

中テーマ名： 2-2 超微細電子写真画像形成技術の開発

中テーマリーダー(所属、役職、氏名)

同志社大学、教授、白川善幸

研究従事者(所属、役職、氏名)

コア研究室 三尾 浩 京都大学 松坂修二、丸山博之、同志社大学 白川善幸、高島竜介、下坂厚子、藤村隆二、樋口亮平、安 剛史

研究の概要、新規性及び目標

①研究の概要

粒子群である粉体の挙動を制御する方法の一つに、電場や磁場などの外場を利用する方法がある。この方法を用いると、ハンドリングが難しい微粉体を比較的自由に操作できる。特にナノレベルの粉体を取り扱うには、これらの場を精細に設計しなければならない。しかし、粒子の挙動は、場と場を感受する粒子との相互作用で決定されるため、場とともに粒子の特性も設計する必要がある。また、この相互作用は時々刻々変化するため、多粒子を扱う場合には、計算機による数値計算を行うことが不可欠である。

外場を利用した粉体挙動制御に関して先駆的応用例である電子写真システムを中心に、計算機上で微粒子の輸送予測をするための研究開発を行い、また、微粒子の帯電量および帯電量分布をその場測定できる装置の試作も併せて、微粒子制御技術を実用化する。具体的には、粒子物性を決定付けるトナー粒子帯電メカニズムを量子計算ならびに帯電モデルによって検討する。実際は、5~10 μ mのトナーが用いられており、1mm³の体積中には約20万個のトナーが存在する。そこで、計算の大規模化のためのアルゴリズムを開発し、並列化処理技術を確立する。また、帯電量と粒度の計測システムを構築する。

②研究の独自性・新規性

電子写真システムの設計において、装置内のトナーの搬送、帯電、飛翔、現像、クリーニングなど各部分における粒子挙動を逐次明確にすることが可能であり、その結果をトナー材料の設計ならびに電子写真システムのトータルプロセス設計にフィードバックできることが独自性である。そのためには微視的なスケールから大規模な領域までシミュレーションをハイブリッド化する必要があり、その融合のためのアルゴリズム開発に新規性がある。また、微粒子の帯電量測定装置の基礎となる理論・実験は世界でも最先端のものであり、装置をトナーの帯電量測定に利用することは、独自性・新規性に優れた研究課題である。

③研究の目標(フェーズ毎に数値目標等をあげ、具体的に)

フェーズⅠ:

- ・量子化学計算による金属-高分子ならびに高分子-高分子界面の電荷移動計算を行う。
- ・帯電量分布および粒度分布の測定装置の試作とサンプリング装置を組み合わせたシステム化
- ・帯電微粒子のサンプリング装置を製作し、問題点の抽出および改良
- ・DEM-FEM連成による1成分現像器内トナー流動挙動シミュレーション法の開発
- ・DEMによる2成分現像プロセス内の現像剤挙動シミュレーション法の開発
- ・DEM-FEM連成によるクリーニングプロセスシミュレーションに関するアルゴリズムの追求
- ・高速DEMアルゴリズムを確立する。
- ・電子写真プロセスにおけるシミュレーション技術の開発
- ・トナーを形成する材料組成と現像システムにおける帯電特性メカニズムの解明
- ・高機能高速粉体シミュレーターの研究開発

フェーズⅡ:

- ・量子化学計算の結果を基に高分子粒子の接触帯電量算出法の構築を行う。
- ・帯電量分布および粒度分布の測定精度の向上
- ・帯電量計測装置をシステムとして完成させ、これを利用したトナー帯電分析技術の開発
- ・トナー粒子帯電モデルの構築
- ・1成分電子写真システム内の各プロセスに対するシミュレーション法の連携
- ・2成分電子写真システム内の各プロセスに対するシミュレーション法の連携
- ・高速 DEM、並列化アルゴリズムを用い、粉体現象の解析を行う。
- ・電子写真現像部のシミュレーション法を構築し、設計指針プログラムを開発する。

研究の進め方及び進捗状況(目標と対比して)

フェーズ I :

