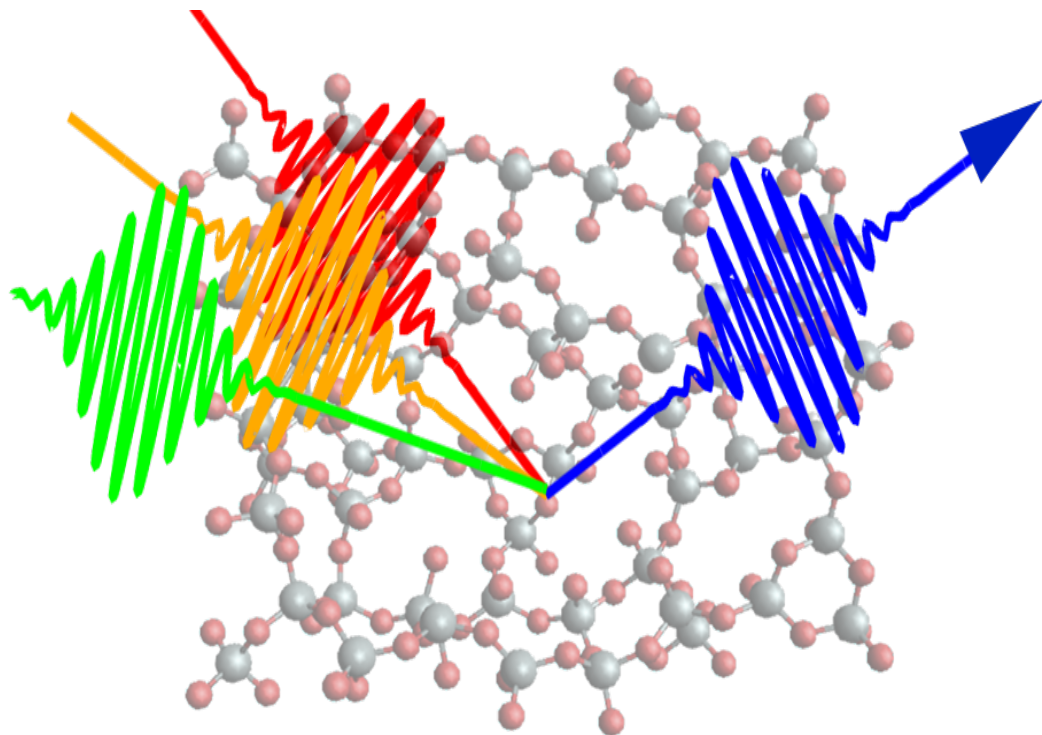
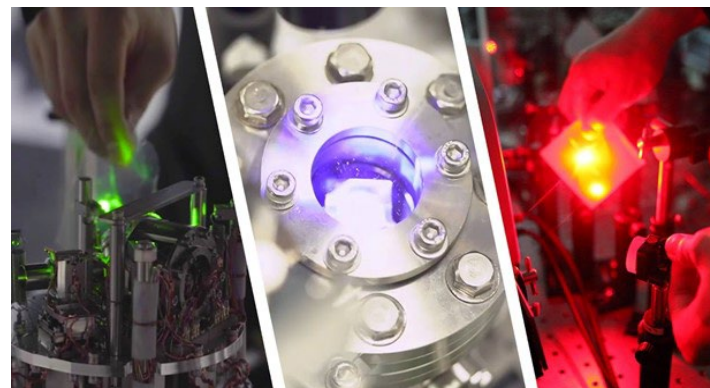


