朗
甲南化工株式会社, FMO 創薬コンソーシアム

概要：フラグメント分子軌道（FMO）計算によって有機低分子と標的タンパク質の相互作用を詳細に調べることで、コンピュータシミュレーションによる新しい創薬および低コストで安全な新機能物質の開発・設計（ものづくり）を目指している。

1. 研究目的

近年、スーパーコンピュータ「京」や「富岳」に代表されるコンピュータ技術やシミュレーションソフトウェアの飛躍的发展により、有機低分子のみならずタンパク質などの生体高分子の量子化学計算が可能となっている。本研究は、量子化学計算法の一つであるフラグメント分子軌道（Fragment Molecular Orbital: FMO）計算により有機低分子と標的タンパク質の詳細な相互作用を算出し実験値と比較検討することで薬剤効果や副作用、物質の機能に関する知見を得、コンピュータシミュレーションによる創薬および低コストで安全な新機能物質の開発・設計を目指している。

2. FMO 創薬コンソーシアムでの活動

本研究は、FMO 創薬コンソーシアムの活動の一環として実施しているものである。FMO 創薬コンソーシアムは、FMO 法によるインシリコ創薬（シミュレーションによる創薬）を実用的な技術として発展させるために、産官学連携の組織として 2014 年 11 月に設立された。現在、アカデミア 28 機関、製薬・化学・IT 企業 21 社がメンバーとなっている【<https://fmodd.jp/>】。日本発の理論手法である FMO 法は、電子状態計算に基づいて医薬品候補化合物と標的タンパク質との詳細な相互作用情報が得られることから、精度の高い信頼性と有効性をもったシミュレーションによる新しい創薬に繋がることが期待されている。FMO 創薬コンソーシアムでは、平成 27 年度から現在まで、研究課題「HPCI を活用した FMO 創薬プラットフォームの構築」が採択されており、スーパーコンピュータ「京」に引き続き、「富岳」によるコンピュータシミュレーションを進めている。我々のグループは現在まで、主に以下のターゲットに対して計算を実施し、薬剤効果の予測や標的タンパク質の機能解明を行ってきた。

3. 応用の可能性

コンピュータシミュレーションによる創薬・ものづくりには、次の利点が挙げられる。

- ①実験回数（コスト）が大幅に削減でき、創薬・ものづくりの加速化・効率化につながる。
- ②環境に優しい創薬・ものづくりにつながる。
- ③実験では得られない新たな知見が得られる。
- ④シミュレーションによる薬剤効果の予測が可能になり、新薬の設計に大きく貢献できる。

現在、甲南化工（株）と共同で以下の研究テーマを進めている。

◆ACA と酵素リパーゼ複合体【甲南化工（株）】

- ▼認知機能改善に関する薬剤開発
- ▼抗がん剤の開発
- ▼抗肥満剤の開発
- ▼痛風や動脈硬化などの予防・治療薬開発
- ▼コラーゲンなどの産生能向上剤の開発《アンチエイジング》

カーボンニュートラルを加速する低コストな次世代有機太陽電池材料の創製

理学部化学科 ○岩永哲夫, 酒井 誠

理学部物理学科 山本 薫

京都大学化学研究所

概要: 本研究では、独自の「分子のかたち」の設計により、安価な市販原料から短工程で高性能・高安定な有機半導体を開発し、次世代太陽電池の実用化を通じてカーボンニュートラルの実現を目指す。

1. 研究目的

本研究では、「分子のかたち」に着目した独自の有機半導体設計指針を確立し、低コストかつ高性能な新規正孔輸送材料を開発することで、次世代ペロブスカイト型太陽電池の高効率化と実用化の促進を目指す。現在利用されている正孔輸送材料は、多段階合成に伴う高コストや、金属ドーパント添加による長期安定性の低下が実用化における大きな課題となっている。これに対し本研究では、含窒素パイ共役系ユニットを集積した独自の「板状」分子構造を設計する。これにより分子全体の平面性と相互作用を高め、金属添加剤に依存しない高い正孔輸送能と優れた安定性の両立を果たす。また安価な市販原料から短工程で合成できる手法を確立し、材料コストの低減と安定供給も実現する。さらに学内外の合成、分光、物性、デバイスの専門家が連携して「分子構造・電子状態・電池性能」の相関を多角的に解明し、汎用性の高い材料設計指針の提示を通じてカーボンニュートラルの実現に貢献する。

