

2024年版 理化学研究所特許シーズ集

材 料

Towards a better future

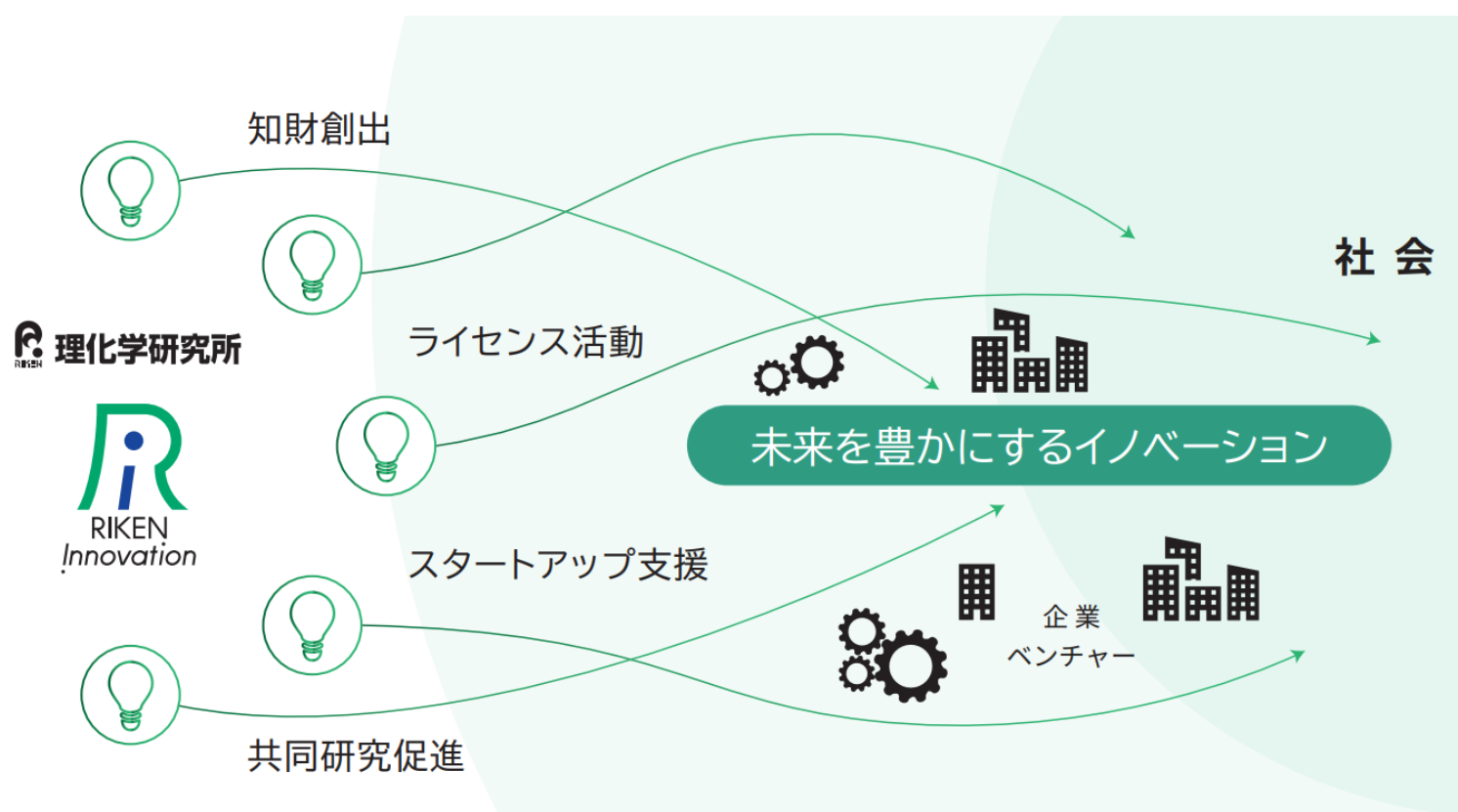
“！”でInnovationを



イノベーションの新しい風を。

理研イノベーションは

国立研究開発法人理化学研究所（理研）が推進する産業連携、イノベーション事業を牽引するため理研の100%出資により設立された会社です。



会社概要

【社 名】株式会社理研イノベーション

【創 業】2019年12月1日

【所在地】埼玉県和光市広沢2-1（理化学研究所内）

【資本金】9,000万円

【出 資】理化学研究所（100%出資）

【本社】

〒351-0198
埼玉県和光市広沢2-1
（理化学研究所内）

【東京オフィス】

〒103-0027
東京都中央区日本橋1-4-1
日本橋一丁目三井ビルディング 19階
（COREDO日本橋）

【神戸オフィス】

〒650 0047
兵庫県神戸市中央区港島南町6-7-1
（理化学研究所内）



目次

タイトル	ページ
新規な固体酸触媒によるカルボン酸エステルのフロー生成	1
シリコンワイヤと貴金属微粒子を用いた脂肪族炭化水素の新規製造方法	1
固体触媒を用いたフロー型カップリング反応システム	1
ABPX色素の新規合成方法・非対称ABPX色素の提供	2
近赤外ABPX色素化合物、及びその製造方法	2
ABPX色素を利用したケミカルセンサー・ガス検知技術	2
色相が多段階変化する新規ローダミン系色素化合物・iso-ABPX色素	3
新規な近赤外光吸収材料の開発・新規芳香族性ヘミポルフィラジン	3
新規拡張型フタロシアニン化合物及びその製造方法	3
新規なキノイド型 π 共役系近赤外色素の開発	4
脱窒反応に使用される革新的な電極システム	4
一対比較特許（意図,暗黙知,ノウハウ等の評価方法）	4
多結晶材料の結晶方位の推定	5
機械学習による有機分子設計技術	5