非晶質物質の不均一中距離構造解析を拓く 新規コヒーレントラマン分光技術



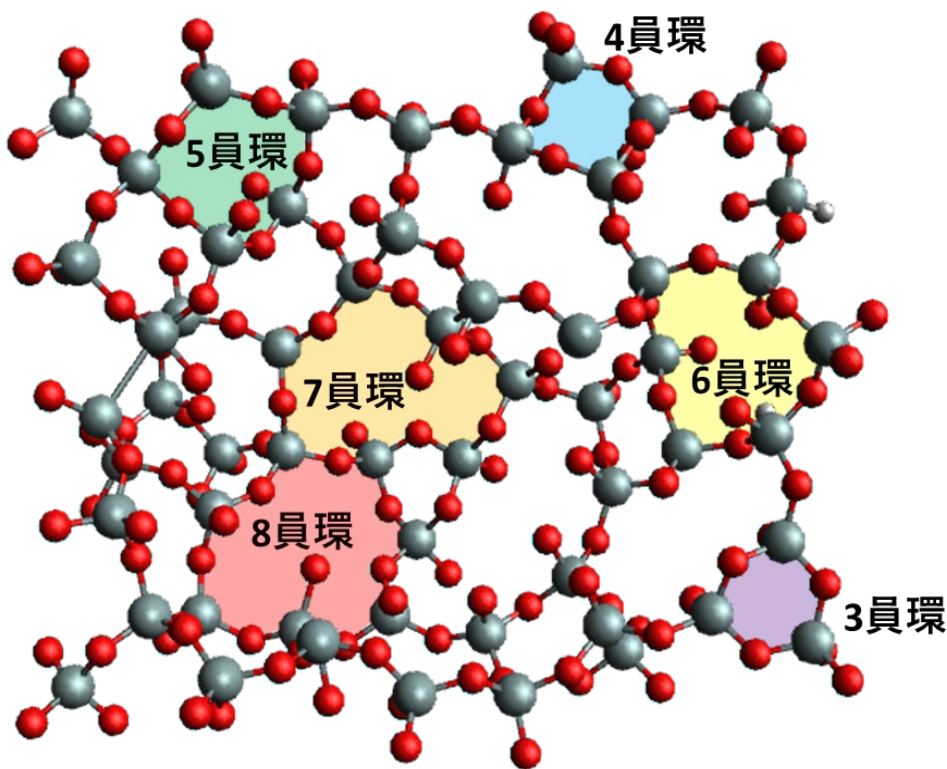
自然科学研究機構
分子科学研究所
物質分子科学研究領域
電子構造研究部門
准教授 杉本 敏樹



非晶質中距離ネットワークの重要性

非晶質物質は多様なアプリケーションで活躍する重要材料

光学・情報通信・半導体・固体電池・触媒化学・接合・接着



長距離構造：なし

短距離構造：sub-nmオーダー

局所的な配位環境や近接原子間距離

中距離ネットワーク構造：nmオーダー
員環サイズ・構造(多体元素間の結合角度)

⇒ 非晶質物質の光学的透明性、
熱的・誘電的特性、化学的安定性
といった特性を支配する重要因子

K.Awazu and H. Kawazoe, *J.Appl.Phys.* 94(10), 6243(2003).

材料形成条件や環境変化によって
員環構造ネットワークは多様に変化

不均一な中距離ネットワーク構造の定量的な評価が望まれる

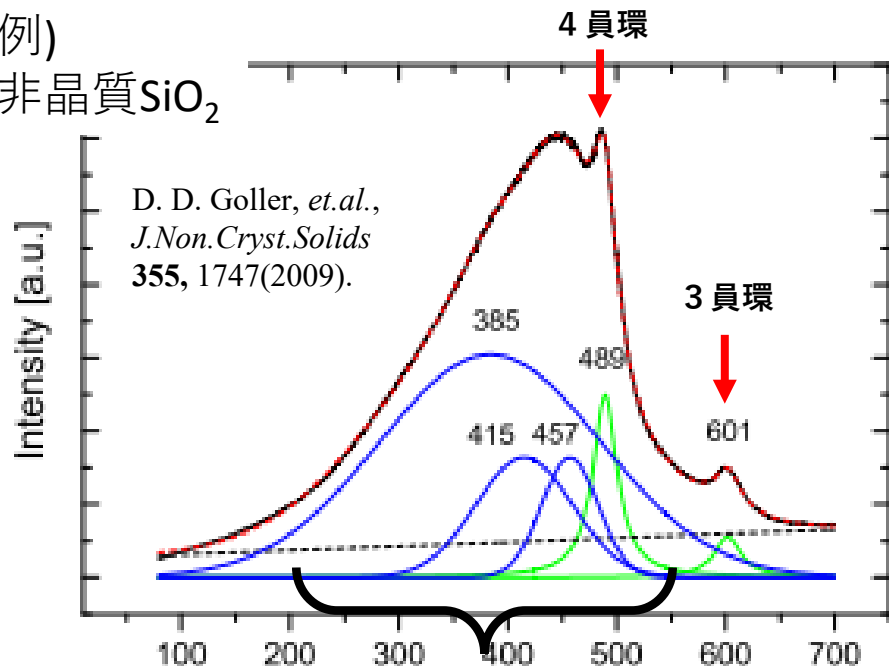
[しかし従来法では困難 → 我々の新技術]