- ・量子化学計算による金属－高分子ならびに高分子－高分子界面の電荷移動計算を行った。
- ・帯電量分布および粒度分布の測定装置の試作と、サンプリング装置と組み合わせたシステム化を行なった。
- ・帯電微粒子のサンプリング装置を製作し、問題点の抽出および改良をした。
- ・DEM－FEM連成による1成分現像器内トナー流動挙動シミュレーション法を開発した。
- ・DEMによる2成分現像プロセス内の現像剤挙動シミュレーション法を開発した。
- ・DEM-FEM連成によるクリーニングプロセスシミュレーションに関する基本アルゴリズムを追求した。
- ・高速DEMアルゴリズムを確立した。
- ・電子写真プロセスにおけるシミュレーション技術を開発した。
- ・トナーを形成する材料組成と現像システムにおける帯電特性メカニズムを解明した。
- ・高機能高速粉体シミュレーターの研究開発をした。

フェーズ II :

- ・量子化学計算の結果を基に高分子粒子の接触帯電量算出法の検討を行った。
- ・帯電量分布および粒度分布の測定精度の向上を行なった。
- ・帯電量計測装置をシステムとして完成させ、これを利用したトナー帯電分析技術の開発をした。
- ・トナー粒子帯電モデルの検討を行なった。
- ・1成分電子写真システム内の各プロセスに対するシミュレーション法の連携を行なった。
- ・2成分電子写真システム内の各プロセスに対するシミュレーション法の連携を行なった。
- ・高速 DEM、並列化アルゴリズムを用い、粉体現象の解析を行った。
- ・電子写真現像部のシミュレーション法を構築し、設計指針プログラムを開発した。

主な成果

具体的な成果内容:

- ・非経験的分子軌道計算により接触帯電が検討できるのか、仕事関数の差に注目し計算を行ったところ定性的な関係が見られ、本方法の妥当性が確認できた。金属と高分子の間の電荷移動には、高分子の電子状態密度が重要であることがわかり、系統的に高分子/金属、/高分子、/外添剤の電荷移動量の計算を行った。接触帯電ならびに摩擦帯電を測定するための装置を組み立て、両者の分離方法について検討し、計算結果ならびに実験結果を基に推算モデルを検討した。
- ・SPMによりトナーの表面の微細構造に対する帯電状態を表面電位として捉え、また粒子表面の抵抗測定に挑戦し、キャリア粒子など比較的、比抵抗が低い粒子について、測定可能であることを確認した。一成分系現像におけるブレードコート部のトナー状態を動的に観察し、シミュレーション結果と比較した。また、各種のブレードコート条件におけるトナーコートとトナー帯電特性の実験結果をシミュレーション結果と比較し、シミュレーションの物理モデルの検証を行った。分散要素法に基づく粒子挙動計算プログラムの高速化を行った。2成分現像剤におけるトナーとキャリアの混合状態の定量化と帯電状態の相関関係を確立した。
- ・気相で重力と静電気力に基づいて移動する粒子の軌跡は、粒子の単位質量当たりの帯電量(比電荷)によって異なるので、これを利用してトナーを分離・回収するとともに、帯電量分布を求める装置を試作した。本装置の性能試験において、強く帯電した微粒子がサンプリング部の内壁に多量に沈着するのを防ぐため、位相反転交流電界制御方式による粒子サンプリング装置を試作して実験を行った結果、本方式が有効であることが分かった。1成分現像トナーの帯電量の測定では、現像ローラ上の粒子に空気を噴射して飛散させることにより測定部にトナーを供給するが、2成分現像方式では、超音波振動を利用して小さな網目からトナーのみを通過させる方法が有効であることが分かった。さらにいくつかの工夫を加え、トナーの帯電量分布と粒子系分布の同時測定を効率的に行い、測定精度を向上させることができた。トナーの分散供給部、粒子サンプリング部、帯電量分布測定部の3つのユニットから成るシステムを構築し、実用化のための総合性能確認試験を行った。また、帯電量の違いによって粒子を分離回収し、組成分析を行うことが可能になった。
- ・紫外線レーザー光源を用いた簡単な実験装置(光学系)を製作し、光学要素の透過性などの評価を行った。この実験装置を用いて、液相で標準サンプルの測定を行い、紫外線レーザーの有効性を評価した。これらの結果に基づき、ハード、ソフトを含めた試作機を製作した。さらに液相、気相中での実サンプル測定を実施し、その結果に基づいて試作機を修正・最適化した。
- ・高分子核粒子の表面に種類の異なる酸化物ナノ粒子を機械的に複合化し、その複合粒子の付着性、なら