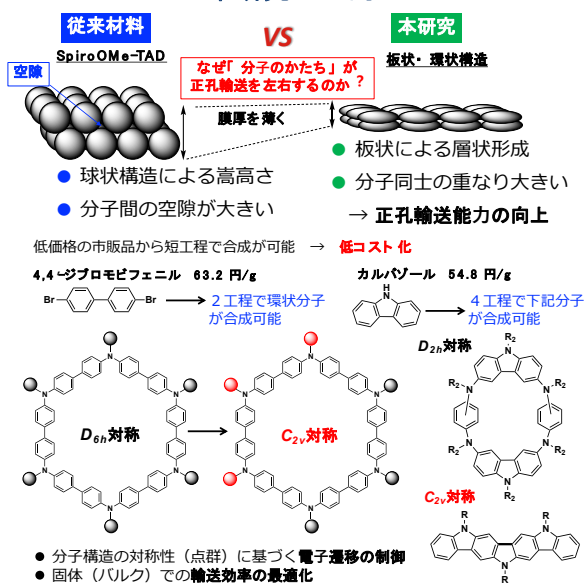
2. 研究内容と実施計画

本研究は、次世代ペロブスカイト型太陽電池の実用化を阻む正孔輸送材料の高コスト・低耐久性という課題に対し、「分子のかたち」に着目した独自の設計指針で挑むプロジェクトである。従来の球状分子に代わり、平面性と剛直性に優れた独自の「板状」の大環状・パイ拡張型有機分子を設計し、分子間の重なりを最大化することで、金属添加物に頼らない高い電荷輸送能と優れた安定性を両立する。また、高価な既存材料とは異なり、入手容易な市販原料から短工程で合成可能な革新的手法を確立し、劇的な低コスト化と安定供給を目指す点に大きな強みがある。実施計画として、1年目は岩永（有機合成）が多様な骨格の分子を創製し、酒井（レーザー分光）および山本（固体物性）がその電子状態や誘電特性を多角的に解析して分子設計へ迅速にフィードバックする基盤を構築する。2年目は、スクリーニングした有望材料を用いて、ペロブスカイト型太陽電池の実用化に取り組む京都大学化学研究所の研究者との共同研究のもとで太陽電池デバイスへと実装する。膜厚や成膜条件の最適化を通じて高い光電変換効率と長期耐久性を実証し、カーボンニュートラルの実現に資する汎用的な新材料の社会実装へと繋げる。

3. 応用の可能性

本研究で開発する低コストかつ高い安定性を有する有機半導体材料は、ペロブスカイト型太陽電池の実用化を大きく加速する。安価で安定供給が可能なため、将来的には大学施設や実際の住環境へ太陽電池を設置する実証評価を進め、地域社会へのクリーンエネルギー普及に貢献できる。

本研究の目的



高溶解性アミノ置換フェニルスルホニル基の開発と

パイ拡張スルホン合成への応用

理工学研究科システム科学専攻 ○松永至恩, 岩倉旭良

工学部応用化学科 高橋力也, 奥田靖浩, 折田明浩

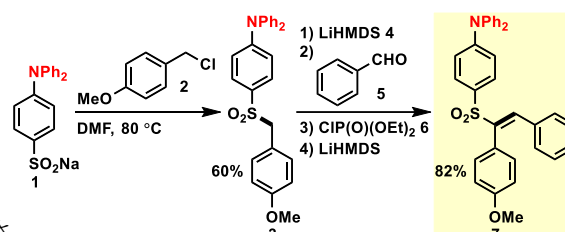
概要: 次世代ディスプレイや有機半導体への応用が期待されるパイ拡張スルホンの高溶解度化を目指し、立体反発を利用したアミノ置換フェニルスルホニル型可溶性補助基を開発した。本補助基の導入により、難溶性パイ拡張スルホンの溶解性を劇的に改善させることに成功した。

1. 研究目的

優れた発光・電子特性を有するパイ拡張スルホン誘導体は、次世代有機エレクトロニクス材料への応用が期待されている。しかし、パイ共役系の高次化に伴う難溶性が原因となり、その産業化は極めて困難である。本研究では、スルホニルフェニレン上ヘジフェニルアミノ基を導入した新規可溶性補助基を設計し、スルホン誘導体の溶解性向上を試みた。

2. 結果と考察

文献に従い調製した **1**^{[1][2]} と *para*-メトキシベンジルクロリド **2** の反応からベンジルスルホン **3** を 60% 収率で得た。**3** をリチウムビス(トリメチルシリル)アミド **4** によりリチオ化した後、ベンズアルデヒド **5** とのアルドール反応を行い、続いてクロロリン酸ジエチルによるホスホリル化を行った。さらに、系中で生成したホスフェートに対して再び **4** を添加し、脱リン酸反応を経て、エテニルスルホン **7** を 82% 収率で得た (Scheme 1)。



Scheme 1. ジフェニルアミノ基を有するスルホニルエテニルベンゼンの合成

得られたアミノスルホン **7** と対応する水素体、メチル体、メトキシ体の THF への溶解性を比較した (Table 1)。50 mg の基質を溶解するのに要した THF 量は、高い結晶性を示すメチル体で 1.49 mL、水素体で 0.300 mL、メトキシ体で 0.260 mL であった。これに対し、アミノ体 **7** は 0.115 mL で完溶し、水素体と比較して約 1.8 倍の高い溶解性を示した。以上より、本補助基の導入がスルホン誘導体の高溶解度化に極めて有効であると明らかとなった。

