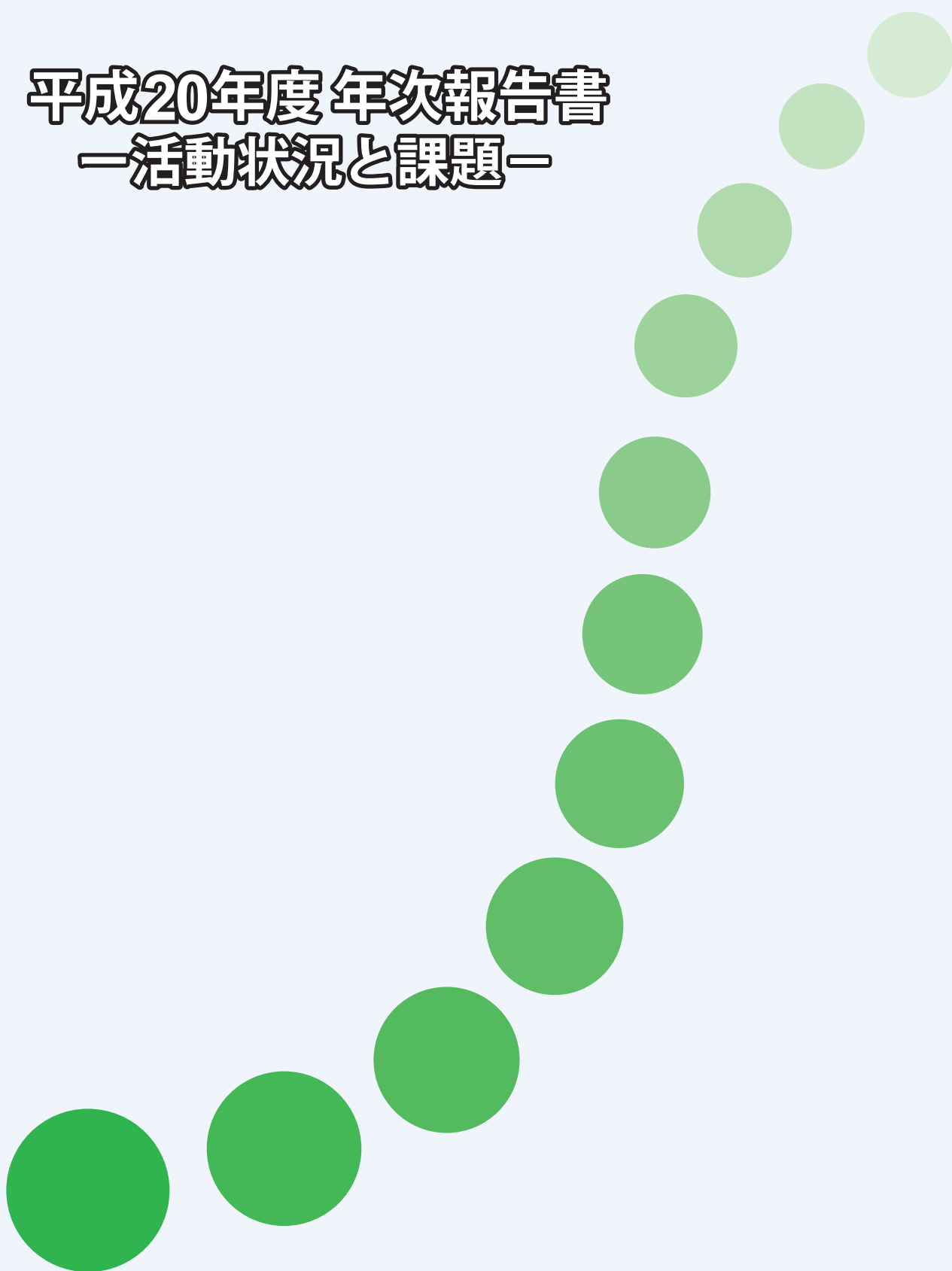


平成20年度年次報告書 —活動状況と課題—



大阪大学産業科学研究所

目 次

1. はじめに -----	1
2. 研究活動	
1) 組織 -----	2
2) 運営 -----	8
3) 研究費 -----	10
4) 国際研究プロジェクト -----	11
5) 学術講演会・研究集会・研究所間交流プログラム -----	11
6) 広報活動 -----	14
7) 受賞状況 -----	15
3. 教育への関与	
1) 大学院研究科・専攻担当 -----	17
2) 大学院担当授業一覧 -----	18
3) 大学院生の受入数 -----	20
4) 学部、共通教育担当授業一覧 -----	21
4. 国際交流	
1) 活動状況 -----	22
2) 国外との研究者往来 -----	23
5. 産業界との交流 -----	23
6. まとめ (課題と展望) -----	25
[附1] 各研究部門の組織と活動 -----	31
[附2] 各附属研究施設の組織と活動 -----	189
[附3] 共通施設、技術室、事務部の組織と活動 -----	339

本年次報告書は、平成20年度（平成20年（2008年）4月1日から平成21年（2009年）3月31日まで）を対象としたものである。

1. はじめに

新たなネットワーク型研究拠点の構築を目指して

所長 山口明人

大阪大学産業科学研究所(産研)は、「自然科学に関する特殊事項で産業に必要なものの基礎的学理とその応用の研究」に対する関西の産業界の強い期待と要望を背景に、昭和14年に誕生しました。来年(平成21年)には創立70周年を迎えます。その間、関係各位の御支援により時代の変遷と共に発展し、現在も日々歴史を刻んでいます。

産業科学研究所は、今春、14年ぶりとなる大改組を行い、新たな学際融合研究の展開とナノサイエンス研究の強化を目指して、6研究部門を第1研究部門(情報・量子科学系)、第2研究部門(材料・ビーム科学系)、第3研究部門(生体・分子科学系)の3大研究部門に再編統合し、ナノテクノロジーセンターの時限を撤廃して、それまでの3専任研究分野から6専任研究分野へと拡充しました。新たに産業科学連携教育推進センター、国際共同研究センターを設け、大学院教育への一層の貢献と、国際連携研究ラボ設置による国際共同研究の強力な推進を目指す体制を作りました。材料解析センターを電子顕微鏡室と統合し、情報や生体の解析も含む総合解析センターへと発展させ、また量子ビーム実験室をナノテクセンターから独立させて、量子ビーム科学研究施設とし、共同研究施設としての利便性の向上を図りました。

さらに、本年6月、産研を中心として、東北大多元研、北大電子研、東工大資源研、九大先導研との5大学附置研による「物質・デバイス領域ネットワーク型共同研究拠点」が、文部科学省により正式に認可されました。これは、我が国にこれまで存在したことの無い大規模な総理工型研究所の全国ネットワークであり、産研はその拠点本部として重責を担うこととなります。本拠点は、公募型共同研究の拠点として機能するほかに、平成22年度発足予定の「ナノとマクロをつなぐ物質・デバイス・システム創製戦略プロジェクト」の母体でもあります。

また、産学連携の一層の推進のための拠点として、ナノテク・インキュベーションセンターを着工し、5階建て5,000㎡の建物が22年3月完成を目指し建設が進んでいます。完成の暁には、産研工場棟が新しい建物に移転するほか、阪大ナノサイエンステクノコア、企業リサーチパーク、阪大リノベーションセンター等が設置され、産研発の、企業や他大学研究所との連携によるオープンイノベーションのための中核拠点として機能するはずです。

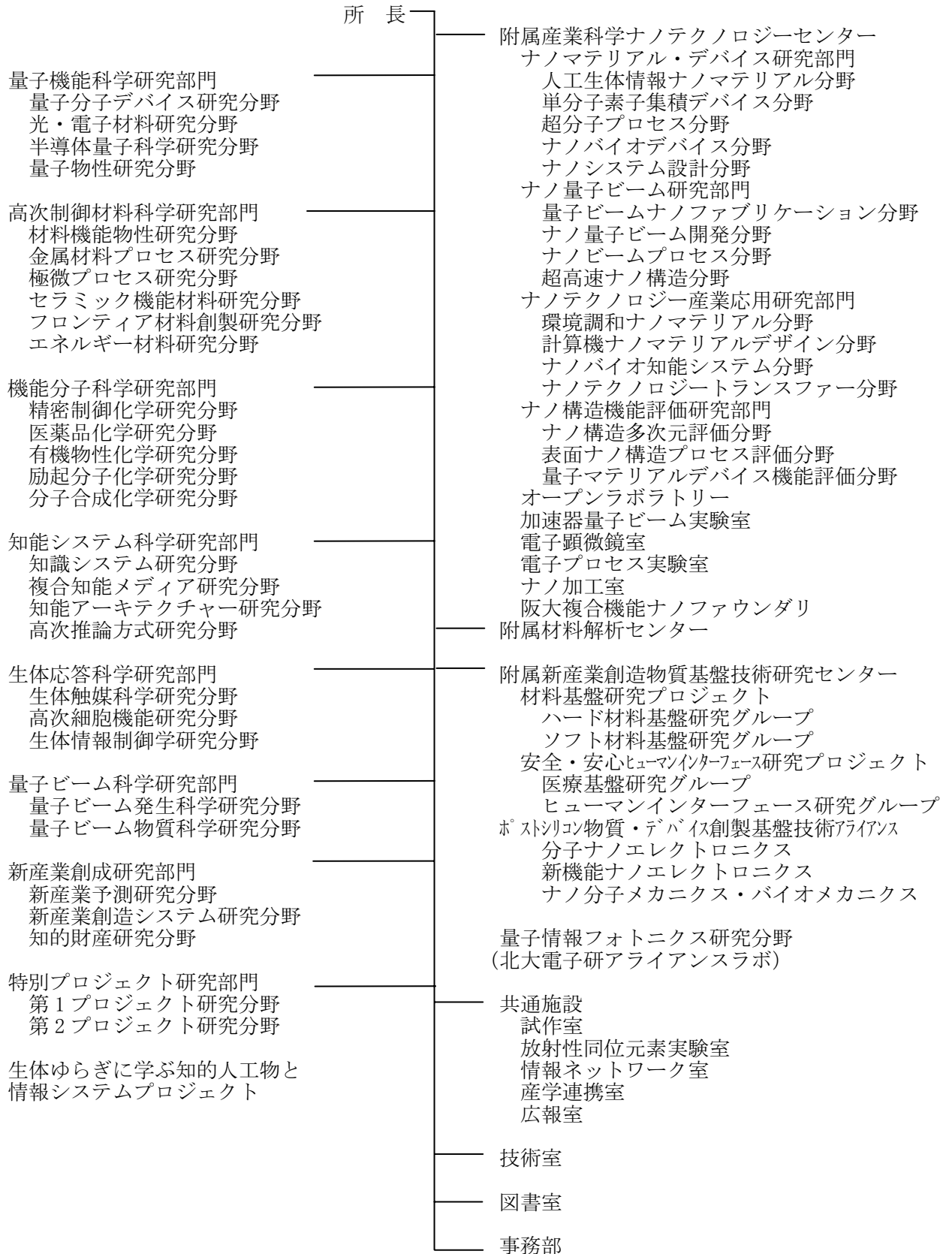
産業科学研究所は、常に時代の要請を先取りし、我が国産業科学の発展に貢献してきました。我が国の国立大学は法人化後のワンラウンドを終え、22年度から新しい第2期中期計画に入りますが、産研はその変化に先だつて自らを大改革し、新たな全国ネットワーク型研究拠点のリーダーとして、また阪大の産学連携の核としてますます発展していきたいと考えています。本報告書は、産研による平成19年度の研究・教育・社会貢献の成果の記録です。皆さまにご一読いただき、産研のより一層の発展のために、ご叱正、ご批判を頂ければ幸いです。今後とも皆様のご支援、ご鞭撻をよろしく願います。

2. 研究活動

1) 組織

産業科学研究所の機構および教員組織は、次のとおりである。

・機構図（平成21年3月31日現在）



・教員組織 (平成21年3月31日現在)

量子機能科学研究部門			
量子分子デバイス研究分野	准教授	博士 (工学)	須藤孝一
光・電子材料研究分野	教授	工学博士	朝日 一
	准教授	工学博士	長谷川繁彦
	助教	理学博士	江村修一
半導体量子科学研究分野	教授	工学博士	松本和彦
	准教授	理学博士	井上恒一
	准教授	博士 (工学)	前橋兼三
	助教	博士 (工学)	大野恭秀
量子物性研究分野	准教授	博士 (理学)	森川良忠
高次制御材料科学研究部門			
材料機能物性研究分野	准教授	博士 (工学)	石丸 学
	助教	博士 (工学)	平田秋彦
金属材料プロセス研究分野	教授	工学博士	中嶋英雄
	准教授	博士 (工学)	鈴木進補
	助教	博士 (工学)	多根正和
	助教	博士 (工学)	仲村龍介
極微プロセス研究分野	教授	理学博士	川合知二
	准教授	博士 (理学)	谷口正輝
	助教	博士 (理学)	田中裕行
	助教	Ph. D	柳田 剛
セラミック機能材料研究分野	教授	理学博士	小林 光
	准教授	理学博士	高橋昌男
	助教	理学博士	延谷宏治
	助教	博士 (理学)	松本健俊
フロンティア材料創製研究分野	教授	理学博士	安藤陽一
	准教授	博士 (理学)	瀬川耕司
	助教	博士 (工学)	楠瀬尚史
	助教	博士 (理学)	佐々木聡
エネルギー材料研究分野	教授	工学博士	谷村克己
	准教授	理学博士	田中慎一郎
	助教	修士 (理学)	稲見栄一
	助教	博士 (工学)	成瀬延康
機能分子科学研究部門			
精密制御化学研究分野	教授	理学博士	中谷和彦
	助教	博士 (工学)	周 大揚
	助教	博士 (エネルギー科学)	萩原正規
	助教	博士 (工学)	堂野主税
	助教	博士 (理学)	武井史恵
医薬品化学研究分野	教授	理学博士	加藤修雄
	准教授	博士 (工学)	大神田淳子
	助教	理学士	新田 孟

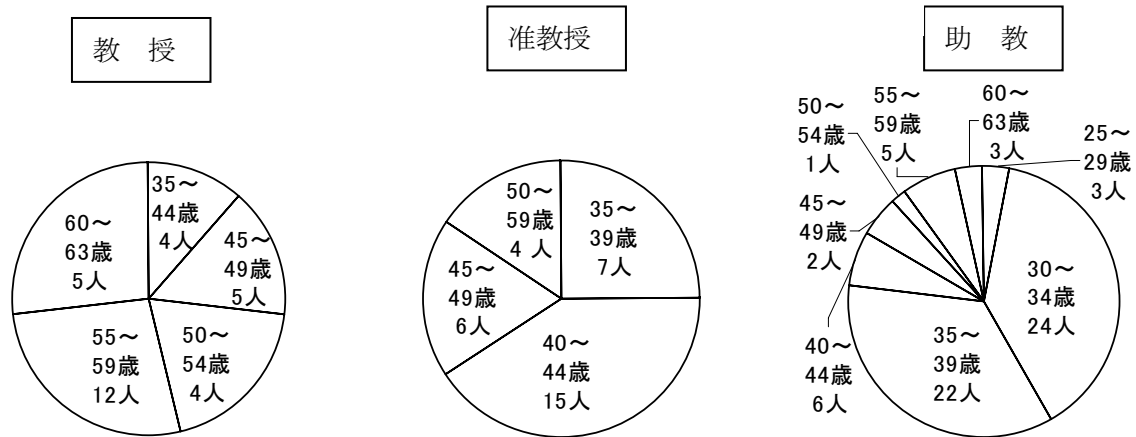
	助教	博士 (理学)	開發邦宏
	助教	理学博士	山口俊郎
有機物性化学研究分野	教授	理学博士	安蘇芳雄
	助教	博士 (工学)	家 裕隆
	助教	修士 (理学)	朝野芳織
励起分子化学研究分野	教授	工学博士	真嶋哲朗
	准教授	博士 (工学)	藤塚 守
	助教	工学修士	藤乗幸子
	助教	博士 (理学)	立川貴士
分子合成化学研究分野	教授	工学博士	笹井宏明
	准教授	博士 (薬学)	滝澤 忍
	助教	理学博士	市原潤子
	准教授	博士 (理学)	竹中和浩
知能システム科学研究部門			
知識システム研究分野	教授	工学博士	溝口理一郎
	准教授	博士 (工学)	來村徳信
	助教	博士 (工学)	笹嶋宗彦
	特任助教 (常勤)	博士 (工学)	林 雄介
	特任助教 (常勤)	博士 (保健学)	国府裕子
	特任助教 (常勤)	博士 (工学)	周 俊
複合知能メディア研究分野	教授	博士 (工学)	八木康史
	准教授	博士 (工学)	向川康博
	助教	博士 (工学)	佐川立昌
	助教	博士 (工学)	榎原 靖
知能アーキテクチャー研究分野	教授	工学博士	沼尾正行
	准教授	博士 (工学)	栗原 聡
	助教	博士 (工学)	森山甲一
高次推論方式研究分野	教授	工学博士	鷺尾 隆
	助教	博士 (工学)	大原剛三
	助教	博士 (工学)	猪口明博
生体応答科学研究部門			
生体触媒科学研究分野	教授	農学博士	谷澤克行
	准教授	博士 (農学)	黒田俊一
	助教	修士 (工学)	立松健司
高次細胞機能研究分野	教授	博士 (理学)	野地博行
	准教授	理学博士	和田 洋
	助教	博士 (理学)	田端和仁
	助教	博士 (理学)	飯野亮太
生体情報制御学研究分野	教授	薬学博士	山口明人
	准教授	博士 (理学)	西 毅
量子ビーム科学研究部門			
量子ビーム発生科学研究分野	教授	理学博士	磯山悟朗
	准教授	博士 (理学)	加藤龍好
	助教	工学士	池田稔治

量子ビーム物質科学研究分野	助教	博士（理学）	柏木 茂
	教授	工学博士	田川精一
	助教	工学博士	小林一雄
	助教	博士（工学）	佐伯昭紀
	特任助教（常勤）	博士（工学）	山本洋揮
新産業創成研究部門			
新産業予測研究分野			
新産業創造システム研究分野			
知的財産研究分野	特任教授（常勤）（兼）	博士（工学）	清水裕一
特別プロジェクト研究部門			
第1プロジェクト研究分野			
第2プロジェクト研究分野	准教授	博士（薬学）	西野邦彦
■ 附属産業科学ナノテクノロジーセンター			
	センター長（併）		菅沼克昭
ナノマテリアル・デバイス研究部門			
人工生体情報ナノマテリアル分野	教授	博士（理学）	田中秀和
	助教	博士（理学）	神吉輝夫
単分子素子集積デバイス分野	教授（兼）	理学博士	川合知二
	准教授	理学博士	松本卓也
	特任助教（常勤）	博士（工学）	李 奉局
超分子プロセス分野	教授（兼）	工学博士	真嶋哲朗
	准教授	博士（工学）	川井清彦
	助教	博士（農学）	辛川 誠
ナノバイオデバイス分野	教授（兼）	農学博士	谷澤克行
	准教授	博士（理学）	岡島俊英
	助教	博士（理学）	中島良介
ナノシステム設計分野			
ナノ量子ビーム研究部門			
量子ビームナノファブリケーション分野	教授	工学博士	吉田陽一
	准教授	博士（理学）	楊 金峰
	助教	修士（理学）	近藤孝文
ナノ量子ビーム開発分野	教授（兼）	理学博士	磯山悟朗
	准教授	工学博士	誉田義英
ナノビームプロセス分野	教授（兼）	工学博士	田川精一
	准教授	博士（工学）	古澤孝弘
	特任助教（常勤）	修士（工学）	岡本一将
超高速ナノ構造分野			
ナノテクノロジー産業応用研究部門			
環境調和ナノマテリアル分野	教授	工学博士	菅沼克昭
	助教	博士（工学）	井上雅博
	助教	博士（工学）	金 権鉄

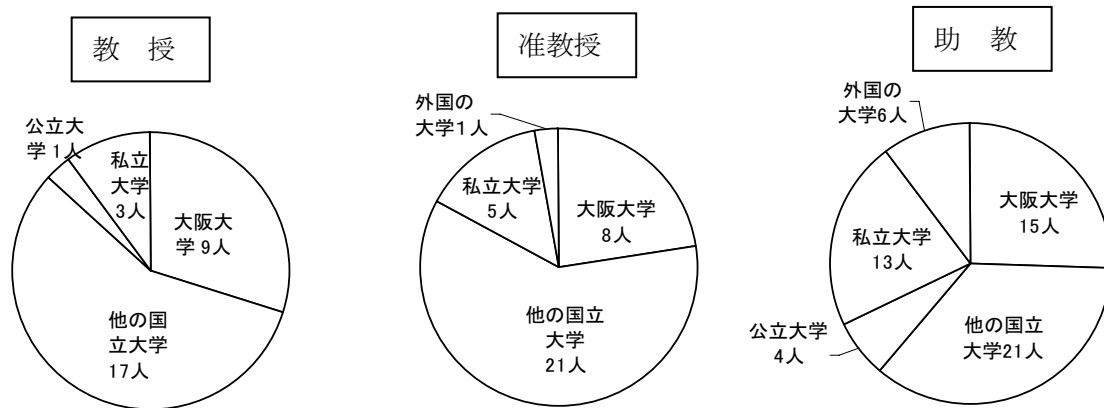
計算機ナノ材料デザイン分野	准教授	博士（工学）	白井光雲
ナノバイオ知能システム分野	教授（兼） 准教授	工学博士 博士（工学）	溝口理一郎 古崎晃司
ナノテクノロジートランスファー分野			
ナノ構造機能評価研究部門			
ナノ構造多次元評価分野	助教	博士（工学）	内藤宗幸
表面ナノ構造プロセス評価分野	教授（兼）	工学博士	谷村克己
	教授（兼）	工学博士	森 博太郎
	准教授	博士（理学）	金崎順一
量子材料デバイス機能評価分野	教授（兼）	工学博士	朝日 一
	助教	博士（工学）	周 逸凱
■ 附属材料解析センター	センター長（併） 准教授	博士（薬学）	笹井宏明 鈴木健之
■ 附属新産業創造物質基盤技術研究センター	センター長（併）		中嶋英雄
・材料基盤研究プロジェクト			
ハード材料基盤研究グループ	教授（兼）	工学博士	中嶋英雄
	教授（兼）	工学博士	菅沼克昭
	教授（兼）	博士（理学）	安藤陽一
	特任准教授（常勤）	博士（工学）	上野俊吉
ソフト材料基盤研究グループ	教授（兼）	工学博士	真嶋哲朗
	教授（兼）	工学博士	笹井宏明
	特任助教（常勤）	博士（工学）	坂本雅典
	特任助教（常勤）	Ph. D(化学)	CHENNAM RAMALINGAN
・安全・安心ヒューマンインターフェース研究プロジェクト			
医療基盤研究グループ	教授（兼）	工学博士	吉田陽一
	教授（兼）	薬学博士	山口明人
	特任助教（常勤）	博士（薬学）	西野美都子
ヒューマンインターフェース研究グループ	教授（兼）	工学博士	沼尾正行
	教授（兼）	工学博士	溝口理一郎
	教授（兼）	博士（理学）	田中秀和
	特任教授（常勤）	学士（工学）	高藤 淳
	特任助教（常勤）	博士（理学）	中沢 誠
	特任助教（常勤）	修士（学術）	福井健一
	特任助教（常勤）	Ph. D(材料工学)	CHA Nam Goo
■ 電子情報フォトリクス研究分野 (北大電子研アライアンスラボ)	招へい教授 招へい教員 招へい教員	博士（理学） 博士（工学） 博士（理学）	竹内繁樹 岡本 亮 藤原正澄
■ 産学連携室	特任教授（常勤）	博士（工学）	清水裕一

■ 生体ゆらぎに学ぶ知的人工物 特任准教授（常勤） 博士（理学） 浅川直紀
 情報システムプロジェクト 特任助教（常勤） 博士（理学） 堀田育志

・教員の年齢構成（平成21年3月31日現在。特任教員（常勤）含む。ただし、併任、兼任者は除く。）



・教員の出身大学（平成21年3月31日現在。特任教員（常勤）含む。ただし、併任、兼任者は除く。）



職員全体では、平成21年3月31日現在で教員121名、事務職員15名、技術職員13名、及び非常勤職員111名を含み、合計260名である。全職員のうち女子は82名である。

・平成20年3月31日から平成21年3月30日までの人事異動（常勤）は次のとおりである。

異動日	異動事項	氏名等
H20. 3. 31	定年退職 教授（材料機能物性）	弘津 禎彦
	定年退職 教授（量子分子デバイス）	岩崎 裕
	定年退職 助教（分子材料解析）	高井 嘉雄
	定年退職 技術室長	山田 等
	定年退職 技術室 工作班 工作班長	角一 道明
H20. 4. 1	任命 産業科学研究所長	山口 明人
	採用 特任事務職員総務課（企画室）	西田 彩

	採用	特例嘱託技術補佐員（技術室）	角一 道明
	昇任	総務課長	津村 和孝(国際部国際交流課課長補佐から)
	昇任	技術室工作班長	松川 博昭(技術室工作班ガラス工作係長から)
	昇任	技術室計測班長（技術室計測班分析・データ処理係長 兼務）	田中 高紀(技術室計測班分析・データ処理係長から)
	配置換	助教（医薬品化学）	開發 邦宏(分子材料解析から)
	配置換	助教（医薬品化学）	山口 俊郎(分子材料解析から)
	配置換	技術室工作班ガラス工作係長	小川 紀之(技術室工作班技術専門職員から)
	配置換	研究連携課研究協力係長	柏倉 重雄(経理課専門職員から)
	配置換	研究連携課研究協力係	花岡 宏亮(総務課庶務係から)
	採用	特任助教（常勤）（金属材料プロセス）	朴 宰成(金属材料プロセス)
	採用	特任助教（常勤）（極微プロセス）	李 奉局(極微プロセス)
	採用	特任助教（常勤）（ハード材料基盤研究グループ）	村井 啓一(ハード材料基盤研究グループ)
	採用	特任教授（分子合成化学）	北 泰行
	配置換	教授	吉田 博(基礎工学研究科 教授へ)
	配置換	研究助成係主任	中原 洋一(総務部障害者雇用推進支援室主任へ)
H20. 5. 1	昇任	准教授（極微プロセス）	谷口 正輝(単分子素子集積デバイス 助教から)
	採用	助教（人工生体情報ナノマテリアル）	神吉 輝夫(ゆらぎプロジェクト 特任助教(常勤)から)
H20. 6. 16	採用	助教（エネルギー材料）	成瀬 延康(特任研究員（エネルギー材料）から)
	採用	特任助教（常勤）（環境調和ナノマテリアル）	酒 金婷(特任助教（常勤）（環境調和ナノマテリアル）から)
	昇任	准教授（分子合成化学）	鬼塚 清孝(理学研究科 教授へ)
H20. 7. 16	採用	准教授（生体情報制御学）	西 毅
H20. 8. 1	昇任	准教授(ナノバイオ知能システム)	古崎 晃司(ナノバイオ知能システム 助教から)
H20. 8. 31	退職	特任教授（常勤）（ゆらぎプロジェクト）	河原 敏男（中部大学 教授へ）
H20. 9. 1	採用	特任助教（常勤）（医療基盤研究グループ）	西野 美都子
	採用	特任助教（ヒューマンインターフェース研究グループ）	CHA Nam Goo
	研究休職	助教（生体触媒科学）	立松 健司
H20. 9. 15	退職	特任研究員（分子合成化学）	NADF, Rashid Nabisaheb
H20. 11. 14	退職	助教（ナノ量子ビーム開発）	木村 徳雄
H20. 11. 16	昇任	准教授(半導体量子科学)	前橋 兼三(半導体量子科学 助教から)
H20. 12. 1	採用	助教（フロンティア材料創製）	佐々木 聡
H20. 12. 16	採用	助教（分子合成化学）	竹中 和浩(ソフト材料基盤研究グループ 特任助教(常勤)から)
H20. 12. 31	退職	助教（計算機ナノマテリアルデザイン）	佐藤 和則
H21. 1. 3	配置換	契約係長	金井 克典（総務部障害者雇用支援室へ）
H21. 1. 15	退職	特任事務職員（研究連携課）	中尾 名見子
H21. 1. 16	昇任	准教授（分子合成化学）	滝澤 忍（超分子プロセス 助教から）
	昇任	准教授（第2プロジェクト）	西野 邦彦（生体情報制御学 助教から）
	採用	助教（量子ビームナノファブリケーション）	近藤 孝文（医薬研究基盤グループ 特任助教（常勤）から）

2) 運営

産業科学研究所全般の管理運営は所長が行っている。所長は、当研究所の専任教授の中から選挙によって選考される。選挙は第一次選挙と第二次選挙からなり、当研究所の専任教員、事務職員及び技術職員による第一次選挙において3名の候補者が選ばれ、その中から、専任教授、事務部長及び技術室長による第二次選挙において1名の所長候補者が選ばれる。最終的には、教授会によって所長候補者が決定される。所長の任期は2年で、再任は可能であるが、引き続き4年を超えることはできない。平成20年（2008）4月1日より山口明人教授が就任している。

産業科学研究所の教員人事、予算等の重要事項は、所長及び専任教授で組織される教授会において審議される。教授会の議長には所長がなり、通常毎月1回予め決められた日時に開催される。教授欠員分野または教授欠席の分野では、予め承認されている教員が教授会に代理出席することができる。

ただし、審議に加わることはできない。

各附属施設には、円滑な運営を図るために、センター長及び運営委員会が置かれている。当研究所の規程上の研究単位は部門であるが、意見の集約と伝達等の円滑化をはかるために、便宜上部門を2つずつまとめ、3研究部としている。

第1研究部	量子機能科学研究部門 知能システム科学研究部門
第2研究部	高次制御材料科学研究部門 量子ビーム科学研究部門
第3研究部	機能分子科学研究部門 生体応答科学研究部門
附属産業科学ナノテクノロジーセンター	
附属材料解析センター	
附属新産業創造物質基盤技術研究センター	

その他、所内には、規程または申し合わせに従って種々の委員会が設置されて活動している。その内の主なものは、以下のとおりである。()内は、各委員会の構成を示す。

役員会 (所長、副所長、附属産業科学ナノテクノロジーセンター長、事務部長)

産学官連携問題委員会 (所長、副所長、附属産業科学ナノテクノロジーセンター長、事務部長)

運営協議会 (所長、副所長、附属産業科学ナノテクノロジーセンター長、学外の学識経験者など)

将来計画委員会 (所長、研究推進・企画評価担当の役員会構成員、附属産業科学ナノテクノロジーセンター長、各研究部門から教授1名、事務部長)

研究企画委員会 (所長、研究推進・企画評価担当の役員会構成員、教授若干名など)

評価委員会 (所長、研究推進・企画担当の役員会構成員、学内評価委員会委員、広報委員会委員長など)

財務委員会 (所長、財務担当の役員会構成員、附属研究施設長、教授若干名など)

施設委員会 (所長、財務担当の役員会構成員、附属研究施設長、教授若干名など)

広報委員会 (教育連携・広報担当の役員会構成員、教授若干名、総務課長など)

国際交流推進委員会 (学内国際交流委員会委員、各研究部から教員2名)

教育構想委員会 (教育連携・広報担当の役員会構成員、各研究科への兼任教授など)

情報ネットワーク室運営委員会 (教授若干名、情報ネットワーク室長など)

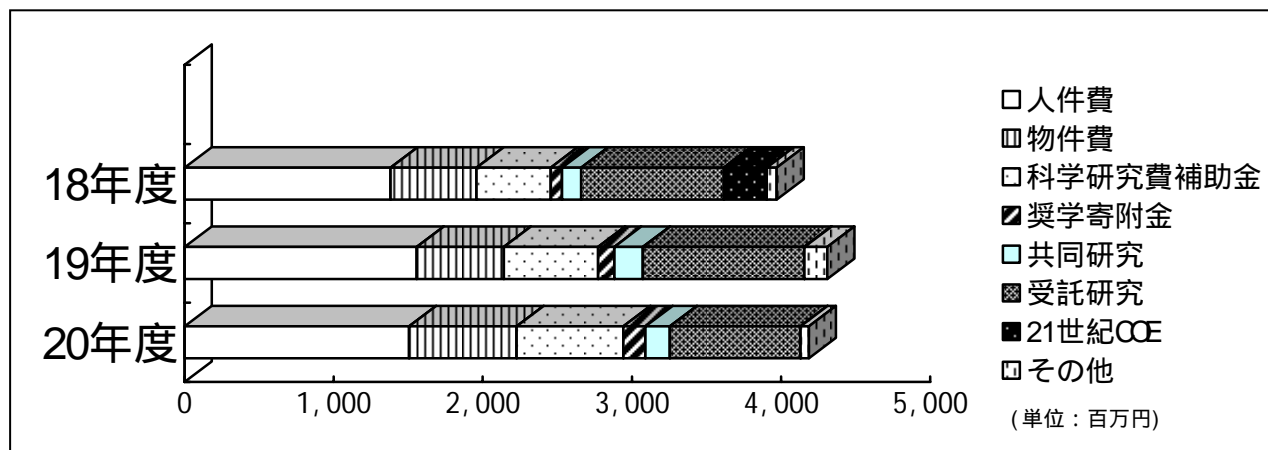
教員の欠員が生じた場合には、選考委員会が設置され、後任候補者の選考が行われる。特に、教授が欠員になった場合には、研究分野検討委員会が設置され、当該研究分野の研究内容、将来の方向等について検討される。教授選考委員会は、研究分野検討が終了した後に設置される。研究分野検討委員会は、当該研究部門の全教授と各研究部から選出された教授各1名で構成される。教授選考委員会は、当該研究部の全教授とその他研究部の教授各1名などで構成される。

当研究所では学内の他部局の教授と共同研究を行うために兼任教授制度を採用している。平成20

年度は学内から5名の理科系の教員（吉田博教授（工学研究科）、鈴木義茂教授（工学研究科）、平尾俊一教授（工学研究科）、中村春木教授（蛋白研究所）、森田清三教授（工学研究科））を兼任教授に任用した。

3) 研究費

当研究所の主な経費は、運営費交付金、科学研究費補助金、奨学寄附金等である。それら研究費の平成18年から3年間の推移は次頁のとおりである。



・予算（平成18～20年度）

（単位：千円）

		18年度	19年度	20年度
運営費交付金 （校費）	人件費	1,381,252	1,558,904	1,506,064
	物件費	577,474	582,799	721,463
科学研究費補助金（件数）		497,540(106)	634,747(112)	716,327(121)
奨学寄附金（件数）		77,391(62)	108,533(78)	148,562(83)
共同研究（件数）		127,556(57)	192,883(72)	163,489(61)
受託研究（件数）		957,672(63)	1,082,598(63)	876,961(43)
21世紀COE（件数）		288,926(1)	0(0)	0(0)
その他（件数）		67,550(7)	152,764(13)	56,609(8)
合計		3,975,361	4,313,228	4,189,475

（注）科学研究費補助金については、研究分担者として配分されたものは除く。

・奨学寄附金等

奨学寄附金、共同研究、受託研究については予め申し込まれた内容について、所内の産学官連携問題委員会において審査したうえで受け入れが決定され、総長（全学産学官連携問題委員会）に報告される。このうち、過去3年間に受け入れられた奨学寄附金は次のとおりである。

	量子機能科学 研究部門	高次制御材料 科学研究部門	機能分子科学 研究部門	知能汎用科学 研究部門	生体応答科学 研究部門	量子・IT科学 研究部門	産業科学ナノテク ロジセンター	その他	合計
平成18	4,500 (3)	13,141 (17)	16,400 (13)	10,100 (8)	9,250 (7)	0 (0)	10,700 (9)	13,300 (5)	77,391 (62)
平成19	500 (1)	22,600 (18)	34,999 (20)	19,614 (10)	11,350 (10)	1,600 (2)	17,570 (16)	300 (1)	108,533 (78)

平成 20	500	22,777	28,494	9,891	20,250	3,250	23,400	40,000	148,562
	(1)	(19)	(22)	(11)	(9)	(4)	(16)	(1)	(83)

単位：千円 () 内は件数

4) 国際研究プロジェクト

当研究所が平成20年度に実施した国際共同研究は次のとおりである。

研究分野	相手機関	国名	内容
材料機能物性	米国ロスアラモス国立研究所	アメリカ	イオン照射による材料改質に関する共同研究
材料機能物性	パシフィックノースウェスト国立研究所	アメリカ	イオン照射による材料改質に関する共同研究
知識システム	ウェールズ大学	イギリス	生物情報学のための次世代化学発見支援ツールに関する研究
セラミック機能材料	スロヴァキア科学アカデミー固体物理研究所	スロヴァキア	新規欠陥消滅法及び低温酸化法のメカニズムとシリコン太陽電池への応用
精密制御化学	ベルン大学	スイス	DNAによるスイッチングデバイスの研究
励起分子化学	韓国朝鮮大学	韓国	当研究室のフェムト秒レーザーフォトリソシス装置を使用して、dya d系化合物を用いて分子内の電子供与体から吸引体への電荷移動と電荷再結合について明らかにし、論文発表した。J. Phys. Chem. A 2008, 112(31), 7208-7213. および Phys. Chem. Chem. Phys. 2008, 10(30), 4393-4399.
励起分子化学	Oregon State University	アメリカ	産研パルスラジオリソシス装置を使用して、ドナーアクセプター型化合物の電荷再結合発光に関する研究を行い論文に発表した。J. Org. Chem. 2008, 73(9), 3551-3558.
励起分子化学	韓国建国大学	韓国	Chan Im教授との共同研究で、パイ共役高分子の発光特性について明らかにし、論文発表した。J. Photochem. Photobiol. A 2008, 200(2-3), 371-376.
人工生体情報ナノマテリアル	梨花女子大学校	韓国	トップダウン・ボトムアップナノテクノロジー融合による酸化物ナノヘテロ構造の創製
量子物性	ユーリッヒ研究センター	ドイツ	磁性有機分子の金属電極表面上への吸着構造と電子状態に関する理論的研究

5) 学術講演会・研究集会・研究所間交流プログラム

当研究所が平成20年度において実施した研究所間交流および主催または共催として実施した学術講演会・研究集会は次のとおりである。

開催期間	テーマ名等
2008/4/17	画像間の対応付け問題に対する我々のチャレンジ
2008/4/21	Design and Applications of General Imaging Systems
2008/5/20	発泡マグネシウム合金の作製と性質
2008/5/21	ロータス型ポーラス金属の気孔の生成・成長理論
2008/5/20-23	The Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD)
2008/6/17	鉛フリーフリットのディスプレイ電極と太陽電池への応用
2008/7/1	Modified Nucleic acid systems for biomedical applications
2008/7/7	Magnetic properties of coupled and non-coupled Fe/Cr multilayers
2008/7/10	Toward New Sensors and Methodology in Computer Vision