有機非線形光学結晶（BNA）の革新的な製造技術	5
セリアナノワイヤを活用した革新的電極材料	6

新規な固体酸触媒によるカルボン酸エステルのフロー生成

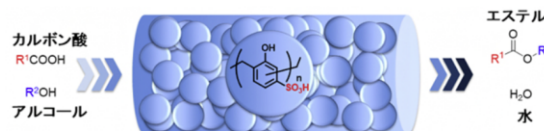
環境資源科学研究センター 山田 陽一 等

キーワード #触媒

概 要

カルボン酸エステルは、医薬品、香料、化粧品、プラスチック、塗料などの製造に欠かせない原料です。フロー合成により製造する方法を提供します。

メタフェノールスルホン酸系樹脂を含む新規な固体酸触媒です。この触媒を使用することで、フロー反応で高効率でカルボン酸エステルを生成することができます。また、この触媒は再利用性にも優れています。



ポ イ ン ト

- 高効率でカルボン酸エステルを生成
- メタフェノールスルホン酸系樹脂を含む新規な触媒組成物の提供
- 触媒の再利用性に優れている

応 用

- 医薬品、香料、化粧品、プラスチック、塗料などの製造に応用可能

知財関連情報

特許第7312463号

革新的な方法で、環境に優しく、効率的に脂肪族炭化水素を製造しましょう！

シリコンワイヤと貴金属微粒子を用いた脂肪族炭化水素の新規製造方法

環境資源科学研究センター 山田 陽一 等

キーワード #触媒, #ナノ材料, #環境浄化, #エネルギー, #ものづくり・製造技術一般, #表面処理技術

概 要

石油や天然ガスからの脂肪族炭化水素と一酸化炭素の製造は、環境に悪影響を与えることが知られています。この新しい方法は、シリコンワイヤと貴金属微粒子を使用して、環境に優しく、効率的にこれらの化合物を製造することができます。

本技術は、シリコンワイヤ上に貴金属微粒子を担持させた触媒により、バイオマスなどに含まれる脂肪酸カルボン酸等から第二世代バイオディーゼル燃料になり得る脂肪族炭化水素を製造するものです。この方法は、従来の方法よりも環境に優しく、効率的であり、産業界での使用が期待されています。