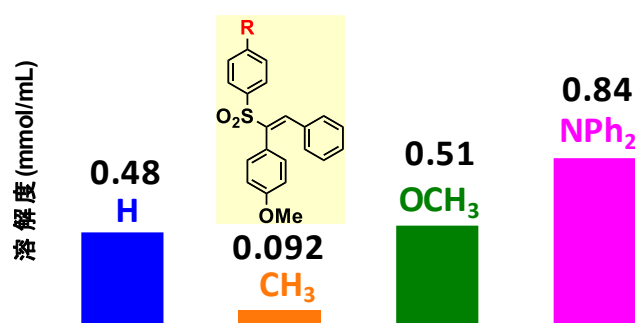


Figure 1. 一置換エテニルスルホンの溶解度

3. 応用の可能性

本補助基が有する優れた可溶化能は、有機材料合成における環境負荷と製造コストの低減に貢献出来ると考えられる。また、脱スルホニル化反応により補助基の除去が可能のため、効率的な大量生産へと応用できると期待できる。

[1] Wagner, J., Mioskowski, C. *et al. J. Org. Chem.* **2003**, 68, 5758.[2] William E. Truce, F. Edward Roberts Jr. *J. Org. Chem.* **1963**, 28, 593.

光電変換材料への応用を志向した

ドナー- π -アクセプター型ジベンゾペンタレン色素の合成

理工学研究科システム科学専攻 ○大島蓮音

工学部応用化学科 小林真生, 奥田靖浩, 折田明浩

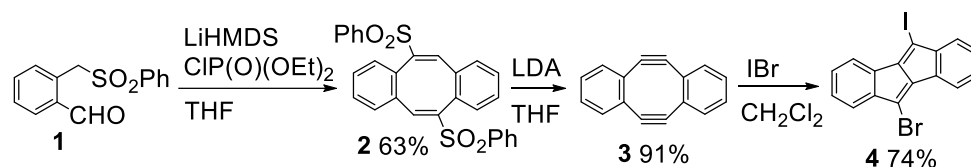
概要: 高性能かつ環境負荷の低い太陽電池材料の開発を目指し、特異な電気的性質を持つジベンゾペンタレン骨格を中心としたドナー- π -アクセプター型色素を合成した。その結果、従来開発したアントラセン色素と比較して、より長波長領域の光を吸収することが確認された。

1. 研究目的

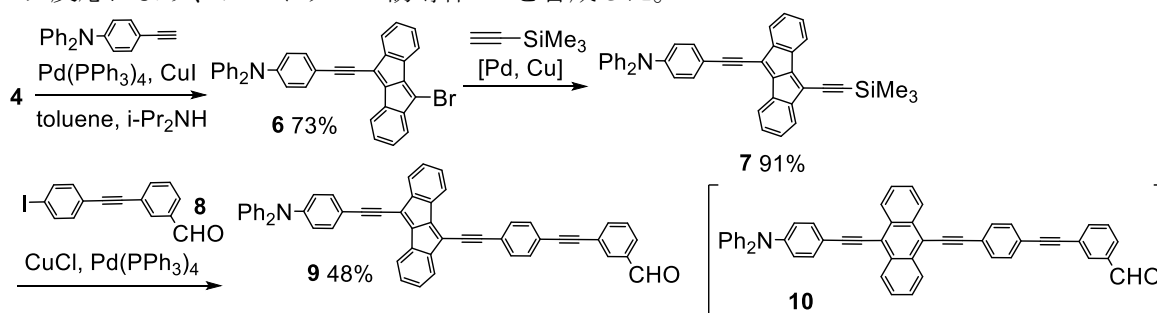
現在使われている太陽電池には、湿気や光に弱く寿命が短いなどの材料の問題、多大なエネルギーを消費して作られるなどの製造方法に課題がある。そのため、本研究では、長波長領域の光を利用可能な高性能かつエコな色素の開発を目的に、反芳香族ジベンゾペンタレンを導入したドナー- π -アクセプター型の色素の合成を行った。

2. 結果と考察

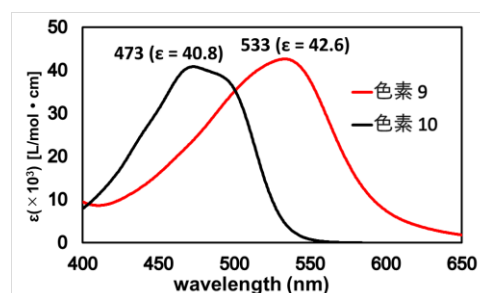
ジベンゾペンタレンを導入した色素 **9** の合成経路を以下に示す。本合成の鍵中間体となる

Scheme 1. ブロモヨードジベンゾペンタレン **4** の合成

るブロモヨードジベンゾペンタレン **4** は、(1) *ortho*-ホルミルベンジルスルホン **1** の環化 2 量化、(2) 脱スルフィン酸反応、(3) 一臭化ヨウ素による渡環反応を経て、3 段階で合成した (Scheme 1)^[1]。続いて **4** と末端アセチレンとの菌頭・萩原カップリングを繰り返すことで **9** を合成した (Scheme 2)。また、比較のために **9**, 10-ジブロモアントラセンを出発原料に用いた同様のカップリング反応により、アントラセン誘導体 **10** を合成した。