びに流動性の違いを明らかにした。メルトブローン法により、円柱状の微粒子を作製する手法を確立した。この円柱状の微粒子と一般の粉碎による不定形粒子との物性ならびに粒子挙動の差異を検討し、粉体塗料について、微細粒子を円柱状にすることにより、帯電粒子の付着性が増大し、その塗着効率が向上することが確認された。電界中での付着力測定により、上部電極に正の電圧を印加(負電界と定義)するとき、負帯電粒子に働くクーロン力は分離力として作用するが、実験結果では付着強度が逆に大きくなった。また、負電界では接地しているテストピースから、さらに負の電荷を受けることになり、粒子一壁間の電気影像力によって付着強度が増加したなどの結果が得られた。

- DEM-FEM連成による1成分現像器内トナー流動挙動シミュレーション法ならびにブレードクリーニング挙動シミュレーション法の開発を行なった。また、CIP-FEM連成による定着プロセスシミュレーションに関する基本アルゴリズムの追求を行なった。DEMによる2成分現像プロセス内の現像剤挙動シミュレーション法に取り組み、トナー表面分割サイトに帯電モデルを組み込んだ1成分現像器内トナー流動挙動シミュレーション法を開発した。さらに3D-MSP法を用いたトナー定着挙動シミュレーション法を確立した。

- 単一径の条件下における粒子検索セルの最適化法、粒子径比の大きい条件下における粒子検索セルの最適化法ならびに任意の粒子条件における検索セルの最適化法を提案した。DEMのアルゴリズムの改善、プログラムチューニングにより、DEMの高速化を達成し、DEMの並列化を行い、大規模計算を可能とした。高速DEMを利用した2成分電子写真システム現像部の粒子挙動解析プログラムを構築した。また、マルチコアCPUにおける高度並列アルゴリズムを構築した。

- 電子写真シミュレータ開発コンソーシアムを立ち上げた。また、2成分電子写真システム現像部の設計支援シミュレーションソフトを試作した。

- 電子写真の現像ユニットでは、ローラにより現像剤(キャリア=磁性粒子)を搬送するが、従来、平面上での計算が可能であったものを、実際の現像ユニット形状である円筒面上での計算を可能とするものとした。また、ハイブリッド並列計算手法を用いることで、従来比6倍以上の計算速度の向上を達成し、これによって従来1週間ほど掛かっていた計算をわずか1日で実施することが可能となり、現像ユニットシミュレータの実用化に大きく前進した。

- 現像プロセス内でのトナー飛翔プログラムならびにトナー飛翔現象の高精度観察技術を開発した。トナー・キャリア間の接触帯電モデルを構築し、現像プロセスにおけるパラメータ設定の最適化プログラムユーザーインターフェースの開発を行なった。

- DEMを用いた電子写真プロセスにおける粉体挙動シミュレータを整備し、粒子計算アルゴリズムの検討を行い、高速化を図った。本シミュレータを稼働させる計算環境構築により研究環境を整備した。計算機ハードウェアを拡張し、プログラムのチューニング、既存高速化手法の導入により高速化を図った(動作環境の最適化、セル法、周期境界など)。また、改良並列計算アルゴリズムと電磁相互作用モデルの検討を行い、一部についてフィジビリティの検証を完了した。

特許件数：16件

論文数：29件

口頭発表件数：89件

研究成果に関する評価

1 国内外における水準との対比

高分子の帯電現象、トナーの帯電モデルの提案、電磁場中での微粒子DEMシミュレーション技術については国の内外を問わず先駆的である。帯電量測定、トナー粒子の性状と帯電量との関係に関する知見は、世界的に最先端の成果である。粒子径測定に関する成果は世界水準と考えて良い。