ポ イ ン ト

- 環境に優しく、効率的に製造することができます。
- 従来の方法よりもエネルギー効率が高い
- 産業界での多くの分野での応用が期待

応 用

- エネルギー産業
- 自動車産業：環境に優しい燃料の製造
- 化学産業：環境に優しい製造方法

知財関連情報

特許第7176759号

効率的な有機合成反応を実現する新技術

固体触媒を用いたフロー型カップリング反応システム

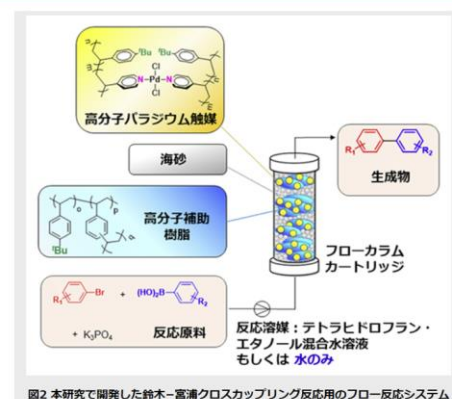
環境資源科学研究センター 山田 陽一 等

キーワード #医薬 #環境浄化 #触媒

概 要

有機ハロゲン化合物と有機ホウ素化合物をパラジウム触媒で反応させ、炭素-炭素結合を介して連結する「鈴木-宮浦クロスカップリング反応」をフロー合成で実現する新技術です。

固定化触媒を用いたフロー反応システムの開発に成功しました。高い収率で生成物を得ることができます。カラムカートリッジ内の充填物が、触媒を安定化させ失活を防ぎます。水溶液でも反応でき、環境負荷を低減することができます。



ポ イ ン ト

- 高い収率で生成物を得ることができる。
- 充填物に触媒の失活を防ぐ機構がある。
- 環境負荷を低減することができる。

応 用

- 医薬品の合成反応の効率化
- 機能性分子の合成反応の効率化
- 持続可能な有機合成反応の実現

知財関連情報

国際出願
JP2023/008147

ABPX色素の新規合成方法・非対称ABPX色素の提供

環境資源科学研究センター 神野 伸一郎 等

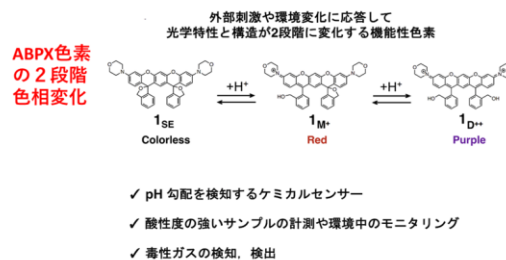
キーワード #化学プロセス技術、#環境浄化、#有機EL、#LED、#光源、#光学装置

概 要

ローダミン系色素が2分子縮合したアミノベンゾピラノキサンテン系(ABPX)色素化合物は理研研究成果です。

従来のABPX色素の合成方法と比較して高収率な合成方法を確立しました。非対称ABPX色素の合成も可能です。

ABPX色素は発光効率が高く着色料や顔料、染色剤としての各種色素材料、蛍光イメージング色素、色素増感型太陽電池等様々な分野に有用な化合物として期待されています。本技術は、高収率なABPX色素の合成方法に関します。この方法により、非対称ABPX色素の合成も可能です。



ポ イ ン ト

- 新しい化合物を得ることができる
- 高収率で化合物を合成でき、コスト削減に繋がる
- 環境に優しい合成方法

応 用

- 医薬品の合成
- 有機EL素子の製造
- 光学材料の合成

知財関連情報

特許第6869524号

ABPX色素化合物の長波長シフト技術！

近赤外ABPX色素化合物、及びその製造方法

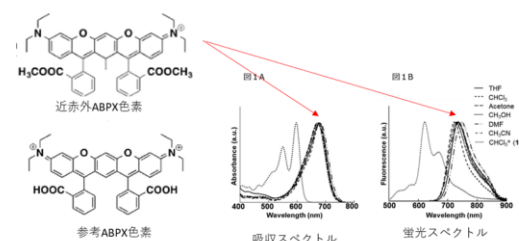
環境資源科学研究センター 神野 伸一郎 等

キーワード #化学プロセス技術、#有機EL、#LED、#光学装置、#量子デバイス、#ナノ材料

概 要

ローダミン系色素が2分子縮合したアミノベンゾピラノキサンテン系(ABPX)色素化合物は理研研究成果です。従来のABPX色素と比較して長波長シフトした近赤外ABPX色素を新規に合成しました。