2008/7/28	Internatinal Seminar on Data Mining
2008/8/1	半導体新規化学プロセス研究会 第1回例会「SiC デバイス・プロセスの最前線」
2008/9/1	Internatinal Seminar on Data Mining
2008/9/24-27	2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience
2008/9/29-10/1	第4回阪大ナノサイエンス・ナノテクノロジー国際シンポジウム
2008/9/6-10	第13回CMD ワークショップ
2008/9/9	ボロンの超伝導
2008/9/26	高強度ポーラス TiAl 基金属間化合物の研究
2008/10/9	ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス平成20年度G2「新機能ナノエレクトロニクス」研究会
2008/10/17-18	ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス平成20年度G3「ナノ分子メカニクス・バリエーションメカニクスグループ」研究会
2008/10/22	平成20年度第1回ポーラス金属研究会
2008/10/23	第1回機能性酸化物エレクトロニクス研究会
2008/10/24	広島大学放射光科学研究センターと大阪大学産業科学研究所交流会
2008/10/27	ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス平成20年度G1「分子ナノエレクトロニクス」研究会
2008/10/30	Automating Biological Science
2008/11/7	有機 π 電子系の作る超分子構造体とナノ集合体
2008/11/21-22	第37回薄膜・表面物理基礎講座「計算機ナノマテリアルデザイン入門」—新物質ナノ超構造・新機能材料薄膜合成の指針を求めて—
2008/12/1	第64回学術講演会「ネットワーク型先端学術科学を目指して」
2008/12/12	半導体新規化学プロセス研究会 第2回例会「SiC パワーデバイスの現状と課題」
2008/12/25-26	平成20年度ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス成果報告会
2009/1/21	平成20年度新産業創造物質基盤技術研究センター所内成果報告会
2009/1/22	第12回産研国際シンポジウム/第7回ナノテクセンター/第2回MSTeC/第1回アライアンス国際合同シンポジウム
2009/2/2-3	第9回加速器量子ビーム実験室研究会「加速器量子ビーム実験室とビーム科学の新展開」
2009/2/3	平成20年度第2回ポーラス金属研究会
2009/2/4	大阪大学産業科学研究所・東京大学生産技術研究所 研究所間ワークショップ
2009/2/20	ナノ結晶バルク金属の自由体積
2009/2/26	大阪大学産業科学研究所・東北大学電気通信研究所 研究所間ワークショップ
2009/3/2-6	第14回CMD ワークショップ
2009/3/3-4	第9回データマイニングと統計数理研究会
2009/3/4	平成20年度加速器量子ビーム実験室成果報告会
2009/3/13	平成20年度新産業創造物質基盤技術研究センター合同成果報告会
2009/3/17	平成20年度第3回ポーラス金属研究会
2009/3/19	半導体新規化学プロセス研究会 第3回例会「太陽電池産業の展望」

上記以外にも、外来講師を迎えての講演会、セミナーも随時開催しており、それらの合計は42件（うち外国人を講師に迎えてのものは12件）であった。

日付	講師名	所属機関	身分	内容
2008/4/24	細見 彰	京都薬科大学	客員教授	創造的研究の勧め。進め方とコツ
2008/4/25	Sylvain Jugé	Institute of Molecular Chemistry, University of Burgundy, France	教授	リン原子に中心不斉を有する有機リン化合物：キラル配位子から標識アミノ酸まで
2008/5/14	原田 崇広	福井大学・大学院工学研究科	講師	心筋細胞の拍動タイミングに見られる長時間相関
2008/5/15	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	パワーデバイスの基礎

2008/6/19	柴崎 正勝	東京大学大学院薬学系研究科 有機合成化学教室	教授	二中心不斉触媒-新たな展開と医薬合成-
2008/6/24	新川 武	国立大学法人琉球大学分子生命科学センター	准教授	ハイナノカプセルを使用した新興ウイルス感染症に対する治療法について
2008/6/30	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	T F T回路とプロセスの基礎
2008/7/10	中山 亨	東北大学大学院・工学研究科・ハイテ工学専攻・応用生命科学講座	教授	花色発現の生化学と分子生物学
2008/7/29	水谷 治央	東京大学大学院・新領域創成科学研究科	特任助教	神経回路網再構築のための高分解能 X 線顕微鏡法
2008/7/30	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	最近のシステム液晶の動向とそのプロセス
2008/8/6	Nick Serpone	University of Pavia	Visiting Professor	Misoconceptions in TiO2 Photocatalysis(Addressing some outstanding issu)
2008/8/15	寺内 一姫	名古屋大学大学院・理学研究科・生命理学専攻	特任講師	試験管内で時をきざむ KaiC タンパク質
2008/8/21	金子 敏明	岡山理科大学	教授	集団励起
2008/8/27	和地 正明	東京大学大学院・生命理工学研究科・生物プロセス専攻	准教授	大腸菌におけるポルフィリンの菌体外排出
2008/9/4	Stefan Matile	スイス ジュネーブ大学	教授	核酸の合成に関する知識の提供
2008/9/5	Jai Pal Mittal	ブネ大学	教授	Anti oxidants-Hype and Reality-Efforts to bioquantify with radiation chemistry ideas
2008/9/8	Tulsi Mukherjee	インド・バーハール原子力研究所	教授	History and Perspective of Free Radical Research in BARC:Interface Among Chemistry,Biology and Medicine
2008/9/8	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	システムディスプレイの基本技術
2008/9/8	米田 健司	松下電器産業株式会社半導体社 プロセス開発センター	主幹技師	最近の LSI プロセスの動向:高誘電体膜と低誘電体膜
2008/9/9	米田 健司	松下電器産業株式会社半導体社 プロセス開発センター	主幹技師	最近の LSI プロセスの動向:半導体洗浄技術
2008/9/9	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	T F T技術の基本と最近の動向
2008/9/10	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	T F T回路技術の基礎
2008/9/10	米田 健司	松下電器産業株式会社半導体社 プロセス開発センター	主幹技師	ハワートバースの基礎
2008/9/18	Nathalie VAST	Commissariat à l'Energie Atomique, Direction des Sciences de la Matière	Senior researcher	Superconductivity from doping boron icosahedra
2009/10/14	Jan Dutkiewicz	The Institute of Metallurgy and Materials Science of the Polish Academy of science	教授	金属ガラスの微細構造解析について

2008/11/6	伊与田 正彦	首都大学東京大学院理工学研究科	教授	有機分子を重ねて作るナリワイ
2008/11/7	伊与田 正彦	首都大学東京大学院理工学研究科	教授	有機分子を重ねて作るナリワイ
2008/11/12	John R. Miller	米国エネルギー省ブルックヘブン国立研究室	上級化学官(博士)	Charge Delocalization and Transport in Cojugated Molecules:“Molecular Wires”for Photovoltaics?
2008/11/13	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	TFTプロセスの基礎
2008/11/20	周藤 由美子	大阪大学	セクハラ相談員	セクシュアル・ハラスメントをなくすためには
2008/11/21	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	TFTプロセス LSIプロセスの類似点と相違点
2008/12/1	井上 明久	東北大学	総長	原子分子材料研究拠点課題としてのバルク金属ガラスの魅力と将来性について
2008/12/9	鄭 周姫	ソウル ASEAN Medical Center	研究員	バイオナノカプセル内部へのリポソームを介した物質導入法について
2009/1/31	古荘 義雄	名古屋大学大学院・工学研究科	准教授	π 共役分子を基盤とする二重らせん分子・高分子の創製
2009/2/4	André Charette	Department of Chemistry, Univ. de Montréal	教授	亜鉛試薬を用いるシクロプロパン誘導体の立体選択的合成に対する新手法
2009/2/4	Ahmed Busnaina	Northeastern University	教授	Directed Assembly of Nanoelements for Devices and Sensors
2009/2/4	Park Jin-Goo	Hanyang University	教授	Plastic, Glass and Metal Substrate Based (Bio-)MEMS Fabrication toward Commercialization
2009/2/5	Gu ManBok	Korea University	教授	Aptamer Technologies for Detection of Adipokines, Residual Pharmaceuticals, and EDCs
2009/2/6	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	TFT回路技術の基礎
2009/2/18	尾瀬 農之	北海道大学・先端生命科学研究院	特任助教	タンパク質発現のためのプラスミド作成、及びタンパク質と低分子化合物との分子ドッキングシミュレーションについての助言
2009/2/20	今井 繁規	シャープ株式会社システム技術研究所	所長	TFTプロセス技術の基礎
2009/3/7	田中 健	東京農工大学大学院・共生科学技術研究院 応用化学専攻	准教授	企業とアカデミアでの有機合成

6) 広報活動

当研究所では、広報活動の一環として次の出版物を発行した。

- ・産業科学研究所要覧（和・英文併記）（2008）
- ・Memoirs of the Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University Vol.65（2008）
- ・年次報告書（平成20年度版）
- ・産研ニューズレター（年3回発行）
- ・産研テクノサロン 講演録・資料（平成20年度版）

「産研ホームページ」も開設しており、産研ニューズレター等を見ることが出来る。

(URL: <http://www.sanken.osaka-u.ac.jp>)

7) 受賞状況 (平成20年1月2日～平成21年3月31日)

氏名	受賞名	受賞日
西野 邦彦	日本化学療法学会西日本支部長賞－基礎部門－	2008/1/8
真嶋 哲朗 立川 貴士	ISEPD2008 ポスター賞	2008/1/8
飯野 亮太	電気学会優秀論文発表賞	2008/3/1
阿 龍慎	大学院研究奨励賞	2008/3/1
溝口 理一郎 來村 徳信 笹嶋 宗彦	人工知能学会・フレッシュマンのための人工知能研究交流会優秀発表賞 「実規模サービスを対象としたタスク指向型メニューの試作」	2008/3/12
溝口 理一郎 來村 徳信 笹嶋 宗彦	人工知能学会・フレッシュマンのための人工知能研究交流会優秀発表賞 「2つの機能語彙体系間におけるオントロジーマッピングに関する一考察」	2008/3/12
溝口 理一郎 古崎 晃司	人工知能学会・フレッシュマンのための人工知能研究交流会優秀発表賞 「オントロジー俯瞰のための概念マップ生成ツールの開発」	2008/3/12
山口 明人	日本細菌学会浅川賞	2008/3/25
山口 明人	日本薬学会賞	2008/3/25
中嶋 英雄	日本金属学会増本量賞	2008/3/26
石丸 学	日本金属学会「功績賞」	2008/3/26
中谷 和彦	日本化学会学術賞	2008/3/27
朝日 一 石丸 学	応用物理学会 JJAP 編集貢献賞	2008/4/8
千葉 博	日本機械学会奨励賞	2008/4/8
谷口 正輝	日本化学会第88春季年会優秀講演賞 (学術)	2008/4/10
開發 邦宏	Travel Grant Award	2008/4/14
西野 邦彦	若手科学者賞	2008/4/15
中谷 和彦	市村学術賞貢献賞	2008/4/25
柳田 剛	ナノ学会第六回大会若手優秀発表賞	2008/5/8
八木 康史 佐川 立昌	2008 IEEE International Conference on Robotics and Automation ベストビジョン論文賞ファイナリスト	2008/5/19
西野 邦彦	上田泰記念感染症・化学療法研究奨励賞	2008/6/6
菅沼 克昭 井上 雅博	International Conference on Electronics Packaging 2007 ベストペーパー賞	2008/6/10
西野 邦彦	日本ビフィズス菌センター研究奨励賞	2008/6/12
八木 康史 向川 康博	SSII07 (第13回画像センシングシンポジウム) 優秀論文賞	2008/6/12
猪口 明博	(社)人工知能学会2007年度研究会優秀賞	2008/6/12
阿 龍慎	2008 International Material Research Conference the Student Best Paper Award	2008/6/20
福井 健一	IEEE 8th International Conference on Computer and Information Technology, Best Paper Award	2008/7/9

中嶋 英雄	DSL2008 Award for Career Achievements(固体および液体における拡散の国際賞)	2008/7/10
粕谷武史	The Highlights of student Posters Session (優秀ポスター賞)	2008/7/13
菅沼 克昭 金 権鉄	ICEPT-HDP 2008 Best paper award	2008/7/29
八木 康史 向川 康博	MIRU 長尾賞 (最優秀論文賞)	2008/7/30
笹井 宏明 滝澤 忍	Tetrahedron: Asymmetry Most Cited Paper 2005 - 2008 Award	2008/8/18
沼尾 正行 栗原 聡	アルチメディア、分散、協調とモバイルシンポジウム(DICOM02008) 優秀論文賞	2008/8/22
田川 精一 古澤 孝弘 山本 洋揮	APSRC-2008 Poster 賞	2008/9/1
朝日 一 川合 知二 松本 和彦	応用物理学会 フェロー表彰	2008/9/2
真嶋 哲朗	光化学協会講演賞	2008/9/12
川井 清彦	光化学協会奨励賞	2008/9/12
中嶋 英雄 多根 正和	第 11 回 日本金属学会 優秀ポスター賞	2008/9/24
中嶋 英雄 仲村 龍介	第 4 回阪大ナノサイエンス・テクノロジー国際シンポジウム・ベストポスター賞	2008/9/30
古澤 孝弘	日本放射線化学会 学術賞	2008/10/16
川合 知二	2008 Achievement Award	2008/10/21
田川 精一 古澤 孝弘	MNC 2007 最優秀発表賞	2008/10/28
中谷 和彦	大阪科学賞	2008/10/29
中嶋 英雄 仲村 龍介	第 7 回 International Conference on Diffusion in Materials ・ベストポスター賞	2008/10/31
栗原 聡 他 4 名と共同受賞	マルチメディア通信と分散処理ワークショップ(DPS ワークショップ 2008) ベストポスター賞	2008/12/12
開発 邦宏	第 9 回バイオビジネスコンペ JAPAN 審査委員特別賞	2009/2/2
中谷 和彦	大阪大学教育功績賞	2009/2/20
西野 邦彦	平成 20 年度国立大学法人大阪大学 教育・研究功績賞	2009/2/20
中嶋 英雄 多根 正和	グローバルCOEプログラム「構造・機能先進材料デザイン教育研究拠点」論文賞	2009/3/18
滝澤 忍	平成 21 年度日本薬学会奨励賞	2009/3/25
中嶋 英雄	第 10 回日本金属学会学術功労賞	2009/3/28
森川良忠 他 5 名と共同受賞	第 14 回日本物理学会論文賞	2009/3/29
中嶋 英雄 仲村 龍介	第 12 回日本金属学会優秀ポスター賞	2009/3/29

3. 教育への関与 (平成20年度)

1) 大学院研究科・専攻担当

当研究所の教員は、大阪大学大学院理学研究科・工学研究科・基礎工学研究科・薬学研究科・情報科学研究科・生命機能研究科に所属し、各専攻の大学院生の講義および研究指導を行っている。

研究科	専攻	担当教員	
理学	物理学	教授 谷村克己 教授 磯山悟朗 教授 朝日 一	准教授 加藤龍好 准教授 長谷川繁彦 准教授 井上恒一 准教授 森川良忠 准教授 白井光雲
	化学	教授 川合知二 教授 小林 光 教授 中谷和彦 教授 加藤修雄 教授 笹井宏明	准教授 松本卓也 准教授 高橋昌男 准教授 大神田淳子 准教授 鬼塚清孝 准教授 鈴木健之
	生物科学	教授 谷澤克行	准教授 黒田俊一 准教授 岡島俊英
工学	知能・機能創成工学	教授 菅沼克昭	
	マテリアル生産科学	教授 中嶋英雄	准教授 石丸 学 准教授 鈴木進補
	応用化学	教授 安蘇芳雄 教授 真嶋哲朗 教授 安藤陽一 教授 田川精一	准教授 藤塚 守 准教授 川井清彦 准教授 瀬川耕司 准教授 関 修平 准教授 古澤孝弘
	生命先端工学	教授 野地博行	
	精密科学・応用物理学		准教授 須藤孝一
	電気電子情報工学	教授 朝日 一 教授 鷲尾 隆 教授 溝口理一郎	准教授 長谷川繁彦 准教授 來村徳信
	環境エネルギー工学	教授 谷村克己 教授 磯山悟朗 教授 吉田陽一	准教授 誉田義英 准教授 楊 金峰
基礎工学	物質創成	教授 松本和彦 教授 川合知二 教授 田中秀和 教授 谷村克己	准教授 井上恒一 准教授 前橋兼三 准教授 森川良忠 准教授 白井光雲 准教授 金崎順一 准教授 田中慎一郎
	システム創成	教授 八木康史	
薬学	分子薬科学	教授 山口明人	
情報科学	情報数理学	教授 沼尾正行 教授 溝口理一郎	准教授 栗原 聡
	コンピュータサイエンス	教授 八木康史	准教授 向川康博
生命機能		教授 谷澤克行 教授 川合知二 教授 野地博行	准教授 和田 洋

2) 大学院担当授業一覧

研究科	科目	担当教員
理学	ナノプロセス・物性・デバイス学	田川精一、谷村克巳、松本和彦
	超分子ナノバイオプロセス学	真嶋哲朗、藤塚守、川井清彦
	ナノ構造・機能計測解析学	弘津禎彦
	放射光物理学	磯山悟朗
	加速器科学	磯山悟朗
	固体電子論Ⅱ	森川良忠
	半導体化学Ⅰ	小林光、高橋昌男
	物性理論セミナーⅡ	白井光雲
	物性理論特別セミナー	森川良忠、白井光雲
	計算機ナノマテリアルデザインチュートリアル	森川良忠、白井光雲
	半導体半期セミナー	朝日 一、長谷川繁彦
	半導体特別セミナー	朝日 一、長谷川繁彦
	半導体物理学	長谷川繁彦
	放射光半期セミナー	磯山悟朗、井上恒一、加藤龍好
	放射光特別セミナー	磯山悟朗、井上恒一、加藤龍好
	構造物性化学	川合知二
	触媒化学	笹井宏明、鬼塚清孝、鈴木健之
	大学院有機化学	笹井宏明
	合成有機化学(I)	加藤修雄、大神田淳子
	構造物性化学セミナーⅠ	川合知二、松本卓也
	構造物性化学セミナーⅡ	川合知二
	半導体化学セミナーⅠ	小林 光、高橋昌男
	半導体化学セミナーⅡ	小林 光
	機能性分子化学セミナーⅠ、Ⅱ	笹井宏明、鬼塚清孝、鈴木健之
	ゲノム化学	中谷和彦
	ゲノム化学セミナーⅠ、Ⅱ	中谷和彦
	ゲノム化学特別セミナー	中谷和彦
	合成有機化学セミナーⅠ、Ⅱ	加藤修雄、大神田淳子
	構造物性化学特別セミナー	川合知二
	半導体化学特別セミナー	小林 光
	合成有機化学特別セミナー	加藤修雄、大神田淳子
	機能性分子化学特別セミナー	笹井宏明
	生体機能物質学Ⅰ	黒田俊一、岡島俊英
	生体機能物質学Ⅱ	谷澤克行
	生体機能物質学セミナー	谷澤克行、黒田俊一、岡島俊英
	生体機能物質学特別セミナー	谷澤克行、黒田俊一、岡島俊英
工学	電子機能分子化学	安蘇芳雄
	励起反応化学特論	真嶋哲朗、藤塚 守、川井清彦
	分子創成化学ゼミナール	真嶋哲朗、安蘇芳雄、藤塚 守、川井清彦
	分子創成化学研究課題企画ゼミナール	真嶋哲朗、安蘇芳雄、藤塚 守、川井清彦
	分子創成化学先端研究情報ゼミナール	真嶋哲朗、安蘇芳雄、藤塚 守、川井清彦
	光物性・光エレクトロニクス	朝日 一、長谷川繁彦
	電気電子情報工学セミナー	朝日 一、鷺尾 隆、長谷川繁彦、
	電気電子情報工学演習・実習	朝日 一、鷺尾 隆、長谷川繁彦
	電気電子情報工学特別講義Ⅳ	朝日 一、長谷川繁彦
	先端エレクトロニクスデバイス工学特論Ⅱ	朝日 一、長谷川繁彦

	量子分子工学特論	田川精一、関 修平、古澤孝弘
	固体物性化学	安藤陽一、瀬川耕司
	物質化学ゼミナール	田川精一、安藤陽一
	物質化学研究課題企画ゼミナール	田川精一、安藤陽一、関 修平、瀬川耕司 古澤孝弘
	物質化学先端研究情報ゼミナール	田川精一、安藤陽一、関野 徹、関 修平、 瀬川耕司、古澤孝弘
	応用生物学ゼミナール 1, 2	野地博行
	ナノバイオロジー特論	野地博行
	応用生物学実験 V	野地博行
	先端バイオテクノロジーゼミナール I, II	野地博行
	先端バイオテクノロジー実験 I, II	野地博行
	Biochemistry	野地博行
	量子分子デバイス	須藤孝一
	応用物理学演習 1	須藤孝一
	応用物理学演習 2	須藤孝一
	応用物理学実験	須藤孝一
	応用物理学ゼミナール	須藤孝一
	創成工学ゼミナール	菅沼克昭
	創生工学総合 PBL	菅沼克昭
	基盤創成工学	菅沼克昭
	機能創成工学	菅沼克昭
	応用デバイス工学	菅沼克昭
	基盤 PP	菅沼克昭
	材料設計論	中嶋英雄、鈴木進補
	極微構造解析学	石丸 学
	マテリアル科学実験	中嶋英雄、石丸 学
	量子ビーム化学	吉田陽一、楊金峰、菅田義英
	情報通信システム工学論	鷺尾 隆
	データマイニング工学	鷺尾 隆
	知識工学論	溝口理一郎、來村徳信
	電気電子情報工学セミナー	溝口理一郎、來村徳信
	電気電子情報工学演習・実習	溝口理一郎、來村徳信
	知能システム工学特論	溝口理一郎、來村徳信
	原子力工学演習	谷村克己、磯山悟朗
	原子力工学セミナー 1	磯山悟朗、谷村克己
	原子力工学セミナー 2	磯山悟朗、吉田陽一
	原子力工学セミナー	吉田陽一、楊金峰、菅田義英
	ナノ工学	谷村克己
基礎工学	半導体物性	松本和彦、井上恒一
	先端物質設計論	白井光雲、森川良忠
	先端物質機能科学特論	谷村克己
	ゼミナール I、II	川合知二、松本和彦、井上恒一、田中秀和
	物理系研究 I、II	川合知二、松本和彦、井上恒一、森川良忠、 田中秀和
	表面・界面 超薄膜物性	田中秀和
薬学	細胞生物学ゼミナール II	山口明人
	細胞生物学特別演習	山口明人

	生物薬学特論 I	山口明人
	生物薬学特論 I	山口明人
	ゼミナール I	山口明人
情報科学	情報数理学セミナー I、II	沼尾正行、栗原 聡
	情報数理学演習 I、II	沼尾正行、栗原 聡
	情報数理学研究 I、II	沼尾正行、栗原 聡
	情報数理学概論	沼尾正行、栗原 聡
	知能と学習	沼尾正行
	行動計画知能論	栗原 聡
	知能アーキテクチャ	沼尾正行、栗原 聡
	知能システム概論	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスセミナー I	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスセミナー II	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス演習 I	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス演習 II	八木康史、向川康博
	アルゴリズム論	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス基礎論	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスインターンシップ	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究 I a	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究 I b	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究 II a	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究 II b	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスインターンシップ D	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスアドバンストセミナー I	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンスアドバンストセミナー II	八木康史、向川康博
	コンピュータビジョン	八木康史、向川康博
	情報数理学インターンシップ	沼尾正行、栗原 聡
	情報数理学インターンシップ D	沼尾正行、栗原 聡
	生命機能	理工医学 II F
理工医学セミナー II F		谷澤克行
理工医学特別セミナー F		谷澤克行
基礎物理		野地博行

3) 大学院生の受入数

(研究科)	(専攻)	(博士前期)	(博士後期)	(小計)
理 学	物理学	15	1	16
	化学	38	16	54
	生物科学	4	0	4
	(小 計)	57	17	74
工 学	生命先端工学	4	1	5
	応用化学	17	14	31
	精密科学・応用物理学	1	0	1
	知能・機能創成工学	4	6	10
	マテリアル生産科学	9	2	11

	電気電子情報工学	12	9	21
	環境・エネルギー工学	2	1	3
	(小 計)	49	33	82
基礎工学	物質創成	16	7	23
	(小 計)	16	7	23
薬 学	分子薬科学	6	4	10
	(小 計)	6	4	10
情報科学	情報数理学	7	3	10
	コンピュータサイエンス	9	4	13
	(小 計)	16	7	23
生命機能		10	4	14
	(小 計)	10	4	14
合 計		154	72	226

4) 学部、共通教育担当授業一覧 (平成20年度)

研究科	科目		担当教員
理学	放射光物理学		磯山悟朗
工学	量子線物理学		谷村克巳
	コンピュータ工学演習		沼尾正行、栗原 聡
	動物細胞工学		野地博行
	環境エネルギー工学		吉田陽一
	熱力学		須藤孝一
基礎工学	知識工学		八木康史、向川康博
	計算機援用工学		八木康史、向川康博
	情報科学ゼミナールA		八木康史、向川康博
	情報科学ゼミナールB		八木康史、向川康博
	プログラミングC演習		佐川立昌・榎原 靖
	情報科学実験C		榎原 靖
薬学	セラミックス物性		川合知二
共通教育	基礎教育セミナー	薬学特論V	山口明人
		生活の中の有機化学	加藤修雄、笹井宏明、真嶋哲朗、安蘇芳雄、中谷和彦、藤塚 守、大神田淳子、鬼塚清孝、鈴木健之
		最新ナノテクノロジー入門	朝日 一、松本和彦、井上恒一、白井光雲、森川良忠、長谷川繁彦、須藤孝一
		分子と生命	野地博行、黒田俊一、谷澤克行、和田 洋、岡島俊英、山口明人、村上 聡
		知能とコンピュータ	沼尾正行、溝口理一郎、八木康史、鷺尾 隆、來村徳信、向川康博、栗原 聡

	先端教養科目	先端ビーム科学	真嶋哲朗、田川精一、磯山悟朗、吉田陽一
	基礎教育科目	化学概論	真嶋哲朗、安蘇芳雄、藤塚 守、川井清彦
		化学要論	加藤修雄
		分子化学A	田川精一、古澤孝弘
		基礎有機化学	中谷和彦、鈴木健之
		物理学概論 I	田中慎一郎
		物理学概論 II	朝日 一
		物理学 2	森川良忠
熱学・統計力学要論	磯山悟朗、加藤龍好、白井光雲		

4. 国際交流

1) 活動状況

当研究所では、国際交流の推進が研究所の活動にとってひとつの重要な要因であるという認識にたつて、平成2年(1990)から国際交流推進委員会を設置した。委員会は、教授3名、助教授3名及び当研究所から選出の学内国際交流委員会委員から成っており、国際交流の推進に中心的な役割を果たしている。

当研究所は、外国研究機関と学術交流協定を結んでおり、シンポジウム・講義の実施、研究者等の交流、情報交換などを行っている。産研における平成20年度の、協定締結機関は以下のとおりである。(合計17機関)

ドイツ	マグデブルグ・オットーフォンゲーリック大学自然科学部	平成6(1994)10.18～
韓国	釜慶大学校基礎科学研究所	平成11(1999)2.26～
ドイツ	ユーリッヒ研究センター	平成13(2001)1.1～
米国	メリーランド大学カレッジパーク校	平成15(2003)4.7～
英国	ユニバーシティカレッジロンドン	平成15(2003)9.26～
韓国	釜山国立大学校自然科学大学	平成16(2004)10.29～
韓国	漢陽大学産業科学研究所	平成16(2004)2.11～
台湾	国立台湾大学理学部	平成17(2005)2.20～
米国	パシフィックノースウエスト国立研究所	平成17(2005)3.10～
フランス	国立科学研究センター (CNRS)	平成17(2005)5.18～
ドイツ	アーヘン工科大学	平成17(2005)9.5～
韓国	慶尚大学校工科大学	平成17(2005)9.9～
韓国	忠南国立大学校自然科学大学	平成18(2006)11.26～
中国	北京大学情報科学技術学院	平成18(2006)5.30～
台湾	国立台湾師範大学理学部	平成19(2007)1.9～
スイス	ジュネーブ大学理学部	平成19(2007)8.22～
中国	内モンゴル師範大学化学・環境科学学院	平成20(2008)6.4～

当研究所に所属する外国人は、合計 57 名で、内訳は、助教（特任助教（常勤）含む）8 名、外国人研究員 9 名、非常勤職員 14 名、大学院博士後期課程 21 名、博士前期課程 12 名である。国別は次のとおりである。

韓国（22）、中国（17）、インド（3）、ベトナム（7）、イギリス（1）、スペイン（1）、アメリカ（1）、インドネシア（1）、ロシア（1）、ブラジル（2）、バングラデシュ（3）、マレーシア（1）、ベネズエラ（1）、エジプト（1）、イラン（1）、トルコ（1）

2) 国外との研究者往来（平成20年度）

研究者の海外派遣は、合計 275 件であった。訪問先は、米国、韓国、フランス、中国、カナダ、ドイツその他の多岐に渡っている。

国外から当研究所を訪問した研究者は合計 85 名であり、内訳は次のとおりである。

米国（5）、韓国（54）、イギリス（1）、フランス（1）、ドイツ（4）、イタリア（1）、スロヴァキア（6）、ロシア（1）、インド（1）、タイ（3）、エジプト（1）、バングラデシュ（2）、中国（2）、台湾（1）、フィリピン（1）

5. 産業界との交流

共同研究、受託研究、技術相談など当研究所と産業界との交流が、各教員によって個別に活発に行われている。これに加えて研究所として平成10年度から「産研テクノサロン」を新設した。これは財団法人産業科学研究協会との共同事業である。企業の経営者および、技術者と当研究所の研究者の定期的な交流の場をつくり、研究成果を産業界の人に広く詳しく知ってもらおうと同時に産研側も産業界の抱えている問題を知り、研究テーマの発掘に役立てようというものである。この趣旨に賛同する企業に会員になってもらい、継続的に交流を行っている。平成20年度は4回の会合をもった。

・第1回：「新たな科学の発展と産業の創生に向けて」平成20年7月1日（火）

「産業科学研究所の概要と今後の展開

所長 山口 明人

「新研究分野紹介」

①フロンティア材料研究分野

教授 安藤 陽一

物質の機能を理解して制御し、新しい機能材料を創製する

②人工生体情報ナノマテリアル分野

教授 田中 秀和

「産学連携のすすめと知財マネジメント」 河野広明特許事務所 所長／弁理士 河野 広明
特許紹介①金属表面の防錆処理関連の特許 / ②バイオセンサー関連の特許

・第2回：「エネルギー・医療の産業科学」平成20年8月29日（金）

「燃料電池触媒のマテリアルデザイン」

准教授 森川 良忠

「燃料電池技術開発の現状」

トヨタ自動車 FC技術部 主査 河津 成之

特許紹介：「導電性セラミックスおよびその製造方法」

助教 楠瀬 尚史

「医療知識の総合的理解」

教授 溝口 理一郎

「抗インフルエンザ活性新規カテキン誘導体の開発」

助教 開発 邦宏

「NBCI 海外ベンチマーク調査結果にみる米国ナノテク産学官連携」

・第3回：「環境・センシングの新技術と展望」 平成20年10月30日（木）

「環境ビジネスの現状と展望」

株式会社日本総合研究所 総合研究部門
球温暖化対応戦略クラスター長 村上 芽

「RoHS・REACH・EuP・ELV 環境規制の動向とその対策」

教授 菅沼 克昭・井手こづえ

「阪大複合機能ナノファウンダリの紹介」

村杉 政一

「センサーネットワーク技術」

准教授 栗原 聡

「超高感度バイオセンシング技術」

助教 飯野 亮太

・第4回：「先端技術の産学連携による産業応用」平成21年1月28日（水）

「欧米における産学連携と企業のR&D戦略と産業応用」

英国 Nanoco 社 副社長 玉川惟正

「アゴニスト、アンタゴニストのスクリーニング技術開発」

アズワン株式会社 上向健司

「半導体中不純物の新ゲッターリング方法の理論的開発とその実証研究」

准教授 白井光雲

株式会社ルネサステクノロジー 松川和人

「半導体レーザーによる樹脂判別装置開発」

IDEC 株式会社 常務執行役員 藤田俊弘

「導電性接着剤接続技術開発」

エスペック株式会社 田中浩和

平成12年度より当研究所の技術シーズを公開して関心のある企業の参加で研究会を組織して事業化を目指す目的で「新産業創造研究会」を設置した。20年度は、半導体新規化学プロセス研究会、ポラス金属研究会を各3回、総計6回開催した。

6.まとめ（課題と展望）

まとめ

1) 組織・運営

当研究所は、平成21年4月1日に改組を行い、27専任研究分野を、それぞれ7分野ずつの第1研究部門（情報・量子科学系）、第2研究部門（材料・ビーム科学系）、第3研究部門（生体・分子科学系）と、6専任研究分野からなる産業科学ナノテクノロジーセンターに再編した。新たに産業科学連携教育推進センター、国際共同研究センターを設け、国際共同研究センターの下には国際連携研究ラボの設置を進めている。すでに北京大学とのICT連携研究ラボが設置され、さらに英国、韓国の大学との連携ラボの準備が進められている。材料解析センターを電子顕微鏡室と合体させ、情報や生体の解析も含む総合解析センターへと改編した。量子ビーム実験室を、ナノテクセンターから独立させ、量子ビーム科学研究施設として、共同研究の利便性を向上させた。産研には充実した技術室があるのが特徴であるが、本年建設を進めているインキュベーション棟には、新しい試作工場が入り、さらに強化される。ユニークな情報ネットワーク室、広報室の活動も活発に行われている。新産業創製物質基盤センター・ポストシリコンアライアンスは、21年度が最終年度であるが、本年6月に産研を含む5大学附置研によるネットワーク型全国共同研究拠点が正式に文科省に認定され、産研はその拠点本部として、拠点を基盤とする次期アライアンスの来春発足に向けて着々と準備が進んでいる。

本年4月の改組により、産研はすべての専任研究室が教授・准教授・助教1:1:2の体制に再編された。このようなフルサイズ研究室制は、研究所における世界的レベルの研究遂行には大変有効な体制であるが、他方で、有能な若手の独立が遅れる問題がある。これを解決するために、特別プロジェクト研究部門を新設し、所内公募選抜により、優秀な若手助教を任期付き准教授に登用し、独立の研究室・予算・スタッフの配置を20年度から毎年1名ずつ採用している。

これらの運営は、全教授で構成される教授会の了承のもと、所長の下に役員会を設置して、3人の副所長が研究企画委員会、財務委員会、施設委員会、広報委員会等の重要な委員会の委員長を兼ねる形で、迅速な意思決定と柔軟な運営を可能にしている。この運営を統括するために、外部委員を加えた運営協議会が設置されている。22年度にネットワーク拠点が発足すると、拠点本部と運営委員会・共同研究推進委員会が新たに産研に設置されることになる。

2) 研究（予算・設備・活動）

産研は、「材料」、「情報」、「生体」をキーワードに、最先端の科学を産業に生かすことを目指して、専門分野の壁を越えた融合研究を展開してきた。所員個々の研究面における実績は、大きい外部資金獲得、文部科学大臣賞等を初めとする各種の受賞、特許出願等に反映されている。とくに若手研究員で「さきがけ」、若手Sなどに採択される数が多く、文部科学大臣賞若手科学者賞の受賞者も多い。大学院生で、日本学術振興会特別研究員に採用されている比率の高いことも特筆される。

さらに、所全体としても、産業科学ナノテクノロジーセンターが全国に先駆けて設置され、ナノテク総合研究棟や阪大ナノプロセスファウンダリなども整備されて、文字通り、我が国ナノサイエンス研究の中心の一つとなっている。国立大学法人化後初の大学研究所間連携の仕組みとして、平成17年に東北大学多元物質科学研究所との間で、新産業創造物質基盤技術研究センター発足、さらに、翌年、北大電子研、東工大資源研を加えて4大学附置研究所アライアンスを形成して連携研究を推進している。その実績が認められ、今年6月、上記4研究所に九大先導研を加えた5研究所による「物質・デバイス領域共同研究拠点」がネットワーク型拠点として文科省に正式に認定された。産研はこのネットワークの拠点本部を務める。全国最大の総合理工分野におけるネットワーク拠点として期待と責

任も大きい。

研究成果を産業界のニーズに素早く且つ効率的に還元できるより良い環境が整うと共に、研究環境の改善も進んでおり、第二研究棟(平成 13 年度)、ナノテクノロジー総合研究棟(平成 15 年度)の竣工に引き続き、今までの課題であった第一研究棟の改修工事も 21 年度中には完了する予定である。また、今年、産学連携の新たな拠点として、ナノテクノロジー・インキュベーション棟が着工された。22 年 3 月竣工すれば、新しい産研試作工場、阪大ナノサイエンステクノコア、企業リサーチパーク、阪大リノベーションセンターなどが入居し、産業化に向けたオープンイノベーションのための拠点となることが期待されている。

3) 教育

当研究所の教員陣は、理、工、農、薬、基工とバラエティーに富んだ教員のみならず、産業界の研究者の協力も得ているため、学問的、専門的な教育が行われている。各教員は学部の教育や全学共通教育にも関与するとともに、工学研究科環境・エネルギー工学専攻の協力を得て、ナノ工学集中講義を産研独自の大学院プログラムとして実施している。学生においては、約 200 名の学部生、大学院生が、1 つ屋根の下で研究、勉学に励んでいる。特徴的なのは、理学、工学、基礎工学、薬学、生命機能、情報科学など様々な分野の学生を受け入れていることであり、枠にとらわれない自由な発想・思考を養うと共に、研究の現場における大学院教育を重視している。また、RA を採用するとともに、ポストドクも年々増え、院生として研究に更に密着できる体制となっている。世界で活躍できる研究者育成のため、国際学会出席援助や著名外国人の招待セミナー、国際シンポジウムなどを通じて、院生教育の国際化を図り、一流の研究者を輩出している。今春、これらの教育貢献活動を一層推進するために、産業科学連携教育推進センターが設置された。

4) 社会との連携・社会貢献

平成 17 年に産学連携室を設置し、また新産業創造物質基盤センターも、産研、多元研に企業を加えたトライアングルプロジェクトとして産学連携に取り組んできた。産研協会は産研とは独立に設置された外部団体であるが、産研と協力し、産研テクノサロン、新産業創造研究会などの産学連携活動に取り組んできた。昨年、産研協会は改組し、事務所を大阪商工会議所から産研敷地内に移して産研との連携を深めるとともに、新たに事務局長を採用して体制を強化した。これを背景に、知財に関する啓発活動や、外部資金の管理団体といった新しい分野への活動拡大を図っている。産研では、産研協会とも連携し、新たに建設中のナノテクノロジー・インキュベーション棟の一角に企業リサーチパークを設け、企業の研究室の進出を促し、産研との共同研究によるオープンイノベーションを目指している。産研は今後も、大阪大学の産学連携の先導的役割を果たしていく。

5) 国際交流

当研究所にとって、国際交流は重要な活動の 1 つである。外国人研究者の受け入れに加え、外国研究機関と学術交流を結ぶことで、国境を越えた交流・情報交換を行っている。毎年 20 数名の外国人留学生を受入れるとともに、外国人研究者、外国人客員教授が産研の研究に携っており、国際交流パーティー等で留学生の声を直接反映できる場も設けている。また、平成 9 年度より当研究所主催で国際会議を開催している。産業科学ナノテクノロジーセンターには常時外国人研究者を招聘するため

の客員教授、准教授ポストを2つ用意しているほか、今春、国際共同研究センターを設置して系統的な外交人研究者との交流を図っている。このセンターは、通常のセンターとは異なり、学术交流協定を締結した相手先の研究室を連携研究ラボとして受け入れ、連携研究ラボの集合体としてセンターを構成する。現在、中国、韓国、英国から3つの連携ラボが設置されあるいは設置準備が進んでいるが、これは毎年増やす予定である。また、相手先にも、産研の連携ラボを設置し、相互的な研究交流とする新しい試みである。