Scheme 2. 色素 **9** の合成

得られたペンタレン色素 **9** およびアントラセン色素 **10** をクロロホルムに溶解し、紫外可視吸収スペクトルを測定した (Figure 1)。**9** および **10** はそれぞれ 533 nm と 473 nm に最長吸収波長を示し、期待通り、ジベンゾペンタレン色素 **9** がより長波長領域の可視光を吸収することが明らかになった。



3. 応用の可能性

ジベンゾペンタレンを有する色素の合成は、現在使われている太陽電池製造にかかるコスト、環境負荷に比べ、大きく抑えることが出来ると考えられる。

[1] A. Orita, J. Otera, *et al. Org. Lett.* **2012**, 14, 3970-3973.

SDGs：難分解性素材のリサイクルおよび代替化への挑戦

工学部応用化学科 ○折田明浩

理学部基礎理学科 東村秀之

タイガースポリマー株式会社

概要：シリコンやテフロン（PFAS）は、優れた性能を有する一方で、リサイクルが困難であり、環境負荷や資源循環の観点から大きな課題となっている。本研究では、シリコンの化学的リサイクル技術の開発と、AI サーバー・6G 通信に必要な高周波基板向け非フッ素系材料の開発に取り組む。新たな分子設計と化学変換技術により、循環型社会の実現と次世代情報通信基盤の構築に貢献することを目指す。

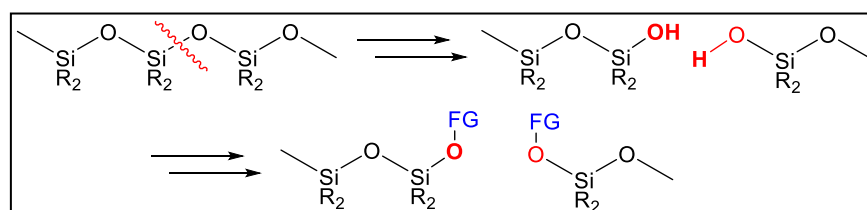
1. 研究目的

本研究は、難分解性素材であるシリコンとテフロンに着目し、それらが抱える環境・産業課題を化学の力で解決することを目的とする。具体的には、シリコンの強固なSi-O結合を選択的に切断・再構築することで、再利用可能な「シリコンサイクル」を確立する。また、PFAS規制によって代替が急務となっているテフロンに代わり、超低誘電特性と高い耐熱性・難燃性を兼ね備えた非フッ素系高分子材料を開発する。これらを通じて、資源循環型社会と次世代情報通信技術の発展に貢献することを目指す。

2. 具体的研究内容

(1) シリコンリサイクル技術の開発

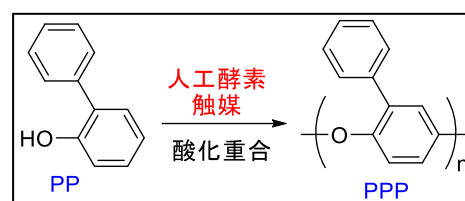
過酸化水素や酸素プラズマなどの活性酸素種



を利用し、極めて強固なSi-O結合を温和な条件で選択的に切断する手法を開発する。切断により生じるSi-OH基を反応点として利用し、シロキサン鎖の再導入や再重合反応へ展開することで、シリコンの化学的リサイクルを実現する。さらに、IR、ラマン、NMRなどの分光学的手法を用いて表面反応の解析を行い、再利用材料としての性能評価を進める。

(2) 非フッ素系超低誘電材料の開発

AIサーバーや6G通信で用いられる高周波基板材料用途を目指して、超低誘電特性と高耐熱性・難燃性を同時に満たす新規ポリマーを開発する。人工酵素触媒によりPPからPPPを合成できることを見出しており（右図）、PPPを改良することで性能向上を検討している。企業との共同研究も活用して、スケールアップ、試作品製造およびユーザー評価を実施し、社会実装を推し進める。



3. 応用の可能性

本研究で得られるシリコンリサイクル技術は、医療材料、自動車部材、電子部材など広範なシリコン製品の資源循環を可能にし、廃棄物削減と低炭素社会の実現に寄与する。また、非フッ素系超低誘電材料は、AIサーバー、6G通信、高速半導体パッケージなどの次世代情報通信機器への応用が期待される。さらに、本研究成果は新たな環境調和型材料の創出につながり、地域産業の活性化や新規事業創出への波及効果も期待される。

T 字型マイクロ流路内における液々 2 相交互流に与える合流角度の影響

理工学研究科 システム科学専攻 ○尾路 慧

工学部バイオ・応用化学科 井上莉香子

工学部応用化学科 平野博之

概要：水相と有機相を、T 字型マイクロ流路に導入して生じる液々 2 相交互流について、実験および汎用流体解析システムとして広く利用されている OpenFOAM を用いた数値解析を行い、交互流のセグメント長に与える合流角度の影響について詳細に検討を行った。