本技術は、近赤外ABPX化合物に関します。ABPX色素の所定の位置に置換基を導入することで長波長シフトすることを見出しました。セキュリティンク、生体イメージング等、種々の用途への利用が期待されます。



ポ イ ン ト

- 高い発光効率を実現することができる
- 従来の光学素子に比べて製造コストが低くなる
- 大量生産にも適している。

応 用

- ディスプレイ
- 照明
- センサー

知財関連情報

特許第7222517号

ABPX色素化合物の応用・新しいガス検知技術！

ABPX色素を利用したケミカルセンサー・ガス検知技術

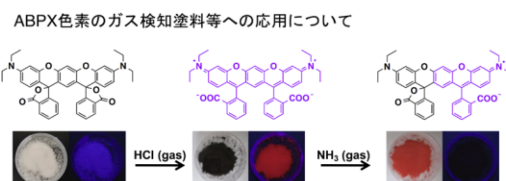
環境資源科学研究センター 神野 伸一郎 等

キーワード #分析、#計測、#環境浄化、#水浄化、#二酸化炭素削減、#太陽光発電

概 要

理研研究成果ABPX色素を、産業ガスなどを高感度、高精度なガス検知用途に利用する技術を提供。

本技術は、ABPX色素を利用したケミカルセンサーです。ガス状態の分子の検知が可能です。蛍光発光や色変化によるガス検知が可能であり、生産プロセスの現場における応用など、様々な分野での利用が可能です。



ポ イ ン ト

- 高精度で迅速なガス検知が可能
- 環境保護に貢献することができる
- エネルギー効率の向上につながる

応 用

- 工場や施設の排気ガス検知
- 医療現場での麻酔ガス検知
- 自動車の排気ガス検知

知財関連情報

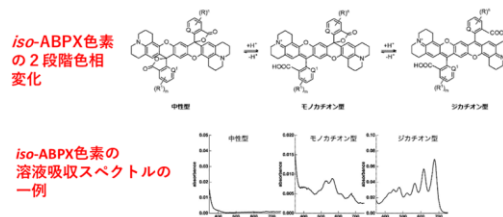
特許第6345543号

キーワード #化学プロセス技術、#分析、#材料、#デバイス、#光学装置

概 要

iso-ABPX色素は、一分子で異なる2段階の色相変化をもたらすことができます。

iso-ABPX色素は、ロイコ色素の骨格を二つ繋げた新規パイ電子系化合物のアミノベンゾピラノキサンテン系色素です。無色のiso-ABPXは、酸やフェノール性化合物によって桃色から青緑色までの色を示し、色相の変化が明確です。濃度や周囲の温度によって無色・桃色・青緑色の三つの色調をコントロールできます。



ポ イ ン ト

- 単一の色素で三つの色調
- 置換基によって酸・温度との応答性が変化
- 従来のロイコ色素と同様の発色機構

応 用

- フェノール性化合物の検出試薬
- 変色・消去可能な筆記具
- サーモクロミズムを利用した温度センサーや玩具
- リライタブル印刷

知財関連情報

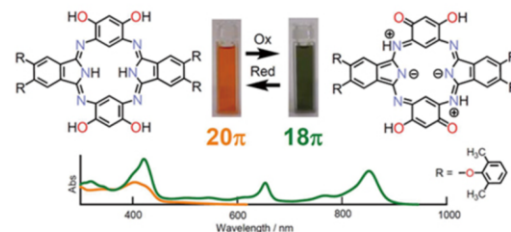
特許第6815651号

キーワード #有機半導体素子 #太陽電池素子 #酸化還元指示薬 #近赤外光吸収材 #光線力学治療 #分子イメージング

概 要

近赤外光を効率的に吸収する材料は、太陽電池やセンサーなどの分野で重要な役割を果たします。しかし、従来の材料は高価であったり、製造が困難であったりする問題がありました。