6) 将来計画

22年度から始まる第2期中期計画を先取りする形で産研は改革を進めている。第2期中期計画発足と同時に、産研を拠点本部とする全国縦断型の「物質・デバイス領域ネットワーク型共同研究拠点」がスタートする。また、新たな産学連携の場であるナノテクノロジー・インキュベーション棟も同時に来春活動を開始する。まさに産研の新しい時代が来春始まるようとしている。それに向けた本体の改組は今春既に完了した。準備は整っている。まずは、ネットワーク型共同研究拠点を軌道に乗せること、企業リサーチパークという新しい産学連携の試みを成功させることが産研の未来の鍵を握っている。

産研の課題と展望

1) 組織・運営

- ・3大研究部門制の円滑な運営と学際融合型研究の推進。
- ・拡充強化されたナノテクノロジーセンターに6研究科から学内兼任研究室を受け入れて、阪大ナノサイエンス研究のコアとしての役割を果たせるようにする体制を作ること。外国人研究者によるグローバルコラボレーション研究部門をナノテクセンターに設置すること。
- ・総合解析センター、量子ビーム科学研究施設など、新たに再編設置された施設の運営を円滑にすること。
- ・ネットワーク型共同研究拠点の拠点本部、運営委員会、共同研究推進委員会を設置し、拠点運営に責任を持つ体制を整備するとともに、専任事務職員配置を実現して、事務体制を確立する。
- ・「ナノとマクロをつなぐ物質・デバイス・システム基盤技術戦略プロジェクト」を遂行できる体制を作る。
- ・産業科学連携教育推進センターを中心に、博士後期教育に貢献する「先端テクノサイエンス融合領域研究者育成のためのニューマイスター構想」実現を図る。
- ・若手研究者育成のための制度として、特別プロジェクト研究部門第2プロジェクト研究分野の准教授募集を毎年継続し、優秀な若手の研究を支援する。
- ・定年退職する教授で、研究意欲の旺盛な人材を活用するため、特別プロジェクト研究部門第3プロジェクト研究分野の特任教授として採用し、独立研究室を運営できるようにする熟年力活用プランを推進する。

2) 研究

- ・“尊敬される科学”と“役に立つ技術”それらを結ぶ新しい科学技術の創出。
- ・5大学附置研によるネットワーク型共同研究拠点による公募型共同研究の新たな展開。
- ・ネットワーク型共同研究拠点をベースにした附置研間連携研究の推進と新たな学際融合研究の推進。
「ナノとマクロをつなぐ物質・デバイス・システム基盤技術戦略プロジェクト」研究の推進。
- ・ナノテクノロジー・インキュベーション棟に設置される企業リサーチパークにおける新たなオープン

ンイノベーション型産学連携研究の創造。

- ・国際共同研究センターの連携研究ラボを通じた国際共同研究の新たな展開。

3) 教育

- ・アカデミックとプロフェSSIONALの育成

大学附置研究所としての使命は、該当分野において一流のアカデミックな研究者と、社会で貢献するプロフェSSIONALとしての研究者を育成することである。産研教員は、今後も所属する大学院研究科の指導教員として大学院教育に積極的に参加するとともに、産研教員が各分野の研究と異分野融合プロジェクトへの参画すると共に、全学に産研独自の副教育プログラムを提供することにより、学際融合型産業科学研究者の育成に貢献する。

- ・日本と世界をリードする研究者の育成

大学院生活は、学生にとって勉学に励む最後のチャンスとも言える。学生や若手研究者1人1人が責任感を持ち、研究生活を充実したものにできるよう、国内外より研究者を招いたセミナーとシンポジウムを開催し、グローバルな視野を広げるとともに、枠にとらわれない産研の研究環境を大いに生かし、一流の研究者だけでなく、社会で日本と世界をリードできる人材育成に努める。

- ・若手支援

20年度に若手支援のための特別プロジェクト研究部門を発足させ、研究所内の優秀な実績を挙げた助教を任期付きの准教授に登用し、研究室、研究費、スタッフを備えた独立研究室を運営させることにより研究の展開を支援する制度を開始した。

- ・産業科学連携教育推進センターを中心とした「ニューマイスター構想」の推進。

4) 社会との連携・社会貢献

- ・時代のニーズ予測と情報発信

産業・社会における産研の役割を明確にし、研究成果、取得特許、ナノテクノロジー関係の設備、総合解析センター等を、ホームページを通して公開し、全学のみならず産業界の利用に供している。

また、テクノサロンや研究会を通して、積極的に情報を発信するとともに、技術相談、技術移転を行い、更なる産学官連携の強化を図る。

- ・積極的な共同研究・受託研究

当研究所では、共同研究、受託研究の数は年々増加しており、これらにより、外部資金の獲得も増加している。今後も、研究の質の向上に取り組むことはもちろん、共同研究、受託研究を積極的に行い、研究成果を産業に還元する。

- ・小中高生へ向けて科学の魅力の伝播

科学の進歩が著しい一方、日本の高校生の理科離れと理工系学生の学力低下が指摘されていることを受け、高校生の研究所見学の受け入れや、小中学生を対象に「ものづくり教室」を開催し、科学に触れ合う機会を設けている。今後も、若者たちに科学の魅力を伝えられるよう努める。また、地域のものづくり教室にも参加し協力している。

- ・企業リサーチパークを特に中小企業に門戸を大きく開くことにより、地域の産業振興に貢献する。

5) 国際交流

- ・外国人研究者・留学生の受け入れ

当研究所では、海外から多くの研究者や留学生が研究に携っている。国籍を問わず、門戸を広げ、

産研のグローバル化を図る。

- ・ボーダレスな情報発信

国際会議を自ら主催するとともに、国際会議の組織委員、招待講演者、議長を務めるなど、積極的に産研をアピールし世界に情報を発信し、自由な意見交換により研究の可能性を広める。

- ・連携研究ラボを通じた実質的な研究双方向の研究交流を実現する。
- ・ナノテクノロジーセンターへの外国人研究分野の設置。

6) 総論

産業科学研究所は、時代の変化と社会的・経済的ニーズに応じた研究の推進と、長期的なビジョンの上に立った基礎研究を行う。設立当初より産業への貢献を目指した独創性の高い研究が行われてきたが、その伝統を受け継ぎながらも、「材料」「情報」「生体」の3領域においてナノテクノロジーとナノサイエンスという全く新しい視点を備え、時代の変化に対応し、研究成果を産業へ還元できる適応能力と、産研独自の研究を兼ね備えた魅力ある産研を目指し、トップレベルの研究所として時代をリードする役割を担っている。

現在、産研は多くの共同研究を行っているが、各分野の世界第一級の実績に基づくものであり、さらに、次世代の研究者教育に根ざした産研の特徴を生かしたものである。大阪大学の一員として、今後も大学院各研究科との密接な関係を維持するとともに、企業と手を結び、産研の研究成果を積極的に開放する。また、国境を越えて情報を発信し、世界の研究者と意見交換を行える環境づくりを促進するとともに、産研のグローバルスタンダードを目指す。

大学附置研究所として、研究成果の社会還元だけでなく、人材の社会還元も重要な役割である。大学院生活は、学生にとって勉学に励む最後のチャンスとも言える。学生1人1人が充実した大学院生活を送れるよう、人材育成に重きをおき、一流の研究者だけでなく、社会で日本と世界をリードできる一流の人材育成に努める。

とくに、ネットワーク型共同研究拠点の中核として、全国レベルの学際融合型研究を推進するとともに、企業リサーチパーク等の設置を通じて、新しい産学連携の道確立する。

今後も、多種多様なエキスパートが叡智を集結し、知行合一の精神で、“尊敬される科学”と“役に立つ技術”そして“それらを結ぶ 21 世紀の新しい科学技術”を創出できるよう、日々邁進する。それが、産業科学研究所である。

(広報委員)

委員長	(教授)	加藤修雄
委員	(教授)	松本和彦
	(教授)	八木康史
	(教授)	中谷和彦
	(教授)※	安蘇芳雄
	(教授)	小林光
	(准教授)	楊金峰
	(准教授)	白井光雲
	(准教授)	前橋兼三
	(准教授)	黒田俊一
	(准教授)	西毅
	(准教授)	金崎順一
	(准教授)※	谷口正輝
	(助教)※	開発邦宏
	(助教)※	笹嶋宗彦
	(計測・情報システム係長)※	相原千尋
	(総務課長)	津村和孝

※は、編集作業に当たった委員

[附1] 各研究部門の組織と活動

[附2] 各附属研究施設の組織と活動

[附3] 共通施設、技術室、事務部の組織と活動

(注) 各研究分野等の所属者については、平成20年度に在籍した者を全て収録した。

〔附 1〕 各研究部門の組織と活動

量子機能科学研究部門

概要

電子、光子が量子的な振る舞いを顕著に示す舞台を自在に作ることが出来ると、これまでは不可能であった高度な計算や情報処理を行う電子素子、光素子、スピン素子を作ることが可能となる。またこのような性質を織り込んだ材料設計を行うことにより、これまでになかった物性をもった材料を創製することが可能となる。量子機能科学研究部門では、表面物理、電子・光分光法、薄膜・結晶成長、半導体物理、計算物理などをベースとして、主として半導体を中心に、ナノメートルレベルの構造・新材料の設計と創製・評価に関する研究を行い、量子機能を利用した高性能素子や新しいセンサ・メモリ素子の実現を目指している。本研究部門は、「量子分子デバイス」、「光・電子材料」、「半導体量子科学」の実験系3研究分野と、「量子物性」の理論系1研究分野からなっている。

各研究分野が開発している特色ある研究領域・手法は、表面物理、特に半導体表面・界面の原子的および電子的構造、走査プローブ法を用いた表面ダイナミクス、ナノ加工プロセス、タンパク質結晶成長、分子線結晶成長法を中心とした化合物半導体系の材料合成、低次元量子構造の自己組織的形成、電子分光法・フォトルミネセンス法を中心技術とした評価、電気伝導などの電氣的評価、新物質物性予測と創製プロセス開発が可能な第一原理計算、量子シミュレーションなどである。

これらの研究手法を総合すると、半導体から有機超分子、生体分子の広範な材料を用いた多岐にわたる材料設計・合成、ナノ加工が可能なナノファクトリーを形成している。このナノファクトリーを駆使することにより、新物質の創製、高性能デバイス、量子デバイスの開発および超五感・生体指向センサ・メモリの開発に関する研究を推進している。具体的には、電子励起原子移動による半導体中不純物欠陥の制御と物理、ナノスケール磁性半導体によるスピンと電荷の制御と光磁気効果の物質設計、有機分子エレクトロニクス、高効率エネルギー変換材料、カーボンナノチューブの物性制御とそれを用いた単電子トランジスタの作製、量子ドット・細線の形成と評価、光子と電子波の量子相互作用等の量子物性、量子電子デバイス・量子光デバイス・スピントロニクスデバイスの基礎、バイオ・化学センサの開発などの研究を行っている。併せて、材料、情報、生体の学際的な研究テーマも推進している。

成果

- ・半導体結晶表面におけるナノ構造緩和ダイナミクスの解明
- ・シリコン微細構造の高温アニールによる形状制御
- ・タンパク質結晶成長のミクロスコピック過程の理解
- ・室温強磁性半導体の創製、評価と半導体スピントロニクスデバイス応用
- ・半導体-半金属混晶 TI 系新半導体の成長と温度安定波長半導体レーザ応用
- ・窒化物半導体ナノロッドの自己形成と電界放出電子源への応用
- ・シリコン局所領域への化合物半導体サブミクロン結晶成長と評価
- ・磁性金属による希薄磁性半導体へのスピン注入とナノ磁性評価
- ・カーボンナノチューブの成長制御と方向制御
- ・カーボンナノチューブの物性制御と量子デバイス応用
- ・カーボンナノチューブを用いた集積バイオセンサー応用
- ・第一原理計算による半導体や酸化物への遷移金属ドーピングによる新機能性材料やスピントロニクスのためのマテリアル・デバイスデザイン
- ・高効率エネルギー変換材料（太陽電池材料、熱電材料、燃料電池材料）のマテリアルデザイン
- ・電子励起原子移動過程の量子シミュレーション及び新物質創製プロセスデザイン
- ・有機分子エレクトロニクスのための金属-有機物界面の物性予測とマテリアルデザイン

量子分子デバイス研究分野

准教授	須藤 孝一
大学院学生	岡野 正和
学部学生	丸尾 和也
事務補佐員	平沢 清美

a) 概要

21世紀を迎え、より人にやさしく、かつ高度に情報化された社会の実現が期待され、これらを可能とするデバイスが要求されている。本研究分野では、このようなデバイスを実現するため、ミクロスケールからメソスコピックスケールにわたるマルチスケールでの物のかたちについての科学と、ナノスケールの物性について研究している。将来のデバイスでは、無機の半導体、金属、絶縁物に加えて、ソフトな有機分子、タンパク質分子などが組み合わせて使われると考えられ、これらの幅広い物質を対象として、表面自己組織化現象、ナノ構造の熱力学的安定性、ナノ構造物性などについて、実験と理論の両面から研究を行っている。具体的には、シリコンなどの半導体表面におけるナノ構造を制御するためのナノ構造ダイナミクスに関する研究、次世代LSI製造プロセスにとって重要な水素アニールによるシリコン微細構造の変形と形態制御に関する研究、原子間力顕微鏡(AFM)によるタンパク質の結晶成長に関する研究を行っている。

b) 成果

・半導体表面ナノ構造のダイナミクスに関する研究

走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて、 $\text{SrTiO}_3(001)$ 表面における2次元構造のコースニングのダイナミクスについて調べた。STMナノ加工法を利用して、様々な被覆率のホモエピタキシャル膜を形成し、構造緩和の様子をSTMでその場観察した。20年度の主な成果として、被覆率が0.5付近で起こる特異なコースニング過程を初めて明らかにした。

・表面拡散によるシリコン微細構造の変形に関する研究

表面拡散を利用した3次元微細構造形成技術の実現を目指し、シリコン微細構造の表面拡散による変形メカニズムについて調べた。 $\text{Si}(001)$ 表面に形成した高アスペクト比ホールを高温でアニールすると、開口部分が自発的に塞がり基板内部にボイドが形成される。アニール中のボイドの形態変化を詳細に調べ、ボイドの形態変化が表面拡散で起こっていることを明らかにした。さらに、2次元ホールパターンを加熱した場合に、パターンの寸法に依存した様々な変形過程を示し、silicon-on-nothing (SON)構造が形成されるための初期パターンの条件を明らかにした。

・極薄SOI基板表面における界面反応のメカニズム

極薄silicon-on-insulator (SOI)基板を真空中で加熱した時に起こる SiO_2 分解反応のメカニズムについて調べた。Si連続膜で覆われている領域では界面反応は進まないが、ディウエッティングによってSi島が形成された領域では界面反応が促進されることが明らかになった。断面TEM観察とAFM観察により、Si島と SiO_2 層の界面で起こる分解反応の過程を明らかにした。

・タンパク質結晶成長に関する研究

甘味タンパク質であるタウマチンをモデルタンパクとして、タンパク質結晶成長のメカニズムを、AFMによる実験とモンテカルロシミュレーションによって研究した。タウマチン正方晶の溶液成長のモンテカルロ・シミュレーションを実現し、光学顕微鏡およびAFMによる結晶成長の観察結果の再現に成功した。実験とシミュレーションの詳細な比較により、タウマチン分子間の相互作用と成長様式に

関する基礎的な知見を得た。

[原著論文]

Smoothing of an atomically rough vicinal surface - STM observation and MC simulation, T. Irisawa, K. Matsumoto, K. Sudoh, H. Iwasaki, and M. Uwaha: Surf. Sci., 602 (2008) 2880-2885.

STM fluorescence of porphyrin enhanced by a strong plasmonic field and its nanoscale confinement in an STM cavity, H. W. Liu, R. Nishitani, T. Z. Han, Y. Ie, Y. Aso, and H. Iwasaki: Phys. Rev. B, 79 (2009) 125415-1-6.

[国際会議]

Formation of Silicon on Nothing Structures by Hydrogen Annealing of the Hole Array on Si (100) (poster), R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu, K. Sudoh, and H. Iwasaki: 14th International Conference on Solid Films and Surfaces (2008 ICSFS), Dublin, Ireland, June 30- July 4, 2008.

Ostwald ripening of two-dimensional islands on SrTiO₃(001) (poster), M. Okano and K. Sudoh: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology (ISSS-5), Tokyo, Japan, Nov. 9-13, 2008.

Structural relaxation of voids in Si substrates by high temperature hydrogen annealing (poster), R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu, K. Sudoh, and H. Iwasaki: 2008 MRS Fall Meeting, Boston, Massachusetts, USA, Dec. 1 - 5, 2008.

[国内学会]

日本物理学会	3 件
応用物理学会	2 件
結晶成長学会	1 件

[奨学寄附金]

須藤 孝一	富士電機デバイステクノロジー (株)	500
-------	--------------------	-----

光・電子材料研究分野

教授	朝日 一
准教授	長谷川 繁彦
助教	江村 修一
博士研究員	Daivasigamani KRISHNAMURTHY
大学院学生	徐 鍾旭、丹保 浩行、Siti Nooraya MOHD TAWIL、金 江玫 亀岡 恒志、高橋 政寛、田中 裕輔、徳田 克彦、本多 裕也 垣見 梨菜、金 甫根、酒井 裕司、曾谷 基紀、谷 弘敦、 林 斉一、山野 彰生、劉 金強
学部学生	市原 寛也
研究生	樊 鵬翰
事務補佐員	渡邊 明子

a) 概要

21世紀に大きく展開する科学技術の一つは情報通信に関するものである。情報伝達・処理を担うものは光と電子であり、これにその働きを与える物質・材料である。当研究分野は光・電子さらにスピントロニクスに関連する材料として半導体を中心に研究している。材料研究の4段階すなわち材料設計、材料合成（結晶成長）／加工、材料評価（物性）、デバイス応用について、時期により重点の置きどころは異なるが、一つの流れとして研究を進めている。材料設計は、原子・分子の組み合わせを変えて必要な特性を得る研究を行っている。材料合成／加工は、原子・分子を適当な条件下で基板に入射させる分子線結晶成長法を中心として行っている。材料評価の研究は、電子線やX線、STM、XAFS、Raman 散乱等を用いた構造評価、光の吸収、反射、発光等の光学的評価や電気伝導等の電氣的評価、SQUID等の磁性評価などを中心に行っている。デバイス応用については、レーザ等の光デバイス、電界電子放射素子等の電子デバイス、さらにスピントロニクスデバイスの基礎となる研究を行っている。

b) 成果

・ GaN ベース希薄磁性半導体の結晶成長とスピントロニクスデバイス応用

半導体と磁性体という2つの性質を合わせ持つ希薄磁性半導体は新しい機能を発現できる材料として注目されている。当研究室では平成13年度に、世界に先駆けて GaN ベースの磁性半導体 GaCrN の成長に成功し室温発光強磁性を実現し、希土類原子添加 GaGdN においても室温強磁性を見出した。17年度には、GaCrN/AlN/GaCrN の3層構造デバイス構造においてトンネル磁気抵抗効果を観測した。その後300°Cの低温成長により、GaGdN の Gd 濃度12%を実現し磁化特性を大幅に増加させた。Si の同時添加により、磁化が更に増大することを明らかとした。GaGdN/GaN 超格子構造での磁化の増加現象も観測し、これらはキャリア誘起強磁性と理解された。平成20年度には、強磁性を示す GaGdN ナノロッド構造においてロッド径の制御成長が可能であることを見出した。更に、希土類原子添加 GaDyN において磁気円二色性(MCD)信号の増大ならびヒステリシスを観測し、真の強磁性半導体の特徴を確認した。

・ 半導体-半金属混晶タリウム系新半導体の結晶成長とデバイス応用

禁制帯幅が温度によって変化しない新半導体として TlInGaP, TlInGaAs を当研究室が提案し、結晶成長から始めて、物性評価、デバイス応用の研究を行っている。これまでに、TlInGaAs の禁制帯幅、屈折率が予想どおり温度安定化することを実験的に確認し、TlInGaAs/TlInP/InP SCH レーザを作製し、発振ピーク波長の温度変化が0.06 nm/K と小さいことを確認している。さらに、しきい値電流、発振波長共に温度安定なレーザ用材料として TlInGaAs(N)/(Al)GaAs ヘテロ構造を提案した。この提案に基づき、Tl

を含有するクラッド層、バリア層の導入、Nの添加により Tlの取り込み濃度がかなり向上することを見出した。平成20年度には、TlInGaAsN/GaAs/InGaP 多重量子井戸構造の層構造の最適化により、N無添加 TlInGaAs と同等の発光強度の得られる条件を明らかとした。さらに TlInGaAsN/TlInP/InP 系においても同様の結果を得た。これらの多重量子井戸構造での LED, LD 作製の基盤を明らかとした。

・窒化物半導体ナノロッドの成長と電界放出電子源への応用

III-V族窒化物半導体は、発光素子や高温素子への応用で注目を浴びている材料である。当研究室では、非晶質の石英ガラス基板あるいは金属基板上に多結晶GaNを成長し、その発光強度が非常に大きいことを示し、多様な応用を提案した。その後、金属基板上多結晶GaNから良好な電界電子放出特性を得て、電子放射源としての可能性を示した。これまでに、Si基板上にGaNナノロッドの形成を試み、しきい値電界 1.1 V/ μm 、電流密度 2.5mA/ cm^2 と極めて良好な電界電子放出特性を得ている。平成20年度は、GaNナノロッド形状の成長条件依存性を調べ、成長温度によりナノロッド径やその間隔を制御できることを明らかにした。電子放出源アレイ構造作製に向けて、SOI(Si/SiO₂/Si)基板を用いて 10 ミクロン角、1 ミクロン角のSi開口部を規則的に配列した2次元アレイ構造作製し、ナノロッドの成長を行った。エッジ効果のため、1 ミクロン角Si開口部内に形成したナノロッドの方がより良い電子放出特性を示すことを明らかにした。

・シリコン局所領域への化合物半導体サブミクロン結晶成長と評価

半導体デバイスの微細化が進み、10年後にはシリコン CMOS は限界を迎えると言われている。ポストシリコン素子材料のひとつに、移動度など電気的特性に優れている化合物半導体がある。シリコンプラットフォーム上に化合物半導体形成のブレイクスルーとして、シリコン局所領域に選択的にサブミクロン結晶を成長させることを提案している。これまでに、Si酸化膜をマスクとして用いることにより、Si局所領域にサブミクロンサイズのInP単結晶成長が可能なこと、成長条件を制御することにより、この単結晶粒を核として横方向成長させてミクロンサイズのInP結晶成長も可能なことを明らかにしてきた。平成20年度は、ナノインプリント法を用いて作製した直径 800nm および 400nm の Si 開口部に選択成長を行い、開口部毎に InP 単一核形成が可能であることを示した。

・磁性金属による希薄磁性半導体へのスピン注入とナノ磁性評価

磁性金属による希薄磁性半導体へのスピン注入現象は、半導体スピントロニクスデバイス形成上、また、スピン偏極走査型トンネル顕微鏡による希薄磁性半導体の磁性評価上、重要である。これまでに、GaN上にFeを成長させて、その結晶構造、成長様式、および磁気特性を調べてきた。室温で形成したFeナノドットは、蒸着量の増加に伴ってドット径が大きくなるとともに配向し始めること、この形状変化と同時に強磁性を示し始めることを明らかにしてきた。平成20年度は、無配向状態のナノドットと配向したナノドットに対してスピン偏極走査型トンネル顕微鏡による評価を行った。無配向状態のナノドットはスピンに依存した電流-電圧特性を示さないのに対して、強磁性を示す配向状態のナノドットからはスピンに依存した電流-電圧特性が得られ、マクロ領域での磁気特性と良い一致を得た。

・新機能物質の XAFS 評価

XAFSは従来の回折現象を利用した構造解析法ではなく、分光法を使つての新しい構造解析法である。分光を手段に用いる故、長距離秩序は必要なくアモルファスや微量元素などの配位環境をダイレクトに調べる手段としては、唯一である。その利点を利用して、新機能物質である GaCrN や GaGdN のキー微量元素である Cr や Gd の配位環境を評価した。これらは濃度が比較的低い場合は置換型で混入している事は既に明らかにしてきた。今年度は、GaCrN 中の Cr が四面体中心位置からシフトして歪みが発生していることを明らかとし、この歪みが GaCrN の強磁性発現に強く影響していると考察した。また、低温成長の GaCrN ナノロッドにおいても Cr は III 族サイトを置換していることを明らかとした。

[原著論文]

Low temperature molecular-beam epitaxy growth of cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, Y. Yamauchi, Y. K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: J. Cryst. Growth, 310 (2008) 40-46.

Large magnetization in high Gd concentration GaGdN and Si-doped GaGdN grown at low temperatures, Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: Appl. Phys. Lett., 92(6) (2008) 6062505-1 - 6062505-3.

Growth and characterization of InCrN and (In,Ga,Cr)N, S. Kimura, S. Emura, K. Tokuda, Y. Hiromura, S. Hayakawa, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5 (6) (2008) 1532-1535.

Molecular-beam epitaxy fabrication and analysis of GaN nanorods on patterned silicon-on-insulator substrate, J.U. Seo, S. Hasegawa, and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5(9) (2008) 3004-3007.

Selective growth of InP on localized areas of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy, K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5(9) (2008) 2766-2768.

Selective growth of InP on areas ($1\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$) of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy, K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: Proc. of the 20th Intern. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials, (2008) WeP12-1 - WeP12-4.

Studies on TlInGaAsN Double Quantum Well Structures, D. Krishnamurthy, M. Ishimaru, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa, Y. Hirotsu and H. Asahi: Proc. of the 20th Intern. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials, (2008) WeP10-1 - WeP10-4.

Electronic structure of Ga $_{1-x}$ Cr $_x$ N and Si-doping effects studied by photoemission and X-ray absorption spectroscopy, G. S. Song, M. Kobayashi, J. I. Hwang, T. Kataoka, M. Takizawa, A. Fujimori, T. Ohkouchi, Y. Takeda, T. Okane, Y. Saitoh, H. Yamagami, F.-H. Chang, L. Lee, H.-J. Lin, D. J. Huang, C. T. Chen, S. Kimura, M. Funakoshi, S. Hasegawa, and H. Asahi:, (2008) 033304-1 – 033304-4.

Local Structural Change in paramagnetic and Charge-Ordered Phase of Sn $_{0.2}$ Pr $_{0.3}$ Sr $_{0.5}$ MnO $_3$: an EXAFS Study, K.R. Priolkar, V. Kulkarni, P.R. Sarode, and S. Emura: J. Phys.: Condensed matter, 20 (2008) 335227 – 335231.

[解説、総説]

半導体ヘテロエピタキシーの現状と展望、朝日一、応用物理、77[5](2008) 489-499.

[著書]

真空と真空蒸着、朝日一、「薄膜ハンドブック」オーム社、(2008) 10-14.

[特許]

[国際会議]

TlInGaAsN Novel Semiconductors and Temperature-Stable Lasing Wavelength Laser Diodes (invited), H. Asahi, S. Hasegawa, A. Fujiwara and D. Krishnamurthy: 2008 SPIE Photonics West Conference.

Selective growth of InP on areas ($1\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$) of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy (poster), K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials,

Versailles, France,.

Studies on TlGaInNAs Double Quantum Well Structures (poster), D. Krishnamurthy, M. Ishimaru, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa, Y. Hirotsu and H. Asahi,: 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Versailles, France,.

Formation of aligned CrN nano-clusters in Cr-delta-doped GaN (poster), Y. K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo.

Crystal growth and characterization of GaCrN nanorods on Si substrate (poster), H. Tambo, S. Kimura, Y. Yamauchi, Y. Hiromura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: The 2nd International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Japan.

Effects of morphologies on field emission characteristics of GaN nanorods grown on Si by MBE (poster), J. U. Seo, S. Hasegawa, and H. Asahi: The 2nd International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Japan.

Orbital ordering on dilute Cr³⁺ ions doped in GaN (poster), S. Emura, S. Kimura, K. Tokuda, Yi-Kai Zhou, S. Hasegawa and H Asahi: 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil.

Third magnetic phase of GaGdN detected by SX-MCD (poster), M. Takahashi, Y. Hiromura, S. Emura, T. Nakamura Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H Asahi: 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil.

Structural properties of AlCrN, GaCrN and InCrN (poster), S. Kimura, K. Tokuda, Y. K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Vancouver, Canada.

MBE growth and characterization of TlGaInNAs double quantum well structures (poster), D. Krishnamurthy, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa and H. Asahi: 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Vancouver,Canada.

Annealing effect in GaDyN on optical and magnetic properties (poster), Y. K. Zhou, M. Takahashi, S. Emura, S. Hasegawa, H. Asahi: 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil.

Magnetic properties of GaGdN studied by SQUID and SX-MCD (poster), M. Takahashi, Y.K. Zhou, S. Emura, T. Nakamura, S. Hasegawa, and H Asahi: 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil.

Structural properties of AlCrN, GaCrN and InCrN (poster), K. Tokuda, S. Kimura, Y. K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: XXI International Union of Crsytallography, Osaka, Japan.

Crystal growth condition dependence of local structure around Gd in GaN nanorods (poster), S. Emura, H. Kameoka, H. Tambo, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: XXI International Union of Crsytallography, Osaka, Japan.

Growth and characterization of GaN nanorods towards the application to field emitters (invited), S. Hasegawa, J.U. Seo and H. Asahi: 14th Seoul International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications, Jeju Island, Korea.

SX-MCD and XAFS Analysis on GaGdN (poster), M. Takahashi, Y. Hiromura, S. Emura, T. Nakamura, Y.K. Zhou, S. Hasegawa, and H. Asahi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Gd concentration dependence of local structures around Gd atoms in GaGdN nanorod (poster), H. Kameoka, S. Emura, H. Tambo, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Growth and characterization of Fe nanostructures on GaN (poster), Y. Honda, M. Sotani, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Growth and characterization of transition-metal and rare-earth doped III-nitride based magnetic semiconductors for nano-spintronics (invited), H. Asahi, S. Hasegawa, S. Emura and Y.K. Zhou: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Influence of native silicon oxides on the growth of GaN nanorods on Si (001) (poster), S. Hasegawa, J. K. Seo, K. Uchida, H. Tambo, H. Kameoka, M. Ishimaru, and H. Asahi: International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN-2008), Montreux, Switzerland.

Degradation mechanisms of GaAs PHEMTs under operation in high humidity conditions (poster), T. Hisaka, H. Sasaki, Y. Nogami, K. Hosogi, N. Yoshida, J.A. del Alamo, S. Hasegawa and H. Asahi: Reliability of Compound Semiconductors (ROCS) Workshop, Monterey, California, USA.

Growth and characterization of Fe nanostructures on GaN (poster), Y. Honda, S. Hayakawa, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia, Matsue, Japan.

Ferromagnetism and Luminescence of Diluted Magnetic Semiconductors GaGdN and AlGdN (invited), S. Emura, M. Takahashi, H. Tambo, T. Nakamura, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: Materials Research Society Fall Meeting, Boston, MA, USA.

Field emission characteristics of GaN nanorods grown on Si by MBE (poster), S. Hasegawa, J. U. Seo and H. Asahi: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, Awaji, Hyogo, Japan.

Magnetic properties of GaCrN nanorods (poster), Y. K. Zhou, H. Tambo, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, Awaji, Hyogo, Japan.

[国際会議の組織委員、国際雑誌の編集委員]

- 朝日 ー 2008 International Conference on Solid State Devices and Materials (プログラム委員)
- 朝日 ー 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (国際運営委員)
- 朝日 ー 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy (国際諮問委員)
- 朝日 ー Second International Symposium on Growth of III-Nitrides (国際諮問委員)
- 朝日 ー 4th Vacuum and Surface Science Conference of Asia and Australia (プログラム委員)
- 朝日 ー International Conference on Functional Materials for Advanced Technology (国際組織委員)
- 朝日 ー 16th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (出版委員)
- 朝日 ー 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials (プログラム委員)
- 朝日 ー 21st International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (国際運営委員)
- 朝日 ー Journal of Crystal Growth (編集委員)
- 朝日 ー Current Applied Physics (Editorial Board 委員)

朝日 一	J. Materials Science: Materials in Electronics (Editorial Board 委員)
朝日 一	Journal of Ceramic Processing Research (編集委員)
朝日 一	Journal of Physics: Condensed Matter (Advisory Editorial Board 委員)
朝日 一	e-Journal of Surface Science and Nanotechnology (Advisory Board 委員)
長谷川繁彦	Second International Symposium on Growth of III-Nitrides (財務委員)
長谷川繁彦	22th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (広報・出版委員)
長谷川繁彦	14th International Conference on Modulated Semiconductor Structures (現地実行委員)

[国内学会]

応用物理学会	23 件
日本表面科学会	1 件
日本金属学会	1 件
電子材料シンポジウム	2 件
PASPS シンポジウム	3 件

[取得学位]

修士 (工学)

高橋 政寛 GaGdN/AlGaIn ヘテロナノ構造の形成、評価に関する研究

修士 (理学)

亀岡 恒志 Gd をドーピングした GaN ナノロッドの作製と評価

田中 裕輔 InP 上に MBE 成長した TlInGaAsN の構造及び光学評価

徳田 克彦 Cr ドープ III 族窒化物希薄磁性半導体の結晶成長とその物性

本多 裕也 GaN 上の Fe ドット形成とその I-V 特性

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

基盤研究 (B)

朝日 一 室温強磁性窒化物物半導体ナノ構造とナノスピントロニクスデバイス
応用に関する研究 2,300

特定領域研究

朝日 一 InN をベースとした長波長円偏光半導体レーザー創製に関する研究 3,900

(分担者として配分されたもの)

学術創成研究

朝日 一 希土類元素添加の精密制御による物性・機能性の開拓 (代表者：藤原康文) 28,000

半導体量子科学研究分野

教授	松本 和彦
准教授	井上 恒一、前橋 兼三
助教	大野 恭秀
大学院学生	長浜 英雄、山本 泰己、岩崎 晋、辻田 雄一、永曾 悟史、 辻 智輝、岸本 貴臣
学部学生	小野寺 秀利、山城 祐介
事務補佐員	栗尾 美早

a) 概要

電子・光子等が量子力学的効果により独特な振舞いをする極微細半導体構造（量子構造）は優れた性質を持つと期待される。そのために原子的尺度で量子構造を形成し、評価する技術を確認する。同時にコヒーレントな電子波の伝播、光子と電子波の量子相互作用等の量子物性にもとづく新しい概念の半導体素子の創出を目指した研究を行う。

カーボンナノチューブは一次元的な半導体となり、量子構造デバイスの作製に有望な物質である。カーボンナノチューブの特長を生かして、電界効果トランジスタや単一電子トランジスタを作成し、単一の分子、電子、およびスピンをセンシングする素子を開発する。現在、熱 CVD 成長法、ラマン分光法、原子間力顕微鏡、フォトルミネセンス法を中心技術として、カーボンナノチューブの基本特性制御、カーボンナノチューブデバイスの特性・プロセス制御、そしてカーボンナノチューブのセンサー応用の研究を進めている。

b) 成果

・レーザー照射 CVD により成長したカーボンナノチューブの共鳴顕微ラマン分光解析

Fe 系の触媒を塗布した基板に単一波長のレーザーを集光し、レーザー照射下でエチルアルコール蒸気を導入すると、カーボンナノチューブが成長する(LICVD)。その試料を、共鳴顕微ラマン分光で解析し、カーボンナノチューブのカイラリティ分布の研究を行った。カーボンナノチューブに特徴的な動径振動モードの信号強度の面内分布は LICVD レーザー照射スポットに対しドーナツ状の形状をしている。成長に用いたものと同じ波長のレーザー光に共鳴するカーボンナノチューブの分布と、LICVD 成長とは別の波長のレーザー光に共鳴するものの分布とに差があることがわかった。LICVD レーザー強度分布を考慮すると、この結果はレーザー照射 CVD においてレーザー光に共鳴する CNT の成長がある局所領域で促進されていることを示唆していると思われる。

・傾斜蒸着法による室温動作単正孔トランジスタの開発

電子線描画法等の高価な装置を用いずに短チャネルカーボンナノチューブ電界効果トランジスタ(CNT-FET)を作製した。傾斜蒸着法を用いて 20 nm 以下のナノギャップ構造を形成し、ソース・ドレイン構造を持つ CNT-FET を作製した。作製した試料は室温において明確なクーロン振動を示し、再現性・安定性も従来のものと比較して非常に優れていることが分かった。

・表面加工シリコン基板によるカーボンナノチューブの配向制御成長

酸化シリコン基板上に微細加工法により人工ステップ（四角柱のラインパターン）を形成し、その上にカーボンナノチューブを成長させると、カーボンナノチューブが人工ステップの上端に沿って成長することを発見した。さらに、理論解析により、カーボンナノチューブと基板間に働くカシミール力が、人工ステップの上端に強く集中することを見いだした。そしてこの効果によりカーボンナノチューブが

人工ステップの上端に引き寄せられて成長することを明らかにした。この発見により、カーボンナノチューブの成長方向を意図した方向に制御することが可能となる。

・カーボンナノチューブ電極を有するマイクロポンプ集積化多項目バイオセンサー

金属表面上に高密度のカーボンナノチューブを形成した CNT 電極と複数個の空気駆動型マイクロポンプを搭載した集積化多項目バイオセンサーの開発を行った。4種類の溶液を独自に送液することが出来るため、測定のための CNT 電極の化学修飾、溶液の導入、洗浄のすべての操作をチップ上で自動的に行うことが出来る。そのシステムを用いて、複数の腫瘍マーカーのワンチップ測定に成功した。

[原著論文]

Electrical characterization of carbon nanotube field-effect transistors with SiNx passivation films deposited by catalytic chemical vapor deposition, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, Koichi Inoue, Kazuhiko Matsumoto, Toshikazu Niki, and Hideki Matsumura: Appl. Phys. Lett., 92 (2008) 138111/1-3.

Carbon Nanotube Amperometric Chips with Pneumatic Micropumps, Yuichi Tsujita, Kenzo Maehashi, Kazuhiko Matsumoto, Miyuki Chikae, Soichiro Torai, Yuzuru Takamura, and Eiichi Tamiya: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (4) (2008) 2064-2067.

High-Performance Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Local Electrolyte Gates., Taiji Katsura, Yasuki Yamamoto, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, and Kazuhiko Matsumoto: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (4) (2008) 2060-2063.

Room-Temperature Coulomb Oscillations of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Oxidized Insulators, Yasuhide Ohno, Yoshihiro Asai, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, and Kazuhiko Matsumoto: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (4) (2008) 2056-2059.

Room-Temperature Carbon Nanotube Single-Electron Transistors Fabricated Using Defect-Induced Plasma Process, Shin Iwasaki, Masatoshi Maeda, Takafumi Kamimura, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, and Kazuhiko Matsumoto: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (4) (2008) 2036-2039.

Suppression of current fluctuations in carbon nanotube field-effect transistors by applying alternating current, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, and Kazuhiko Matsumoto: Proc. of the 2008 International Conference on Nanoscience and Nanotechnology, (2008) 67-70.

Carbon nanotube field-effect transistor biosensors with high signal-to-noise ratio using alternating current measurement, Yasuki Yamamoto, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi, and Kazuhiko Matsumoto: Proc. the IASTED International Conference on NANOTECHNOLOGY AND APPLICATIONS, 615-043 (2008) 21-26.