1. 研究目的

円形断面や正方形断面などの流路において、代表径が 1 mm 程度以下の流路はマイクロ流路とよばれ、これよりも大きなスケールの、いわゆるマクロな流路にくらべ、化学反応や抽出などの化学工学的単位操作、化学分析、化学合成などを高効率・高精度で行うことができる。本研究では、水相と有機相による液々 2 相系について、両相を T 字型マイクロ流路内で合流させることで出現する交互流（各々の相が交互に現れる流れ）に着目する。交互流はマイクロ流路特有の現象であり、それぞれの相の長さ（セグメント長）が短くなるため、界面積の増大が見込め、とくに物質移動などの効率が大幅に向上することが期待できるが、用いる流体は透明であることが多く、物性値を変えずに流動様相を検討するためには困難を伴う。そこで本研究では、数値解析および実験の両手法により、セグメント長に与える合流角度の影響を中心に詳細に検討した。

2. 研究内容

円形断面および正方形断面の T 字型せん断マイクロ流路に、水相と有機相 (cyclohexane) を両相の流入速度が等しくなるように合流させて生じる交互流について、OpenFOAM を用いて数値解析した結果、および円形断面流路を用いた実験結果を合わせて、Fig.1 に示した。これより、①合流角度が 90° となるときがセグメント長は最小となること、②鋭角あるいは鈍角になればなるほどセグメント長は長くなること、③鋭角に比べて鈍角の方がセグメント長が長くなる割合が大きくなること、④円形断面に比べて正方形断面の結果の方がセグメント長が長くなること、⑤円形断面を用いた実験結果は、正方形断面と円形断面の計算結果の間となっていること、⑥実験結果と数値解析結果は定性的に一致していることがわかった。実験で用いた円形断面流路は切削加工しているため、数値解析モデルのような真円とはなっていない可能性も考えられる。このほか、T 字型衝突マイクロ流路を用いた数値解析も行った。

3. 応用の可能性

水相と有機相から成る相溶性の無い 2 種類の液体をマイクロ流路に導入して生じる交互流を利用することで、両相の界面積の増大が見込めるため、化学反応や化学工学的単位操作などの各種効率の大幅な向上が期待でき、化学工業装置の小型化を実現できる可能性がある。

【特許第 4931065 号】「衝突型マイクロミキサー」

【特許第 5504526 号】「マイクロリアクターを用いてスラグ流を形成する方法」

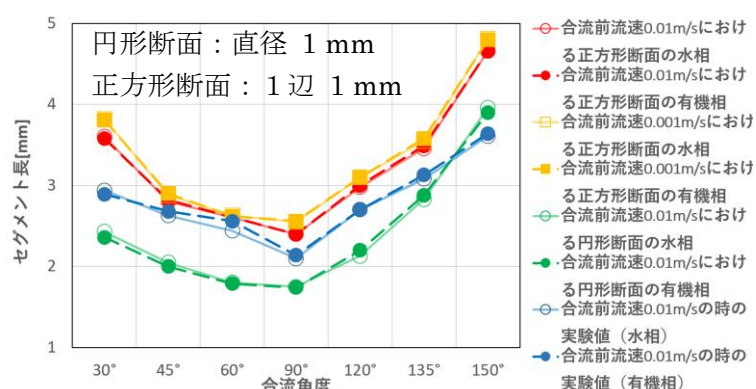


Fig. 1 セグメント長と合流角度の関係

光励起電子移動による光環化を基盤技術とした含窒素 π 電子材料の創製

工学部応用化学科 奥田靖浩, 白井萌子, 吉成智哉, 折田明浩

工学部応用化学科 (卒) 三宅貴翔 理工学研究科システム科学専攻 ○高本朔汰

岡山大学異分野基礎科学研究所

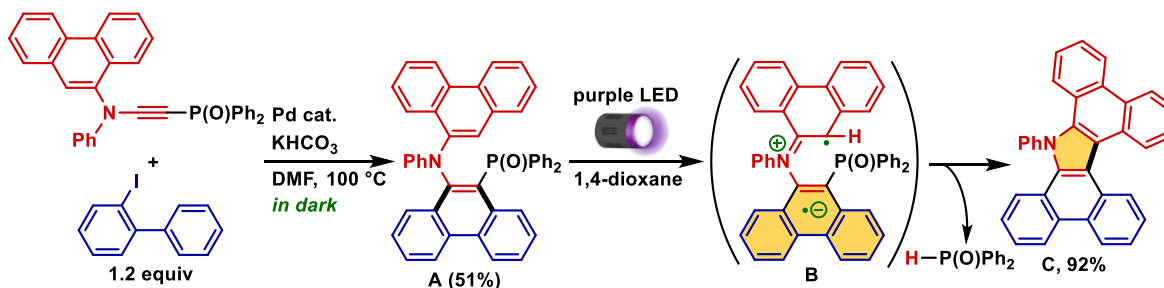
概要: 有機エレクトロニクス材料として有望な含窒素 π 共役化合物の新規合成法として、光励起電子移動による脱ホスフィニル型光環化を開発した。さらに、本環化の利用拡大に向けた前駆体の簡便合成法として、芳香族アミンの求電子的ホスフィニル化の開発にも着手した。