ヘミポルフィラジンの分子構造はフタロシアニンと似ていますが、その電子構造はフタロシアニンよりも2つ電子の数が多いため、これまで応用分野ではあまり興味を持たれていませんでした。本発明では、フタロシアニンと同様の電子構造を持つ芳香族性ヘミポルフィラジンの合成法を開発しました。合成した色素は850-900nmの近赤外領域に吸収帯を持ち、酸化剤-還元剤によってその吸収特性をスイッチできるユニークな性質を示します。



新規芳香族性ヘミポルフィラジン色素の溶液中の吸収スペクトル

ポ イ ン ト

- 酸化されにくい近赤外色素を提供可能
- 中心金属、周辺置換基をかけることで吸収波長のコントロールが可能

応 用

- 有機系太陽電池
- 近赤外バイオイメージング
- 酸化還元指示薬

知財関連情報

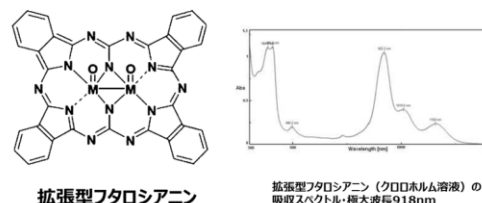
特許第5800222号

キーワード #化学プロセス技術、#高分子材料、#ナノ材料、#触媒、#電子デバイス、#光学装置

概 要

二核金属イオンを含む拡張型フタロシアニン化合物に関します。この拡張型フタロシアニン化合物は、通常のフタロシアニンが青色色素として機能するのに対して、近赤外色素としての性質を有します。

二核金属イオンを含む拡張型フタロシアニン化合物は、通常のフタロシアニンと比較して4電子多い22π電子構造を有し、近赤外領域に吸収を持ちます。副生成物（無金属フタロシアニン）が生じ、収率が低いという合成上の問題がありました。本技術によりその問題点も解決されています。



拡張型フタロシアニン

拡張型フタロシアニン（クロロホルム溶液）の吸収スペクトル・最大波長918nm

ポ イ ン ト

- 高収率での製造が可能
- 近赤外領域の光を吸収する
- 蒸着での製膜が可能

応 用

- 近赤外光吸収材
- 太陽電池素子
- 有機半導体素子

知財関連情報

特許第6436545号

新規なキノイド型n共役系近赤外色素の開発

材 料

0 8 7 3 3

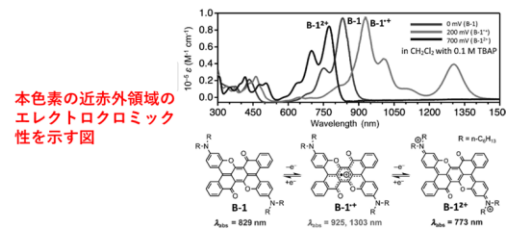
環境資源科学研究センター 村中 厚哉 等

キーワード #有機半導体 #太陽電池 #近赤外吸収材料 #エレクトロクロミック素子 #光学材料 #光学デバイス

概 要

理研研究成果として、新規なキノイド型n共役系化合物を創出しました。
この新規化合物は、近赤外有機色素として機能します。

新しい骨格を有する近赤外有機色素を開発しました。この近赤外有機色素は、近赤外領域においてエレクトロクロミック性、光起電力特性を示します。また、可視光域の吸収が低い点も特徴です。生体イメージングや光線力学療法、太陽電池などの分野での応用が期待されます。