High-performance carbon nanotube field-effect transistors for high-sensitive bio sensors, Kenzo Maehashi, Kazuhiko Matsumoto: Proc. the IASTED International Conference on NANOTECHNOLOGY AND APPLICATIONS, 615-019 (2008) 1-5.

Controlling Direction of Growth of Carbon Nanotubes on Patterned SiO₂ Substrate, Takafumi Kamimura, Kazuhiko Matsumoto: Appl. Phys. Express, 2 (2009) 015005/1-3.

Transition between Particle Nature and Wave Nature in Single-Walled Carbon Nanotube Device, Takafumi Kamimura, Yasuhide Ohno, Kazuhiko Matsumoto: Jpn. J. Appl. Phys., 48 (2009) 015005/1-3.

Carbon Nanotube Fabry–Perot Device for Detection of Multiple Single Charge Transitions, Takafumi Kamimura, Yasuhide Ohno, Kazuhiko Matsumoto: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 48 (2009) 025001/1-4.

Room-temperature-operating carbon nanotube single-hole transistors with significantly small gate and tunnel capacitances, Yasuhide Ohno, Yoshihiro Asai, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, and Kazuhiko Matsumoto: *Appl. Phys. Lett.*, 94 (2009) 053112/1-3.

[国際会議]

High-Performance Carbon Nanotube Field-Effect Transistors Using Low-Energy Ion Implantation, *Kenzo Maehashi, Kohei Nishiguchi, Yasuhide Ohno, Koichi Inoue, Kazuhiro Yamamoto, and Kazuhiko Matsumoto: 66th Device Research Conference, Santa Barbara, USA, June, 23-25, 2008.

Convertible Transistor between Resonant Tunneling Transistor and Single Hole Transistor Using Single-Walled Carbon Nanotube., *Takafumi Kamimura, Yasuhide Ohno, and Kazuhiko Matsumoto: 66th Device Research Conference, Santa Barbara, USA, June, 23-25, 2008.

Transition from Carbon Nanotube Single-Hole Transistor Property to Resonant Tunneling Transistor Property by Controlling Thickness of Tunneling Barriers., *Takafumi Kamimura, Yasuhide Ohno, and Kazuhiko Matsumoto: TMS 50th Electronic Materials Conference, Santa Barbara, USA, June, 25-27, 2008.

High Sensitive Carbon Nanotube FET Biosensor with Micro Fluid System and AC Measurement System (poster), *Kazuhiko Matsumoto, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, and Yasuki Yamamoto: 9th International Conference on the Science and Application of Nanotubes, Montpellier, France, June 29 - July 4, 2008.

Low-Energy Oxygen Ion Irradiation Effects on Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Passivation Films., *S. Nagaso, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Inoue, K. Yamamoto, and K. Matsumoto: 2008 International Conference on Solid State Device and Materials Tsukuba, Japan, September 23 - 26, 2008.

Conversion Between Particle Nature and Wave Nature of Hole in Single-walled Carbon Nanotube Transistor by Gate Voltage, *T. Kamimura, Y. Ohno, and K. Matsumoto: 2008 International Conference on Solid State Device and Materials Tsukuba, Japan, September 23 - 26, 2008.

Room Temperature Operation of Carbon Nanotube Single-Hole Transistors Fabricated by Shadow Evaporation Methods, *Y. Ohno, Y. Asai, K. Maehashi, K. Inoue, and K. Matsumoto: 2008 International Conference on Solid State Device and Materials Tsukuba, Japan, September 23 - 26, 2008.

Carbon Nanotube Field-Effect Transistor Biosensors with High Signal-to-Noise Ratio Using Alternating Current Measurement, *Y. Yamamoto, Y. Ohno, K. Maehashi, and K. Matsumoto: 2008 The IASTED International Conference on Nanotechnology and Applications, Crete, Greece, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

High-Performance Carbon Nanotube Field-Effect Transistors for High-Sensitive Biosensors, *K. Maehashi, and K. Matsumoto: 2008 The IASTED International Conference on Nanotechnology and Applications, Crete, Greece, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Irradiation Effect of IR Laser on Carbon Nanotubes. (poster), *T. Tsuji, K. Inoue, Y. Ohno, K. Maehashi, and K. Matsumoto: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Carbon Nanotube Amperometric Multi-ImmunoSensors with Pneumatic Micropumps (poster), *Y. Tsujita, K. Maehashi, K. Matsumoto, M. Chikae, Y. Takamura, and E. Tamiya: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Evaluation of Ion Irradiation Effects on CNT-FETs with Passivation Films (poster), *S. Nagaso, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Inoue, K. Yamamoto, and K. Matsumoto: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Fabrication of CNT-FETs on Sapphire Substrate (poster), *T. Kishimoto, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Inoue, and K. Matsumoto: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Fabrication of the Catalyst Nanoparticle Arrays for Carbon Nanotube Growth (poster), *S. Iwasaki, Y. Ohno, K. Maehashi, and K. Matsumoto: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sept. 29 - Oct. 1, 2008.

Transition Between Particle Nature and Wave Nature of Hole in Single-Walled Carbon Nanotube Transistor by Gate Voltage, *Kazuhiko Matsumoto: AVS 55th International Symposium & Exhibition, Boston, USA, October 19 - 24, 2008.

Noise Reduction of Carbon Nanotube Field-effect Transistor Biosensors using Alternating Current Measurement, *Y. Yamamoto, Y. Ohno, K. Maehashi, and K. Matsumoto: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, October 27 - 30, 2008.

Microfluidic and Label-free ImmunoSensors based on Carbon Nanotube Microelectrodes, *Y. Tsujita, K. Maehashi, K. Matsumoto, M. Chikae, Y. Takamura, and E. Tamiya: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, October 27 - 30, 2008.

Carbon Nanotube Quantum Nanodevice., *K. Matsumoto, Y. Ohno and T. Kamimura: 13th Advanced Heterostructures and Nanostructures Workshop Hawaii, USA, December 7-12, 2008.

Carbon Nanotube Quantum Devices & Bio Sensor Application (invited), *K. Matsumoto: International Meeting on Frontiers of Physics 2009 Malaysia, January 12-16, 2009.

Carbon Nanotube Quantum Nanodevices & Bio Sensor Applications (plenary), *K. Matsumoto, T. Kamimura, K. Maehashi, and Y. Ohno: The 2nd International Symposium on Global COE Program of Center for Next-Generation Information Technology Based on Knowledge Discovery and Knowledge Federation, Hokkaido, Japan, January 20-21, 2009.

Aligned Single-Walled Carbon Nanotubes on Patterned SiO₂/Si Substrates (poster), *T. Kishimoto, S. Iwasaki, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Inoue, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Vertically-Aligned Carbon Nanotube Arrayed Electrodes for Amperometric biosensors (poster), *H. Onodera, Y. Tsujita, K. Maehashi, Y. Ohno, K. Inoue, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Chirality Selection of Single-Walled Carbon Nanotubes by the irradiation of IR Laser (poster), *T. Tsuji, K. Inoue,

Y. Ohno, K. Maehashi, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Multiplexed Immunosensors Based on Carbon Nanotube-Arrayed Microelectrodes and Pneumatic Micropumps (poster), *Y. Tsujita, K. Maehashi, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Detection of Negatively Charged Protein Using n-type Carbon Nanotube Field-Effect Transistors (poster), *Y. Yamamoto, K. Maehashi, Y. Ohno, K. Inoue, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Coulomb Oscillations in Graphene Quantum Dots (poster), *Y. Yamashiro, K. Maehashi, Y. Ohno, K. Inoue, and K. Matsumoto: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Total Integrated Immune Assay System Employing Simple and Accurate Check Valve-Pump Flow Control with Non-label High Sensitive Electrochemical Detection for Clinical Diagnosis (poster), *Yuzuru Takamura, Soichiro Torai, Miyuki Chikae, Yuichi Tsujita, Kenzo Maehashi, Kazuhiko Matsumoto and Eiichi Tamiya: he 12th Int. Conf. on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (2008) Oct. 12 - 16, San Diego, USA.

[国内学会]

応用物理学会

11 件

[取得学位]

修士 (工学)

岩崎 晋

表面加工シリコン基板によるカーボンナノチューブの配向制御成長

辻田 雄一

カーボンナノチューブ電極を用いたマイクロポンプ集積化多項目バイオセンサー

永曾 悟史

カーボンナノチューブチャンネルナノメモリデバイスの研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

特定領域研究

松本 和彦

カーボンナノチューブバイオセンサー

33,800

基盤研究 (C)

前橋 兼三

カーボンナノチューブ多項目高感度バイオセンサーアレイの開発

1,300

[その他の競争的研究資金]

松本 和彦

科学技術振興機構

量子界面制御による量子ナノデバ

7,000

受託研究 CREST 戦略的創造研究推進事業)
イスの実現

量子物性研究分野

教授（兼任）	吉田 博
准教授	森川 良忠
特任研究員	柳瀬 章
招へい教授	本河 光博
博士研究員	Dinh Van An、濱田 幾太郎、柳澤 将
大学院学生	林田 英樹、豊田 健治、出倉 春彦、原田 邦彦、石定 惇、魚住 昭文、 實宝 秀幸、藤井 将、富永 隆介、中江 伸也、森村 英幸
事務補佐員	浅田 美香、伊藤 僚子

a) 概要

量子物性研究分野は、物質や材料の物性を理論的手法により解明すると共に、必要とする機能を持つ物質材料の創出やそれらの創製プロセスを理論的に予測する物質設計を目指した研究をおこなっている。理論的手法として、物質の本質を抽出したモデルによる解析に加えて、最近のコンピュータの計算能力の飛躍的進歩を反映した計算物理的また計算化学的手法を用いた物質、材料の量子シミュレーションに立脚した物性予測の研究をおこなっている。さらに、応用上必要とされる物性を持つ物質材料について経験的パラメータを用いずに、原子番号だけを入力パラメータにして第一原理からの物性予測を可能にする理論的アプローチの開発もおこなっている。

b) 成果

・白金電極界面における水の構造と吸着水素原子の影響

本研究では密度汎関数法を用い、白金電極界面における水の構造と、吸着水素原子の影響について研究を行った。白金電極界面での反応は燃料電池をはじめとする電気化学反応において重要であるが、密度汎関数法による一般化密度勾配近似(DFT-GGA)の範囲では吸着エネルギーが正しく見積もることができないことが指摘されていた。長距離ファンデルワールス相互作用を取り入れた汎関数を用いることにより、界面での構造やエネルギーの記述が大幅に改善されることが明らかとなった。また、界面に吸着する水素は水と反発的な相互作用をして、電極表面を疎水的な表面にすることが明らかとなった。これらの知見は今後電極反応を研究していく上で重要な基盤となる。

・有機/金属界面の電子構造

有機デバイスの効率を大きく左右する界面での構造と電子状態について研究を進めている。本年は、芳香族炭化水素の典型であるベンゼン、および、有機 FET で代表的な材料であるペンタセン分子と貴金属電極表面との相互作用について重点的に研究を行った。まず、ベンゼンが吸着した金属表面の仕事関数変化を分子-基板間距離の関数として調べたところ、金、銀、銅表面上でかなり近い振る舞いをした。すなわち、仕事関数変化は基板金属の仕事関数によらず、分子-基板間距離にのみ依存する。これは、Schottky 極限を示している。一方、実験的には、界面の電気二重層は基板金属の仕事関数に依存することが報告されている。このことより、基板金属依存性は、主として、分子-基板間距離の違いによって生じることが明らかとなった。ペンタセン分子の場合は、ベンゼンに比較して HOMO-LUMO ギャップが小さく、基板金属の電子状態との混成が起りやすい。そのため、分子-基板間距離が大きい領域で Schottky 極限、分子-基板間の距離が 0.3nm より近くなると界面電気二重層の大きさが基板金属の仕事関数にほぼ比例した Bardeen 極限となることが示された。さらに、実験的には界面 S パラメータが 0.5 付近であることから、分子-基板間距離の違いによる影響も大きいことが明らかとなった。今後、界面電子準位接続を設計する上で、分子-金属基板間距離を制御することが重要な点であることが示唆される。

・分子スケールエレクトロニクスにおける電極表面上での分子スイッチの機構解明

分子スイッチの機構解明の研究をさらに進め、表面での電場が吸着有機分子の構造と電子状態に及ぼす影響を詳しく調べた。特に、oligo-phenylene-ethynylene(OPE)分子への置換基構造の違いによる影響の違いを詳しく調べた。その結果、置換基によって分子の持つ電気双極子を変化させることにより、スイッチングを起こすバイアスが系統的に変化されることが示され、実験的な結果をよく再現することができた。さらに、スイッチングのバイアスに対する分子の分極効果が大きいことがわかり、分極率を変化させることによっても制御できることが示唆された。

・インテリジェント触媒の自己再生機構の解明とデザイン

ペロブスカイト型酸化物に担持されたPd触媒の自己再生機構を解明するため、第一原理電子状態計算と熱力学・統計力学を組み合わせた手法を用いて、Pd, Rh, Pt貴金属に加えて、Fe, Cu触媒金属としての可能性を検討した。また、母体酸化物としては、LaFeO₃, CaTiO₃ペロブスカイト酸化物に加えてCaZrO₃, SrCoO₃, SrZrO₃, LaAlO₃, LaCrO₃, LaMnO₃への固溶析出状態の安定性について、外部雰囲気ガス依存性を調べた。Pdに関して、LaFeO₃へ、LaMnO₃, SrZrO₃等が有望な担体酸化物として示された。Rhに関してはSrCoO₃, LaAlO₃等が有望な酸化物である。Ptに関してもLaFeO₃, LaMnO₃, CaZrO₃, SrCoO₃等が上げられる。以上のように、第一原理電子状態計算により、触媒構造の雰囲気ガス依存性が半定量的に再現できることが明らかとなった。さらに、有望な担持酸化物についても候補となる酸化物を示すことが可能となった。

・SiC 表面のエッチング過程と表面安定性の研究

SiC(0001)表面について、水素終端、OH 終端、F 終端の場合で fcc スタッキングと hcp スタッキングの安定性が大きく異なることが第一原理分子動力学法により示された。これは、エッチング過程に見られるテラス構造の安定性を説明するとともに、結晶成長時に終端原子を選択的に使用することにより、成長する結晶構造を制御することが可能であることを示唆するものである。

・希薄磁性半導体中への格子間不純物同時ドーピング法のデザイン

希薄磁性半導体はその溶解度ギャップのために熱平衡状態では相分離を起こすため結晶成長にはMBE等の非平衡結晶成長法が採用される。ワイドギャップ半導体を母体とする希薄磁性半導体ではスピノダル分解を起こす傾向が特に強く、高い T_C を実現するために必要な濃度まで磁性イオンを母体半導体に均一に添加することは非常に難しい。今までに、希薄磁性半導体におけるスピノダル分解を抑制し、高濃度の遷移金属不純物添加により高いキュリー温度を実現する方法として、ドナー不純物の同時ドーピング法のデザインについて提案を行ってきた。例えば、GaMnAsやGaMnNの作成時にOまたはSi等のドナー不純物を同時添加することで、混合エネルギー ΔE を調整できることを示し、スピノダル分解の抑制と均一な固溶の可能性を第一原理から示した。しかし、同時添加したドーパントが、磁性イオンが誘起したホール状態を補償してしまうため磁性イオンを高濃度にドーピングしたにもかかわらず、 T_C が逆に低下してしまうという問題点があった。

本年度はこの問題点を解決するため、格子間不純物を用いた同時ドーピング法をデザインした。KKR-CPA 計算パッケージMACHIKANNEYAMA2002 コードを用いて混合エネルギーを計算した結果、格子間不純物としてLi,Be,B,Na,Mg,K,Ca,Cu,Agなどを同時添加すると混合エネルギーが下がることがしめされ、同時ドーピングによりMnの溶解度を上げ高濃度の(Ga,Mn)Asを作製出来るようになる。

しかし、格子間不純物もやはり T_C を下げてしまうので、格子間不純物の磁性半導体中での拡散をモンテカルロ法によりシミュレートし、結晶成長後のアニーリングでそれらを取り除くプロセスデザインが必要である。まず、シミュレーションに必要なパラメータとして、拡散の活性化エネルギー、MnとLiとの間の束縛エネルギーを、ノルム保存・ウルトラソフト擬ポテンシャル、平面波基底を用いた第一原理計算法(STATE-SENRI)によって見積もり、これらのパラメータを使い、動的モンテカルロシミュレーションおよび簡単なモデル計算からLiの(Ga, Mn)As中での拡散係数を計算した。

Liの場合は、Mnとの引力がそれほど大きくなく、現実的な温度 ((Ga,Mn)As中でMnAsが析出する温度 580°C以下) とアニーリング時間で薄膜表面まで拡散できることが示された。この結果から、GaAsにMnとLiを同時添加することで、Mnの溶解度を増大させ、さらに結晶成長後のアニーリングで T_c を上昇させることができるというマテリアルデザインが得られた。

・ MgO ベースの遷移金属を含まない強磁性体のデザイン

半導体スピントロニクスデバイスのためのスピン偏極源として、室温でも高いスピン偏極度を保つハーフメタリック物質が必要とされている。また、近年では大きなバンドギャップを持った酸化物等で格子欠陥や典型元素不純物が誘起する強磁性が理論計算や実験により示唆され、その真偽に興味を持たれ検証が行われている。我々は酸化物ベースのハーフメタリック材料として、磁性元素 Ni, Co を添加した MgO や、N を添加した MgO, CaO, SrO, BaO のように磁性元素を含まない強磁性体のデザインを第一原理計算とモンテカルロシミュレーションを用いそれらの系の電子状態とキュリー温度を評価した。

KKR-CPA法(MACHIKANEYAMA2002)を用いて電子状態と磁性原子間の交換相互作用を計算した。キュリー温度はモンテカルロシミュレーション(MCS)により評価した。窒素ドーピングMgO, CaO, SrO, BaOは磁性金属を含まないにもかかわらず強磁性状態が安定となる。このとき、スピン偏極の大部分はN原子が担っている。ハーフメタリックな状態密度を示し、スピン偏極源材料として有望な材料であると期待されるが、高い T_c のためには高濃度添加が必要であり、そのための同時ドーピング法的设计やスピノダル分解の制御が重要である。

・ IV 族半導体ベース希薄磁性半導体のマテリアルデザイン

これまで特によく調べられている希薄磁性半導体材料は III-V 族や II-VI 族化合物半導体を母体とするものであるが、既存の半導体エレクトロニクスとの整合性とその環境調和性の良さから IV 族半導体ベースのスピントロニクス材料の開発は非常に重要になると考えられる。Si, Ge ベース環境調和磁性半導体として Fe, Mn を添加した Si, Ge の磁性を KKR-CPA(MACHIKANEYAMA2002)を用いて系統的に調べた。その結果 Mn 添加 Ge で、Mn は最近接配置を避け Ge 中にドーピングされることがわかり、そのとき強磁性が安定となることが示された。また、Ge 中で Mn 間には引力的な原子対相互作用が働いていることが計算で示され、最近 Mn 添加 Ge において観測されたナノコラムの自己形成と矛盾しない結果を得た。

[原著論文]

Computational nano-materials design for the wide band-gap and high- T_c semiconductor spintronics, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki and V. A. Dinh: Semiconductors and Semimetals, 82 (2008) 433-454.

Computational nano-materials design for II-VI compound semiconductor-based spintronics, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, V. A. Dinh and P. H. Dederichs: J. Korean Phys. Soc., 53 (2008) 1-12.

Theoretical study of vacuum level shift at the C_6H_6 /Al(111) interface, Y. Nakano, S. Yanagisawa, I. Hamada, and Y. Morikawa: Surf. Interface Anal., 40 (2008) 1059-1062.

Role of molecular orbitals near the Fermi level in the excitation of vibrational modes of a single molecule at the STM junction, M. Ohara, Y. Kim, S. Yanagisawa, Y. Morikawa, and M. Kawai: Phys. Rev. Lett., 100 (2008) 136104-1-4.

Electric field effect on the adsorption state of methylthiolate on Au(111), A. Nagoya, I. Hamada, and Y. Morikawa: e-J. Surf. Sci. and Nanotechnology, 6 (2008) 99-102.

Direct Observation of Hydrogen-Bond Exchange within a Single Water Dimer, T. Kumagai, M. Kaizu, S. Hatta, H. Okuyama, T. Aruga, I. Hamada, and Y. Morikawa: Phys. Rev. Lett., 100 (2008) 166101-1-4.

First-principles theoretical study of Alq₃/Al interfaces: Origin of the interfacial dipole, S. Yanagisawa, K.H. Lee, and Y. Morikawa: J. Chem. Phys., 128 (2008) 244704-1-13.

Density-functional analysis of hydrogen on Pt(111): electric field, solvent and coverage effects, I. Hamada and Y. Morikawa: J. Phys. Chem. C, 112 (2008) 10889-10898.

Density-functional analysis of hydrogen on Pt(111): electric field, solvent and coverage effects: Erratum, I. Hamada and Y. Morikawa: J. Phys. Chem. C, 112 (2008) 17486-17486.

Structure of the water-platinum interface – a first principles simulation under bias potential –, M. Otani, I. Hamada, O. Sugino, Y. Morikawa, Y. Okamoto, and T. Ikeshoji: Phys. Chem. Chem. Phys., 10 (2008) 3609-3612.

The local electronic properties and formation process of titanium silicide nanostructures on Si(001)-(2x1), M. Tonomaru, T. Iida, K. Sato, S. Ohno, K. Shudo, Y. Morikawa, and M. Tanaka: J. Phys.: Condens. Matter, 20 (2008) 485006-1-7.

Water Monomer and Dimer on Cu(110) Studied Using a Scanning Tunneling Microscope, T. Kumagai, M. Kaizu, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, I. Hamada, and Y. Morikawa: e-J Surf. Sci. Nanotech., 6 (2008) 296-300.

Theoretical investigation of the electronic structure of the Alq₃/Mg interface, S. Yanagisawa and Y. Morikawa: J. Phys.: Condens. Matter, 21 (2009) 064247-1-6.

Tunneling dynamics of a hydroxyl group adsorbed on Cu(110), T. Kumagai, M. Kaizu, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, I. Hamada, and Y. Morikawa: Phys. Rev. B, 79 (2009) 035423-1-6.

[解説、総説]

第一原理電子状態計算による赤外吸収分光, および, 高分解能電子エネルギー損失分光 (HREELS) の評価, 森川良忠、表面科学、 29 [3] (2008)202-205.

第一原理電子状態計算による内殻準位シフトの解析、森川良忠、表面科学、 29 [6](2008) 382-384.

界面の第一原理分子動力学シミュレーション、濱田幾太郎、森川良忠、アンサンブル、 10 [4] (2008) 7-10.

[国際会議]

First-Principles study on Electronic Structure of Co-doped TiO₂ (rutile) within Self-Interaction- Corrected LDA (poster), *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

A theoretical study of codoping with Li interstitials in Mn-doped GaAs (poster), *Lars Bergqvist, Kazunori Sato, Peter Heinz Dederichs and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-doping method (poster), *T. Fukushima, K. Sato and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

First principle study on the half-metallic ferromagnetism in half-Heusler alloys XMnSi (poster), *Van An Dinh, Kazunori Sato, and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, June 4, 2008, Tokyo, Japan.

Design of Dilute Magnetic Semiconductors with room Temperature Ferromagnetism by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K.Sato, T. Fukushima, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

First Principle Prediction of Half-Metallicity and Ferromagnetism above room Temperature in Half-Heusler Alloys (poster), *V.A. Dinh, K.Sato, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-Doping Method (poster), *T. Fukushima, K. Sato, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

Design of High Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Codoping Method (poster), *T.Fukushima, K.Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Design of Dilute Magnetic Semiconductors by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K.Sato, T.Fukushima and H.Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

First Principle Study of Spinodal Decomposition Thermodynamics in Half-Heusler Alloys (poster), *V. A. Dinh, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Ab-initio Electronic Structure Calculations of (Ti,Co)O Within Self-interaction-corrected LDA (poster), *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Computational Nano-materials Design for Semiconductor Nano-Spintronics (invited), *H.Katayama-Yoshida: Joint European Magnetic Symposia, Sep 19, 2008, Trinity College Dublin, Ireland.

First-Principles Calculations of Electronic Structure on (Ti,Co)O within Self-Interaction-Corrected LDA, *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato H. Katayama-Yoshida: 2nd International Symposium on Transparent Conductive

Oxides, Oct 22, 2008, Crete. Greece.

Density functional theoretical study of hydrogen on Pt(111) in an electrochemical environment", *I. Hamada, Y. Morikawa: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

First-Principles study on Electronic Structure of Co-doped TiO₂ (rutile) within Self-Interaction- Corrected LDA (poster), *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

A theoretical study of codoping with Li interstitials in Mn-doped GaAs. (poster), *Lars Bergqvist, Kazunori Sato, Peter Heinz Dederichs and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-doping method (poster), *T. Fukushima, K. Sato and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

A new structure of Cu complex in S (poster), *H. Yamaguchi, K. Shirai, A. Yanase, and H. K. Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

First-principles theoretical study of Alq₃ on Al and Mg surfaces (poster), *S. Yanagisawa, K. Lee, and Y. Morikawa: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

First principle study on the half-metallic ferromagnetism in half-Heusler alloys XMnSi (poster), *Van An Dinh, Kazunori Sato, and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, May 31 - June 3, 2008 National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), Tokyo.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience June 3-7. 2008, Tokyo, Japan.

Density functional theoretical study of hydrogen on Pt(111) in an electrochemical environment (poster), *I. Hamada, Y. Morikawa: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience June 3-7. 2008, Tokyo, Japan.

Electric Field Effect on the Atomic Geometries and Electronic Structures of Adsorbed Molecules on Metal Surfaces (poster), *Y. Morikawa, H. Jippou, A. Nagoya, I. Hamada: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience June 3-7. 2008, Tokyo, Japan.

First-principles theoretical study of Alq₃/Al interfaces: Origin of the interfacial dipole (poster), *S. Yanagisawa, K. Lee, Y. Morikawa: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience June 3-7. 2008, Tokyo, Japan.

Electric Field Effect on the Atomic Geometries and Electronic Structures of Adsorbed Molecules on Metal Surfaces (poster), *Y. Morikawa, H. Jippou, A. Nagoya, I. Hamada: The 4th edition of the international workshop on "Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces" (ESPMI IV), June 10-12. 2008, Princeton University, USA .

Design of Dilute Magnetic Semiconductors with room Temperature Ferromagnetism by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, and H.K.-Yoshida: International Conference on the Physics of Semiconductors 2008, July27-Aug1. 2008, Riocentro, Brazil.

First Principle Prediction of Half-Metallicity and Ferromagnetism above room Temperature in Half-Heusler Alloys (poster), *D.V.An, K. Sato, and H.K.-Yoshida: International Conference on the Physics of Semiconductors 2008, July27-Aug1. 2008, Riocentro, Brazil.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-Doping Method (poster), *T. Fukushima, K. Sato, and H.K.-Yoshida: International Conference on the Physics of Semiconductors 2008, July27-Aug1. 2008, Riocentro, Brazil.

An Investigation of Material Design for Gettering (poster), *K. Matsukawa, K. Shirai, and H.K.-Yoshida: International Conference on the Physics of Semiconductors 2008, July27-Aug1. 2008, Riocentro, Brazil.

Design of High Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Codoping Method (poster), *T. Fukushima, K. Sato, and H.K.-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug3-6.2008, Bourbon Cataratas Resort & Convention Center, Brazil.

Design of Dilute Magnetic Semiconductors by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug3-6.2008, Bourbon Cataratas Resort & Convention Center, Brazil.

First Principle Study of Spinodal Decomposition Thermodynamics in Half-heusler Alloys (poster), *D.V.An K, Sato, and H.Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug3-6.2008, Bourbon Cataratas Resort & Convention Center, Brazil.

Ab-initio Electronic Structure Calculations of (Ti,Co)O Within Self-interaction-corrected LDA (poster), *H.Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug3-6. 2008, Bourbon Cataratas Resort & Convention Center, Brazil.

First-principles molecular dynamics simulation of H adsorption at the water/Pt(111) interface (invited), *Y. Morikawa, I. Hamada, T. Ikeshoji, Y. Okamoto, M. Otani, and O. Sugino: 59th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Sep7-12. 2008, School of Engineering, Spain.

Density-functional theoretical study of hydrogen on Pt(111) in an electrochemical environment (poster), *I. Hamada, Y. Morikawa: 59th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Sep7-12. 2008, School of Engineering, Spain.

Computational Nano-materials Design for Semiconductor Nano-Spintronics (invited), *H.K-Yoshida: Joint European Magnetic Symposia, Sep14-19.2008, Trinity College Dublin, Ireland.

An Investigation of Material Design for Getting (poster), *K. Matsukawa, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: Pacific Rim Meeting 2008, Oct12-17. 2008, Honolulu, Hawaii.

First-Principles Calculations of Electronic Structure on(Ti,Co)O within Self-Interaction-Corrected LDA, *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida: 2nd International Symposium on Transparent Conductive Oxides, Oct22-25.2008, Crete. Greece.

Density-functional theory study of hydrogen at the water/Pt(111) interface (poster), *I.Hamada, Y.Morikawa: The 12th SANKEN International Symposium,Jan.22. 2009, Univ. Osaka, Japan.

Co-doing of interstitial impurities in dilute magnetic semiconductors (poster), *K. Sato, H. Fujii, H. Katayama-Yoshida: The 12th SANKEN International Symposium,Jan.22.2009, Univ. Osaka,Japan.

Theoretical investigation of the electronic structure of the Alq₃/metal interfaces (poster), *S. Yanagisawa, K. Lee, Y. Morikawa: The 12th SANKEN International Symposium, Jan.22.2009, Univ. Osaka,Japan.

First-principles molecular dynamics simulations of chemical reactions at electrode surfaces (invited), *Y.Morikawa: Supercomputing in Solid State Physics 2009, ISSP Tokyo, Japan, 16-19 Feb. 2009.

Theoretical investigation of the electronic structure of the Alq₃/metal interfaces (poster), *S. Yanagisawa, K.Lee, Y.Morikawa: The International Symposium "Simulations and Dynamics for Nanoscale and Biological Systems" March4-6,2009 Univ. of Tokyo, Japan.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

森川 良忠 International Conference on Quantum Simulators and Design 2008(QSD2008), National Museum of Emerging Science and Innovation (Miraikan), (Tokyo), 31 May-3 Jun. 2008. (組織委員)

森川 良忠 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium: Nano-Advanced Materials and Devices, ~from Nano-fabrication to Nano-application~, Icho-Kaikan, Osaka University, Suita, (Osaka), 29 Sep.-1 Oct. 2008. (組織委員)

[国内学会]

日本物理学会	21 件
応用物理学会	4 件
表面・界面スペクトロ スコピー	4 件
その他	6 件

[取得学位]

修士 (工学)
魚住 昭文 第一原理熱力学計算によるインテリジェント触媒の自己再生機構の解明
實宝 秀明 有機分子／金属界面の構造及び電子状態に関する第一原理計算

石定 惇	シリコン中の単一原子空孔がもたらす弾性的性質への影響の理論的考察
原田 邦彦	第一原理計算による環境調和性スピントロニクスのマテリアルデザイン
修士 (理学)	
藤井 将	同時ドーピングによる高温強磁性半導体のマテリアルデザイン

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
特定領域研究		
森川 良忠	超並列大規模量子ダイナミクスシミュレータの開発・応用	12,700
森川 良忠	サブミクロンサイズ量子シミュレータの開発・公開	2,300
(分担者として配分されたもの)		
特定領域研究		
森川 良忠	ナノリンク分子の理論	2,900
森川 良忠	新型多機能ナノチューブデバイスのデザイン	397

[受託研究]

森川 良忠	科学技術振興機構 元素戦略プロジェクト	脱貴金属を目指すナノ粒子自己形成触媒の新規発掘 (ナノ粒子自己形成触媒の解明と脱貴金属触媒のデザインの理論的研究)	8,104
-------	------------------------	---	-------

[共同研究]

森川 良忠	トヨタ先端技術共同研究	高精度第一原理電子状態計算手法による Li イオン拡散過程の解析	5,000
森川 良忠	松下電器産業株式会社	第一原理計算による有機・金属界面の解析に関する研究	1,540
森川 良忠	株式会社神戸製鋼所	第一原理計算による界面構造シミュレーションの研究	1,045

高次制御材料科学研究部門

概要

本研究部門は、材料機能物性、金属材料プロセス、極微プロセス、セラミック機能材料、フロンティア材料創製、エネルギー材料の6分野からなり、平成14年度に設置された産業科学ナノテクノロジーセンターと密接な協力関係を持ちながら研究を行っている。今後の急速な科学技術の発展を支えるためには、新しい機能・性能を持つ材料及び新材料の創成が不可欠であり、これらの材料は、従来からの材料構造制御の高度化と、原子・分子・ナノレベルからの新しい人工的な高次構造制御の構築から生まれる。本研究部門は6研究分野が協力して、既存のいわゆる金属・無機・有機材料研究の枠を超えた高次プロセッシング及び高次制御材料の設計・開発・応用と材料物性解明の研究を進め、今後の新産業育成につながる新しい材料設計コンセプトの構築を目指す。特に、新しいナノ複合化技術による高次構造性および機能性複合材料の設計・開発・応用、原子・分子・ナノスケールで制御された人工新材料、複合新機能を持つ高次情報材料、エネルギー材料、バイオマテリアルの創製、それらの物性解明と応用などを目的にして研究を推進している。分野・部門間の共同研究のみならず、国公立研究機関、民間企業ならびに国際的な共同研究にも積極的に取り組んでいる。

成果

- ・ Fe基バルク金属ガラスの熱処理に伴う局所構造変化
- ・ 照射誘起アモルファス相の熱処理に伴う構造変化
- ・ 連続鋳造法を用いたロータス型ポーラス炭素鋼およびアルミニウム合金の量産化技術の開発と軽量・機能性材料への応用
- ・ ガス元素を含む化合物の熱分解法によるロータス型ポーラス金属の製法の確立
- ・ 拡散のカーケンドール効果を利用したナノ中空金属球およびナノチューブの創製
- ・ レーザープロセスによる酸化物ナノワイアの創成と ReRAM への応用
- ・ 高分解能 SPM による DNA の塩基識別
- ・ DNA を用いたバイオ分子デバイスの開発
- ・ 硝酸酸化法を用いる SiO₂/Si 構造の低温創製と TFT への応用
- ・ 欠陥消滅型半導体洗浄技術の開発と半導体デバイスの高性能化
- ・ SiC の低温酸化法の開発と SiC-MOS デバイスの高性能化
- ・ 両極性ドーブが可能な銅酸化物高温超伝導体の基礎物性解明
- ・ 鉄砒素系高温超伝導体の単結晶育成とキャリア濃度制御
- ・ スピンホール絶縁体の高品質単結晶育成と物性解明
- ・ フェムト秒光励起によるグラファイトーダイヤモンド光誘起相転移
- ・ STM チップからの正孔注入による半導体表面原子の局所的ボンド切断とナノ加工
- ・ 半導体表面における超高速キャリアー動力学的研究
- ・ フェムト秒時間分解電子線回折測定装置の開発

材料機能物性研究分野

准教授	石丸 学
助教	平田 秋彦
大学院学生	中村 文彦、山本 悌、西山 勇作
事務補佐員	富井 茂子

a) 概要

新しい機能材料の創製には、材料の局所構造、電子状態を正確に知ることが重要となってきた。当研究分野では、非晶質ならびにナノ結晶が示す特異な性質と局所構造との関係に注目した研究を進めて来ている。高分解能電子顕微鏡法、ナノビーム電子回折法、電子線エネルギー損失分光法などを利用して、これらの局所構造、電子状態を解析し、機能との関連を調べる研究を行う一方、得られた知識を新しい機能材料の設計に向けた研究や、新しい局所構造解析手法の開発などを行っている。また、種々の条件下での材料の局所構造の予測、物性の予測をする目的で、分子動力学法、モンテカルロ法などによる局所構造シミュレーションや、バンド計算による電子状態の解析なども行っている。

b) 成果

・ Fe 基バルク金属ガラスの熱処理に伴う局所構造変化

本年度は、金属-半金属系であるFe基バルク金属ガラスの構造と相安定性について調べるため、熱処理による局所構造変化および結晶化挙動の特徴について主に透過型電子顕微鏡法を用いて研究を行った。まず、FeCrMoCBTmバルク金属ガラスの結晶化過程について詳細に観察を行ったところ、結晶化完了後の時点でX線回折曲線に $M_{23}C_6$ 構造による明瞭な回折ピークが出現した。しかし、X線回折曲線の明らかな変化が起こる前に、擬 10 回対称回折パターンを示す多様なナノ構造の出現がナノビーム電子回折実験によって示され、本合金系における結晶化過程はナノスケールの中間状態を経て進行することが明らかとなった。また、FeCoSiBNbバルク金属ガラスにおいても、FeCrMoCBTmと同様なナノスケールの中間状態が見られ、それらの構造も擬 10 回対称を示すことが見出された。このことから、擬 10 回対称に関係した多様なナノ中間状態の形成が、Fe系バルク金属ガラスの一つの特徴であることが明らかとなった。

・ 照射誘起アモルファス相の熱処理に伴う構造変化

イオン照射誘起非晶質 SiC の熱処理に伴う回復過程を透過電子顕微鏡「その場」観察により調べた。断面観察および電子エネルギー分光法により、熱処理温度が高くなるとともに非晶質 SiC の高密度化が顕著になることが見いだされた。電子線動径分布解析により、非晶質 SiC の第 1 隣接においては異種原子対(Si-C)に加え、結晶には存在しない同種原子対(C-C、Si-Si)が存在することが確認された。異種原子対は構造緩和により増大するが、同種原子対は減少する。ここで、Si-Si 原子対は C-C よりも早く消失し、この同種原子対間の消失速度の違いが、構造緩和における体積減少に重要な役割を演じていると考えられる。照射に伴う損傷過程においては、損傷量の増加とともに Si-Si 原子対が C-C 原子対よりも速く増大することが確認されている。今回の「その場」観察の結果は、SiC の損傷過程、回復過程における同種原子対間の不釣り合いな生成・消滅速度の存在を支持するものである。

[原著論文]

Ionization-induced effects in amorphous apatite at elevated temperatures, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, M. Higuchi: J. Mater. Res., 23 (2008) 962-967.

Low temperature thermal annealing-induced α -FeSi₂ derived phase in an amorphous Si matrix, M. Naito, M.

- Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez, K. E. Sickafus: Appl. Phys. A, 91 (2008) 353-356.
- Compositional analyses of ion-irradiation-induced phases in δ -Sc₄Zr₃O₁₂, K. E. Sickafus, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, I. O. Usov, J. A. Valdez, P. Hosemann, A. L. Johnson, H. T. Thao: Nucl. Instrum. Meth. B, 266 (2008) 2892-2897.
- Temperature dependence of electron-beam induced effects in amorphous apatite, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, M. Higuchi: Nucl. Instrum. Meth. B, 266 (2008) 2037-3042.
- Unexpectedly low thermal conductivity in natural nanostructured bulk Ga₂Te₃, K. Kurosaki, H. Matsumoto, A. Charoenphakdee, S. Yamanaka, M. Ishimaru, and Y. Hirotsu: Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 012101(1)-012101(3).
- Role of the triclinic Al₂Fe structure in the formation of the Al₃Fe₂-approximant, A. Hirata, Y. Mori, M. Ishimaru, Y. Koyama: Philos. Mag. Lett., 88 (2008) 491-500.
- Direct observations of thermally induced structural changes in amorphous silicon carbide, M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: J. Appl. Phys., 104 (2008) 033503(1)-033503(3).
- Electron irradiation-induced phase transformation in α -FeSi₂, M. Naito, M. Ishimaru, J. A. Valdez, K. E. Sickafus: J. Appl. Phys., 104 (2008) 073524(1)-073524(6).
- Ni thin films vacuum-evaporated on polyethylene naphthalate substrates with and without the application of magnetic field, H. Kaiju, A. Ono, N. Kawaguchi, K. Kondo, A. Ishibashi, J. H. Won, A. Hirata, M. Ishimaru, Y. Hirotsu: Appl. Surf. Sci., 255 (2009) 3706-3712.
- MBE growth and characterization of TlInGaAsN double quantum well structures, D. Krishnamurthy, S. Shanthi, K. M. Kim, Y. Sakai, M. Ishimaru, S. Hasegawa, H. Asahi: J. Cryst. Growth, 311 (2009) 1733-1738.
- Nanocrystallization of complex Fe₂₃B₆-type structure in glassy Fe-Co-B-Si-Nb alloy, A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, N. Nishiyama, A. Inoue: Intermetallics, 16 (2008) 491-497.
- Crystallization process and glass stability of an Fe₄₈Cr₁₅Mo₁₄C₁₅B₆Tm₂ bulk metallic glass, A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, A. Inoue: Phys. Rev. B, 78 (2008) 144205(1)-144205(6).
- Nanoscale metastable state exhibiting pseudotenfold diffraction pattern in Fe-based bulk metallic glass, A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, A. Inoue: Phys. Rev. B, 79 (2008) 020205R(1)-020205R(4).
- Structural relaxation in amorphous SiC studied by *in situ* transmission electron microscopy, M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: Proc. 9th Asia-Pacific Microscopy Conf., (2008) 708-709.
- Structural characterization of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, M. Naito, M. Ishimaru: Proc. 9th Asia-Pacific Microscopy Conf., (2008) 822-823.

[解説、総説]

複合酸化物セラミックスの照射誘起構造変化、石丸 学、まてりあ 47(12) (2008) 613.

高ドーズ鉄イオン注入シリコンの再結晶化過程、内藤宗幸、石丸 学、まてりあ 47(12) (2008) 640.

[国際会議]

Studies on TlGaInNAs double quantum well structures (poster), *D. Krishnamurthy, M. Ishimaru, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa, Y. Hirotsu, H. Asahi: 20th Indium Phosphide and Related Materials Conference, Versailles, France (May 25-29, 2008).

Structural changes of amorphous SiC during post-implantation thermal annealing (invited), *M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: 16th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Dresden, Germany (August 31 - September 5, 2008).

Formation of metastable iron silicides in the Fe implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru: 16th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Dresden, Germany (August 31 - September 5, 2008).

L1₀-structure formation of FePtCu nanoparticles at 613 K using RF-magnetron sputtering, *Y. Hirotsu, H. W. Ryu, K. Sato, M. Ishimaru: 7th Polish-Japan Joint Seminar on Micro and Nano Analysis, Warsaw, Poland (September 7-10, 2008).

Local structure analysis of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru: 7th Polish-Japan Joint Seminar on Micro and Nano Analysis, Warsaw, Poland (September 7-10, 2008).

Influence of native silicon oxides on the growth of GaN nanorods on Si(001) (poster), *S. Hasegawa, J.-U. Seo, K. Uchida, H. Tambo, H. Kameoka, M. Ishimaru, H. Asahi: International Workshop on Nitride Semiconductors, Montreux, Switzerland (October 6-10, 2008).

Structural relaxation in amorphous SiC studied by *in situ* transmission electron microscopy, *M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju, Korea (November 2-7, 2008).

Structural characterization of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru: 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju, Korea (November 2-7, 2008).

Formation Process of χ -FeCrMo Structure in Fe-Cr-Mo-C-B-Tm Metallic Glass, *A. Hirata, Y. Hirotsu, K. Amiya, A. Inoue: 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju, Korea (November 2-7, 2008).

Characterization of Natural Nanostructured Thermoelectric (Ga,In)₂Te₃ (poster), *K. Kurosaki, M. Ishimaru, A. Charoenphakdee, H. Matsumoto, H. Muta, S. Yamanaka: Materials Research Society 2008 Fall Meeting, Boston, USA (December 1-5, 2008).

Transmission electron microscopy study on electron beam irradiation induced phase transformation of niobium nitride (poster), *J. H. Won, J. A. Valdez, K. E. Sickafus, M. Ishimaru, M. Naito: Materials Research Society 2008 Fall Meeting, Boston, USA (December 1-5, 2008).

Natural nanostructured bulk Ga₂Te₃ as a new class of thermoelectric material (poster), *K. Kurosaki, M. Ishimaru, A. Charoenphakdee, H. Matsumoto, H. Muta, S. Yamanaka: The International Union Materials Research Society International Conference in Asia 2008, Nagoya (December 9-13, 2008).

Thermally induced structural changes of amorphous SiC, *M. Ishimaru: 16th International Conference on Microscopy of Semiconducting Materials, Oxford, UK (March 17-20, 2009).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

石丸 学 Japanese Journal of Applied Physics (編集委員)

[国内学会]

日本金属学会	3 件
応用物理学会	2 件
日本顕微鏡学会	2 件

[取得学位]

修士 (工学)
山本 梯 Si_{1-x}Ge_x/Siヘテロエピタキシャル成長過程の分子動力学シミュレーション

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円

基盤研究(C)		
石丸 学	照射環境下における炭化ケイ素の非晶質化過程と化学的短範囲規則性	1,500
若手研究(B)		
平田 秋彦	バルク金属ガラスにおけるナノスケール構造変化の直接観察	2,600

[受託研究]

石丸 学	(財)次世代金属・複合材料研究開発協会 NEDO (革新的部材産業創出プログラム)	高機能複合化金属増ガラスを用いた革新的部材技術開発 複合化金属ガラスの微細構造解析	2,500
石丸 学	(株)日産アーク	二次電池特性に及ぼす非晶質 Si の構造変化に関する研究	1,000
平田 秋彦	(株)日産アーク	鉄系材料における非晶質状態の解析	2,000

金属材料プロセス研究分野

教授	中嶋 英雄
准教授	鈴木 進補
助教	多根 正和、仲村 龍介
特任助教	朴 宰成 (平成 21 年 2 月迄)、井手 拓哉
特任研究員	金 相烈 (平成 20 年 8 月迄)
大学院学生	千葉 博、金 泰範、宋 榮煥、川島 多絵、河村 勇樹、谷口 恒太、 岡本 理佳、杉原 孝平、松林 玄
研究生	Juan Lobos
事務補佐員	松本 聡子

a) 概要

金属材料は構造材料や機能材料の基幹材料として我々の生活に不可欠なものであり、新たな需要および技術革新に向けてさらなる耐熱強靱性、軽量化、高機能化、長寿命化などが要求されてきている。この金属材料を優れた構造材料、機能性材料として開発することを目的とした金属材料プロセスの新しい展開をめざすことが本研究分野の主なテーマである。これまでは、構造材料、機能材料を問わず、合金元素の添加、結晶粒微細化、熱処理などによって組織や結晶構造を制御し、強度をはじめとする種々の材料特性を向上させることに主要な力点が置かれていた。このような観点とは別に、本研究分野では、従来ほとんど注目されていなかった鑄造欠陥と見なされていた気孔を材料特性の向上に利用する試みを行っている。具体的には、融体の凝固制御法や格子欠陥制御法を駆使して、合金、金属間化合物、半導体、セラミックスなどの先端機能性材料を創製し、それらの材料に関する新規物性の探索と発現機構の解明を行うと共に、応用製品化の実現を目指している。

本研究分野では、方向性気孔を多数有するロータス（レンコン）型ポーラス金属に関する研究開発を行っている。本年度は、近年開発した高压ガスを使用しない低コストで安全なロータス金属の製法に関する系統的な研究を行うとともに、実用化を目的としてロータス銅、アルミニウム合金、および炭素鋼を量産するための連続鑄造法の開発を行った。また、強度を維持・負荷したロータス金属を開発することを目的として力学物性の解明を行い、ロータス金属の塑性変形による機械的性質の改善を行うとともに、各種分野へのロータス金属応用研究を行った。

さらに、新規ナノポーラスマテリアルの形成原理の確立を目指して、ナノサイズの孔を有するナノ中空粒子やナノチューブの形成メカニズムに関する研究を行っている。これまで、材料工学の立場から、拡散に伴う原子空孔の生成と集合化に着目し、ナノ粒子やナノワイヤーの内部にナノ孔を導入するアイデアを提案してきた。本年度は、拡散係数に大きな差のある異種金属で構成されるコアシェル型ナノ粒子を相互拡散させると金属ナノ中空粒子が形成すること、および、金属ナノワイヤーを大気中でアニールすると酸化物のナノチューブ構造体が得られることを明らかにした。透過型電子顕微鏡を用いて、ナノボイドの形成過程を詳細に調べ、中空構造の形成機構の解明に取り組んだ。

b) 成果

・化合物の熱分解を利用したロータス金属の作製

高压水素ガスを用いることなく、 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 、 NaHCO_3 もしくは TiH_2 (ガス化合物)の熱分解により生成する水素を利用して一方向凝固によりロータスアルミニウムおよびその合金を作製した。ガス化合物の添加量の増加に伴い、気孔径が増加し、気孔の数密度は増加した。これは、気孔の核生成サイトが増加したためである。気孔率および気孔径はアルゴン圧の増加に伴い減少した。これはボイルの法則により説明される。熱分解法においては、ガス化合物の種類、添加量およびAr圧力により、気孔率、気孔径が制御

できることが明らかになった。

・連続鋳造法による実用ロータス金属の量産化製法の開発

加圧ガス雰囲気および化合物の熱分解法を利用した連続鋳造法を用い、銅、アルミニウム合金および炭素鋼等を用いてロータス金属を作製した。作製時の溶湯温度、雰囲気圧力、凝固速度、ガス化合物の添加量などにより気孔率や気孔径を制御する方法を確立し、実用化のための基礎的研究を行った。これによりロータス金属の量産化、製造の低コスト化が可能となり、工作機械、輸送機部品、スポーツ用品、ヒートシンク材、医療材料などの応用分野への実用化に向けた基礎が築かれた。

・ロータス鉄の高ひずみ速度での圧縮変形挙動の解明

衝撃吸収材料として期待されるロータス鉄の高ひずみ速度での圧縮変形挙動に対して研究を行った。気孔に平行な方向の高ひずみ速度での圧縮においては、応力がほぼ一定の状態に変形が進行するプラトー領域が現れることが明らかとなった。このプラトー領域のために、気孔に平行な方向の高ひずみ速度での圧縮においては、優れたエネルギー吸収能を示すことが明らかとなった。プラトー領域の出現はひずみ速度に依存し、低ひずみ速度および中ひずみ速度での気孔に平行な方向の圧縮変形においてはプラトー領域は現れない。また、プラトー領域の出現は気孔の方向性にも依存し、高ひずみ速度での圧縮変形においても気孔に垂直な方向の圧縮変形においてはプラトー領域が現れないことが明らかとなった。

・塑性加工を利用したロータス金属の強化

高速回転するワイヤカップブラシにより板状ロータス銅試料の表面の塑性加工を行った。加工後、試料の表層には粒径 100nm 以下の微細結晶粒が観察され、気孔の入口は微細結晶粒のノンポーラス層により閉じられていた。結晶粒の微細化およびノンポーラススキン層の形成によりロータス銅の引張強度は加工前と比較して約 30%増加した。

・カーケンドール効果を利用した金属ナノ中空粒子と酸化物ナノチューブの作製

異種金属間の相互拡散において、拡散性の大きな差に起因して生じるカーケンドールボイドの生成現象を利用し、内部に孔を有するナノ中空金属粒子の作製を行った。拡散係数の大きい Au ナノ粒子を拡散係数の小さい Pd で被覆したコアシェル型 Au/Pd ナノ粒子を 300-400°C でアニールすると、粒子中心部にボイドが形成し、中空構造となった。拡散係数の差が大きく、かつ、互いの固溶度が大きいような異種金属のコアシェル構造において、相互拡散により中空粒子が得られる可能性が示唆された。また、Fe, Cu および Ni ナノワイヤーを大気中で酸化させると、酸化物ナノチューブが形成されることを明らかにした。酸化鉄および酸化銅ナノチューブは均一な内径および外径を有する構造となったが、酸化ニッケルナノチューブは、凹凸の大きな構造となった。

[原著論文]

粉末冶金法を用いて作製したアルミニウムフォームの気孔率・気孔形態に及ぼす昇温速度・保持温度・保持時間の影響, 関宏範, 佐々木新悟, 大塚正久, 中嶋英雄: 日本金属学会誌, 72 (4) (2008) 278-284.

Magnetization Process of Lotus-type Porous Metals, H. Onishi, S.K. Hyun, H. Nakajima, S. Mitani, K. Takanashi, K. Yakushiji: J. Appl. Phys., 103 (9) (2008) 93539.

一方向気孔を有するポーラス金属の物性評価, 中嶋英雄, 多根正和, 中田一博, 藤本慎司, 市坪哲, 田中徹, 山田康雄: ふえらむ, 13 (6) (2008) 368-374.

Peculiar elastic behavior of Ti-Nb-Ta-Zr single crystals, M. Tane, S. Akita, T. Nakano, K. Hagihara, Y. Umakoshi, M. Niinomi, and H. Nakajima: Acta Mater., 56 (12) (2008) 2856-2863.

Equal-channel Angular Extrusion Process of Lotus-type Porous Copper, S.Suzuki, H. Utshunomiya, H. Nakajima: Mater. Sci. Eng. A, 490 (1 · 2) (2008) 465-470.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals through Hydride Decomposition, H. Nakajima: Adv. Eng.Mater., 10 (9) (2008) 816-819.

Shrinking of hollow Cu₂O and NiO nanoparticles at high temperatures, R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori and H. Nakajima: Acta Mater., 56 (18) (2008) 5276-5284.

In Vitro Corrosion Resistance of Lotus-type Porous NI-free Stainless Steels, K. Alvarez, S.K. Hyun, S. Fujimoto, H. Nakajima: J. Mater. Sci.: Mater. Med., 19 (11) (2008) 3385-3397.

Fabrication of Lotus-Type Porous Al-Si Alloys Using the Continuous Casting Technique, J.S. Park, S.K. Hyun, S. Suzuki, H. Nakajima: Metal. Mater. Trans. A, 40 (2) (2009) 406-414.

New Fabrication Method for Lotus-Type Porous Metals and its Application, H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2007), (2008) 193-196.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon-steel by Continious Casting Technique in Nitrogen Atmosphere, K. Kashihara, S. Suzuki, S.K. Hyun, H. Yonetani, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2008), (2008) 201-204.

Equal-channel Angular Extrusion of Lotus-type Porous Copper, S. Suzuki, H. Utsunomiya, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2009), (2008) 205-208.

Fabrication and Plastic Deformation Behavior of Lamellar Ti-Rich TiAl Crystals With Lotus-Type Aligned Pores, T. Nakano, S. Tachibana, K. Hagihara, Y. Umakoshi, T. Ide, M. Tane, H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2010), (2008) 213-216.

Fabrication of Lotus-type Porous Nickel with Atmospheric Pressure and Foaming Agents by Mold Casting Technique, S.Y. Kim, B.Y. Hur, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2011), (2008) 197-200.

Impact Properties of Lotus-type Porous Carbon Steel Measured by Instrumented Charpy Testing, T. Kujime, S. K. Hyun, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2012), (2008) 217-220.

Fabrication of Lotus-type Porous Al-Si by Continuous Casting Technique, J.S. Park, S.K. Hyun, S. Suzuki, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2013), (2008) 229-232.

Fabrication of Lotus-type Porous Magnesium by Continuous Casting Technique, S.K. Hyun, S. Suzuki, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2014), (2008) 233-236.

Effects of pore size distribution and loading direction on fatigue property of lotus-type porous copper with anisotropic pore structure, H. Seki, M. Tane, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2015), (2008) 237-240.

Fabrication of Lotus-type Porous Magnesium using Hydrogen Desorption from MgH₂, M. Tane and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2016), (2008) 241-244.

Formation of a Nano-pore during Oxidation of Metal Nanoparticles, R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2017), (2008) 329-332.

Steady State Comparative-longitudinal Heat Flow (SCHF) Method Using Specimen of Different Thickness for Measuring Thermal Conductivity of Anisotropic and Thin Porous Metals, H. Chiba, T. Ogushi, H. Nakajima, K. Torii, T. Tomimura, F. Ono: Proceedings of 5th International Conference on Porous Metals and Metallic Foams (MetFoam2017), (2008) 521-524.

ECAE を利用したロータス型ポーラス銅の塑性加工, S. Suzuki, H. Utunomiya, H. Nakajima: 銅と銅合金, (47) (2008) 93-97.

[解説、総説]

一方向気孔を有するポーラス金属の製法と物性, 中嶋英雄, 多根正和, 玄 丞均, 鈴木進補, まてりあ, 47[4] (2008) 196-202.

ロータス型ポーラス銅を使用した高性能水冷ヒートシンクの開発, 千葉博、大串哲朗, 中嶋英雄, 伝熱, 47[5] (2008) 11-15.

金属ナノ粒子の酸化による中空構造体の形成, 仲村龍介, 床桜大輔, 李正九, 森博太郎, 中嶋英雄, まてりあ, 47[7] (2008) 368-374.

液体金属中の拡散係数測定, 鈴木進補, まてりあ, 47[6] (2008) 305-311.

一方向凝固法によるロータス型ポーラスセラミックスの作製, 上野俊吉, 林礼明, 中嶋英雄, まてりあ, 47[8] (2008) 399-405.

[著書]

「ポーラス金属の圧縮試験方法 JIS H 7902」, 中嶋英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-7.

「ポーラス金属の熱伝導率試験方法 JIS H 7903」, 中嶋英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-16.

「ポーラス金属用語 JIS H 7009」, 中嶋英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-15.

「熱伝導率・熱拡散率の制御と測定評価方法」, 千葉博, 中嶋英雄, サイエンス&テクノロジー, (2009) 146-156.

「High-temperature Measurements of Materials」(H. Fukuyama, Y. Waseda 編集), S.Suzuki, Springer, (2009) 61-83.

[特許]

「多孔質金属体の製造方法」中嶋英雄、特許第 4217865 号、

「金属多孔質体の製造方法」中嶋英雄、特許第 4235813 号

「金属多孔質体の製造方法」中嶋英雄、カナダ、登録番号 2473120 号

「吸音材料」中嶋英雄、奥田良行、謝振凱、池田輝之、特許第 4196181 号

[国際会議]

Hollow Oxide Formation via Oxidation of Metal Nanoparticles, R. Nakamura, H. Nakajima: The 3rd International Workshop on Nano and Amorphous Materials, Miyagi, Japan, August 7-8, 2008.

Formation of Hollow and Porous Oxides through Oxidation of Metallic Nanoparticles (poster), R. Nakamura, H. Nakajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Formation of Hollow Structure through Heat Treatment of Core-Shell Type Metal Nanoparticles (poster), K. Taniguchi, R. Nakamura, H. Nakajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Continuous Casting Technique and Application to Machine Tools, M. Kashihara, H. Yonetani, S. Suzuki, S.Y. Kim, H. Nakajima: CELLMET2008, Cellular Metals for Structural and Functional Applications, 2nd International Symposium, Dresden, Germany, Oct. 8-10, 2008.

Lotus-type Porous Ni-free Stainless Steel Biomaterial Produced by Continuous Zone Melting Technique (poster), K. Alvarez, H. Nakajima: CELLMET2008, Cellular Metals for Structural and Functional Applications, 2nd International Symposium, Dresden, Germany, Oct. 8-10, 2008.

Formation of a Nano-hole via Oxidation of Metal Nanoparticles, R. Nakamura, H. Nakajima, H. Mori: 7th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT2008), Canary Islands, Spain, Oct. 28-31, 2008.

Shrinkage of Hollow Nanoparticles of Oxides of Cu and Ni at High Temperatures (poster), R. Nakamura, H. Nakajima, H. Mori: 7th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT2008), Canary Islands, Spain, Oct. 28-31, 2008.

Fabrication of Lotus-Type Porous Aluminum through Thermal Decomposition Method, H. Nakajima, S. Y. Kim, J. S. Park: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2008.

Structural Stability of Hollow Oxide Nanoparticles at High Temperatures (poster), R. Nakamura, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2009.

Morphology Change of Core-Shell Type Metal Nanoparticles through Heat Treatment (poster), K. Taniguchi, R. Nakamura, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008,

Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2010.

Fabrication of Lotus-type Porous Magnesium through Thermal Decomposition Method (poster), M. Tane, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2011.

Fabrication of Lotus-type Porous Copper by Thermal Decomposition Method using Titanium Hydride (poster), T. Ide, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2012.

Fabrication of Lotus-type Porous Aluminum using Thermal Decomposition of Magnesium Hydroxide (poster), J.S. Park, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2013.

Fabrication of lotus-type porous Al-Si alloy by continuous casting with using thermal decomposition method (poster), T.B. Kim, S. Suzuki, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2014.

Mechanical property of lotus-type porous carbon steel fabricated by continuous casting method (poster), Y. Kawamura, S. Suzuki, S. Y. Kim, H. Nakajima, M. Kashihara, H. Yonetani: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2015.

Structure change and improvement of the mechanical properties of lotus-type porous copper by wire-brushing (poster), J. Lobos, S. Suzuki, H. Nakajima, Y. S. Ji, H. Fujii, D. Terada, N. Tsuji: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2016.

Fabrication of lotus-type porous Al-Cu alloys by continuous casting technique (poster), S. Suzuki, T.B. Kim, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2016.

Fabrication of Porous Magnesium with Directional Pores through Thermal Decomposition of Magnesium Hydride (poster), M. Tane, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, Nov. 10-12, 2017.

Fabrication of Lotus-type Porous Aluminum through Thermal Decomposition Method (invited), H. Nakajima, T. Ide, S. Y. Kim: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, Jan. 13-16, 2009.

Structure change and improvement of the mechanical properties of lotus-type porous copper by ECAE process, J. Lobos, S. Suzuki, H. Utunomiya, H. Nakajima: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, Jan. 13-16, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

- | | |
|-------|--|
| 中嶋 英雄 | Sixth International Conference on Porous Metals and Metal Foaming Technology (MetFoam2009) (組織委員会委員) |
| 中嶋 英雄 | High Temperature Materials and Progress (国際編集委員) |
| 中嶋 英雄 | Diffusion and Defect Data (編集顧問) |
| 中嶋 英雄 | Materials Science Foundations (編集顧問) |

中嶋 英雄	International Conference on New Frontiers of Process Science and Engineering in Advanced Materials (組織委員会委員)
中嶋 英雄	5th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (組織委員会委員)
中嶋 英雄	International Conference on Eco-Materials Processing and Design 2010 (組織委員会委員)
中嶋 英雄	3rd International Symposium on Cellular Metals for Structural and Functional Applications (プログラム委員会委員)
中嶋 英雄	International Conference on Advanced Structure and Functional Materials Design (組織委員会委員)
中嶋 英雄	THERMEC 2009 International Conference on Advanced Materials (国際顧問)

[国内学会]

日本金属学会	26 件
高温学会	3 件
軽金属学会	2 件
銅および銅合金技術研究会	2 件
日本鉄鋼協会	1 件
関西支部 材料物性工学談話会平成 20 年度第 4 回研究会	1 件
関西支部 材料開発研究会平成 20 年度第 3 回研究会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
川島 多絵	ロータス型ポーラス鉄の圧縮変形挙動およびエネルギー吸収特性のひずみ速度依存性
河村 勇樹	連続鋳造法によるロータス型ポーラス炭素鋼の作製と機械的性質
谷口 恒太	コア/シェル型金属ナノ粒子の相互拡散による中空化に関する研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究(S)		
中嶋 英雄	革新的金属ナノ中空球および金属ナノチューブの創製と機能性解明	11,050
若手研究(B)		
鈴木 進補	マルチモールド連鋳による異種材料から成る複合ロータス金属の創製	1,300

[受託研究]

中嶋 英雄	(株)森精機製作所 (H20-H21 年度)	ロータス炭素鋼板材の製造技術に関する研究	総額 11,550
中嶋 英雄	科学技術振興機構	化合物熱分解法によって作製されたロータス型ポーラスアルミニウム合金の軽量化衝撃吸収部材への応用	2,000

[奨学寄附金]

中嶋 英雄	株式会社永木精機		1,000
中嶋 英雄	ロータスアロイ株式会社		27
中嶋 英雄	株式会社妙徳		1,000

[その他の競争的研究資金]

中嶋 英雄	軽金属奨学金	軽金属の物性解明	250
仲村 龍介	日本鉄鋼協会	酸化反応を利用した Fe および Ni ナノ粒子の中空化プロセス	500
仲村 龍介	新世代研究所	異種金属の著しい拡散性の差を利用したナノ中空構造体の創製	1,200
仲村 龍介	ホソカワ粉体工学振興財団	鉄ナノ粒子の酸化によるナノポラス構造の創出と制御	700
鈴木 進補	JFE21 世紀財団	マクロ形態とミクロ組織を制御したポラス炭素鋼の作製と特性	2,000

[共同研究]

中嶋 英雄	産業技術短期大学		55
中嶋 英雄	トヨタ自動車(H20-21 年度)		総額 4,400

極微プロセス研究分野

教授	川合 知二
准教授	谷口 正輝
助教	田中 裕行、柳田 剛
特任教授	李 恵ヨン
研究員	金井 真樹、銚之原 瞳、筒井 真楠、高木 昭彦、韓 美正、山田 郁彦
大学院学生	鈴木 光治、小林 匠、横田 一道、長島 一樹、川口 英幸、山中 理、庄司 昂平、五嶋 数哉、岡 敬祐、瀬川 祐司、河野 正人、森本 康友、橘田 晃宜
学部学生	今井 祐輔
事務補佐員	藤林 乃理子

a) 概要

私達のグループでは、“すぐれた機能材料・デバイス・システム”の創成に向かって、「多機能が調和した材料・デバイスの科学」「バイオ分子デバイスの科学」を主な研究課題としている。レーザーを用いた原子層制御材料の設計・合成により、通常は実現できない構造や機能を持つ物質・材料を人工的に創りだし、それを“五感センサ・脳型メモリ”へと発展させること、走査プローブ顕微鏡によりDNAなど表面上にある1分子の観察および分光と分子マニピュレーションを行い、バイオ分子デバイスや新しいバイオチップの開発へと展開することを行っている。また、コンピューターを利用して物質の結晶構造変化や電子状態を予測する計算科学も主要な研究課題としている。

主な研究課題としては、①レーザープロセスによる機能調和人工格子及びナノ構造の創成、②SPMによるDNA等のバイオ分子のナノサイエンス・ナノテクノロジー、③バイオチップの開発、④DNAを用いたバイオ分子デバイスの開発、が挙げられる。

b) 成果

・レーザープロセスによる機能調和人工格子及びナノ構造体の創成

新規強相関電子系強磁性酸化物($\text{Fe,M})_3\text{O}_4$ ($\text{M}=\text{Zn, Mn}$)を設計し、室温における外場応答(磁場・電場)を示す、酸化物スピンドバイス(強磁性電界効果トランジスタ、ダイオード)の作製に成功した。更に金属酸化物ナノ構造形成技術を開発し(Moナノマスク-AFMナノリソグラフィ法、Moマスク-ナノインプリント法)、多様な遷移金属酸化物薄膜において、超高分解能(30-100nm)および大面積酸化物ナノ構造形成を達成した。自己集成的に形成される30nm以下の酸化物ナノワイヤ(MgO)を用いて、種々のヘテロナノワイヤ構造体(MgO/TiO_2 , MgO/NiO , $\text{MgO/Fe}_3\text{O}_4$)をin-situで作製することに成功した。更に、ナノワイヤ構造体における不揮発性メモリ効果を見出した。

・単一分子の識別

ナノ加工した機械的破断接合(nano-MCBI)を用いて、Au-ベンゼンジチオレート-Au接合における分子の数と種類を識別することに成功した。分子の数は分子接合のコンダクタンスから識別され、分子の種類は単分子接合の非弾性トンネル分光から識別された。さらに、nano-MCBIとマイクロ流路を融合した計測システムを用いて、溶液中の単一金ナノ粒子(直径2nm)の検出に成功した。これは、化学標識を必要としないDNAやウイルスの検出、あるいは有害物質の検出などへ応用が期待される。

・SPMによるDNA等のバイオ分子のナノサイエンス・ナノテクノロジー

一分子シーケンシングするためのDNA分子の伸張固定方法を独自に開発することにより、7千塩基も有する長い実際のファージDNAの個々のヌクレオチドを走査型トンネル顕微鏡により可視化することに世界で初めて我々は成功した。その結果、グアニン塩基特有の局所状態密度を可視化・分光及びマッ

ピングに成功し、得られたグアニンの配列パターンが、データバンクのそれとほぼ一致することを明らかにした。一方、膜蛋白質の原子間力顕微鏡(AFM)での観察に向けて、生体膜をより生体に近い測定環境の構築のために、アガロースゲルを使い基板そのものが含水した平坦なAFM観察用基板を開発した。AFM観察・測定及び電気生理計測の同時計測を実現させるために、脂質膜及びゲル固定用基板として加熱した探針によりテフロン薄膜に真円に細近い孔を開ける方法を開発した。この手法で作成した脂質膜を用いてチャンネル蛋白の測定に成功した。

・生体単分子の位置制御

ポリマーマテリアルを用いて生体適合性ナノ構造体を作製し、一つのナノウェルに一つの機能性脂質分子が入る制御に成功した。この論文はNature Asia (Nature Publishing Group) の“Array for Assay”部門でhighlightとして選定された。また、シーケンシャル自己組織化により、逐次的に異なる分子を用いた人工細胞膜ナノ構造の形成に成功した。このような特異的な単一分子位置制御・分子認識を実現することは、生体内での信号伝達の異常により生じる現象を理解する鍵になると期待される。

[原著論文]

Control of device characteristics of ambipolar organic field-effect transistors using the hydroxyl in organic insulator, H. Kawaguchi, M. Taniguchi, and T. Kawai: Synth. Met., 158 (2008) 355-358.

Thermodynamic stability of single molecule junctions, M. Tsutsui, K. Shoji, K. Morimoto, M. Taniguchi, and T. Kawai: Appl. Phys. Lett., 92 (2008) 223110-223112.

Metallic nature of metal-molecule interface formed by Au-Se bonds, K. Yokota, M. Taniguchi, H. Tanaka, and T. Kawai: Phys. Rev. B, 77 (2008) 165416-165420.

Hydration effects on the microwave dielectricity in dry poly(dA)-poly(dT) DNA, A. Hojo, H. Matsui, K. Iwamoto, T. Yanagimachi, H. Abdrurakhan, M. Taniguchi, T. Kawai, and N. Toyota: J. Phys. Spc. Jpn., 77 (2008) 04402-04408.

Local heating in metal-molecule-metal junctions, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai: Nano Lett., 8 (2008) 3293-3297.

Measurement environment dependency of single molecule conductance, M. Taniguchi, K. Morimoto, M. Tsutsui, and T. Kawai: Chem. Lett., 37 (2008) 990-991.

Fabrication of 0.5 nm electrode gaps using self-breaking technique, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai: Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 163115-163117.

Control of threshold voltage and hysteresis in organic field-effect transistors, H. Kawaguchi, M. Taniguchi, and T. kawai: Appl. Phys. Lett., 94 (2009) 093305-093307.

Transverse field effects on DNA-sized particle dynamics, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai: Nano Lett., 9 (2009) 1659-1662.

Visualization of the Detailed Structure of Plasmid DNA, H. Tanaka, S. P. Mielke, C. J. Benham and T. Kawai: J. Phys. Chem. B, 112 (2008) 16788-16792.

Effect of Heterointerface on Transport Properties of In-situ Formed MgO/titanate Core-shell Nanowires, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka, S.Seki, A.Saeki, S.Tagawa, and T.Kawai,: J. Am. Chem. Soc., 130 (2008)

5378-5382.

Crucial Role of Inter-diffusion on Magnetic Properties of In-situ Formed MgO/Fe₃O₄ Heterostructured Nanowires, Marcu, A., T. Yanagida, K. Nagashima, K. Oka, H. Tanaka and T. Kawai,; *Appl. Phys. Lett.*, 92 (2008) 173119.

Mechanism of Critical Catalyst Size Effect on MgO Nanowire Growth by Pulsed Laser Deposition, Yanagida, T., K. Nagashima, H. Tanaka and T. Kawai,; *J. Appl. Phys.*, 104 (2008) 016101.

Growth Atmosphere Dependence on Transport Properties of NiO Epitaxial Thin Films, Oka, K., T. Yanagida, K. Nagashima, H. Tanaka and T. Kawai,; *J. Appl. Phys.*, 104 (2008) 013711.

Mechanochemical Preparation of Magnetite Nanoparticles by Coprecipitation, Iwasaki, T., K. Kosaka, N. Mizutani, S. Watano, T. Yanagida, H. Tanaka and T. Kawai,; *Mater. Lett.*, 62 (2008) 4155-4157.

Mechanism and Control of Sidewall Growth and Catalyst Diffusion on Oxide Nanowire VLS Growth, Nagashima, K., T. Yanagida, K. Oka, H. Tanaka and T. Kawai,; *Appl. Phys. Lett.*, 93 (2008) 153103.

Enhancement of initial permeability due to Mn substitution in polycrystalline Ni_{0.50-x}Mn_xZn_{0.50}Fe₂O₄, A.K.M. Hossain, T. S. Biswas, S. T. Mahmud, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai,; *J. Magn. Magn. Mater.*, 321 (2008) 81-87.

Effect of Ferrous/Ferric Ions Molar Ratio on the Reaction Mechanism for the Hydrothermal Synthesis of Magnetite Nanoparticles, Mizutani, N., T. Iwasaki, S. Watano, T. Yanagida, H. Tanaka and T. Kawai,; *Bull. Mater. Sci.*, 31 (2008) 713-717.

Enhancement of Oxide VLS Growth by Carbon on Substrate Surface, Yanagida, T., A. Marcu, H. Matsui, K. Nagashima, K. Oka, K. Yokota, M. Taniguchi and T. Kawai,; *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008) 18923-18926.

Implications of Phase-Segregation on Structure, Terahertz Emission and Magnetization of Bi(Fe_{1-x}Mn_x)O₃ (0 ≤ x ≤ 0.5) Thin Films, Rana, D.S., K. Takahashi, K.R. Mavani, I. Kawayama, H. Murakami, M. Tonouchi, T. Yanagida, H. Tanaka and T. Kawai,; *Europhys. Lett.*, 84 (2008) 67016.

Influence of Mg and Cr Substitution on Structural and Magnetic Properties of Polycrystalline Ni_{0.50}Zn_{0.50-x-y}Mn_xCr_yFe₂O₄, A.K.M. Hossain, T. S. Biswas, S. T. Mahmud, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai,; *Mater. Chem. Phys.*, 113 (2009) 172-178.

Non-volatile Bipolar Resistive Memory Switching in Single Crystalline NiO Heterostructured Nanowires, Oka, K., T. Yanagida, K. Nagashima, H. Tanaka and T. Kawai,; *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (2009) 3434-3435.

Molded nanowell electrodes for site-selective single liposome arrays, P.N. Kim, B.K. Lee, H.Y. Lee, T. Kawai, K.Y. Suh,; *Advanced Materials*, 20 (2008) 31-36.

Stepwise Self-Assembled Protein Nanoarray with a Nanoimprinted Poly(Ethylene Glycol) Hydrogel, B.K. Lee, H.Y. Lee, P.N. Kim, K.Y. Suh, J.H. Seo, H.J. Cha, T. Kawai,; *Small*, 3 (2008) 342-348.

Analytical studies of penicillamine enantiomer surfaces: the molecularly flat surface and the functionality, W.S. Kim, H.Y. Lee, T. Kawai, H.W. Kang, H. Muramatsu, I.H. Kim, K.M. Park, S.M. Chang, J.M. Kim,; *Sensors & Actuators B(chemical)*, 129 (2008) 126-133.

Self-organized Functional Lipid Vesicle Array for Sensitive Immunoassay chip, H.Y.Lee, B.K.Lee, J.W.Park, H.S.Jung, T.Kawai: Ultramicroscopy, 108 (2008) 1325-1327.

Epitaxial Nanodot Arrays of Transition-Metal Oxides Fabricated by Dry Deposition in Combination with a Nanoimprint Lithography based molybdenum Lift-off Technique, N. Suzuki, Hide.Tanaka, S.Yamanaka, M.Kanai, B.K.Lee, H.Y.Lee, T.Kawai: Small, 10 (2008) 1661-1665.

Nanoarrays of Tethered Lipid Bilayer Rafts on Poly(vinyl alcohol) Hydrogels, B.K.Lee, H.Y.Lee, P.N.Kim, K.Y. Suh, T.Kawai: Lab on a chip, 9 (2009) 132-139.

High-density DNA Alignment on an Au(111) Surface Starting from Folded DNA, H. Matsuura, A. Hirai, F. Yamada, T. Matsumoto, T. Kawai: J. Am. Chem. Soc., 130 (15) (2008) 5002-5003.

Self-Organized Functional Lipid Vesicle Array for Sensitive Immunoassay Chip, H.- Y. Lee, B.- K. Lee, J.- W. Park, H.- S. Jung, T. Kawai: Ultramicroscopy, 108 (10) (2008) 1325-1327.

Electrical Resistivity of Molecular-Assembly Nanowires of Amphiphilic Bis-TTF Macrocycle/2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane Charge Transfer Complex Characterized by PCI-AFM, R. Tsunashima, Y. Noda, Y. Tatewaki, S.- I. Noro, T. Akutagawa, T. Nakamura, T. Matsumoto, T. Kawai: Appl. Phys. Lett., 93 (29) (2008) 173102-1-3.

Epitaxial Nano Dot Array of Transition Metal Oxide Fabricated by Dry Deposition in Combination with the Nanoimprint Lithography based Molybdenum Lift-off Technique, N. Suzuki, Hid. Tanaka, S. Yamanaka, M. Kanai, B.- K. Lee, H.- Y. Lee, T. Kawai: Small, 4 (10) (2008) 1661-1665.

Nanoarray of Tethered Lipid Bilayer Rafts on Poly(vinyl alcohol) Hydrogel, B.- K. Lee, H.- Y. Lee, P. Kim, K.- Y. Suh, T. Kawai: Lab on a Chip, 9 (1) (2009) 132-139.

[解説、総説]

絶縁体表面における吸着ナノ物質の静電気力イメージングーバイオ分子への応用ー、松本卓也、山田郁彦、佐藤一美、甘江利子、高木昭彦、川合知二、表面科学 29 [4] (2008) 246-252.

走査プローブ顕微鏡を用いた表面電荷のナノスケール画像化、松本卓也、川合知二、粘土科学 47 [1] (2008) 1-8.

走査プローブ顕微鏡を用いた時間分解静電気力検出法の開発、松本卓也、川合知二、顕微鏡 43 [2] (2008) 149-151.

[著書]

「バイオナノプロセスー溶液中でナノ構造を作るウェット・ナノテクノロジーの薦めー、第 23 章、プログラム自己組織化によるナノ材料・デバイスの創製」、鈴木直毅、安立京一、李奉局、川合知二、CMC 出版社、(2008) 227-228.