1. 研究目的

カルバゾールやトリフェニルアミンに代表される含窒素 π 共役化合物は、優れた正孔輸送能や発光特性を有し、有機 EL 素子や有機太陽電池などの有力材料として注目されている。特に多環縮合型の含窒素 π 共役化合物は特筆すべき材料特性を発現するが、これらの合成法である Scholl 反応などの酸化的縮環法では基質の分解や位置選択性の制御が困難という課題を抱えている。以前、我々は 9-アミノ-10-(ホスフィニル)フェナントレンに一電子還元剤 (KO^tBu) を加えて光照射すると、脱ホスフィニル化を伴う分子内環化が進行してジベンゾカルバゾールを合成した (*J. Org. Chem.*, **2024**, 89, 7747.)。本研究では、9-フェナントリル基を置換した環化前駆体 **A** を新たに調製し、**A** から外部還元剤の添加なしに光照射のみで環化する、分子内光励起電子移動 (Photoinduced Electron Transfer, PET) 型の光環化によりテトラベンゾカルバゾールを合成した。

2. 結果と考察

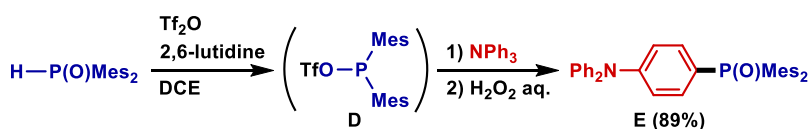
パラジウム触媒存在下、9-フェナントリル基を有するイナミンと 2-ヨードビフェニルとの [4+2] 環化により前駆体 **A** を収率 51% で得た。次に、**A** に紫色 LED 光 ($\lambda_{\text{max}}=390 \text{ nm}$) を照射したところ、添加剤を用いずとも脱ホスフィニル型環化が円滑に進行し、目的のテトラベンゾカルバゾール **C** を 92% で得た。本反応メカニズムは、光励起した **A** のアミノ基から (ホスフィニル)フェナントリル基への一電子移動が起こり、イミニウムカチオンとフェナントリルラジカルアニオンからなる電子移動状態 **B** を生成し、続くラジカル環化と脱ホスフィニル化を経て進行したと推察している。



3. 応用の可能性

本光環化反応を実用的な材料製造シーズとするには、多様な環化前駆体の簡便合成法が

不可欠である。そこで我々は、ジメシチルホスフィンオキシドから調製したホスフィントリフラート **D** をトリフェニルアミンと反応させる求電子的ホスフィニル化を検討し、パラ位選択的にホスフィニル化された **E** を収率 89% で得た。今後は、オルト位選択的なホスフィニル化による環化前駆体の合成や、**E** の PET により生成するラジカルアニオン種を利用した分子間カップリング反応など、さらなる合成利用について検討予定である。



水溶性ポルフィリン・フタロシアニン系金属錯体の合成と光機能評価

理工学研究科自然科学専攻 ○上田玲実

研究・社会連携機構フロンティア理工学研究所 赤司治夫

概要：ポルフィリン・フタロシアニン系金属錯体の高い光増感能に着目し、光照射により発生する一重項酸素の強力な酸化力を利用した低環境負荷型酸化反応系の開発を目指す。本研究では、特に水系で利用可能な水溶性ポルフィリン・フタロシアニン系金属錯体の合成と光機能評価を目的とする。

1. 研究目的

自然界では、光合成における水の酸化反応に見られるように、太陽光エネルギーを利用したクリーンな酸化反応が行われている。一方、従来の化学プロセスにおける酸化反応では、有害な酸化剤や有機溶媒の使用、副生成物としての金属塩の発生などが環境負荷の要因となっており、その低減には多大なエネルギーとコストを要している。

そこで本研究では、光増感能を有する金属錯体を用い、天然の酸化反応に学んだ低環境負荷型酸化反応系の開発を目指す。具体的には、光や酸素を利用し、可能な限り水を反応場とすることで、有害な酸化剤や有機溶媒の使用を抑えながら有用物質を合成する反応系を構築する。さらに、金属錯体への光照射により発生する一重項酸素の高い反応性を活用し、医療分野への応用や、抗菌・抗ウイルス機能を有する材料・反応系への展開も視野に入れる。

2. 水溶性ポルフィリン・フタロシアニン系金属錯体

ポルフィリンおよびフタロシアニン類、および、それらを配位子とする金属錯体は、基本的に水に難溶である。そこで、配位子に最適な親水性置換基を導入することで、水溶性錯体の開発を行っている。