本色素の近赤外領域のエレクトロクロミック性を示す図

ポ イ ン ト

- 新しい骨格の近赤外有機色素。
- 可視光域の吸収が低い。
- 近赤外領域でエレクトロクロミック性・光起電力特性を示す。

応 用

- 生体イメージング
- 光線力学療法
- 太陽電池

知財関連情報

特許第7086391号

微生物の仕組みに学ぶ環境浄化技術！モリブデンオキシスルフィド電極

脱窒反応に使用される革新的な電極システム

材 料

0 8 6 5 4

環境資源科学研究センター 中村 龍平 等

キーワード #環境 #脱窒反応 #電極 #モリブデンオキシスルフィド #触媒層 #電気化学

概 要

農地に散布された窒素肥料、家畜の糞尿、生活排水などに含まれる窒素酸化物は、湖沼や沿岸域に蓄積し、富栄養化や赤潮発生の原因になります。

窒素酸化物は、自然界においては、微生物の代謝により浄化されます。
本技術は、人工触媒により、この微生物による浄化作用を再現しています。具体的には、モリブデンオキシスルフィドを含む触媒層を持つ電極システムによって、硝酸イオンおよび亜硝酸イオンを効率的に還元します。

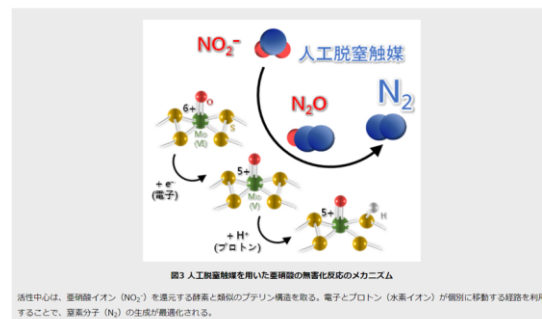


図3 人工触媒層を用いた窒素の無害化反応のメカニズム

活性中心は、亜硝酸イオン (NO2-) を還元する酵素と類似のブレン構造を取る。電子とプロトン (水素イオン) が個別に移動する経路を利用することで、窒素分子 (N2) の生成が最適化される。

ポ イ ン ト

- 硝酸態窒素 (NO3-, NO2- など) を効率的に分解できる。
- 中性領域で硝酸イオンを還元できる。
- モリブデンオキシスルフィド触媒層は塗布によって様々な形状の電極表面に形成可能。

応 用

- 排水処理：硝酸態窒素（飼料、肥料）の分解
- 微生物が処理できない高濃度硝酸イオンを含む排水処理

知財関連情報

特願2017-031072

専門家の知識が生み出す、次世代シミュレーション技術

一対比較特許（意図、暗黙知、ノウハウ等の評価方法）

材 料

0 9 4 1 8

革新知能統合研究センター 吉掛 健太郎 国立大学法人名古屋大学 宇治原 徹

キーワード #シミュレーション技術 #データ同化 #機械学習 #物性値推定 #熱流体シミュレーション #マテリアル

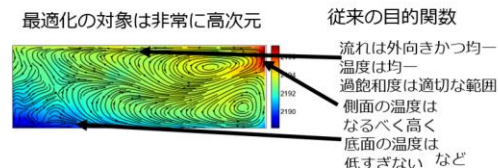
概 要

【背景】

- ・研究者等の表出する動作だけでなく心に秘める暗黙知も反映する必要がある。
- ・従来は研究者等の表出動作を模倣する評価手法のみで、オペレータの意図や暗黙知、ノウハウまでも反映して最適化するシステムは存在しなかった。

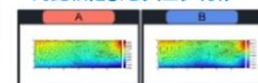
【ポイント】

- ・オペレータの意図、暗黙知、ノウハウ等の評価方法：A案・B案を対提示（一対比較）することでレーティング
- ・実験パラメータから潜在変数を予測するモデルを作成、一対比較によるスコアを元に潜在空間での最適化。暗黙知を反映した目的関数設計
- ・潜在パラメータを最適化することで実験パラメータも最適化されることが確認された。意図の再現度 99%以上
- ・結晶製造プロセスのノウハウ評価、カラー写真から農作物の味、品質、生育状況などの良否評価を行う等