2 実用化に向けた波及効果

大規模DEMとFEMとをハイブリッド化することで、コンピュータシミュレーションにより詳細な電子写真システムの最適設計が可能となる。さらに、粉体塗装技術における電場中の粒子挙動、塗着効率の評価や、セラミックス成形過程における粉体充填挙動解析、圧縮特性評価あるいは微粒子のスラリー中での分散特性など、多くの分野への適用が期待できる。また、PCクラスターを利用した並列計算を利用することにより、粉体プロセスの全システムをシミュレーションすることも期待できる。コンピュータシミュレーションにより詳細な電子写真システムの最適設計が可能となり、新規な電子写真装置を創出することができる。

また、装置開発において新規な帯電微粒子のサンプリング・帯電量と粒度の計測システムの提案が可能となる。新規に開発されるトナー帯電量計測技術および計測結果を用いることにより、トナー帯電支配因子を定量評価し、帯電特性の安定したトナー・現像装置および電子写真プロセスを創成できる。また、ナノメートルで表現される大きさ領域の粒子について、粒子径分布(個数基準)測定および特定粒子径を持つ粒子の捕集を安定的に行える手法を確立する。さらに、捕集した粒子の成分分析を行える質量分析装置、赤外線分光装置、蛍光X線分析装置など各種分析装置と結びつけることにより、微粒子研究の新しいツールとなる装置、システムの基本となる技術を確立できる。

・ナノ粒子、微粒子粉体の乾式複合化装置については、ナノ粒子、微粒子粉体の流動性改善プロセスの構築と共に、流動性評価装置を提案できる。ナノ粒子のその場観測に適した新しい粒度分布計が製品化される可能性がある。創成される製品は、特別な計測技術を必要としない汎用的な測定装置であり、誰でもがルーチンベースで使用することができる道具を提供することができる。また、液相、気相両方で使える粒子径測定装置を試作できる。

残された課題と対応方針について

- ・摩擦帯電量に対して実験ならびにシミュレーションから定量的評価を行い、提案した帯電モデルの検証を行なう。
- ・平成21年以降は、トナー粒子のマイクロ観察をさらに推進し、帯電機構の解明を行う。さらに、現像機構におけるトナー挙動を微細に観察し、現像部における帯電物理モデルの構築とモデルを基にしたシミュレーションを行い、現像装置の開発支援へと進展させる。
- ・汎用型帯電量分布測定装置の技術移転を目指して、装置の開発を行う。また、試作した帯電量分布測定装置を用いて、粒子の帯電量分布に及ぼす原因の解明を系統的に進める。
- ・レーザの高出力化、検出部の高感度化、サンプリングインターバルの短縮などハードウェアの更なる高機能化、測定条件の自動選択機能など、ソフトウェアの高機能化を進める。
- ・微粒子の付着性、流動性は、様々な粉体機器での処理、ハンドリングにおいて重要な課題である。そこでこれまでに確立してきた①円柱状粒子の作製法や②機械的粒子複合法等を活用して、これまでに無かった特長を有した微粒子を創製し、応用していく研究開発をさらに進めていく。
- ・汎用型帯電量分布測定装置の技術移転を目指して、装置の開発を行う。また、試作した帯電量分布測定装置を用いて、粒子の帯電量分布に及ぼす原因の解明を系統的に進める。
- ・電子写真システム内の各プロセスの汎用設計支援シミュレータの開発およびトナー微粒子設計に対する各シミュレーション法の連携を行なう。
- ・電子写真設計支援シミュレータの試作を引き続き継続し、コンソーシアム参加企業でのテスト、エラーチェック、要望、意見交換を行いながら、シミュレータの開発に取り組む。大規模シミュレーションの実施、最適化プログラムの高精度化、ユーザーインターフェースの改良を行なう。また、改良並列計算アルゴリズムと電磁相互作用モデルを実装して、高機能高速粒子シミュレータを構築し、実用化する。

	J S T負担分 (百万円)							地域負担分 (百万円)							合 計
	15 年度	16 年度	17 年度	18 年度	19 年度	20 年度	小計	15 年度	16 年度	17 年度	18 年度	19 年度	20 年度	小計	
人件費															
設備費															
その他研究費 (消耗品費、 材料費等)															
旅費															
その他															
小 計															

代表的な設備名と仕様 [既存 (事業開始前) の設備含む]

J S T負担による設備：

- ①Blade型クラスター並列コンピュータシステム、②Myrinet高速ネットワークシステム、③粉体塗装装置、④粘度計、⑥XYステージ

地域負担による設備：