「分子エレクトロニクスの基盤技術と将来展望」(松重和美、田中一義、和田恭雄編集)、谷口正輝、川合知二、シーエムシー出版、(2009)214-226

[特許]

「ナノインプリントリソグラフィ用の高耐久性レプリカモールドおよびその作製方法」 B.K.Lee、H.Y.Lee、川合 知二、N.Y.Hong、D.P.Kim、 特願 2008-239827

「THE MANUFACTURE METHOD OF HIGH DURABLE REPLICA MOLD FOR NANOLITHOGRAPHY」 T.Kawai、H.Y.Lee、B.K.Lee、N.Y.Hong、D.P.Kim、 特願 2009-0006902 (韓国)

[国際会議]

Single molecule identification (invited), *M. Taniguchi, M. Tsutsui, and T. Kawai: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium.

Development of self-organized process for molecular devices, *M. Taniguchi, Y. Nojima, K. Yokota, J. Terao, K. Sato, N. Kambe, T. Kawai: ACS National Meeting, Philadelphia.

Metal-molecule interface for molecular electronics, *K. Yokota, M. Taniguchi, H.Tanaka, Tomoji Kawai: ACS National Meeting, Philadelphia.

Thermodynamic stability of atomic and molecular junctions, *M. Tsutsui, K. Shoji, M. Taniguchi, T. Kawai: ACS National Meeting, Philadelphia.

Fabrication of gating nano-pore device, *T. Kawai, M. Taniguchi, M. Tsutsui, and T. Yanagida: Fall MRS Meeting.

Metallic nature of the interface in the self-assembled monolayer formed by gold-selenium bonds (poster), K. Yokota, M. Taniguchi, H.Tanaka, Tomoji Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology.

High Resolution STM Imaging and Manipulation of Molecular Bearing of Porphyrin Complexes, H. Tanaka, T. Ikeda, M. Takeuchi, S. Shinkai and T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology.

High Resolution STM Imaging and Manipulation of Multi-decker Porphyrin, H. Tanaka, T. Ikeda, M. Takeuchi, S. Shinkai and T. Kawai: AVS 55th International Symposium & Exhibition, Boston, MA, USA, Oct.19-24, 2008.

Nanowire Morphology Control in Pulsed Laser Deposition (poster), Marcu, A., M.Goyat, T.Yanagida and T.Kawai,: 2nd INDLAS International Conference, Modern Laser Applications.

Nanochannels Fabrication Using Kirkendall Effect (poster), Marcu, A., T.Yanagida and T.Kawai: European Material Research Society, Fall Meeting,.

Heterostructured Nano-Oxides and Their Functionalities (poster), Kawai, T., H.Tanaka T.Yanagida, N.Suzuki, S.Yamanaka, K.Goto, K.Nagashima and K.Oka,: 15th International Workshop on Oxide Electronics,.

Drastic Reduction of Reset Current on Non-volatile Resistive Switching using Titanium Oxide Heterostructured Nanowire, (poster), Nagashima, K., T.Yanagida, K.Oka, M.Taniguchi, H.Tanaka and T.Kawai,: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium.

Oxide Nanowire VLS Growth using Organic-treated Au Nanoparticle (poster), Yanagida, T., K.Nagashima, K.Oka, Y.Tsukahara, T.Yamauchi, H.Tanaka and T.Kawai,: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium.

Enhancement of Oxide VLS Growth by Carbon on Substrate Surface (poster), Yanagida, T., A.Marcu, H.Matsui, K.Nagashima, K.Oka, K.Yokota, M.Taniguchi, H.Tanaka and T.Kawai,: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium.

Surface Effect on Transport Properties of In-situ Formed MgO/NiO Heterostructured Nanowires (poster), Oka, K., T.Yanagida, K.Nagashima, H.Tanaka, S.Seki, Y.Honsho, M.Ishimaru and T.Kawai,: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium.

Heterointerface Effect on Transport and Magnetic Properties of Heterostructured Nanowires using Transition Metal Oxides Toward Ultimate Non-Volatile Memory Devices, (poster), Yanagida, T., K.Nagashima, K.Oka, S.Seki, H.Tanaka and T.Kawai,: 8th Japan-Korea Symposium on Materials & Interfaces.

Heterointerface Effect on Transport and Magnetic Properties of Heterostructured Nanowires using Transition Metal Oxides, (poster), Yanagida, T., K.Nagashima, K.Oka, S.Seki, H.Tanaka and T.Kawai,: Material Research Society Fall Meeting.

Transport Properties of Heterostructured Titanate Nanowires (poster), Nagashima, K., T.Yanagida, K.Oka, M.Taniguchi, S.Seki, H.Tanaka and T.Kawai,: Material Research Society Fall Meeting.

Non-volatile Memory Switching on Individual Titanate Heterostructured Nanowire (poster), Nagashima, K., T.Yanagida, K.Oka, M.Taniguchi and T.Kawai,: The 12th Sanken International Symposium.

Dynamic Mechanism of Oxide Nanowire VLS Growth (poster), Nagashima, K., T.Yanagida, K.Oka, and T.Kawai,: The 12th Sanken International Symposium.

Unipolar Resistive Switching Characteristics of Low-Temperature Grown Tin Oxide Poly-crystalline Thin Films for Non-volatile Memory Application, (poster), Nagashima, K., T.Yanagida, K.Oka, and T.Kawai,: The 12th Sanken International Symposium.

Non-volatile Bipolar Resistive Memory Switching in Single Crystalline NiO Heterostructured Nanowire (poster), Oka, K., T.Yanagida, K.Nagashima and T.Kawai,: The 12th Sanken International Symposium.

Strained Oxide Nanowires and the Non-volatile Memory Applications, (invited), Yanagida, T., K.Nagashima, K.Oka and T.Kawai,: Workshop on SAKURA Project.

Metal Oxide Nanowires: Synthesis, Nano-properties and Non-volatile Memory Applications (invited), Yanagida, T., K.Nagashima, K.Oka and T.Kawai,: Workshop on INL.

NanoWell based Electrochemical NanobioCHIP toward mult-Nanomedicine (invited), H.Y.Lee,T.Kawai: The 6th Japan-Korea Nanotech Industrialization Forum.

Integrated Biocompatible Nanobiochip (invited), H.Y.Lee: The 3rd CNU-SANKEN Joint Symposium on Advanced Materials Science.

Toward Digital NanoBioCHIP (invited), H.Y.Lee,T.Kawai: Invited Seminar, Department of veterinary and biomedical science, Penn State Neuroscience Institute, The Pennsylvania State University.

Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Digital NanoBioChip (invited), H.Y.Lee,T.Kawai: Special invited

seminar, Microbiochip Center, Hanyang University.

Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Digital NanoBioChip (invited), H.Y.Lee,T.Kawai: Special invited seminar, Nanoscience and technology Institute, Seoul National University.

Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Digital NanoBioChip (invited), H.Y.Lee,T.Kawai: Special invited seminar, Departemnt of bioengineering, Korea University.

Nano-Biochips Integrated through Soft lithography and Programmed Self-organization toward Single Molecular Analysis (plenary), H.Y.Lee,T.Kawai: The 2nd Thailand Nanotechnology Conference.

Advanced Bio-Devices Toward Single Molecular Assay (plenary), H.Y.Lee,T.Kawai: Biotronics2008.

Nanosocket Geometry based Digital BioChip-Devices (invited), H.Y.Lee: Special Invited Seminar, Department of Chemical Engineering Pohang University of Science and Technology (POSTECH).

Time-resolved Electrostatic Force Detection by Frequency Shift Mode (poster), T. Matsumoto, T. Kawai: 11th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy Madrid 2008,September 16-19, (2008), Madrid, Spain.

Elctric Dipoles of Surface Nano-Structures on Insulating Substrates (poster), F. Yamada, A. Takagi, E. Mikamo-Satoh, T. Matsumoto, T. Kawai: 11th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy Madrid 2008,September 16-19, (2008), Madrid, Spain.

Integrated NanoBiochip through Soft NanoLithography (invited), B.- K. Lee, H.- Y. Lee, T. Kawai: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium,September 29–October 1, (2008) , Osaka, Japan.

Time-resolved Electrostatic Force Detection by Frequency Shift Mode, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology,November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Molecule Recognition Imaging by Frequency Shift Detection on Liquid (poster), T. Matsumoto, T. Kawahara, H. Hokonohara, M. Kawano, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology,November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Electric Dipoles of Surface Nano-Structures on Insulating Substrates (poster), F. Yamada, A. Takagi, E. Mikamo-Satoh, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology,November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Force Measurement between Protein, IL-6 and IL-6 Receptor, Immobilized at N-terminal (poster), H. Hokonohara, A. Takagi, T. Matsuura, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology,November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Arrays Mn12 Complex with DNA Template, Y. Segawa, F. Yamada, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology,November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Conduction through Biomolecular Arrays, T. Matsumoto, T. Kawai: 4th International Meeting on Molecular Electronics elecml'08,December 8-12, (2008) Grenoble, France.

Transverse Conduction DNA Probed by Simultaneous Measurements of STM and Non-contact AFM (poster), T. Matsumoto, Y. Maeda, T. Kawai: 4th International Meeting on Molecular Electronics elec mol'08, December 8-12, (2008) Grenoble, France.

Metal Oxide Nano Physics (invited), T. Kawai: Department of Physics Bangladesh University of Engineering & Technology Seminar, Department of Physics Bangladesh University of Engineering & Technology, 2008.05.16.

Physical method for characterizing a single molecule, especially for DNA (invited), T. Kawai: Workshop in Bangkok, 2008.05.27.

NanoWell Array-based Digital BioChip Platform (invited), T. Kawai: 9th WSEAS Int. Conf. On MATHEMATICS AND COMPUTERS IN BIOLOGY AND CHEMISTRY(MCBC'08)ACADEMIA ROMANIA(Calea Victoriei 125, Sector 1, Bucharest, Romania)2008.06.24-26.

DNA Nanotechnology (invited), T. Kawai: Special Symposium on Emerging Science and Technology, Hanyang University, Seoul, Korea, 2008.06.30.

DNA Nanotechnology (invited), T. Kawai: Special Symposium on Emerging and Technology, Hanyang University, Korea, 2008.06.30.

Single-molecule sequencing of deoxyribonucleic acid using scanning tunneling microscopy, T. Kawai: Seeing at the Nanoscale VI, Maritim Proarte Hotel, Berlin, Germany, 2008.07.09-1.

Single-molecule sequencing of deoxyribonucleic acid using scanning tunneling microscopy, T. Kawai: 2008 International Conference on Nanoscience + Technology, Keystone Resort & Conference Center, Keystone, Colorado, USA, 2008.07.20-25.

Nano-Biochips Integrated through Soft Lithography and Programmed Self-organization toward Single Molecular Analysis (plenary), T. Kawai: The 2nd Thailand Nanotechnology Conference 2008 (Plenary Lecture), Phuket Graceland Resort and Spa Hotel, Phuket, Thailand, 2008.08.13-15.

Nano-fabrication and Nano-properties in Transition Metal Oxide Semiconductors (invited), T. Kawai: The 14th International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications, The Ramada Plaza Jeju hotel, 2008.08.26-29.

Heterostructured Nano-Oxides and Their Functionalities, T. Kawai: 15th International Workshop on Oxide Electronics, The Stanley Hotel(Estes Park, Colorado, USA), 2008.09.14-17.

Convergence of bio semiconductor technology (invited), T. Kawai: BIOTronics 2008 (International Conference on Biosensors, Biochips, and Bioelectronic Devices), Jeju, Korea, 2008.10.08.

Single Molecular Analysis of DNA and Protein (invited), T. Kawai: Special Invite Seminar, Department of Chemical Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH), 2008.09.29-10.01.

Biological processes on a membrane observed by atomic force microscopy, T. Kawai: AFM BioMed Conference, Hyatt Regency Monterey(Monterey, California, USA), 2008.10.15-18.

AFM Lithography for the Functional Metal Oxide Devices (plenary), T. Kawai: 2008 International Workshop on Tip-Based Nanofabrication (Plenary Lecture), Howard International House, Taipei, Taiwan, 2008.10.19-21.

Ferroelectric Control of Carrier Mediated Ferromagnetism in (Fe,Zn)3O4 with High Curie Temperature in Field Effect Transistor Structure, T. Kawai: MRS 2008 FALL MEETING, Hynes Convention Center and Sheraton Boston Hotel(Boston, Massachusetts, USA), 2008.12.01-05.

Minute Signaling Recognition for Smart Bio-Device Systems (invited), T. Kawai: BMMP-9, Npyori Conference Hall, Nagoya University, Nagoya, Japan, 2009.01.20-23.

DNA Nanotechnology toward Single Molecular Sequencing (invited), T. Kawai: INDO-JAPAN WORKSHOP ON "NANOBIOTECHNOLOGY & NANODEVICES", SASTRA University, Thanjavur, India, 2009.01.23-24.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

川合 知二 Nanotech 実行委員長

[国内学会]

応用物理学会	26 件
日本物理学会	5 件
日本化学会	4 件
分子科学会	5 件
日本生物物理学会	4 件
ナノ学会	1 件

[取得学位]

学士 (基礎工学)	
今井 佑輔	人工細胞膜系におけるバイオ分子の構造と機能計測を目指して
修士 (理学)	
庄司 昂平	電気計測による単一分子識別
修士 (基礎工学)	
岡敬 啓祐	ニッケル酸化物のナノ構造創製と物性評価
山中 理	超高集積スピネル Fe 酸化物ナノドットアレイの磁気特性とナノヘテロスピンデ バイス応用
五嶋 数哉	原子間力顕微鏡ナノリソグラフィによって作製された磁性ナノ細線の相転移

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
新学術領域 (領域 型)		
川合 知二 (総括 班)	分子ナノシステムの創発化学	9,880
川合 知二 (川合 班)	遷移金属酸化物ナノ構造体における階層を越えたプログラム自 己創発化学	19,890
新学術領域 (課題提 案型)		
谷口 正輝	ゲーティング固体ナノポアを用いた DNA シーケンサーの開発	11,830

基盤研究(A)			
川合 知二	DNA ナノ構造体の創成と物性の研究		10,140
特定領域研究 (公募)			
谷口 正輝	ハイコンダクタンス単一分子接合に向けた電極—分子界面の創製		2,500
若手研究(B)			
谷口 正輝	量子伝導性有機分子の創製		2,700
柳田 剛	酸化物ヘテロナノワイヤ構造体の創成と物性評価		2,500

[受託研究]

川合 知二	科学技術振興費	阪大複合機能ナノファウンダリ	147,000
川合 知二	NEDO	バイオ診断ツール実用化開発 (東レ(株) 前処理装置を搭載した高感度遺伝子多型検出バイオチップシステムの開発	6,600
川合 知二	科学技術振興費	「バイオテクノロジー研究拠点の形成」生命分子の集合原理に基づく分子情報の科学研究ネットワーク拠点	6,470
川合 知二	科学技術振興調整費	先端融合イノベーション創出拠点の形成」生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報システム「ナノ材料領域」	97,600
谷口 正輝	Panasonic	被覆共役分子を用いた分子デバイスの解析・評価に関する研究	1,100

[共同研究]

谷口 正輝	信越化学工業	有機ポリマーを用いた有機デバイスの開発	2,100
柳田 剛	日本学術振興会 二国間 (日仏) 交流共同研究事業 SAKURA	遷移金属酸化物における動的歪み効果に関する学際研究	1,000

[その他の競争的研究資金]

谷口 正輝	科学技術振興機構	超高集積分子デバイスの創製	27,300
田中 裕行	科学技術振興機構	単一分子 DNA のナノポアシーケンシング	28,478
柳田 剛	科学技術振興機構	酸化物ヘテロナノワイヤ構造体による不揮発性メモリ素子の創製	1,000
柳田 剛	科学技術振興機構	[平成20年度シーズ発掘試験] 酸化物ヘテロナノワイヤを用いたクロスバー構造メモリデバイスの開発	2,000

柳田 剛	総務省 SCOPE		無機・有機融合型ヘテロナノワイヤのネットワーク構造体を用いた超 Tbit 級不揮発性メモリ素子の研究開発	8,736
柳田 剛	KRF		ソフトロソグラフィー法によるコアシェル構造を有する酸化物ナノワイヤメモリデバイス	950
柳田 剛	村田学術振興財団 研究助成		酸化物ヘテロナノワイヤ構造体を用いた制限ナノ空間における電界誘起抵抗スイッチング現象の研究	1,800
李 恵ヨン	科学技術振興機構		微量・微細電気信号分析用の信頼性・生体親和性ナノアレイバイオチップの創製	2,000
李 恵ヨン	日本証券奨学財団		層状ケイ酸塩/酸化チタン/生分解性ポリ乳酸ナノコンポジットによる分解の高速度化	1,300

セラミック機能材料研究分野

教授	小林 光
助教授	高橋 昌男
助手	延谷 宏治、松本 健俊
客員教授	岩佐 仁雄、寺川 澄雄、中戸 義禮
研究支援推進員	正司 雅美
研究員	山田 幹浩、吉田 亮、モタハル マズンデル、井川 麻衣
大学院学生	マダニ モハマド、一花 裕一、金 佑柄、岩田 隆、柳瀬 隆、 大仲 亜由美、黒木 貴久、田中 峻介、東 裕子
学部学生	深谷 洋介
事務補佐員	黒崎 千香、野櫻 玲子

a) 概要

半導体技術は、急速に進歩する現代社会を支えているといっても過言ではない。当研究分野では、新規の半導体化学プロセスを開発することによって、種々の半導体デバイスの高性能化と低コスト化を目指す研究を行っている。半導体デバイスとしては、(1)エネルギー問題と環境問題の解決を目指した太陽電池、(2)LSIの基本構造である金属-酸化物-半導体(MOS)デバイス、(3)液晶ディスプレイに用いられる薄膜トランジスターに関する基礎研究を行っている。また、上記デバイスの特性を大きく影響する半導体界面の高感度観測に関する研究も行っている。

b) 成果

・化学的手法を用いたシリコンとシリコンカーバイドの基板上への酸化薄膜の低温創製と TFT や LSI への応用

液晶ディスプレイの駆動などに用いられる TFT は、硝子基板に堆積した多結晶シリコン上に、プラズマ気相成長法 (CVD法) を用いて SiO₂ 膜を堆積する方法で製造されている。CVD法で SiO₂ 膜を堆積する理由は、硝子基板を用いるために良質の SiO₂ 膜が形成できる高温熱酸化法 (800°C以上) を利用できないためである。堆積膜は膜質が悪く、さらに凹凸のある多結晶シリコン上に均一な膜厚で SiO₂ 膜を形成することが不可能であり、その結果十分に低いリーク電流を達成するためには 50nm 程度の大きな膜厚を必要とする。さらに、堆積法では堆積前の表面が堆積後に界面になるため、表面汚染や不完全な結合の存在により界面特性は悪い。これらの結果、消費電力が増大し、また画像処理速度が低下する。

我々は、硝酸を用いて約 120°C の低温でシリコンを酸化して SiO₂ 厚膜を形成できる「二段階硝酸酸化法」を開発した。これは、シリコンを濃度が約 40% の硝酸に浸漬して、その後濃度 68% の共沸硝酸に浸漬する方法である。二段階硝酸酸化法を用いて、15nm 以上の膜厚を持つ SiO₂ 膜を約 120°C の低温で形成することができた。一段目の硝酸酸化では、ナノオーダーサイズ以下の細孔が存在する極薄 SiO₂ 膜が形成できる。二段目の浸漬中に、この細孔で共沸硝酸が分解して、酸化力の非常に強い酸素イオン (O⁻) が生成するために、120°C という低温でも SiO₂ 厚膜が形成できる。二段階硝酸酸化法で創製した SiO₂/シリコン構造は、従来の CVD法 に比較して格段に良好な電気特性を持つことを見出した。特に、金属不純物濃度 10ppt 以下の超高純度硝酸を用いて酸化した場合、リーク電流密度は 800°C 以上の高温で形成される熱酸化膜に匹敵した。二段階硝酸酸化法で多結晶シリコン薄膜を酸化した場合、凹凸のある表面にも均一な膜厚の SiO₂ 膜が形成できた。硝酸酸化法で形成した SiO₂ 膜は良質であることから、SiO₂ 膜厚を減少でき、TFT の低消費電力化、画像処理速度の向上などの高性能化が達成できると考えられる。さらに、硝酸酸化法では約 120°C の低温で SiO₂ 膜が形成できるため、PET などのプラスチック基板上に TFT を作製することも可能となり、フレキシブル TFT が達成できると期待される。

次に、32×40cm² のサイズの TFT 基板用の硝酸酸化装置を改良し、重金属汚染が全反射蛍光 X 線の検出

限界以下で、LSI(大規模集積回路) に用いることの出来る 3×10^9 atoms/cm²以下に抑制することに成功した。また、沸騰硝酸中にSiウェーハやTFT基板を投入できるようになり、短時間での硝酸酸化処理が可能になった。

また、原子レベルで平坦なSi(111)表面上に、原子レベルで平坦なSiO₂/Si界面を形成しながら、膜厚の均一なSiO₂薄膜を硝酸酸化法により形成することに成功した。68wt%の共沸硝酸酸化中で、121°Cの低温で、硝酸酸化を行った。原子レベルで平坦でないSi表面上の硝酸酸化膜と比較して、Si²⁺のサブオキシドの密度は、半分まで低下し、価電子帯不連続エネルギーも、0.1 eV大きかった。リーク電流密度もより低く、250°Cの水素雰囲気下でアニールすることにより、ゲート電圧が1 Vで0.5 A/cm²まで、大きく低減することに成功した。

約9 nmの比較的厚い硝酸酸化膜の形成に、硝酸蒸気中で500°C以下で加熱することにより、成功した。熱酸化法の適用が困難である低温で形成したにもかかわらず、リーク電流密度は極めて低く、このリーク電流は、Fowler-Nordheim機構によるものであった。Fowler-Nordheimプロットより、伝導帯オフセット電圧は、500°Cで加熱した場合は2.57 eV、350°Cで加熱した場合は2.21 eVと求められた。また、XPS測定より、価電子帯オフセット電圧は、500°Cで加熱した場合は4.80 eV、350°Cで加熱した場合は4.48 eVと見積もられた。従って、SiO₂薄膜のバンドギャップエネルギーは、500°Cで加熱した場合(8.39 eV)は、350°Cでの加熱でした場合よりも0.68 eV大きくなることを明らかにした。500°Cで加熱した方が、バンドギャップエネルギーが大きくなる理由としては、SiO₂の原子密度が高いこと (2.46×10^{22} /cm³) やSiO₂中にトラップ準位がないことが考えられる。

3C-SiCウェーハ基板上に、硝酸酸化法を用いて、SiO₂酸化膜を形成し、この酸化膜の特性についても検討した。SiCは、ワイドバンドギャップ化合物や高熱伝導性化合物として知られており、パワーデバイスへの応用が期待されている化合物半導体である。さらに、電子の移動度がSiよりも極めて大きいため、高周波デバイスへの応用も期待されている。しかし、これまで、熱酸化膜法では、SiO₂薄膜を形成する際に、Siは下地から引き抜かれるが、Cは燃焼せずにSiC-SiO₂界面に蓄積されて、MOSTランジスタの特性が極めて悪いことが知られている。そこで、水素雰囲気中で400°Cで加熱してSiC表面を平坦化した後、二段階硝酸酸化法を用いて、SiO₂薄膜を形成したところ、10 nm以上の均一な酸化膜を容易に形成でき、極めて低いリーク電流密度を示した。これにより、二段階硝酸酸化法によってSiCウェーハ上に形成したSiO₂薄膜は、MOSTランジスタへの応用を期待できる電気特性を示すことを明らかにした。

・新規化学反応を用いる半導体欠陥消滅型洗浄法の開発

新規の半導体洗浄法「非エッチング欠陥消滅型洗浄法」を開発した。この半導体洗浄技術では、半導体上のシアン化物イオンが金属汚染物と非常に安定な錯イオンを形成することによってこれを除去する。このため、洗浄液中に除去された金属の再付着が起これずに、 10^9 原子/cm²オーダー以下にまで金属汚染を除去でき、さらに洗浄液の反復使用が可能である。この洗浄液の金属汚染除去能力は非常に大きく、従来の半導体洗浄液の濃度が5%程度であることに対して、0.2%以下の濃度で十分な洗浄能力を有する。さらに、従来の半導体洗浄液が50~80°Cで使用する必要があったのに対して、室温で使用できる。その上、この半導体洗浄液は半導体中の欠陥準位(シリコンダングリングボンドなど)を消滅する能力を有しており、LSI、TFT、太陽電池等の半導体デバイスの特性を向上することができる。

凹凸の大きいSiC基板上のCuなどの金属汚染を、従来から用いられているRCA法と本研究室で開発したDPEL法の組み合わせにより、完全に除去することに成功した。SiC基板表面に強く結合した金属汚染は、RCA法では、SiC表面を犠牲酸化できないために、その後のエッチングによって十分に除去できないが、シアン化物イオンと金属は安定な錯体を形成するためDPEL法により除去できる。一方、深い凹部に吸着した金属汚染は、嵩高い錯体の形成が必要なDPEL法は不利で、むしろRCA法により除去されることが分かった。

[原著論文]

Ultrathin SiO₂ layer on atomically flat Si(111) surfaces with excellent electrical characteristics formed by nitric acid oxidation method, W.-B. Kim, Asuha, T. Matsumoto, H. Kobayashi: Appl. Phys. Lett., 93 (7) (2008)

072101-1-3.

Complete prevention of reaction at HfO_2/Si interfaces by 1 nm silicon nitride layer, H. Kobayashi, K. Imamura, K. Fukayama, S.-S. Im, O. Maida, Y.-B. Kim, H.-C. Kim, and D.-K. Choi: Surf. Sci., 602 (11) (2008) 1948-1953.

Properties of thick SiO_2/Si structure formed at 120°C by use of two-step nitric acid oxidation method, S. Imai, S. Mizushima, Asuha, W.-B. Kim, and H. Kobayashi: Appl. Surf. Sci., 254 (24) (2008) 8054-8058.

SiC cleaning method by use of dilute HCN aqueous solutions, M. Madani, Y.-L. Liu, M. Takahashi, H. Iwasa, and H. Kobayashi: J. Electrochem. Soc., 155 (2008) H895-H898.

On similar electrical, optical and structural properties of MOS structures prepared on a-Si:H/c-Si, porous silicon/c-Si, and c-Si, E. Pincik, H. Kobayashi, R. Brunner, M. Takahashi, J. Rusnak, and M. Jergel: Mater. Sci. Forum, 609 (2009) 11-25.

Investigation of deep interface traps in very-thin oxide/Si structures prepared at low temperatures using chemical solutions, J. Rusnak, M. Ruzinsky, K. Imamura, T. Matsumoto, M. Stefecka, M. Takahashi, H. Kobayashi, and E. Pincik: Mater. Sci. Forum, 609 (2009) 123-127.

On topographic properties of semiconductor surfaces and thin film systems, S. Jurecka, H. Kobayashi, M. Takahashi, R. Brunner, M. Madani, and E. Pincik: Mater. Sci. Forum, 609 (2009) 275-279.

Photoluminescence of passivated a-Si:H, R. Brunner, H. Kobayashi, M. Kucera, M. Takahashi, J. Rusnak, and E. Pincik: Mater. Sci. Forum, 609 (2009) 281-285.

Passivation of defect states in Si-based and GaAs structures, E. Pinčík, H. Kobayashi, R. Brunner, M. Takahashi, Y.-L. Liu, L. Ortega, K. Imamura, M. Jergel, and J. Rusnák: Appl. Surf. Sci., 254 (24) (2008) 8059-8066.

Band alignment of SiO_2/Si structure formed with nitric acid vapor below 500°C , K. Imamura, M. Takahashi, S. Imai, and H. Kobayashi: Surf. Sci., 603 (7) (2009) 968-972.

シリコン材料表面の金属除去用新洗浄溶液, 高橋昌男、小林光: クリーンテクノロジー, 18 (10) (2008) 42-46.

酸化薄膜の低温形成と酸化膜の電気特性評価, 松本健俊、アスハ、今村健太郎、小林光: 表面科学, 29 (8) (2008) 498-502.

[特許]

「半導体基板、半導体装置およびその製造方法」小林光、特願 2008-208398

「半導体への絶縁性被膜の形成方法および半導体装置の製造方法」小林光、柳瀬隆、特願 2008-224467

「絶縁性被膜の形成方法および半導体装置の製造方法」小林 光、柳瀬 隆、 特願 2009-025764 (特願 2008-224467 の国内優先権主張出願)

「絶縁膜の形成方法、半導体装置の製造方法および半導体装置の製造装置」小林 光、特願 2009-77984

[国際会議]

Low temperature nitric acid oxidation of Si (NAOS) for fabrication of gate oxides in LSI and TFT (invited), *H. Kobayashi: The 1st International Symposium on Hybrid Materials and Processing, Busan, Korea, Oct. 27-29, 2008.

Nitric acid oxidation of Si (NAOS) method for fabrication of ultra-low power thin film transistors (invited), *H. Kobayashi, T. Matsumoto, M. Yamada, S. Terakawa, S. Imai: New Processing and Nanostructure/property Relationship for Multi Functional Materials.

Nitric acid oxidation of Si at 120°C to fabricate MOS Structure with excellent electrical characteristics (invited), *H. Kobayashi: 1st International Conference on Thin Films and Porous Materials, Zeralda, Algiers, May 19-22, 2008.

Surface cleaning and defect passivation by the use of cyanide solutions (invited), *M. Takahashi: 1st International Conference on Thin Films and Porous Materials, Zeralda, Algiers, May 19-22, 2008.

Semiconductor defect passivation etch-less cleaning method using HCN solutions with ppm order concentration (poster), *H. Kobayashi: 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design.

Nitric Acid Oxidation of Si (NAOS) to Improve Si device characteristics and Application to Thin Film Transistors (poster), *T. Matsumoto, Asuha, S. Imai, S. Mizushima, M. Takahashi, J. Rusnák, K. Imamura, E. Pinčík, H. Kobayashi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Low temperature formation of SiO₂/Si structures for LSI and TFT by nitric acid oxidation of Si (NAOS) method (poster), *T. Matsumoto, W.B. Kim, J. Rusnák, K. Imamura, Asuha, S. Imai, E. Pinčík, H. Kobayashi: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, Nov. 9-13, 2008.

Ultrathin SiO₂/Si(111) structure with low leakage current density formed by nitric acid oxidation method, *W.-B. Kim, T. Matsumoto, H. Kobayashi: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, Nov. 9-13, 2008.

SiC cleaning method by use of dilute HCN aqueous solutions, *M. Madani, Y.-L. Liu, M. Takahashi, H. Iwasa, H. Kobayashi: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, Nov. 9-13, 2008.

Semiconductor cleaning by use of hydrocyanic acid solutions with extremely low concentrations, *M. Takahashi, Y. Higashi, H. Iwasa, H. Kobayashi: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, Nov. 9-13, 2008.

On-step and two-step NAOS methods for fabrication of SiO₂/Si structure with excellent electrical characteristics (invited), *H. Kobayashi: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

Passivation of defect states in surfaces and edge regions on pn-junction Si solar cells by use of hydrogen cyanide solutions (invited), *M. Takahashi: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

Non-Gaussian photoluminescence peaks of thin a-Si:H layers (poster), *R. Brunner, H. Kobayashi, M. Kučera, M. Takahashi, M. Jergel, E. Pinčík: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

Acoustic spectroscopy of Si/SiO₂ structures with ultrathin SiO₂ layers formed with nitric acid oxidation (poster), *P. Bury, H. Kobayashi, M. Takahashi, P. Sidor, P. Hockicko: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

HNO₃ concentration dependence of electrical characteristics of SiO₂/Si structure formed by NAOS method (poster), *S. Imai, K. Imamura, H. Kobayashi: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

SiC cleaning method by use of dilute HCN aqueous solutions (poster), *M. Madani, Y.-L. Liu, M. Takahashi, H. Iwasa, H. Kobayashi: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

On Electrical, Optical and Structural Properties of Si-based Structures (poster), *E. Pinčík, H. Kobayashi, R. Brunner, M. Takahashi, K. Imamura, M. Kučera, T. Shishido, J. Rusnák, T. Matsumoto, M. Jergel, M. Madani, M. Mikula, M. Uragou, S. Jurečka, and M. Kopani: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

Investigation of very thin SiO₂/Si structures by charge version of DLTS using small excitation voltage steps (poster), *J. Rusnák, K. Imamura, T. Matsumoto, H. Kobayashi, and E. Pinčík: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

SiO₂/Si structure fabrication at low temperature by novel nitric acid method (poster), *T. Yanase, M. Takahashi, T. Matsumoto, H. Iwasa, S. Terakawa, and H. Kobayashi: 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovakia, Nov. 24-27, 2008.

Nitric acid oxidation of Si (NAOS) method to form gate insulators in Si devices at 120°C (poster), *T. Matsumoto, W.-B. Kim, T. Yanase, Y. Fukaya, Asuha, M. Takahashi, and H. Kobayashi: The 12th SANKEN International Symposium.

New semiconductor cleaning method by use of ppm order HCN solutions (poster), *Y. Higashi, M. Takahashi, H. Iwasa, and H. Kobayashi: The 12th SANKEN International Symposium.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

小林 光	Applied Surface Science (編集委員長)
小林 光	2008 SSSI International Conference (顧問委員長)
小林 光	0th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (実行委員)
小林 光	4 th Vacuum and Surface Science Conference of Asia and Australia (編集委員)
高橋 昌男	Applied Surface Science (Guest Editor)

[国内学会]

日本化学会	1 件
日本物理学会	2 件
応用物理学会	6 件
表面・界面スペクトロスコピー	2 件

[取得学位]

修士 (理学)

岩田 隆

硝酸酸化法によるアルミニウム薄膜の低温酸化と酸化膜の特性

柳瀬 隆

新規硝酸酸化法による高性能 SiO₂/Si 構造の低温形成

[科学研究費補助金]

小林 光

基盤研究 (A)

硝酸酸化法による表面ナノ細孔を用いる SiO₂/SiC 構造の低温創製

17,810

[受託研究]

小林 光

科学技術振興機構

硝酸酸化法による TFT ゲート酸化膜の低温創製と低消費電力化

62,400

小林 光

日本学術振興会 二国間交流事業

新規欠陥消滅法及び低温酸化法のメカニズムとシリコン太陽電池への応用

2,500

[奨学寄附金]

松本 健俊

財団法人日揮・実吉奨学会

低融点基板上に形成するトランジスタのゲート絶縁膜の高速成長法と硝酸改質法の開発

1,000

松本 健俊

JFE21 世紀財団

半導体製造プロセスのグリーン化

2,000

フロンティア材料創製研究分野

教授	安藤 陽一
准教授	瀬川 耕司
助教	楠瀬 尚史、佐々木 聡 (平成 20 年 12 月 1 日採用)
特任研究員	Alexey TASKIN
大学院学生	韓 淵圭 (平成 20 年 9 月 30 日卒業)、橋本 英樹、文 淑英、朴 動鎮、 三輪 利幸、江藤 数馬、三棹 貴史
学部学生	濱 大祐、南 達哉
事務補佐員	影島 充紀

a) 概要

本研究分野では、試料作製から物性測定までを一貫して行うことにより新奇な材料が示す特徴的な電子機能物性の発現機構を探究し、その知見に基づいた画期的新材料の創製を目指している。特に注目するのは、高温超伝導、スピンホール効果、高効率熱電変換などの量子力学的機能である。上記の目的を達成するため、(1) フローティング・ゾーン法を用いた高品質単結晶成長や精密キャリア濃度制御などによる特色ある試料作製、(2) その特色ある試料を用いて先端無機材料が示す有用な量子機能の発現機構を探究、(3) 発現機構に関する知見を活かしてさらに優れた材料を創製、というプロセスで研究を推進している。

b) 成果

・銅酸化物高温超伝導体

我々のこれまでの研究により電子ドーピングが可能であることが明らかになったイットリウム系銅酸化物(Y,La)(Ba,La)₂Cu₃O₇に関して、この物質では電荷キャリアを正孔から電子まで連続的に変化させられることを利用して、モット絶縁体である銅酸化物における反強磁性転移のドーピング依存性を正孔ドーピング側と電子ドーピング側で直接比較することに成功した。

・鉄砒素系高温超伝導体

2008年2月にその発見が報告されて以来、超伝導研究にフィーバーを巻き起こしている新しい鉄砒素系高温超伝導体は試料合成が大変に難しい。我々は今年度中にSmFeAs(O,F)系で40 K以上の超伝導転移温度を示す多結晶試料の合成に成功するなど、この物質系の合成に関するノウハウを蓄積しつつある。このノウハウをもとにして、新しい構造の鉄砒素系高温超伝導体の探索を進めるとともに、LaFeAs(O,F)系の単結晶育成にも挑戦している。今年度中に新しい超伝導体に関する特許を1件申請し、さらにLaFeAs(O,F)系の微小な単結晶の育成にも成功した。

・鉄砒素系高温超伝導体関連物質

鉄砒素系高温超伝導体を合成する際のプリカーサとして使われるFeAsという2元系物質の輸送特性がこれまでほとんど知られていなかったので、鉄砒素系材料研究の基礎データとして供するため、この物質の単結晶を作製して基本的な輸送特性の測定を行った。

・スピンホール絶縁体

電子の持つスピンの向きをビット情報として利用するスピントロニクスにおいては、いかにデバイス中のスピンを制御するかが技術的課題である。もし磁場を用いずに電場でスピンを制御できるようになれば、スピントロニクス素子の超高密度化に道が開かれる。それを可能にする新原理として最近注目を集

めているのがスピンホール効果である。スピンホール効果は非磁性体に流す電流によって直接スピン流を発生させることのできる現象で、古典的な「磁場」の代わりに量子力学的な「スピン軌道相互作用」を利用する。特に、材料に特有のバンド構造に起因する「内因性スピンホール効果」を利用すれば、原理的にエネルギー散逸なしでスピン流を生成できることが理論的に予言されており、この効果に関する研究が新たな分野を形成しつつある。今年度は内因性スピンホール効果によってエネルギー散逸なしでスピン流を生成できることが提案されている「スピンホール絶縁体」の候補物質であるPbSとBi_{1-x}Sb_xの高品質単結晶を作製し、これらの材料におけるスピン物性の解明を様々な側面から進めた。

[原著論文]

Magnetic Field Induced Modification of Superfluid Density and Interplane Spectral Weight in YBa₂Cu₃O_y, A. D. LaForge, W. J. Padilla, K. S. Burch, Z. Q. Li, A. A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. N. Basov: Phys. Rev. B, 79 (10) (2009) 104516/1-8.

Quantum Phase Transition in the Magnetic-Field-Induced Normal State of Optimum-Doped High-Tc Cuprate Superconductors at Low Temperatures, F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G. S. Boebinger: Phys. Rev. Lett., 102 (1) (2009) 17004/1-4.

Mapping of the Formation of the Pairing Gap in Bi₂Sr₂Ca₂CuO_{8+δ}, K. K. Gomes, A. N. Pasupathy, A. Pushp, C. Parker, S. Ono, Y. Ando, G. Gu, and A. Yazdani: J. Phys. Chem. Solids, 69 (12) (2008) 3034-3038.

Implication of the Mott-Limit Violation in High-Tc Cuprates, Y. Ando: J. Phys. Chem. Solids, 69 (12) (2008) 3195-3198.