ポルフィリン誘導体であるクロリン骨格に、親水性の高い糖鎖を連結することで、水溶性のクロリン誘導体を合成したり、フタロシアニンの環周辺の α 位に、末端部分をカチオン化したかさ高いアルキル鎖を導入することで、フタロシアニン間の過度な会合を抑制しつつ、本来水に溶けないフタロシアニンに水溶性を付与したりすることにも成功した。

水溶性のクロリンおよびフタロシアニン Zn 錯体は、酸素共存下で可視光を照射すると、強い酸化力をもった一重項酸素を発生する光増感剤として機能する (Fig. 1, 2)。水溶性ポルフィリン・フタロシアニン系金属錯体では、中心金属の種類や、置換基の選択などにより、その機能性をコントロールできる点も大きな特徴である。

3. 応用の可能性

これらの水溶性金属錯体は、水系で利用可能な光増感剤として、低環境負荷型酸化反応だけでなく、光線力学療法、抗菌・抗ウイルス材料、環境浄化反応などへの応用が期待される。

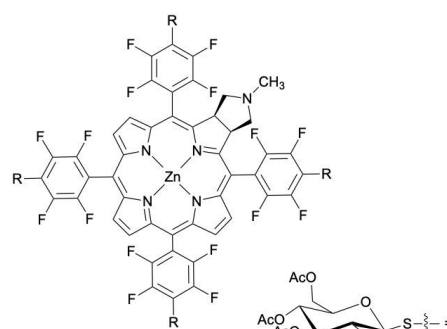


Fig. 1 糖連結クロリンを配位子とする水溶性 Zn 錯体

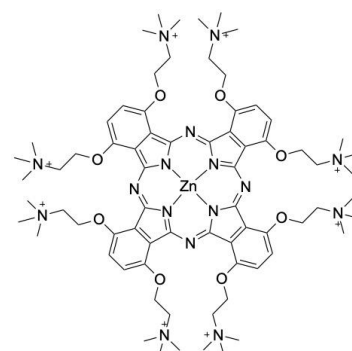


Fig. 2 α -トリメチルエトキシカチオン基を導入した水溶性フタロシアニン Zn 錯体

青色系ガラスの作製と微細構造解析

理工学研究科システム科学専攻 ○川原大輝, 福永花歩

工学部応用化学科 牧 涼介, 草野圭弘

グラスイメカ, 滋賀県工業技術総合センター, 岡山大学, 生産開発科学研究所

概要: 鉄を着色材とした青および緑色ガラスの作製条件を確立し、ガラス中の鉄イオンの化学状態を明らかにした。還元剤として炭素を添加するとガラスは青色となり、炭素を添加しないガラスは緑色を呈した。青色ガラスは Fe^{2+} を多く含み、緑色ガラスは Fe^{3+} を多く含むことを明らかにした。

1. 研究目的

ガラスの呈色は、主にガラスに含まれる遷移元素や希土類元素によって引き起こされ、これらの酸化数によって色調は変化する。Fig.1は、本研究の共同研究者であるガラス工芸作家の琵琶湖彩ガラスである。ガラス作家は、琵琶湖の水草が年間約5000 t廃棄処理されていることに注目し、琵琶湖の水草を灰にしたものを無色透明となるガラス原料に混合し、琵琶湖の色を再現した青や緑色ガラスを作製している。ガラスの青および緑色は、ガラスに含まれる鉄イオンに起因し、鉄イオンの d 電子の遷移の結果として呈色する。しかし、青および緑色のガラス中の鉄イオンの化学状態や微細構造については明らかにされていない。本研究では、出発物質に還元剤として炭素を混合することにより青色ガラスの作製を検討した。また、得られたガラスの光吸収特性を評価した。



Fig.1 ガラス工芸作家の琵琶湖彩ガラス作品

2. 青色ガラスの呈色機構の解明

表 1 に、ガラス原料、 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ の混合量および得られたガラスの色調を示す。ガラス原料のみを熱処理して作製したガラス(a)は無色透明であったが、 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ を添加すると黄色味の強い緑色のガラス(b)となった。青色のガラス(c)は、原料に還元剤として C を混合することで作製することができた。一般に、ガラスの色調は、ガラス中の Fe イオンの化学状態および $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ 比によって変化する。緑色のガラスには主に Fe^{3+} イオンが含まれており、 Fe^{3+} は 380-460 nm 付近の光を吸収するためガラスに黄色味を与え、緑色に呈色した。また、 Fe^{2+} イオンは 700-2500 nm の広い範囲の光を吸収するため、ガラスに青色味を与えることを明らかにした。青色ガラスには六配位の Fe^{2+} が多く、緑色のガラス中には六配位 Fe^{3+} が多く含まれていることから、これらが呈色に関与していると考えられる。

Table 1 混合量および得られたガラスの色調

	(a)	(b)	(c)
ガラス原料(wt%)	100	99.0	76.15
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$	—	1.0	0.77
C	—	—	23.08
	無色透明	緑色	青色