従来分析技術とその問題点（ラマン分光）

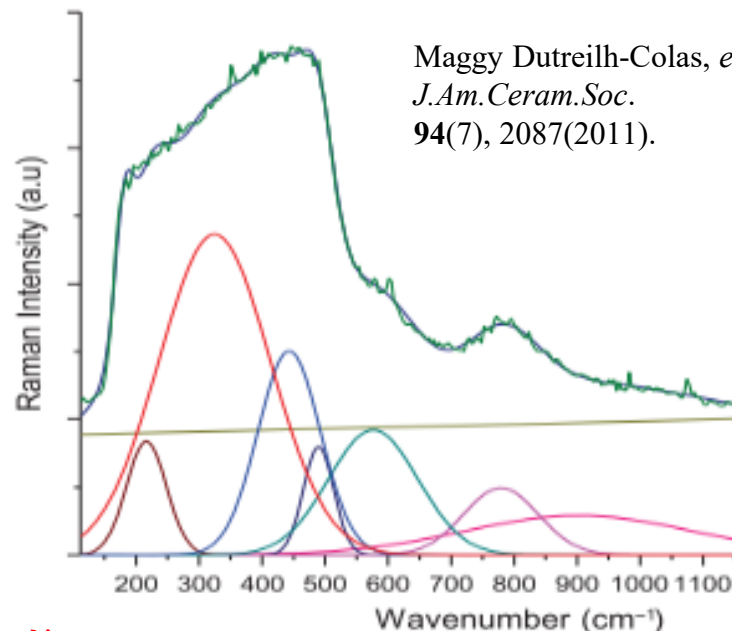
非晶質ラマンスペクトルはブロードに広がってしまう
⇒ 構成するスペクトル分割の妥当性が不明

例)

非晶質SiO₂



D. D. Goller, *et al.*,
J. Non. Cryst. Solids
355, 1747(2009).



Maggy Dutreilh-Colas, *et al.*,
J. Am. Ceram. Soc.
94(7), 2087(2011).