オペレーターは、望ましい流れ・温度についての暗黙知を持っている

一対比較によるスコア付け



しかし、すべてを数式で表すことは困難

どちらが良いかを判断することは容易

知財関連情報

PCT/JP2023/005091

ポ イ ン ト

- より現実に近いシミュレーション結果を得ることが可能
- シミュレーションパラメータや物性値の推定精度が向上
- 高速シミュレータや異常検知など、さまざまな応用が可能

応 用

- マテリアル製造
- 熱流体シミュレーション
- 製造技術

多結晶材料の結晶方位の推定

材 料

0 9 0 7 7

革新知能統合センター 吉掛 健太郎 国立法大人名古屋大学 宇佐美 徳隆

キーワード #分析、#材料、#電子、#計測

概要

【従来技術と問題点】

- 多くの実用材料(金属、セラミクス、半導体等)は多結晶材料
- 実用太陽電池のウエハは多結晶シリコンで構成され、品質が多結晶ウエハの結晶方位分布に大きく依存する
- 従来法: 電子後方散乱回折法(SEM-EBSD法)(真空中解析)、X線ラウエ法(放射線管理区域必要)

【ポイント】

- 光学画像から結晶方位推定が可能な解析アルゴリズムを開発。大気中測定、平均値3.5度の推定精度を達成
- ①結晶粒検出を行い(混合ガウスモデルを用いたクラスタリング等)、②教師あり学習で結晶方位分布を推定
- 結晶方位→輝度変化パターン(写像は連続性を満たすことから逆問題(回帰写像学習問題)として輝度変化パターンから結晶方位を推定可能。輝度変化パターンは回転方向任意性を持つため学習モデルはLLMが最適
- 入力: 輝度ベクトル、出力: 結晶方位を示す回転クォータニオンQを定める4元数(クォータニオン)の係数
- 損失関数: 誤差回転4元数Δ(真値と推定を同じ姿勢にする回転クォータニオン)

ポイント

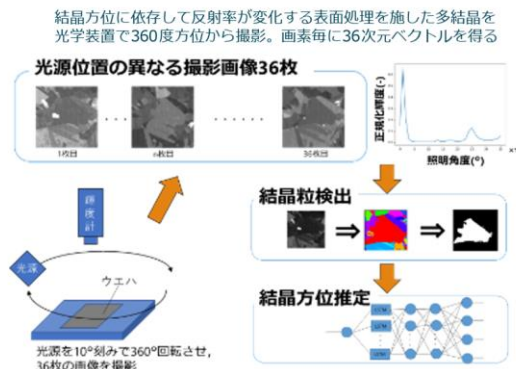
- 結晶方位をより簡単に解析できるため、研究や製造において時間とコストを削減できます。
- 複数の照明条件で試料を撮影することで、より正確な結晶方位を推定できます。
- 多くの分野で使用されることが期待されます

応 用

- 太陽電池用の多結晶シリコン基板の結晶方位解析
- 金属材料の結晶方位解析
- 半導体材料の結晶方位解析

知財関連情報

特許第7353601号



部分構造の濃縮度に着目

機械学習による有機分子設計技術

材 料

0 9 3 0 2

革新知能統合研究センター 津田 宏治

キーワード #バイオテクノロジー、#化学プロセス技術、#高分子材料、#ナノ材料、#量子デバイス、#情報処理技術

概要

部分構造の濃縮度に着目して有望な部分構造を選択し、有望な性質を有する物の設計データを生成することができます。この技術は、従来の手法よりも高速かつ正確な設計が可能であり、有機エレクトロニクス分野における機能性分子の開発を加速することが期待されています。

ポイント

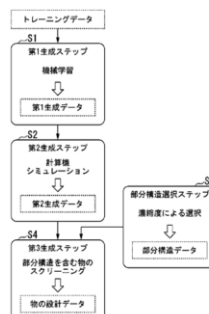
- 高速かつ正確な有機分子設計が可能
- 部分構造の濃縮度に着目した選択により、有望な性質を有する物の設計データを生成
- 有機エレクトロニクス分野における機能性分子の開発を加速