3. 応用の可能性

本研究の成果は、鉄イオンの化学状態を根拠にガラスの色調を制御することを可能にする。廃棄される水草灰などを着色材として利用することにより、意匠性と資源循環を両立したガラス製造への応用が期待できる。

Al₃BC₃ の酸化反応を利用した多孔質 Al₂O₃ の合成

工学部応用化学科 ○牧 涼介, 草野圭弘
理工学研究科システム科学専攻 (了) 中島 雅
岡山セラミックス技術振興財団

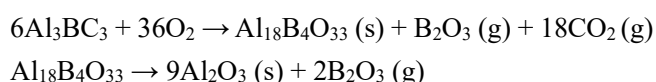
概要：Al₃BC₃ の酸化反応を利用して多孔質 Al₂O₃ を合成し、焼成条件が微構造および機械的特性に与える影響について検討した。酸化反応により CO₂ および B₂O₃ が生成・揮散することで微細な気孔が形成し、焼成温度で気孔率を制御できることが明らかとなった。気孔率 72 % で従来比 3 倍以上の強度を有する高強度な多孔質 Al₂O₃ の合成に成功した。

1. 研究目的

多孔質アルミナ(Al₂O₃)は、軽量で熱伝導率が低く、高剛性を有することから、断熱材や耐火物などに広く利用されている。また、連結した開気孔を有する多孔体は分離フィルター、触媒担体および吸着剤などに用いられる。気孔は、一般的には澱粉や樹脂などの有機物、カーボン粉末等の可燃性物質を造孔剤として添加し、焼成することによりセラミックス内部に形成される。しかし、気孔率が増加すると重量が軽減される一方で、機械的強度は低下する。そのため、高い気孔率と高強度を両立するためには、気孔が均一に分散した多孔質 Al₂O₃ を合成することが重要である。本研究では、Al₃BC₃ の酸化・熱分解反応を利用して多孔質 Al₂O₃ を合成し、焼成条件が微構造に与える影響について検討した。また、得られた多孔質試料の機械的および熱的特性を評価した。

2. 多孔質 Al₂O₃ の微構造評価

Fig. 1 に、Al₃BC₃ 成型体を 1500 °C で焼成した試料の XRD パターンを示す。10 h 焼成した試料は、Al₃BC₃ の酸化により Al₂O₃ と Al₁₈B₄O₃₃ が生成した。20 h 焼成した試料では Al₁₈B₄O₃₃ は全て熱分解し、Al₂O₃ 単相が得られた。熱分析結果から、Al₃BC₃ の酸化・熱分解反応が以下に従い起こったと考えられる。



1200 °C および 1500 °C で焼成した試料の微構造観察結果を Fig. 2 に示す。酸化反応により生成した CO₂ と B₂O₃ が揮発することで微細な気孔が形成された。焼成温度の上昇に伴って気孔は増大し、1500 °C で 20 h 焼成した試料の気孔率は 72 % であった。得られた多孔質試料の曲げ強度は 34.7 MPa を示し、同程度の気孔率を有する造孔材由来の多孔質 Al₂O₃ よりも 3 倍以上の強度を達成した。

3. 応用の可能性

本研究成果は、高強度な多孔質 Al₂O₃ を簡便に作製できることから、軽量かつ高強度が求められる断熱材や耐火物、分離フィルターなどへの応用が期待できる。

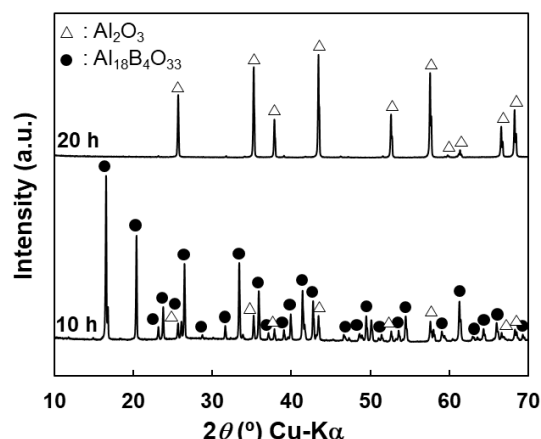


Fig.1 1500 °C で焼成した Al₃BC₃ 試料の XRD パターン

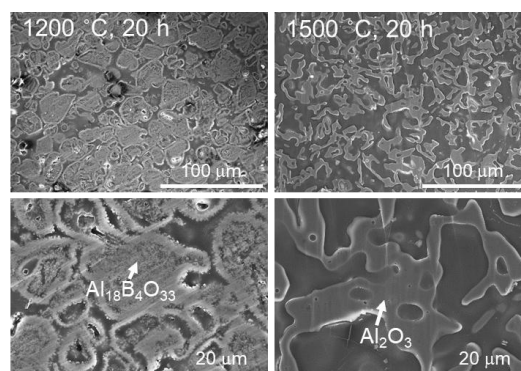


Fig.2 1200 °C および 1500 °C で焼成した Al₃BC₃ の微構造写真