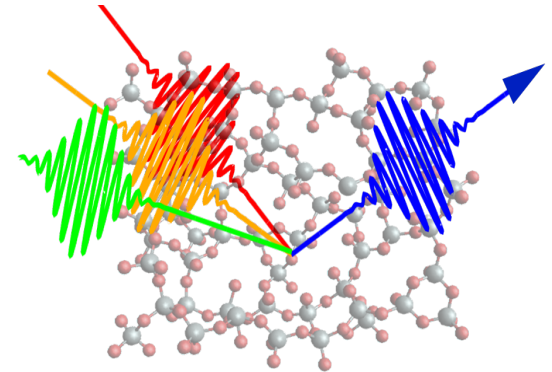
多員環構造（5員環以上）のスペクトルはブロード

⇒ 文献ごとに異なる多員環構造ピーク分割がされている

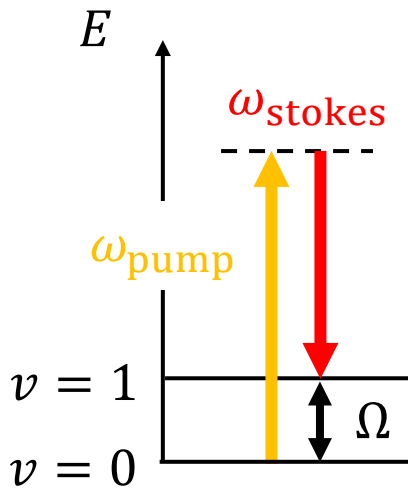
包括的かつ信頼性ある多員環構造解析のためには、一意的なピーク分割が課題

新技術の特徴・方法論、従来技術との比較

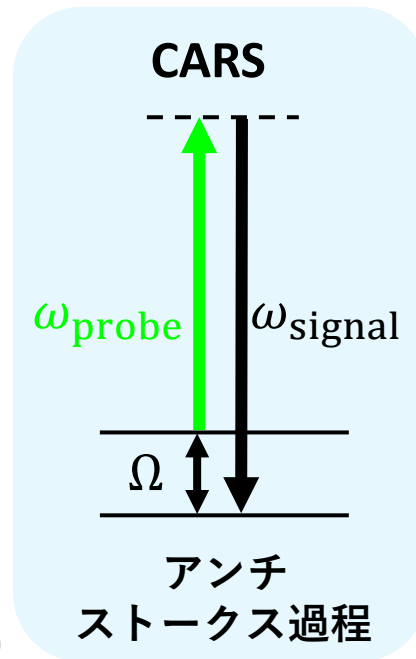
コヒーレントラマン分光法による 中距離ネットワーク構造解析方法の開発



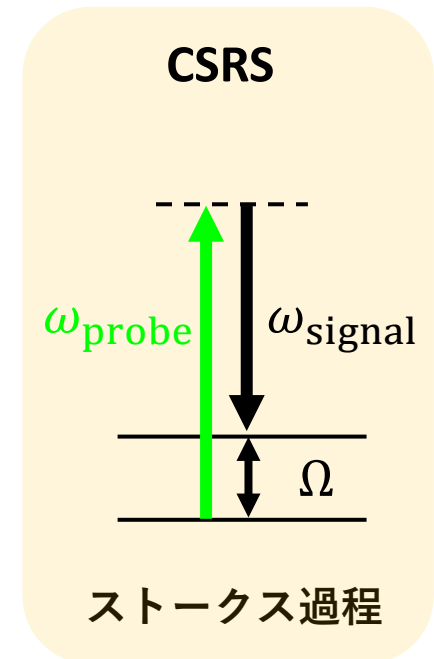
3次コヒーレントラマン分光のダイアグラム



ポンプ光(ω_{pump})とストークス光(ω_{stokes})
の差周波で振動モード(Ω)を励起



or



振動コヒーレンスを
プローブ光(ω_{probe})でプローブ

新技術の要点

コヒーレントラマン分光法により、

非晶質物質の“不均一な中距離ネットワーク構造（多員環構造）”を一意的に解析可能であるコンセプトを世界初で提示・実証した。

既存の構造解析技術とは一線を画するアプローチ

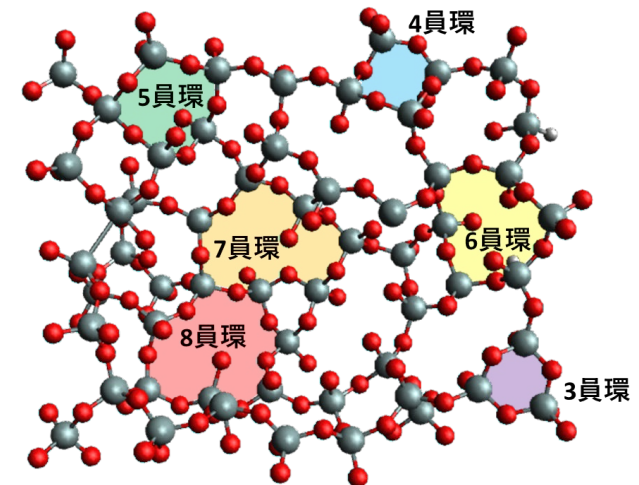
- ・ 既存の構造解析法（X線・中性子線回折・X線吸収法、核磁気共鳴）では、物質の不均一構造の定量解析が難しく、局所的な短距離構造の情報が主だった。
- ・ 既存の(自発)ラマン分光法では、構造不均一性に由来するスペクトルがブロード化し、ピークの一意的な成分分離が困難だった。

新技術の確立により、

構造学的観点からの非晶質物質の機能設計と最適化

を可能とし、幅広い産業分野で本質的に重要となる

材料評価と開発のあり方を刷新することが見込まれる。



想定される用途・新技術の波及領域

光学・情報通信・半導体・固体電池・触媒化学・接合・接着

現代社会に重要な非晶質物質の中距離多員環ネットワーク構造情報を提供
⇒ 材料の高機能化や高度化を促進

(例)

- ・半導体および光学デバイスに用いられる非晶質薄膜の構造科学的な品質評価と製造プロセス管理・最適化
- ・固体電池材料および情報通信材料における構造物関連の高精度評価による材料機能の設計・制御
- ・触媒材料や接合・接着界面における非晶質層のリアルタイム非破壊分析による界面材料機能の設計・制御とプロセス最適化

実用化に向けた課題

- ・ 複雑な非晶質物質に関するスペクトル計算
- ・ スペクトル分割におけるインフォーマティクスの導入
- ・ 計測スループットの向上・自動化
- ・ 計測システムの小型化・パッケージ化