Appearance of Universal Metallic Dispersion in a Doped Mott Insulator, S. Sahrakorpi, R. S. Markiewicz, H. Lin, M. Lindroos, X. J. Zhou, T. Yoshida, W. L. Yang, T. Kakeshita, H. Eisaki, S. Uchida, S. Komiyama, Y. Ando, F. Zhou, Z. X. Zhao, T. Sasagawa, A. Fujimori, Z. Hussain, Z. X. Shen, and A. Bansil: Phys. Rev. B, 78 (10) (2008) 104513/1-6.

Inhomogeneous Magnetic-Field Response of YBa₂Cu₃O_y and La_{2-x}Sr_xCuO₄ Persisting above the Bulk Superconducting Transition Temperature, J. E. Sonier, M. Ilton, V. Pacradouni, C. V. Kaiser, S. A. Sabok-Sayr, Y. Ando, S. Komiyama, W. N. Hardy, D. A. Bonn, R. Liang, and W. A. Atkinson: Phys. Rev. Lett., 101 (11) (2008) 117001/1-4.

Sum Rules and Interlayer Infrared Response of the High Temperature YBa₂Cu₃O_y Superconductor in an External Magnetic Field, A. D. LaForge, W. J. Padilla, K. S. Burch, Z. Q. Li, A. A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. N. Basov: Phys. Rev. Lett., 101 (9) (2008) 97008/1-4.

Scanning Josephson Tunneling Microscopy of Single-Crystal Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ} with a Conventional Superconducting Tip, H. Kimura, R. P. Barber, S. Ono, Y. Ando, and R. C. Dynes: Phys. Rev. Lett., 101 (3) (2008) 37002/1-4.

Superstructure Formation at the Metal-Insulator Transition in RBaCo₂O_{5.5} (R=Nd,Tb) as Seen from Reciprocal Space Mapping, D. Chernyshov, V. Dmitriev, E. Pomjakushina, K. Conder, M. Stingaciu, V. Pomjakushin, A. Podlesnyak, A. A. Taskin, and Y. Ando: Phys. Rev. B, 78 (2) (2008) 24105/1-7.

Electronic Origin of the Inhomogeneous Pairing Interaction in the High-Tc Superconductor Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+δ}, A. N. Pasupathy, A. Pushp, K. K. Gomes, C. V. Parker, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. D. Gu, S. Ono, Y. Ando, and A. Yazdani: Science, 320 (5873) (2008) 196-201.

Pitfalls in the Analysis of Low-Temperature Thermal Conductivity of High-Tc cuprates, Y. Ando: J. Phys.: Conf. Series, 108 (2008) 012001/1-4.

Synthesis of SiC/BN Nanocomposite Powders by Carbothermal Reduction and Nitridation of Borosilicate Glass, and the Properties of Their Sintered Composites, T. Kusunose, T. Sekino, Y. Ando: Nanotechnology, 19 (2008) 1-9.

Contact Damage of Machinable Aluminum Nitride/Boron Nitride Nanocomposites, T. Kusunose, T. Sekino, Y. Ando: J. Ceram. Soc. Jpn, 116 (6) (2008) 762-766.

Fabrication and Characterization of Aluminum Nitride/Boron Nitride Nanocomposites by Carbothermal Reduction and Nitridation of Aluminum Borate Powders, T. Kusunose, N. Sakayanagi, T. Sekino, Y. Ando: J. Nanosci. Nanotechnol., 8 (11) (2008) 5846-5853.

Electrochemical Growth of Vertically-Oriented High Aspect Ratio Titania Nanotubes by Rapid Anodization in Fluoride-Free Media, N. F. Fahim, T. Sekino, M. F. Morks, T. Kusunose: J. Nanosci. Nanotechnol., 9 (3) (2009) 1803-1818.

One-step Reverse Micelle Polymerization of Organic Dispersible Polyaniline Nanoparticles, Y.-G. Han, T. Kusunose, T. Sekino: Synth. Met., 159 (1-2) (2009) 123-131.

One-pot Synthesis of the Core-shell Structure Titania/Polyaniline Hybrid Materials: the Effect of the Sodium Dodecylsulfate Surfactant, Y.-G. Han, T. Kusunose, T. Sekino: Chem. Lett., 37 (8) (2008) 858-859.

Magnetocaloric Effect, Specific Heat and Adiabatic Temperature Change of $\text{Ho}_x\text{Er}_{1-x}\text{N}$ ($x=0.25, 0.5, 0.75$), Y. Hirayama, N. Tomioka, S. Nishio, T. Kusunose, T. Nakagawa, K. Kamiya, T. Numazawa, T.A. Yamamoto: J. Alloy Compd, 462 (1-2) (2008) L12-15.

Magnetocaloric Effect of Rare Earth Nitrides, Y. Hirayama, T. Nakagawa, T. Kusunose, T.A. Yamamoto: IEEE T. Magn., 44 (11) (2008) 2997-3000.

Simple One-step Synthesis of Water and Organic Media Soluble Gold Nanoparticles with Various Shapes and Sizes, S.-Y. Moon, T. Sekino, T. Kusunose, S.-I. Tanaka: J. Cryst. Growth, 311 (3) (2009) 651-656.

Thermal and Mechanical Properties of Zirconia/Monazite-type LaPO_4 Nanocomposites Fabricated by PECS, S.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, A. T. Hirvonen: Ceramic Engineering and Science Proceedings, 28 (3) (2008) 19-26.

Sound Velocity Measurements in the Low and the High Field Phases of the Nuclear-Ordered bcc Solid ^3He in Magnetic Fields, S. Sasaki, A. Nakayama, Y. Sasaki, T. Mizusaki: J. Low Temp. Phys., 151 (5-6) (2008) 1113-1148.

Optical Observations of Disorder in Solid Helium 4, S. Sasaki, F. Caupin, S. Balibar: J. Low Temp. Phys., 153 (3-4) (2008) 43-76.

Absence of Grain Boundary Melting in Solid Helium, S. Sasaki, F. Caupin, S. Balibar: J. Phys.: Condens. Matter, 20 (2008) 494228/1-6.

[解説、総説]

「多機能な構造用セラミックス複合材料の開発」楠瀬尚史、化学工業、59 [11] (2008) 49-54

[特許]

「超電導体及びその製造方法」安藤陽一、瀬川耕司、特願 2008-243148

[国際会議]

The Anomalous Hall Effect in an Anisotropic Ferromagnet $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ (poster), *A.A. Taskin, I. Tsukada, and Yoichi Ando: Symposium on Topological Aspects of Solid State Physics, Kyoto, Japan, June 24, 2008.

Two Gap Energy Scales in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ Observed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy (poster), *T. Yoshida, M. Hashimoto, K. Tanaka, N. Mannella, Z. Hussain, Z.-X. Shen, A. Fujimori, M. Kubota, K. Ono, S. Komiya, Y. Ando, H. Eisaki, and S. Uchida: International Symposium on Anomalous Quantum Materials (ISAQM2008), Tokyo, Japan, November 7-10, 2008.

Chemical Potential Jump between Hole- and Electron-Doped High-Tc Superconductors of Y-Based System (poster), *M. Ikeda, M. Takizawa, T. Yoshida, A. Fujimori, K. Segawa, and Y. Ando: 9th Korea-Japan-Taiwan Symposium on Strongly Correlated Electron System, Taiwan, November 21, 2008.

Magnetotransport Properties of Carrier-Controlled PbS Single Crystals (poster), *K. Eto, T. Kusunose, K. Segawa, and Y. Ando: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Magnetic Field-Induced Modification of Superfluid Density and Interplane Spectral Weight in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$, *A. Laforge, W. Padilla, K. Burch, Z. Li, A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. Basov: 2009 APS March Meeting, Pittsburgh, USA, March 18, 2009.

Quasiparticle Interference above and below T_c in Underdoped Cuprates, *A. Pushp, C. Parker, A. Pasupathy, K. Gomes, S. Ono, Y. Ando, J. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, and A. Yazdani: 2009 APS March Meeting, Pittsburgh, USA, March 19, 2009.

Fabrication of Electrically Conductive AlN by Rare Earth Oxycarbide Grain Boundary Phase (poster), *T. Kusunose, T. Sekino, K. Niihara, Y. Ando: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, - New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi Functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF Core University Program (CUP) Seminar between Japan and Korea), Awaji, Japan, Dec. 14-16, 2008.

Production of a Grain Boundary Phase as Conducting Pathway in Insulating AlN Ceramics (poster), *T. Kusunose, T. Sekino, Y. Ando: The 12th SANKEN International Symposium -Joint Meeting of The 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium, The 2nd SANKEN MSTeC Symposium, The 1st SANKEN Alliance Symposium - Frontiers of Science for Future Industries, Convention Center (MO Hall), Osaka Univ., Japan, Jan. 22, 2009.

Phase Transfer of Didodecyldimethylammonium Bromide Lipid Bilayer-Protected Gold Nanocrystals in Different Media, *S.-Y. Moon, T. Sekino, S.-I. Tanaka: The 4th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT4), Japan, Sendai, May 22-24, 2008.

One-Step Synthesis of the Core-Shell Structure Titania/Polyaniline Hybrid Materials: The Effect of the SDS Surfactant (poster), *Y.-G. Han, T. Kusunose, T. Sekino: The 1st International Symposium on Hybrid Materials

and Processing (HyMaP 2008), Korea, Busan, Oct. 2008.

Synthesis, Nanostructures and Physico-Chemical Properties of Ce-Modified TiO₂ Nanotubes (poster), *D.-J. Park, T. Sekino, T. Kusunose, S.-I. Tanaka: The 1st International Symposium on Hybrid Materials and Processing (HyMaP 2008), Korea, Busan, Oct. 2008.

Synthesis and Phase Transfer of Organic Bilayer-Protected Gold Nanocrystals in Different Media (poster), *S.-Y. Moon, T. Sekino, T. Kusunose, S.-I. Tanaka: 1st Workshop Tohoku University – EMAC – INSA, France, Albi, Dec. 1-2, 2008.

Direct Synthesis and Biocompatibility of Titania Nanotube Layers on Metal Substrates for Implant Biomaterial (poster), *T. Miwa, H. Nishida, H. Egusa, D.-J. Park, T. Sekino, S.-I. Tanaka: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, - New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi Functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF Core University Program (CUP) Seminar between Japan and Korea), Awaji, Japan, Dec. 14-16, 2008.

Thermoelectric Properties of Rare Earth Cobalt Oxide Solid Solutions R_{1-x}R_{2x}CoO₃ (poster), *H. Hashimoto, T. Kusunose, S. Tsukuda, T. Sekino, S.-I. Tanaka: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, - New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi Functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF Core University Program (CUP) Seminar between Japan and Korea), Awaji, Japan, Dec. 14-16, 2008.

Effects of Substituting A-Site Ions on Thermoelectric Properties of Perovskite-Type Rare Earth Cobalt Oxides R_{1-x}R_{2x}CoO₃, *H. Hashimoto, T. Kusunose, T. Sekino: Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2009), Grand New World Hotel, Xian, China, Jan. 13-16, 2009.

Synthesis, Functionalization, Processing and Assembly of Nanostructures (poster), *S.-Y. Moon, T. Sekino, S.-I. Tanaka: 33rd International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, Hilton Daytona Beach Resort & Ocean Center, Daytona Beach, Florida, USA, Jan. 18-23, 2009.

Visual Observation of Solid Helium Samples Grown at Constant Volume, *S. Sasaki, F. Caupin, S. Balibar: International Conference of Low Temperature Physics 25th.

Optical Observations of Defects in Solid 4He ~What is Supersolidity?~ (poster), *S. Sasaki, F. Caupin, S. Balibar: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

安藤 陽一 9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (組織委員)
安藤 陽一 12th Sanken International Symposium (委員長)

[国内学会]

日本物理学会 9 件
日本セラミックス協会 4 件

[取得学位]

学士 (工学)	
濱 大祐	化学輸送法による Na_xWO_3 の単結晶成長およびその評価
南 達哉	鉄オキシニクタイト高温超伝導体多結晶の合成と単結晶成長
修士 (工学)	
朴 動鎮	希土類修飾型酸化チタンナノチューブの創製とその多機能化
三輪 利幸	金属表面への酸化チタンナノチューブ直接合成とその生体適合性
博士 (工学)	
韓 淵圭	先進の電氣的機能を有するポリマー基ナノハイブリッドの設計と創製

[科学研究費補助金]

単位：千円

若手研究 (S)		
安藤 陽一	モット絶縁体とスピンホール絶縁体：普通でない絶縁体の物理の究明	31,980
若手研究 (B)		
瀬川 耕司	高温超伝導体母物質における PIN 接合の創製とその物理	2,340
特定領域研究		
安藤 陽一	ランタン系銅酸化物における量子振動の探索	2,100
(分担者として配分されたもの)		
基盤研究 (B) (分担)		
楠瀬 尚史	環境・エネルギー創製システムを指向した酸化物ナノチューブの高次構造制御と機能共生	520

[奨学寄附金]

楠瀬 尚史	住友金属セラミックスアンドクウォーツ (株)	1,000
楠瀬 尚史	電気化学工業 (株)	950
楠瀬 尚史	日本タングステン (株)	500

[共同研究]

安藤 陽一	(財)電力中央研究所	遷移金属酸化物の物性研究を通じた新材料開発	1,000
-------	------------	-----------------------	-------

[その他の競争的研究資金]

安藤 陽一	米国 AFRL Asian Office of Aerospace Research and Development, Special Grant	Exploration of New Principles in Spintronics Based on Spin Hall Insulators	5,350
-------	---	--	-------

エネルギー材料研究分野

教授	谷村 克己
准教授	田中 慎一郎
助教	稲見 栄一
助教	成瀬 延康
大学院学生	市林 拓
研究支援推進員	布垣 昌伸
特任事務職員	野澤 幸代

a) 概要

本研究分野では、固体の電子系が励起された際に発生する種々の原子過程（電子励起誘起原子過程）の機構を解明し、誘起された原子過程を制御・組織化して新規な高次機能構造を創製する事を目指している。このような励起状態を発生・制御した固体構造創製の研究は、従来の手法が有していた熱力学的平衡条件の制約を大きく打破し得る、新しい材料科学・物質科学の1つの展開方向である。固体の励起手法として、レーザー光、電子線、量子ビーム、反応性プラズマ、等多彩な励起源を駆使して各励起状態を選択的に発生させ、誘起される原子過程を、固体内の原子の振動周期よりも速いフェムト秒領域で動力学的に直接追跡すると共に、走査型トンネル顕微鏡を用いて、原子分解能で構造変化を直接観察する研究を行っている。

更に最近では、原子過程を誘起する電子系の励起直後の変化を超高速で直接測定するためのフェムト秒時間分解光電子分光、および、固体の構造変化を 10^{-13} 秒の時間領域で直接捉えるためのフェムト秒時間分解電子線回折分光の研究も展開し、固体励起物性の全面的な理解と把握を目指した研究を推進している。主な研究内容は、励起手法による半導体表面上の高次機能ナノ構造創製の基礎過程の研究、フェムト秒2光子光電子分光による半導体結晶内部および表面の超高速キャリア動力学の研究、絶縁性固体に対するフェムト秒時間分解分光法による励起状態の超高速緩和過程の研究、光誘起構造相転移動力学の研究、および応用研究としての反応性プラズマとイオンビーム等を用いた機能性材料表面創製の研究である。

b) 成果

・半導体表面上の励起誘起原子過程における確率共鳴効果の研究

(1) Si(111)-(7x7)上のレーザー励起ボンド切断過程における確率共鳴効果の研究

レーザーの価電子系励起による半導体表面での表面原子ボンド切断の基本的機構は、価電子系に注入された正孔の非線形局在によって発生する動的過程である。この場合、格子系の熱揺らぎは正孔の局在過程およびボンド切断過程に重要な役割を演じると期待される。この熱的励起と電子系励起の相乗効果の機構を解明すべく、フェムト秒レーザー励起によるボンド切断効率の基板温度依存性を研究した。今までの研究で、室温における機構のほぼ全容が解明されている Si(111)-(7x7)表面を対象とした研究の結果、基板温度上昇とともに、正孔の局在確率が指数関数的に増加し、その結果、ボンド切断効率が大きく増加することを見出した。この結果は、電子系励起に伴う超高速かつ動的な電子-格子系の劇的変化が、系の熱揺らぎによって大きく増進される事を明確にしている。従来まで「活性化エネルギー」として理解されてきた多くの励起誘起の現象における温度依存性の現象を、物理的に正確に把握する概念的基礎を提示する結果である。

(2) 低エネルギー高分解能電子ビーム励起による半導体表面における局所的ボンド切断機構の研究

荷電粒子と固体電子系の相互作用は、光励起の場合と異なり、固体電子系の集団励起を誘起する。表面およびバルクにおけるプラズモンの発生は、電子系の空間的疎密状態を導き、固体結合状態に大きな効果を引き起こす。この効果を物理的に解明するため、Si(111)-(7x7)表面に対して、5~20eVの運動エネルギーを有する電子ビームを照射し、表面原子のボンド切断効率を電子エネルギーの関数として精密に測定した。その結果、Si表面のプラズモン励起によって、表面Si原子のボンド切断が効果的に誘起される事が明らかになった。誘起された構造変化の特徴は光励起の場合と酷似しており、プラズモン励起に伴う正孔の発生とその非線形局在が、表面原子のボンド切断を誘起するものと結論できる。このプラズモン励起による表面原子ボンド切断現象の発見は、今後の電子線リソグラフィの展開において、重要な意義を有する結果である。

・フェムト秒2光子光電子分光による表面励起動力学の研究

フェムト秒2光子光電子分光の手法を用いて、Si(001)-(2x1)表面、およびSi(111)-(7x7)表面における光励起電子の超高速動力学に関する研究を展開した。我々の実験装置の特徴であるポンプ光とプローブ光との独立な波長可変性を最大限に活用し、Siの代表的な光学遷移を誘起させた後の電子系の緩和動力学を、運動量とエネルギーを特定した状態ごとに時間分解的に直接観測する研究を行うとともに、励起された電子に対する動力学的研究のみならず、占有状態中に発生した価電子系正孔系の緩和動力学研究を行った。主要な成果は、以下の通りである。

(1) Si結晶におけるL-X intervalley散乱に対する超高速動力学の研究

昨年までの成果である結晶内部の伝導帯からの光電子放出ピークの同定と励起波長可変性を活用し、今まで実験的研究が不可能であったSi結晶中のL valleyからX valleyへのintervalley散乱過程に対する直接観測の研究を行った。その結果、L valleyに注入された励起電子は、高速なvalley内散乱のあと、180 fsの時定数でX valleyに散乱される事を見出した。その結果、散乱を支配する変形ポテンシャル相互作用定数として1.2 eV/Åの値を始めて決定した。X valleyへの散乱後、電子は電子温度1000Kの状態 で伝導帯底周辺で準熱化され、その後格子系との平衡に達する。

本結果は、我々の時間分解2光子光電子分光手法の特徴を最大限に生かし、今まで誰も解明しえなかった重要な過程に対する最初の研究例となっている。

(2) Si(001)-(2x1)表面におけるバルク電子系と表面電子系の遷移過程の研究

応用上最も重要な表面であり、いままでの精力的な研究によって表面電子状態の詳細が明らかにされているSi(001)-(2x1)表面を対象として、結晶内電子系を占有する電子が、どのような動力学を経て表面電子系へ遷移するかに関する直接的な知見を明らかにした。結晶電子系の励起に、赤外から紫外までのフェムト秒パルスを用い、光学遷移過程を選択した上でのバルク伝導電子および表面状態電子の分布変化を詳細に追跡した。その結果、

- 1) 結晶伝導帯周辺に準平衡分布した熱い電子は、励起後1ps以内に、急速な電子-正孔再結合による消滅過程を示し、2/3の濃度が消失する、
- 2) 格子系との平衡を達成した結晶伝導帯電子は、表面電子状態へ、表面並行な運動量を保存しつつ、遷移速度 $2.5 \times 10^{13} \text{s}^{-1}$ で遷移する、
- 3) 励起後数ps後の伝導電子の時間応答は、上記の遷移速度で決まる表面再結合速度と試料内部への拡散によって支配されること、

が明らかとなった。以上の知見は、放出光電子の角度分解および時間分解の双方を駆使することによってはじめて明らかとなった新たな知見である。

(3) Si(111)-(7x7)表面における価電子系正孔動力学の研究

最も代表的な再構成表面であるSi(111)-(7x7)を対象として、表面占有状態中に注入された正孔の動力学を、世界に先駆けて、フェムト秒時間領域の時間分解能で研究した。その結果、

1) 6 eV 程度の光子エネルギーを光電子プローブパルスとして用いることによって、従来の光電子分光では測定不可能であった、表面共鳴状態にある (7 x 7) 構造に固有な表面占有状態を明確に測定し、分散関係を明らかにした。詳細な偏光依存性から、大きな分散特性を示す **adatom** のバックバンド状態が、バルク価電子帯頂上から 0.4 eV 下に存在することを明らかにした。

2) 可視領域の 100fs 光パルス励起によって、占有状態からの光電子放出強度が 10%以上減少し、表面占有状態中への正孔注入が明確に観測された。注入された正孔は、励起後 150fs の時定数で急速に減少した後、15ps の時定数で特徴づけられる緩やかな消滅（回復）を示す。この結果は、バルク価電子帯と表面占有状態の間の電荷交換過程が、極めて遅い現象であることを示している。

これらの結果は、半導体表面における光誘起現象・化学反応やキャリア動力学の支配要因を統一的に理解する上で、極めて重要な知見である。

・光誘起構造相転移の研究

フェムト秒レーザーパルスの励起によって固体電子系を瞬時にかつ高密度に励起し、固体構造を新奇な構造相への変換させる光誘起構造相転移の研究を展開した。その結果、 sp^2 の平面構造で特徴づけられるグラファイトを、新奇な sp^3 結合構造を有する新しい構造相（ダイヤモンド相）へ変換させることに成功した。フェムト秒レーザーを制御された強度下で励起しつつ、表面構造を走査型トンネル顕微鏡で原子レベルの分解能で観測し、ダイヤモンド相の生成を確認した。この構造相は、グラファイトを構成する各平面が、光励起によってshear変位とともに面間隔の減少を伴うcompressionを誘起し、層間原子間に共有結合を発生させることによって、5nm程度の直径を有するドメイン様に形成される。

この結果は *Physical Review Letters* 誌に掲載され、その内容は、*Nature* 誌および *Nature Nanotechnology* 誌の *Research Highlight* の記事で紹介されている。

・励起効果を用いた非平衡材料プロセッシングの研究

・荷電粒子照射及びプラズマプロセスを利用した材料改質

粒子線照射・プラズマプロセス複合工程表面直接改質法を用いて、種々の金属材料の表面の高機能セラミック化し、耐超高温性、高熱伝導性、高硬度、耐摩耗性等の高機能性付与を目標とした応用研究を行った。反応性プラズマ処理により、Ti 表面層の TiC へのセラミック化に成功するとともに、実用化に向けての最大の問題であった、安定なプラズマ生成の技術的問題を克服し、実用化へ大きく前進した。

[原著論文]

Excitation-induced atomic desorption and structural instability of III-V compound semiconductor surfaces, K. Tanimura and J. Kanasaki, *Surf. Sci.* **602**, 3162–317 (2008).

Electronic properties and electron dynamics on the Si(001)-(2x1) surface with C-defects, S. Tanaka and K. Tanimura, *Phys. Rev. B* **77**, 195323-1-8 (2008).

Local bond rupture of Si atoms on Si(111)-(2x1) induced by the surface π - π^* excitation E. Inami and K. Tanimura, *Surf. Sci.* **603**, L63-L65 (2009).

Formation of sp^3 -bonded carbon nanostructures by femtosecond laser excitation of graphite. J. Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, H. Ohnishi, and K. Nasu, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 087402-1-4 (2009).

Ultrafast carrier relaxation in Si studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy: Intravalley scattering and energy relaxation of hot electrons T. Ichibayashi and K. Tanimura, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 087403-1-4 (2009).

Dynamics of bulk-to-surface electron transitions on Si(001)-(2x1) studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy, S. Tanaka, T. Ichibayashi, and K. Tanimura, *Phys. Rev. B* **79**, 155313-1-8 (2009).

Ultrafast carrier dynamics in Si and Si surfaces studied by femtosecond time-resolved two-photon photoemission spectroscopy, K. Tanimura and T. Ichibayashi, Proc. of SPIE, **7214**, 72141M-1-13 (2009).

100-femtosecond MeV electron source for ultrafast electron diffraction, J. Yang, K. Kan, N. Naruse, Y. Yoshida, K. Tanimura, Radiat. Phys. Chem. in press.

[国際会議]

Ultrafast carrier dynamics in Si and on Si surfaces studied by time-resolved twophoton photoemission spectroscopy (invited), K. Tanimura, 6th International Conference on Ultrafast Surface Dynamics, Kloster Banz, Germany, July 20-25, 2008

Ultrafast carrier dynamics on Si surfaces studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy (invited), K. Tanimura, Ultrafast Phenomena in Semiconductors and Nanostructure Materials XIII, San Jose, USA, January 25-28, 2009

Local bond rupture on Si surfaces induced by low-energy electron-beam excitation, J. Kanasaki and K. Tanimura, International workshop on "Low-Energy Electron Molecule Interaction: LEEMI-EIPAM'08, Roscoff, France, May 7-11, 2008.

Interlayer bond formation of graphite crystals induced by femtosecond laser excitation, Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, and K. Nasu, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug. 1, 2008.

Surface-carrier dynamics on Si(001)-(2x1): roles of electron transfer from bulk- to surface-electronic states, S. Tanaka and K. Tanimura, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug. 1, 2008.

Quantum-confinement effect in individual GeSn nanodots observed by Fourier-transform photoabsorption spectroscopy combined with scanning tunneling microscopy, N. Naruse, Y. Mera, Y. Nakamura, M. Ichikawa, and K. Maeda
25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug. 1, 2008.

Hot-hole and hot-electron dynamics at Si surfaces studied by time-resolved twophoton photoemission spectroscopy, T. Ichibayashi and K. Tanimura, 6th International Conference on Ultrafast Surface Dynamics, Kloster Banz, Germany, July 20-25, 2008.

Image-potential induced surface-resonance states at Si(100)-(2x1), T. Ichibayashi and K. Tanimura, 25th European Conference of Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug. 1, 2008..

Taku ICHIBAYASHI and Katsumi TANIMURA

Ultrafast carrier dynamics in Si studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy, T. Ichibayashi and K. Tanimura, 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, Osaka, Japan, Nov. 11-13, 2008.

Ultrafast Electron NanoCrystallography, Y. Murooka, R.K. Raman, R.A. Murdick, and C.-Y. Ruan, IUCR2008 Satellite Meeting at Nagoya University (IUCR=XXI Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography), Nagoya, Japan, September 1-2, 2008

[国内学会]

日本物理学会

12 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

特別推進研究

谷村 克己

光誘起構造相転移動力学の研究

175,760

[受託研究]

谷村 克己

戦略的基盤技術高度化支援事業

1,081

機能分子科学研究部門

概要

本研究部門は精密制御化学研究分野、医薬品化学研究分野、有機物性化学研究分野、励起分子化学研究分野、分子合成化学研究分野からなり、有機化学に基礎を置いて、有機化合物によってもたらされる種々の機能を様々な観点から追求している。有機化学は有機分子を対象とする学問体系であり、有機分子は生命体における多種多様の機能を担っているのをはじめ、各種機能性材料や医薬品として広く用いられている。これら有機分子の機能は分子や分子集合体の種類・構造と深く関係している。したがって、本研究部門においては有機金属化合物、医薬品用化合物、複合金属錯体、放射線や光によって励起された分子、パイ電子系を含む有機分子などの種々の有機化合物について、それらの設計・合成、合成法の開発、反応性・反応機構の検討などを通して新規触媒反応、医薬品、新規有機合成法などの開発や光・電子機能、分子認識能などの新機能発現を目指して研究を行っている。

成果

- DNA 二本鎖形成を光で可逆的に制御する「光応答性 DNA 分子糊」の開発
- 新規金属修飾 DNA の合成
- シトシンバルジヘアピンプライマーを用いた簡便な遺伝子変異検出法
- ヒトテロメア繰り返し配列に特異的に結合し構造変化を誘起する有機小分子の開発
- タンパク質の内部・外部表面認識型阻害剤の設計と合成
- 新規茶カテキン誘導体を用いたインフルエンザウイルス感染阻害
- 骨髄異形成症候群に対する治療薬候補化合物の新規合成プロセスの開発
- p-型および n-型半導体の開発と有機エレクトロニクスへの応用
- 刺激応答性や絶縁被覆などの機能を有する分子ワイヤの構築
- DNA のビーム化学
- マルチレーザー光化学
- 二酸化チタン光触媒反応
- 金属クラスター・ナノ粒子の化学
- Pd(II/IV)触媒系による新規エナンチオ選択的反応の開発
- 新規スピロ型キラル配位子の設計と合成
- 高効率キラル二核バナジウム(V)触媒の創製と 2-ナフトール類の酸化カップリングへの応用
- エナンチオ選択的触媒反応を基盤とするスピロビラクタムの創製

精密制御化学研究分野

教授	中谷 和彦
助教	周 大揚、萩原 正規、堂野 主税、武井 史恵
博士研究員	何 漢平、前川 健典、岡 芳美
大学院学生	林 剛介、宇野 真之介、梅本 詩織、堂浦 智裕、洪 昌峰、山本 剛史 坂井 俊、柴田 知範、岡崎 正嗣、今村 允美
学部学生	米田 恵介
研究補助員	瀬尾 晶子、山内 里紗
事務補佐員	矢口 百合子

a) 概要

当分野では、有機合成化学を基盤として、ケミカルバイオロジーとナノテクノロジーを指向した研究を進めている。ケミカルバイオロジーに関しては、核酸特異構造の認識と遺伝子発現制御に焦点を絞り、1) ミスマッチ塩基対特異的な低分子有機リガンドの分子設計と、2) 分子生物学的手法を用いた RNA アプタマー創出の対極的な二つの方向からアプローチしている。一方、C、H、O、N、P の各元素からなる DNA は、遺伝子として重要であるばかりでなく、らせん構造を自発的に形成する極めて特徴的な有機化合物と捉えることが出来る。ナノテクノロジーにおける精密材料としての高度利用を進めるために、核酸の反応性や物性の解明、化学修飾による新規物性の獲得を目指している。

b) 成果

・シトシンバルジヘアピンプライマーを用いた簡便な遺伝子変異検出法

遺伝子の変異を迅速に検出する手法が、テーラメード医療を支える根幹技術として期待されている。当研究室では、ミスマッチやバルジ構造に特異的に結合する小分子を用いた遺伝子変異検査技術を提案してきた。実用に耐えうる遺伝子変異検査技術としては、簡便な操作、正確な判定、かつ、検査コストが十分に安価であることが望まれる。この要求を満たすために、DNA プローブの化学修飾はいっさい行わないことを基本としている。シトシンバルジサイトをヘアピン構造内に持ち、さらに 3' 末端に一塩基多型認識サイトを含む PCR プライマーを用意し、シトシンバルジにジアミノナフチリジン誘導体が結合して発する特徴的な蛍光を利用して PCR の進行をモニターし、遺伝子変異の有無を見つける方法を検討した。この手法の特徴は、標的 DNA が少量でも PCR を使うことで検出が可能であること、全てを混合して PCR がかけられるというきわめて簡便な手法で遺伝子変異が判定できる点にある。テンプレートをを用いて PCR を行なった結果、3' 末端の一塩基の違いで蛍光の変化に大きな差が観測され、一塩基の違いを認識することに成功した。

・ヒトテロメア繰り返し配列に特異的に結合し構造変化を誘起する有機小分子の開発

テロメアは染色体の 3' 末端に存在する DNA 配列であり、ヒト染色体の場合には TTAGGG 配列が繰り返し、様々なタンパク質が結合して染色体の安定性に関わっている。ヒトテロメア配列を伸長する酵素テロメラーゼは、がん細胞において活性の上昇が認められており、テロメラーゼによるテロメア伸長を阻害する低分子化合物は抗癌剤として注目されている。

当研究室では、GG ミスマッチ配列を特異的に認識し、結合する低分子リガンド「ナフチリジンダイマー」がグアニン塩基に富むヒトテロメア繰り返し配列に高い親和性で結合することを見いだした。さらに親和性、選択性の向上を目指して C3 リンカーで 2 分子のナフチリジンダイマーを共有結合しより連結した分子「ナフチリジンテトラマー」を合成した。ナフチリジンテトラマーはヒトテロメア繰り返し配列に高い親和性で結合し、テロメア繰り返し配列が形成する G-四重鎖構造を不安定化し、強固な分子内ヘアピン様構造を誘導することを円二色性偏光解析、DNA ポリメラーゼを用いた生化学的な手法

により明らかにした。

・ DNA 二本鎖形成を光で可逆的に制御する「光応答性 DNA 分子糊」の開発

DNA のミスマッチ塩基対に特異的に結合するミスマッチ結合リガンド(MBL)は、安定な複合体を形成することにより、ミスマッチ塩基対を含む DNA の二本鎖形成を誘起する、いわば、二本の DNA を貼り合わせる「分子糊」としての機能を持つ。しかしながら MBL による二本鎖構造制御は一本鎖から二本鎖構造への一方方向でのみ進行し、実質的に不可逆的な過程である。外部刺激による可逆的な DNA 二次構造変換を指向し、MBL のリンカー部位を光応答性基であるアゾベンゼンに置換した光応答性の分子糊、NCDA の設計・合成を行った。平面剛直なアゾベンゼン骨格を有する *trans*-NCDA から、折れ曲がり構造を有する *cis*-NCDA に光異性化させることにより、グアニン塩基認識部位であるナフチリジンを結合に有利な位置および配向に変換することができる。すなわちトランス体からシス体への異性化により、不安定なミスマッチ含有 DNA を安定な二本鎖型複合体へと変換が可能であり、紫外・可視光照射を組み合わせることにより可逆的に DNA 二本鎖の安定性を制御することが可能である。実際に NCDA と光を用いた DNA 二本鎖構造制御を評価するため、金基板上に、GG ミスマッチを含む DNA を固定化し、SPR イメージングによる測定を行った。基底状態の *trans*-NCDA 存在下では、有意な SPR 変化は観測されなかったが、360nm 光照射によって NCDA を *cis* 型に変換することにより二本鎖形成に由来すると考えられる SPR シグナルが観測された。さらに、430nm 光照射により一旦生成した二本鎖 DNA の解離が進行することが明らかとなった。NCDA は未修飾の DNA の二本鎖形成を外部刺激である光により可逆的に制御することができる全く新しい機能性分子である。

・新規金属修飾 DNA の合成

機能性を付加した DNA はバイオナノ材料として注目されている。複数種の金属イオンを DNA 側鎖に導入することにより、多種類の金属イオンを、その数や順番をコントロールして並べることが可能になる。金属イオンの配列や金属イオン間の相互作用を制御することで、ユニークな機能の発現が期待され、ナノメートルサイズの機能性分子の次世代の構築原理ができる。この研究の第一歩として、ビピリジンを持つヌクレオシドの合成を行った。さらに一つビピリジン基を有する DNA の合成が成功した。無機銅塩溶液と反応させて、ビピリジン基に一つ銅イオンが取り込まれた DNA の生成することを確認した。

[原著論文]

Genotyping by allele-specific L-DNA-tagged PCR, Gosuke Hayashi, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: J. Biotechnol., 135 (2008) 157-160.

Synthesis of Dimeric 2-Amino-1,8-naphthyridine and Related DNA-Binding Molecules, Kazuhiro Nakatani, Hanping He, Shin-nosuke Uno, Tsuyoshi Yamamoto, Chikara Dohno: Current Protocols in Nucleic Acid Chemistry, 2 (2008) 1-21.

DNA Labeling by Ligand Inducible Secondary Structure, Tao Peng, Hanping He, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: ChemBioChem, 9 (2008) 1893-1897.

Ligand Binding to Tandem G-quadruplex from Human Telomeric DNA, Li-Ping Bai, Masaki Hagihara, Zhi-Hong Jiang, Kazuhiko Nakatani: ChemBioChem, 9 (2008) 2583-2587.

Site-specific binding of chelerythrine and sanguinarine to single pyrimidine bulges in hairpin DNA, Li-Ping Bai, Zongwei Cai, Zhong-Zhen Zhao, Kazuhiko Nakatani, Zhi-Hong Jiang: Anal. Bioanal. Chem., 392 (2008) 709-716.

Dimer of 2,7-diamino-1,8-naphthyridine for the detection of mismatches formed by pyrimidine nucleotide bases, Akio Kobori, Kazuhiko Nakatani: Bioorg. Med. Chem., 16 (2008) 10338-10344.

RNA Aptamers That Reversibly Bind Photoresponsive Azobenzene-Containing Peptides, Gosuke Hayashi, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: Chem. Eur. J., 15 (2009) 424-432.

The effect of linker length on binding affinity of a photoswitchable molecular glue for DNA, Chikara Dohno, Shin-nosuke Uno, Shun Sakai, Mika Oku, Kazuhiko Nakatani: Bioorg. Med. Chem, 17 (2009) 2536-2543.

Synthesis and Reaction of DNA Oligomers Containing Modified Cytosines Related to Bisulfite Sequencing, Yoshimi Oka, Tao Peng, Fumie Takei, Kazuhiko Nakatani: Org. Lett., 11 (2009) 1377-1379.

[国際会議]

Synthesis and evaluation of photoresponsive molecular Glue for DNA (poster), *Shin-nosuke Uno, Chikara Dohno, Mika Oku, Shun Sakai, Kazuhiko Nakatani: IUPAC ICOS-17, 17th International Conference on Organic Synthesis.

Small molecule affecting the synthesis of trinucleotide Repeat (GAA)_n, *Hanping He, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: 26th Chinese Chemical Society (CCS) Congress.

Preparation and evaluation of small molecule binding to trinucleotide repeat d(GAA)_n (poster), *Hanping He, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: Ninth Tetrahedron Symposium.

THE FLUORESCENT DETECTION OF SINGLE NUCLEOTIDE DIFFERENCE USING CYTOSINE BULGE HAIRPIN PRIMERS (poster), *Fumie Takei, Masaki Hagihara, Yoshimi Oka, Kazuhiko Nakatani: XXII IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY 2008.

Switching DNA hybridization by a molecular glue for DNA (poster), *Chikara Dohno, Uno Shin-nosuke, Kazuhiko Nakatani: XXII IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY 2008.

Fluorescent Ligand as a molecular probe for the RNA structure (poster), *Shiori Umemoto, Jinhua Zhang, Chikara Dohno, Kazuhiko Nakatani: Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry.

The reaction of cytosine with bisulfite by base flipping from the duplex (poster), *Yoshimi Oka, Tao Peng, Fumie Takei, Kazuhiko Nakatani: Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry.

RNA aptamers that reversibly bind to photoresponsive peptide (poster), *Gosuke Hayashi, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry.

The Development of The Displacement Assay, Screening Method for Detecting the RNA-ligand Interactions (poster), *Shiori Umemoto, Masaki Hagihara, Kazuhiko Nakatani: 12 th Sanken International Symposium.

Reversible control of DNA hybridization by a small synthetic ligand (poster), *Chikara Dohno, Shinnosuke Uno, Tsuyoshi Yamamoto, Shun Sakai, Kazuhiko Nakatani: The Fifth International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-5).