応 用

- 太陽電池の集光材料
- 電気貯蔵材料
- 有機EL用の発光・ホスト材料

知財関連情報

特開2022-179079



光の力で未来を照らす

有機非線形光学結晶(BNA)の革新的な製造技術

材 料

0 7 7 8 8

光量子工学研究センター 齋藤 美紀子

キーワード #有機材料 #非線形光学 #単結晶成長 #テラヘルツ光源 #光学材料 #結晶育成

概要

本技術は、有機非線形光学結晶であるBNAの製造技術において、従来の結晶にはない高い品質と耐久性を実現しています。

BNA結晶は、高い非線形感受率と優れた光学特性を持ち、テラヘルツ波発生素子や光デバイスとして幅広い応用が期待されています。この技術は、結晶成長から加工までの工程において革新的な手法を採用し、高品質かつ大型のBNA結晶の製造を可能にしています。

ポイント

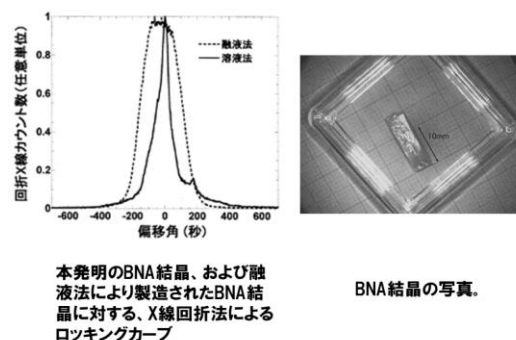
- 高品質かつ大型の結晶であり、高出力テラヘルツ波発生に適しています。
- 光強度に対する耐久性が優れており、損傷ピークパワー密度が高い特性を持っています。
- 低融点有機化合物にも適用可能であり、高品質な結晶の成長が見込まれます。

応 用

- 高出力テラヘルツ光源の開発に貢献します。
- 高効率波長変換素子の製造に適しています。
- 超高速光変調デバイスの実現を支援します。

知財関連情報

特許第5660565号



セリアナノワイヤを活用した革新的電極材料

キーワード #ナノテクノロジー #燃料電池 #電極材料 #セリアナノワイヤ #量子ビーム照射 #分散性

概 要

本技術は、セリアナノワイヤを用いた白金担持電極材料の製造プロセスにおいて、量子ビーム照射を活用することで、電極性能を向上させる革新的手法です。

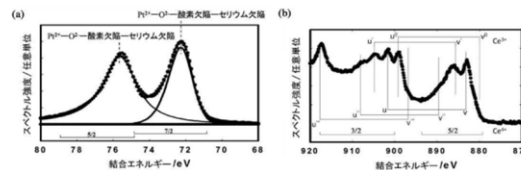
量子ビームの照射により、白金の担持量を低減し、同時に白金担持セリアナノワイヤの表面に特有の構造を形成することで、高い電極性能を実現しています。この技術は、燃料電池や再生可能エネルギー装置などの電極材料として革新的な解決策を提供します。

ポ イ ン ト

- 白金担持量の低減による製造コストの削減
- 希少な白金資源の効率的な利用と高い電極性能の両立
- CO2排出ガスの削減に貢献する持続可能なエネルギーソリューション

応 用

- 燃料電池の電極材料としての利用
- 再生可能エネルギー装置の電極部品としての応用
- 高性能バッテリーの電極材料としての採用



白金担持量が0.5wt%の電極を構成するセリアナノワイヤと白金との界面のXPS測定結果

- (a) Pt 4fの結合エネルギーとスペクトル強度の関係
(b) Ce 3dの結合エネルギーとスペクトル強度の関係

知財関連情報

特許第6638879号



お問い合わせ

license-contact@innovation-riken.jp

理化学研究所特許シーズ集第2版 2024年11月
発行 株式会社理研イノベーション
本書の全部または一部の無断転載、改変を禁じます。