社会実装への道筋

時期	取り組む課題	社会実装へ取り組み
基礎研究	<ul style="list-style-type: none">・コヒーレントラマン分光法による 中距離ネットワーク構造の計測・解析方法の開発が完了	
現在	<ul style="list-style-type: none">・無機材料(非晶質シリカ)のスペクトル計算・構造モデル化・薄膜非晶質材料と物性との相関づけ	
1年後	<ul style="list-style-type: none">・様々な非晶質系（無機・有機・複合材料）への展開 材料特性に応じた計測最適化やデモ実験・計測する非晶質物質のスペクトル計算	<p>材料企業：サンプルおよび評価指標データの提供</p> <p>計算系アカデミア・企業： 非晶質系のスペクトル計算・構造モデルの枠組み構築</p>
2～3年後	<ul style="list-style-type: none">・データ科学などを用いたスペクトル解析の運用性向上・自動制御装置による計測スループットの向上・自動化・新技術の普及を目指した小型化・商品化の実現	<p>ソフト開発系アカデミア・企業： 解析アルゴリズムの開発と実装</p> <p>FA企業：計測ラインの構築</p> <p>計測機器企業：製品試作・販売</p>

企業への期待

- ・ 無機非晶質材料開発および有機材料・複合材料系への展開

⇒ 材料特性に応じた計測最適化や材料データの整備が必要

⇒ 材料提供と評価指標（物性・品質）に知見を持つ企業との共同研究を希望

- ・ 非晶質物質のスペクトル計算

⇒ スペクトル計算と構造モデル化により、計測データと構造との接続が可能

⇒ 計算材料科学に強い企業との共同研究を希望

- ・ スペクトル解析の運用性の向上

⇒ データ科学を用いたスペクトル分割・定量化が必要

⇒ 解析アルゴリズム開発やソフトウェア実装に強い企業との共同研究を希望

- ・ 計測スループット向上・自動化

⇒ 光学システム制御・自動調整、機械化により達成できる

⇒ 条件最適化や工程の自動化技術を持つ企業との共同研究を希望

- ・ 小型化・商品化

⇒ 顕微鏡など計測装置メーカーとの共同研究を希望

企業への貢献・PRポイント

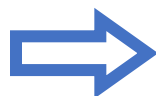
産業応用における新規非晶質材料研究開発に新潮流をもたらす

非晶質材料の物性を支配する中距離員環構造の解明

- ☞ 構造学的観点からの機能設計と最適化
- ☞ 幅広い産業分野で本質的に重要となる材料評価と開発のあり方を刷新

経験則の材料開発

Try & Error



構造に基づく材料設計

Structural Guideline & Design Principle

本技術の導入にあたり・・・

- ・ 測定対象とする新規非晶質材料に応じて必要な追加実験やデモ実験により有効性の確認
- ・ 測定した中距離構造に関する物理化学的解釈の検討
- ・ コヒーレントラマン分光に関する技術指導

を実施可能

本技術に関する知的財産権

- 発明の名称：**非晶質物質の分析方法、
ラマン分光装置及び顕微鏡装置**
- 出願番号：特願2025-144216
- 出願日：令和7年8月29日
- 出願人：自然科学研究機構
- 発明者：杉本敏樹、吉澤龍

産学連携の経歴

2020~2024年度: 防衛装備庁 安全保障技術研究推進制度(タイプS) への参画

次世代レーザーデバイス創成：常温物質接合メカニズム解明のための
革新的界面*in-situ*計測法開発

三菱電機株式会社、神島化学工業株式会社、日本ファインセラミックス協会

2022~2029年度: 環境省 地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的
触媒技術の開発・実証事業 への参画

革新的触媒・反応プロセス創成：触媒反応駆動メカニズム解明のための
オペランド計測方法論開拓

株式会社クボタ、住友化学株式会社、株式会社フルヤ金属、株式会社東芝

2025年~2030年度: JST経済安全保障重要技術育成プログラム への参画

次世代航空機接着技術の創成：高分子接着因子、共有結合評価・解明のための
革新的界面*in-situ*計測法開発

三菱重工業株式会社、帝人株式会社、東レ株式会社

お問い合わせ先

自然科学研究機構 事務局研究協力課研究支援係

TEL 03-5425-1325

e-mail nins-sangaku@nins.jp