[国内学会]

第3回バイオ関連化学合同シンポジウム2008	5件
日本化学会第89春季年会	10件
第26回日本コンビナトリアル研究会	1件
第3回日本ケミカルバイオロジー研究会年会	4件
第4回ナノテクノロジーセンター研究会	1件
第5回東レ先端融合研究シンポジウム8	1件

[取得学位]

博士 (理学)		
林 剛介	鏡像体 DNA を用いた PCR に関する研究と RNA の構造・機能の制御研究	
修士 (理学)		
宇野 真之介	光応答性 GG ミスマッチ結合分子の開発	
梅本 詩織	RNA-小分子間相互作用検出法の開発と応用	
堂浦 智裕	マラカイトグリーン-DNA 複合体の蛍光挙動に関する研究	
洪 昌峰	フラーレンと DNA を繋ぐ分子の創製に関する研究	
山本 剛史	光応答性ミスマッチ結合分子の設計・合成と結合評価	

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (S)		
中谷 和彦	ミスマッチ塩基対安定化を基盤とした核酸構造制御による機能発現調節	17,940
基盤研究 (C)		
武井 史恵	シトシンバルジプローブを用いる革新的遺伝子-塩基変異の蛍光検出法の開発	1,950
若手研究 (B)		
萩原 正規	In vivo セレクション法によるゲノムワイドなリボザイム探索	2,210

[受託研究]

中谷 和彦	科学技術振興機構 戦略的創造研究	分子シャペロン工学に基づく遺伝子解析	6,370
中谷 和彦	科学技術振興機構 産学共同シーズイノベーション 化事業顕在化ステージ	創薬標的RNAに結合するドラッグ候補化合物のハイスループットスクリーニング法開発	6,000

[奨学寄附金]

中谷 和彦	旭硝子財団	2,000
堂野 主税	住友財団	720

[共同研究]

中谷 和彦	日東化成	DNA 結合性分子の合成	840
-------	------	--------------	-----

[その他の競争的研究資金]

萩原 正規	ヒューマン・フロンティア ア・サイエンス・プログ ラム若手研究グラント	<i>The biological role of tandem repeats in genomes</i>	9,934
-------	---	---	-------

医薬品化学研究分野

教授	加藤 修雄
准教授	大神田 淳子
助教	新田 孟、山口 俊郎、開発 邦宏
特任研究員	平岡 正光
博士研究員	森 修一
大学院学生	井上 崇嗣、町田 慎之介、原ノ園 祐、樋口 雄介、澤田 慎二郎、 藤井 康平、丸山 友理子、門田 高明、近藤 千尋、高橋 知也、河村 明恵、 林 大輔、藪 稔
学部学生	山口 佳史
技術補佐員	松村 浩代
事務補佐員	丹野 美鈴

a) 概要

当研究分野は、医薬品のリード・リード化合物の創製および薬物と薬物受容体との相互作用など医薬品の作用機構解明を研究目的としている。この目的達成のために、薬剤を用いたケミカルゲノミクスによるタンパク質の機能解析と、その結果に基づく創薬を目指し、特に、タンパク質のリン酸化-脱リン酸化過程の制御を主たる研究標的とする。また、タンパク質表面を標的とする阻害剤・変調剤の創製に取り組み、創薬に向けた新手法の提案を目指す。また、生理活性化合物の高効率合成・コンビナトリアル合成手法の応用についても研究を展開している。

b) 成果

・ジテルペン配糖体・コチレニンと 14-3-3 たんぱく質の結晶構造

従来植物ホルモン様活性を有することが知られていたジテルペン配糖体・コチレニンは前骨髄性白血病細胞・HL-60 に対して分化誘導活性を持つことで注目されている。しかし、この活性は化学構造の類似した天然型フシコクシンには見られない。分化誘導活性が動物細胞中の 14-3-3 たんぱく質会合体の安定化に起因しているとの仮説に立ち、Max Planck Society の C. Ottmann 博士との共同研究により、標題結晶構造を明らかにし、コチレニンとフシコクシンの化学構造の差異が会合体形成に相違をもたらすことを明らかにした。

・たんぱく質共通表面構造を認識するプレニル転移酵素 dual 阻害剤の設計と評価

がん増殖・転移に関与するプレニル転移酵素 FTase と GGTase-I は、近年の抗がん剤開発の標的として注目されており、両者の活性を 1 分子で抑制する dual 阻害剤の開発は意義深い。両者に共通に存在する活性ポケット周辺の酸性たんぱく質表面を認識するポリアミン含有没食子酸誘導体と活性ポケットを認識するペプチドを連結した化合物を合成し *in vitro* 評価したところ、FTase と GGTase-I の双方に対して nM レベルの高活性を示すことを明らかにした。

・金属錯体コンビナトリアルライブラリの合成とプロテアーゼ阻害活性評価

たんぱく質の広く浅い作用面を認識する低分子量化合物は、細胞外または膜たんぱく質にその用途が限られる抗体医薬に対して相補的に働く医薬品に結びつくことが期待される。種々の官能基を導入したビピリジン誘導体 6 種類を用い、トリスビピリジン鉄錯体の 6 x 6 混合ライブラリを合成した。このアレイを用いてセリンプロテアーゼであるキモトリプシンとトロンビンの活性阻害効果を検討したところ、両者の活性を阻害する配位子の組み合わせが有意に異なることを明らかにした。

・骨髄異形成症候群に対する治療薬候補化合物の新規合成プロセスの開発

高度高齢化社会への移行に伴い、造血幹細胞の異常により血球の異形成および血球減少を認める症候群である骨髄異形成症候群 (MDS) の患者数が増加している。過去に MDS 治療薬を指向して開発が検討された 4-carbamoylimidazolium 5-olate は Phase II 治験において良好な結果を与えたが、化学的不安定性が一因で開発が断念された経緯がある。そこで、有機化学の見地から合成経路を改良することで、化学的に安定なベンゼンスルホン酸塩の直接合成プロセスの確立に成功し、医薬への再開発への道を拓いた。

・可視光応答性アゾベンゼン搭載型ペプチド核酸の合成

一般に、アゾベンゼンの光異性化には紫外光が利用されるが、可視光照射に応答する新規アゾベンゼンを開発できれば、紫外線の細胞障害を誘起することなく、細胞機能を調節することが可能になる。我々は、アゾベンゼンに硫黄原子を導入すると、その可視光応答性、熱安定性が飛躍的に向上することを見出した。この硫黄置換アゾベンゼン (AZO) をペプチド核酸 (PNA) に導入し、可視光を照射したところ、アゾベンゼン骨格の異性化に伴う構造変化が起こることを確認した。

・新規茶カテキン誘導体を用いたインフルエンザウイルス感染阻害

茶カテキンの主成分であるエピガロカテキンガレート (EGCG) の種々の脂肪酸エステル誘導体をリパーゼ触媒トランスエステル化反応により調整した。EGCG 脂肪酸エステルはインフルエンザ A 型、および B 型、ウイルス感染の初期段階におけるウイルス-細胞間の膜融合を効率的に阻害し、ヒト感染性、および高病原性鳥インフルエンザを効率的に阻害することを見出した。

[原著論文]

Identification of diterpene biosynthetic gene clusters and functional analysis of labdane-related diterpene cyclases in *Phomopsis amygdali*., T. Toyomasu, R. Niida, H. Kenmoku, Y. Kanno, S. Miura, C. Nakano, Y. Shiono, W. Mitsuhashi, H. Toshima, H. Oikawa, T. Hoshino, T. Dairi, N. Kato, T. Sassa: *Biosci. Biotechnol. Biochem.*, 72 (4) (2008) 1038-1047.

Enhanced anti-influenza A virus activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives: Effect of alkyl chain length, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, N. Kato, K. Kaihatsu: *Bioorg. Med. Chem. Let.*, 18 (14) (2008) 4249-4252.

Synthesis and mercuriphilic properties of dithiocrown ethers having an azulene pendant., K. Kubo, A. Mori, T. Nishimura, N. Kato: *Heterocycles*, 76 (1) (2008) 209-214.

Enhanced antitumor activities of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives in vitro and in vivo, K. Matsumura, K. Kaihatsu, S. Mori, H.H Cho, N. Kato, S.H Hyon: *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, 377 (4) (2008) 1118-1122.

Biosynthetic gene-based secondary metabolite screening: A new diterpene, methyl phomopsenonate, from the fungus *Phomopsis amygdali*., T. Toyomasu, A. Kaneko, T. Tokiwano, Y. Kanno, Y. Kanno, R. Niida, T. Kawano, H. Oikawa, N. Kato, T. Sassa: *J. Org. Chem.*, 74 (4) (2009) 1541-1548.

Identification and functional analysis of brassicicene C biosynthetic gene cluster in *Alternaria brassicicola*, A. Minami, N. Tajima, Y. Higuchi, T. Toyomasu, T. Sassa, N. Kato, T. Dairi: *Bioorg. Med. Chem. Let.*, 19 (3) (2009) 870-874.

A structural rationale for selective stabilization of anti-tumor interactions of 14-3-3 proteins by cotylenin A., C. Ottmann, M. Wayand, T. Sassa, T. Inoue, N. Kato, A. Wittinghofer, C. Oecking: *J. Mol. Biol.*, 386 (4) (2009) 913-919.

[解説、総説]

低分子によるたんぱく質間相互作用の制御、加藤 修雄、生産と技術、60 (2008) 43-45.

たんぱく質間相互作用を標的とする阻害剤の創製—ペプチドミメティクスからモジュールアセンブリへ—、大神田 淳子、フロンティア生命化学研究会レター、27 (2008) 4-9.

[特許]

「4-カルバモイル-5-ヒドロキシ-イミダゾール誘導体のスルホン酸塩化合物」加藤修雄、樋口雄介、近藤千尋、砂川洵、PCT/2008//067050.

「可視応答型アゾベンゼン誘導体の開発と応用」開発邦宏、澤田慎二郎、加藤修雄、特願 2008-323606.

「膜融合阻害剤」開発邦宏、森修一、大道寺智、三宅真弥、加藤修雄、PCT/2009/051721.

「12-デオキシフシコクシン糖鎖改変誘導体およびその用途」加藤修雄、井上崇嗣、丸山友理子、新田孟、本間良夫、佐々武史、特願 2009-02583.

[国際会議]

Anti-influenza A virus activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives (poster), *K. Kaihatsu, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, N. Kato: 21st International Conference on Antiviral Research, Canada, April 13-17, 2008.

Diterpene Cyclase Responsible for Fusicoccin Biosynthesis (poster), *T. Toyomasu, T. Dairi, N. Kato, T. Sassa: 7th US-Japan Seminar on the Biosynthesis of Natural Products Enzymology, Structural Biology, and Drug Discovery, La Jolla, California, USA, June 22-27, 2008.

Chemical ligation of epoxide-containing fusicoccins and peptide fragments induced by 14-3-3 protein surface (poster), *J. Ohkanda, T. Maki, A. Kawamura, N. Kato: 9th Tetrahedron Symposium, San Francisco, USA, July 22-23, 2008.

Synthetic Method of 4-Carbamoylimidazolium 5-olate (poster), *C. Kondo, Y. Higuchi, M. Sunagawa, N. Kato: The First International Symposium on Process Chemistry [ISPC 08], Kyoto, Japan, July 28-30, 2008.

Antitumor activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid derivatives (invited), *K. Kaihatsu, K. Matsumura, S. Mori, H.H. Cho, S.H. Hyon, N. Kato: The 8th International Conference of Anticancer Research, Greece, October 17-22, 2008.

Fusicoccin derivative (ISIR-005) suppression anchorage-independent growth of cancer cells through anoikis activation (poster), *Y. Honma, M. Akimoto, T. Sassa, N. Kato: 20th EORTC-NCI-AACR Symposium on Molecular Targets and Cancer Therapeutics, Geneva, Switzerland, October 21-24, 2008.

Module assembly for protein surface recognition (invited), *J. Ohkanda: The IUMRS International Conference in Asia 2008, Nagoya, Japan, December 9-11, 2008.

Design and functional evaluation of prenyltransferase dual inhibitors targeting active site and protein surface

(poster), *S. Machida, N. Kato, J. Ohkanda: 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Synthesis and evaluation of photochromic properties of heteroatom-substituted azobenzene derivatives (poster), *S. Sawada, K. Kaihatsu, N. Kato: 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Synthesis of green tea catechin derivatives and evaluation of their anti-influenza virus activity (poster), *S. Mori, N. Kato, K. Kaihatsu: 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Design and synthesis of differentiation Inducers: A new and efficient synthetic approach from natural fusicoccins (poster), *T. Inoue, Y. Higuchi, Y. Maruyama, M. Yabu, H. Nitta, J. Ohkanda, N. Kato: 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Synthesis of new MBL inhibitor with hydroxamic acid (poster), *Y. Haranosono, T. Kawano, M. Sunagawa, N. Kato: 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

加藤 修雄 27th Conference on Combinatorial Chemistry, Japan (組織委員)

[国内学会]

日本化学会第 89 春季年会	7 件
日本薬学会第 129 年会	1 件
日本農芸化学会 2009 年度大会	1 件
第 68 回日本癌学会学術総会	1 件
日本カテキン学会第 5 回年会	1 件
繊維学会 20 年度大会	1 件
第 27 回コンビナトリアル化学研究会	1 件
日本ウィルス学会第 57 回学術総会	1 件
第 22 回日本薬学会関東支部シンポジウム	1 件
その他	5 件

[取得学位]

修士 (理学)	
澤田 慎二郎	遺伝子発現の光制御を目指したアゾベンゼン誘導体の合成と物性評価
藤井 康平	たんぱく質表面指向型阻害剤探索のための金属錯体コンビナトリアルライブラリの構築
丸山 友理子	フシコクシン糖鎖改変誘導体の分化誘導活性
門田 高明	クォーラムセンシング阻害を目的とした AI-2 アンタゴニストの設計と合成

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位: 千円
若手 (B)		
開発 邦宏	光応答性アンチセンス分子による人工転写バルブの形成と転写反応の制御	1,300

特別研究員奨励費			
井上 崇嗣	14-3-3	タンパク質に対するフォワード/リバーズ・ケモゲノミクス	900
樋口 雄介	14-3-3	タンパク質の機能解明を目的としたケミカルバイオロジー	600

[受託研究]

加藤 修雄	医薬基盤研究所（保健医療分野における基礎研究推進事業）	ジテルペン配糖体をリードとした分化誘導型新規抗がん剤の開発	24,000
開発 邦宏	(NEDO)産業技術研究助成	新規茶カテキン誘導体を利用した抗RNAウイルス薬の迅速な開発システムの構築	6,240

[奨学寄附金]

加藤 修雄	(株)MBR		250
大神田 淳子	(株)エーザイ		1,200

[その他の競争的研究資金]

大神田 淳子	(財)武田科学振興財団薬学系研究奨励	活性ポケットと周辺外部表面を標的とするプレニル転移酵素系 Dual 阻害剤の開発と抗腫瘍活性	2,000
大神田 淳子	第 40 回 内藤記念科学奨励金	たんぱく質間相互作用に対する阻害剤の創製	3,000
開発 邦宏	JST シーズ発掘研究	飛沫ウイルスを不活化する新規カテキンの開発と感染防御への応用	2,000

有機物性化学研究分野

教授	安蘇 芳雄
准教授	家 裕隆 (平成 21 年 3 月 16 日)
助教	家 裕隆 (平成 21 年 3 月 15 日)、朝野 芳織
大学院学生	遠藤 克、二谷 真司、廣瀬 智哉、 宇都 俊彦、岡部 誠、野澤 貴博、浜野 雄矢、
学部学生	櫻井 隆裕、吉村 篤軌
事務補佐員	今井 珠沙世

a) 概要

有機物質の機能を分子のレベルで解明し制御することを基盤として、優れた電子・光機能を有する有機分子の開発と構造物性相関および機能評価と有機エレクトロニクス応用の一貫した研究を行っている。有機エレクトロニクスに適した有機機能分子の開発、および、分子スケールエレクトロニクスを志向したナノスケール π 共役分子材料の分子設計と物質合成、それらの物性有機化学と機能有機化学の研究を中心に、1) π 電子共役系の化学修飾による高い電子移動度を示す有機半導体材料の開発、2) π 電子共役系の自己会合性増大によるキャリア輸送パスの形成を利用した光電変換材料の開発、3) 分子エレクトロニクス素子に適したナノスケール分子材料の開発を目的として、機能化分子ワイヤおよび金属電極接合ユニットの開発と評価を進めている。

b) 成果

・有機エレクトロニクス材料の開発

n 型有機電界効果トランジスタ材料の開発を進めている。 π 電子共役系に電子求引性基を導入することで n 型特性が発現する事が知られている。そこで、強い電子求引効果とオリゴマーにおける共役平面性保持の観点から、フッ素化およびカルボニル化シクロペンテンを縮環させたチオフェンやカルボニル基で架橋したビチアゾールをユニットとするオリゴマーを遷移金属触媒カップリング反応で合成した。物性評価により、期待どおりの高い電気陰性効果と共役鎖の高い平面性に加え、電荷輸送に適した固体状態での分子間相互作用も明らかとなった。これらのオリゴマーの幾つかは高い電子移動度を示し、中でも、カルボニル基で架橋したビスチアゾールを含むオリゴマーは最高レベルの電子移動度を有し、大気下でも安定に動作する n 型FET材料となることを見いだした。また、カルボニル化シクロペンテンを縮環させたチオフェンと可溶性基としてヘキシルチオフェンを π 電子共役系に導入することで、塗布法に適用可能な n 型半導体材料となることが明らかとなった。

塗布薄膜での高効率キャリア移動の達成を目的として、オリゴチオフェンをベンゼン環の1,3,5位で連結した分岐型オリゴチオフェンの合成と物性評価を行っている。分岐型オリゴチオフェンにアクセプターとしてペリレンビスイミドを連結することで高効率の光誘起分子内電子移動が起こることを明らかとした。スピコート法で作製した薄膜は光電変換特性を示したことから、薄膜中で分岐オリゴチオフェンが正孔輸送パスを、ペリレンビスイミドが電子輸送パスを形成していることが示唆された。さらに、アクセプターとしてナフタレンビスイミドを連結した化合物も光電変換材料として機能することを明らかとした。

・分子エレクトロニクス材料の開発

単分子導電性計測に適した分子ワイヤの構築を目指して、 β 位をシクロペンテン縮環でブロックし飽和炭素に嵩高い置換基としてスピロ置換型ジオクチルフルオレンを導入したモノマーユニットを設計・合成し、被覆型オリゴチオフェン分子ワイヤの合成を行った。X線結晶構造解析から、期待通りの高い平面性と嵩高い置換基による完璧な共役系の被覆が明らかとなった。酸化状態の電子吸収スペクト

ル解析から、通常のオリゴチオフェンと異なり、被覆によって π ダイマー形成が完全に阻害されることが分かった。オリゴチオフェン分子ワイヤのナノギャップ電極への接合を目的として、両末端にチオール官能基を導入した被覆型オリゴチオフェン6量体の開発に成功した。

確実な金属電極接合と効率的な電子注入の実現を目的として、セレン官能基を有するテトラフェニルメタン骨格の三脚型アンカーを開発した。金電極上での単分子膜の生成と接合状態を評価した結果、セレン官能基と三脚構造の有用性が明らかとなった。

[原著論文]

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b'':7,8-b''':10,9-b''':11,12-b'''''] hexathiophene, M. Endou, Y. Ie, Y. Aso: *Heterocycles*, 76 (2) (2008) 1043-1048.

Dendritic Oligothiophene Bearing Perylene Bis(dicarboximide) Groups as an Active Material for Photovoltaic Device, Y. Ie, T. Uto, N. Yamamoto, Y. Aso: *Chem. Commun.*, 2009 (10) (2009) 1213-1215.

[解説、総説]

フッ素化反応を基盤とする電子輸送性共役オリゴマーの開発と有機電界効果トランジスタへの応用、家裕隆、安蘇芳雄、*有機合成化学協会誌*、66[5] (2008) 504-514.

フルオロアルキル基縮環に基づく新しい有機n型半導体の開発、安蘇芳雄、家裕隆、*生産と技術*、60[3] (2008) 73-76.

[著書]

「分子エレクトロニクススの基盤技術と将来展望（分筆）」（松重和美／田中一義／和田恭雄監修）“分子ワイヤ”、安蘇芳雄、家裕隆、シーエムシー出版、(2009) 151-158.

「次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能（分筆）」（赤木和夫監修）“電荷輸送制御のための多分岐共役系階層構造構築と機能”、安蘇芳雄、家裕隆、シーエムシー出版、(2009) 51-56.

[特許]

「含窒素縮合環化合物，含窒素縮合環重合体，有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、二谷真司、安蘇芳雄、上田将人、特願 2008-220031

「分岐型化合物，これを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、宇都俊彦、安蘇芳雄、上田将人、特願 2008-221779、PCT/JP2009/050083

「共役系化合物，並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、安蘇芳雄、岡部 誠、上田将人、特願 2008-290027

「共役系化合物，含窒素縮合環化合物，含窒素縮合環重合体，有機薄膜及び有機薄膜素子」、安蘇芳雄、家裕隆、岡部 誠、二谷真司、上田将人、PCT/JP2008/071520

「重合体，これを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」辛川 誠、安蘇芳雄、上田将人、PCT/JP2009/052156

「重合体、この重合体を用いた有機薄膜及びこれを備える有機薄膜素子」家 裕隆、吉村篤軌、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058656

「分岐型化合物、並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家 裕隆、岡部 誠、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058664

「共役化合物、並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家 裕隆、岡部 誠、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058737

「含フッ素重合体及びこれを用いた有機薄膜」家 裕隆、二谷真司、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058739

「低屈折率を有する dendritic 化合物、その製造方法、およびその合成原料化合物」田中義人、永井隆文、安蘇芳雄、家 裕隆、特願 2009-059936

[国際会議]

Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances of Difluorodioxocyclopentene-annelated Oligothiophenes, *Yutaka Ie, Yoshikazu Umemoto, Makoto Okabe, Yoshio Aso: The 8th International Symposium on Functional pi-Electron Systems (Fpi8), Graz, Austria, July 21-25 (2008).

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b":7,8-b":10,9-b":11,12-b"]hexathiophene (poster), *Masaru Endou, Yutaka Ie, Yoshio Aso: LXII Yamada Conference 2008 "Topological Molecules", Awaji, Hyogo Japan, September 1-4, 2008.

Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances of Difluorodioxocyclopentene-annelated Oligomers (poster), *Yutaka Ie, Makoto Okabe, Yoshikazu Umemoto, Yoshio Aso: LXII Yamada Conference 2008 "Topological Molecules", Awaji, Hyogo Japan, September 1-4, 2008.

Synthesis and Photovoltaic Performance of Branched Oligothiophenes Having Perylene Bis(dicarboximide) (poster), *Toshihiko Uto, Yutaka Ie, Yoshio Aso: The Fifth International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-5), Kobe, Japan, September 5-6, 2008.

Synthesis and Properties of Tripodal Anchor Units Bearing Selenium Functional Groups (poster), *Tomoya Hirose, Yutaka Ie, Yoshio Aso: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, September 29 – October 1, 2008.

Synthesis, Properties, and Photovoltaic Performances of Branched Oligothiophenes Bearing Perylene Bis(dicarboximide) Groups (poster), *Yutaka Ie, Toshihiko Uto, Yoshio Aso: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, September 29 – October 1, 2008.

Difluorodioxocyclopentene-Annulated Thiophenes: Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances (poster), *Yutaka Ie, Makoto Okabe, Yoshikazu Umemoto, Yoshio Aso: 18th Iketani Conference, International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers, Awaji, Hyogo, Japan, October 21-23, 2008.

Synthesis and Properties of Branched Oligothiophenes Having Perylene Bisimide Groups as an Electron-Accepting Unit (poster), *Toshihiko Uto, Yutaka Ie, Yoshio Aso: 18th Iketani Conference, International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated

Polymers, Awaji, Hyogo, Japan, October 21-23, 2008.

Synthesis of Anchor Compounds Bearing Selenium Functional Groups and Characterization of Their Monolayers (poster), *Tomoya Hirose, Yutaka Ie, Yoshio Aso: The International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan, November 10-12, 2008.

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b'':7,8-b''':10,9-b''''':11,12-b''''']hexathiophene (poster), *Masaru Endou, Yutaka Ie, Yoshio Aso: The International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan, November 10-12, 2008.

Synthesis, Properties, and Field-Effect Transistor Characteristics of Conjugated Oligomer Containing Carbonyl-Bridged Bithiazole Unit (poster), *Masashi Nitani, Yutaka Ie, Yoshio Aso: Osaka University Forum 2008 : Bio-Environmental Chemistry, San Francisco, December 8-9, 2008.

Synthesis and Properties of Branched Oligothiophenes Bearing Perylene Bis(dicarboximide) Groups (poster), *Toshihiko. Uto, Yutaka. Ie, Yoshio. Aso: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka Univ., January 22, 2009.

Development of Tripodal Anchor Units Bearing Selenium Functional Groups and Characterization of Their Monolayers (poster), *Tomoya Hirose; Yutaka Ie; Yoshio Aso: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka Univ., January 22, 2009.

Synthesis, Properties, and Photovoltaic Performances of Branched Oligothiophenes Bearing Naphthalene Bis(dicarboximide) Groups (poster), *Yutaka Ie, Toshihiko Uto, Yoshihito Honsho, Shu Seki, Makoto Karakawa, Yoshio Aso: Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5), Miyazaki, Japan, March 15-18, 2009.

[国内学会]

日本化学会	5 件
有機典型元素化学討論会	1 件
有機 π 電子系シンポジウム	2 件
基礎有機化学討論会	2 件
フッ素化学討論会	1 件
応用物理学会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
宇都 俊彦	アクセプター部位を導入した分岐型オリゴチオフェンの合成、物性、および光電変換特性
岡部 誠	ジフルオロジオキソシクロペンテン縮環チオフェンを含む新規共役オリゴマーの合成・物性と n 型 FET 特性

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

特定領域研究			
安蘇 芳雄	電子構造に段差を有するナノ共役系の構築と階層制御		1,500
家 裕隆	単分子の電気伝導特性計測を指向した三脚アンカー導入被覆型分子ワイヤの創製		2,100
新学術領域研究			
安蘇 芳雄	拡張 π 電子共役系の創製に基づく高次 π 空間の機能とエレクトロニクス応用		4,420
特別研究員奨励費			
二谷 真司	新規 n 型半導体材料としてフッ素原子を有する π 共役オリゴマーの合成・機能評価		600
[受託研究]			
安蘇 芳雄	科学技術振興機構（シーズ発掘試験）	安定動作 n 型半導体を指向した新規共役オリゴマーの開発と応用	4,999
家 裕隆	NEDO 産業技術研究助成事業	革新的分子設計に基づいた電子輸送性および両性の有機電界効果トランジスタ材料の開発	18,850
[奨学寄附金]			
安蘇 芳雄	J S R(株)		1,000
[共同研究]			
安蘇 芳雄	住友化学株式会社	有機エレクトロニクス材料の開発	1,012
家 裕隆			
安蘇 芳雄	ダイキン工業	超低反射材料の開発	3,300
家 裕隆			
[その他の競争的研究資金]			
家 裕隆	近畿地方発明センター	塗布型の n 型有機半導体材料を指向した新規な拡張共役分子の開発	1,200
家 裕隆	新世代研究所研究助成	革新的分子設計に基づいた電子輸送性有機半導体材料の開発	1,400
家 裕隆	大阪大学工業会海外交流助成	Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances of Difluorodioxocyclopentene-annelated Oligothiophenes	150

励起分子化学研究分野

教授	真嶋 哲朗
准教授	藤塚 守
助教	藤乗 幸子、立川 貴士
特任教授	杉本 晃
研究支援推進員	木村 巧
博士研究員	佐守 真悟
大学院学生	小阪田 泰子、内藤 一也、宮本 佳樹、朴 満宰、崔 俊禮、崔 世聡、 武田 雄一郎、中谷 武史、小寺 遥、西寺 晴弘
学部学生	松谷 恵利、山下 聡一郎
事務補佐員	富永 早苗

a) 概要

本分野は、光および放射線により誘起される励起分子化学と機能分子化学を基盤として、ビーム制御化学や分子・反応場制御化学の手法を用いた新しい「ビーム機能化学」の研究を行っている。ビーム制御化学とは空間的・時間的に制御した多種多様なビームの複合照射によって、求める反応活性種・中間体を逐次的、局所的、選択的に発生させ、かつそれらのエネルギーを制御することによって、反応を制御することである。また、マルチビームの利用によって、新しい反応活性種の発生と、それによる新しい反応・プロセスや複合反応への展開が可能である。分子・反応場制御化学とは、分子設計された反応基質（DNA、タンパク）、超分子、メソスコピック分子などの分子場や、気体・液体・固体、表面、薄膜、液晶などからなる複合系、多成分系、液体希ガス、極低温などの反応場の立体的・電子的・構造的・化学的性質を利用することによって、反応を制御することである。「ビーム機能化学」の目指す方向は、高次元反応制御、新合成化学、新機能性分子・高機能性材料への展開である。

b) 成果

・マルチビーム化学

安定分子への第1のビーム（レーザーパルスまたは電子線パルス）照射によって生成させた短寿命活性種を出発分子とし、これの吸収に合わせた波長の第2のレーザーパルスを照射することによる2段階励起ビーム化学、さらに、第2のレーザー反応で生成した短寿命活性種に第3のレーザー励起をすることで起こる3段階励起ビーム化学を調べることができる。このような、複数のビームを同期発振させた多段階励起法によって反応中間体・短寿命活性種を原料とする光化学、短寿命活性種の光励起状態や高励起状態の動的挙動などのマルチビーム化学について研究を行っている。今年度は、オリゴチオフェンのラジカルイオンの励起状態の検討を行った。フェムト秒過渡吸収で励起状態を直接観察するとともに励起状態からのホール移動過程を明らかにした。さらに、芳香族カルボニル化合物の高励起三重項状態を介した \cdot -および \cdot -結合解離を検討した。そのほかにもポルフィリンの異性体であるポフィセン超分子内での光誘起電荷分離過程やオリゴチオフェンとペリレンジイミドの電子移動におけるコンフォマー依存性を明らかにするとともに、クロモフォアがスタックした系における負電荷の非局在化の定量的解析を行った。

・ナノ光化学

1) TiO_2 光触媒反応機構の解明: TiO_2 光触媒反応における反応活性種の拡散や反応過程における時間的および空間的不均一性を明らかにすることを目的とし、単一分子蛍光分光法を用いた研究を行った。具体的には、 TiO_2 ナノ粒子表面から空気中へ飛散したヒドロキシルラジカルや一重項酸素の単一分子蛍光プローブ検出や一次元構造を有する TiO_2 ナノチューブ内における光触媒反応の単一分子・単一粒子蛍光

観測に成功した。観測された蛍光輝点の時間・空間分布解析から、TiO₂ナノチューブ内での分子拡散や光触媒反応におけるマクロ孔およびメソ孔の影響について検討し、細孔径が大きくなると拡散速度が増大し、それとともに検出頻度（反応活性）が増加することを見出した。これらの結果は、光触媒活性における分子拡散の重要性を明確に示している。さらに、TiO₂ナノチューブの反応活性点が不均一に存在していることを見出した。また、ユーロピウムイオンをドーピングしたTiO₂ナノ粒子の単一粒子発光観測を行い、欠陥サイトが関与したエネルギー移動過程を明らかにした。

2) 半導体量子ドット-有機分子複合体における光誘起電子移動反応: 半導体ナノ粒子表面における有機分子の電子移動反応過程を明らかにすることは、色素増感太陽電池やセンシングデバイスの開発において重要な課題である。本研究では、電子受容体としてピロメリットイミドを修飾した CdTe 量子ドットナノ複合体を合成し、単一複合体における電子移動反応を単一分子蛍光分光法によって観測することで、ブリンキング現象が断続的な電子移動反応に起因していることを明らかにした。

3) MOF-5 ナノ粒子による芳香族化合物の光誘起一電子酸化反応: ナノポーラス細孔構造を有するテレフタル酸亜鉛錯体である MOF-5 のナノ粒子を合成し、芳香族化合物との光誘起電子移動反応を時間分解拡散反射法により観測した。基質分子の一電子酸化反応の効率やそのメカニズムなどに関して詳細な検討を行った。

[原著論文]

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in bis-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (31) (2008) 7208-7213.

Excitation Energy Dependence of Photoinduced Processes in Pentathiophene-Perylenediimide Dyads with a Flexible Linker, M. Fujitsuka, K. Harada, A. Sugimoto, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (41) (2008) 10193-10199.

Photodecomposition Profiles of β -Bond Cleavage of Phenylphenacyl Derivatives in the Higher Triplet Excited States during Stepwise Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (45) (2008) 11306-11311.

Properties of Excited Radical Cations of Substituted Oligothiophenes, S. Samori, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (45) (2008) 11312-11318.

Photoinduced Charge Transfer Processes on MOF-5 Nanoparticles: Elucidating Differences between Metal-Organic Frameworks and Semiconductor Metal Oxides, T. Tachikawa, J. R. Choi, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (36) (2008) 14090-14101.

Iodine-Doped TiO₂ Photocatalysts. Correlation between Band Structure and Mechanism, S. Tojo, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (38) (2008) 14948-14954.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate, S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (49) (2008) 19625-19634.

Spatial Control of Protein Binding onto Lipid Bimembrane Using Photoeliminative Linker, K. Nakayama, T. Tachikawa, and T. Majima: *Langmuir (Letter)*, 24 (13) (2008) 6425-6428.

Fine-Tuning of Radiolysis Induced Emission by Variable Substitution of Donor-/Acceptor-Substituted Tetrakis (arylethynyl)benzenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, E. L. Spittler, M. M. Haley, and T. Majima: *J. Org. Chem.*, 73 (9) (2008) 3551-3558.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu^{3+} -Doped TiO_2 Nanocrystals Revealed at the Single-Particle or Single-Aggregate Level, T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 47 (29) (2008) 5348-5352.

Two-laser-guided Three-dimensional Microfabrication and Processing in Flexible Polymer Matrix, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Adv. Mater.*, 20 (18) (2008) 3427-3432.

Charge transfer in DNA assembly: effects of sticky end, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2008) 2656-2658.

Two Different Mechanisms Operating in Photoinduced Electron Transfer of 1,8-Naphthalimide-linker-phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 10 (30) (2008) 4393-4399.

Kinetic of charge transfer in DNA containing a mismatch, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Nucl. Acids Res.*, 36 (17) (2008) 5562-5570.

Triplet Level Dependent Photoluminescence and Photoconduction Properties of π -Conjugated Polymer Thin Films Doped by Iridium Complexes, J. An, J. Chang, J. Han, C. Im, Y.-J. Yu, D. H. Choi, J.-I. Jin, and T. Majima: *J. Photochem. Photobiol. A*, 200 (2-3) (2008) 371-376.

Photoreactivity of As-Fabricated Au Clusters at the Single-Cluster Level, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (1) (2009) 6-7.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO_2 Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures, K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (3) (2009) 934-936.

σ -Bond Dissociation of *p*-Phenylbenzoyl Derivatives in the Higher Triplet Excited State during Two-color Two-laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 113 (9) (2009) 1696-1703.

Electron Transfer in Supramolecular Donor-Acceptor Dyad of Zinc Porphycene, M. Fujitsuka, H. Shimakoshi, S. Tojo, L. Cheng, D. Maeda, Y. Hisaeda, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 133 (14) (2009) 3330-3335.

Intramolecular Dimer Radical Anion of $[3_n]$ Cyclophanes: Transannular Distance Dependent Stabilization Energy, M. Fujitsuka, S. Tojo, T. Shinmyozu, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2009) 1553-1555.

[解説、総説]

DNA 中の電荷移動、真嶋哲朗、*化学と生物*、46[8] (2008) 520-522.

新規酸化チタンナノ粒子光触媒の開発、立川貴士、真嶋哲朗、*ケミカルエンジニアリング*、53[8] (2008) 17-23.

ユーロピウムイオンをドーブした発光性酸化チタンナノ粒子 —単一粒子分光法による発光測定—、立川貴士、真嶋哲朗、*セラミックス*、43[11] (2008) 958-960.

2 波長 2 レーザー照射による樹脂内に金属微粒子アレイの作成技術、坂本雅典、真嶋哲朗、Polyfile、45[538] (2008).

単一分子の観測から広がる化学研究—酸化チタン光触媒反応への応用—、立川貴士、真嶋哲朗、化学、64[1] (2009) 55-60.

2 波長 2 レーザーによる三次元加工、坂本雅典、真嶋哲朗、生産と技術、61[1] (2009) 55-61.

Light as a Construction Tool of Metal Nanoparticles: Synthesis and Mechanism, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Photochem. Photobiol. C, 10[1] (2009) 33-56.

DNA の物理化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「物理化学」6.生物物理化学 (2009) ①-83.

DNA の光電子移動反応、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「有機化学」12.光化学 3.電子移動 (2009) ⑥-54.

DNA 光化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「光化学」13.光生命科学 (2009) ②-16.

量子収率と光化学、真嶋哲朗、光化学、40[1] (2009) 巻頭言.

[著書]

“Consecutive adenine sequences serve as potential targets in photosensitized oxidative DNA damage”, K. Kawai and T. Majima, Nova, USA, (2008).

[特許]

「レーザー 3 次元光加工」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-161367

「金属クラスターの作成方法」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-276335

[国際会議]

Development of New TiO₂ Photocatalyst: Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligands to S₂-Excited Tetraphenyl Porphyrins (invited), T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 10th International Workshop on Radiation Damage to DNA, Fukushima, Japan, Jun. 8-12, 2008.

Real-Time Single Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species with Fluorescent Probes: Applications to TiO₂ Photocatalysts (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Single-Molecule Detection of Hole Transfer Through DNA (poster), *T. Tadao, M. Fujitsuka, and T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), *T. Majima, K. Kawai, and M. Fujitsuka: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

3-D Writing of metal nanoparticles in a polymer matrix with two-color laser beams (poster), *M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

Charge Transfer in DNA, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008), Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Intermolecular Photoinduced Electron-Transfer of 1,8-Naphthalimides in Protic Polar Solvents (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in *bis*-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Reversible Intramolecular Triplet-Triplet Energy Transfer in Benzophenone-*N*-methylphthalimide Dyad (poster), *S. S. Kim, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Three-dimensional Fabrication of Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: Langmuir Symposium in Beijing, Beijing, China, Oct. 31, 2008.

Photochemical Fabrication of 3D Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Solvent Effects on Photoinduced Electron Transfer in 1,8-Naphthalimide Dyads (poster), *D. W. Cho, U. C. Yoon, M. Fujitsuka, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Inter- and/or Intramolecular Excimer and Exciplex Emission in 1,8-Naphthalimide Derivatives (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Emission Mechanism of Doubly Orth-Linked Quinoxaline/Diphenylfluorene or *cis*-Stilbene/Fluorene Hybrid Compounds Based on the Transient Absorption and Emission Measurements during the Pulse Radiolysis (poster), Y. Wei, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-S. Lin, *C.-T. Chen, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 9th Int Symp Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Application, Shanghai, China, Nov. 11, 2008.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO₂ Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: Osaka University Forum in San Francisco: Global COE Program, Bio-Environmental Chemistry, San Francisco, USA, Dec.8-11,

2008.

Bilateral Cooperation between Korea and Japan: To the Future (invited), T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Design of Cyclic Reaction Driven by the Two-color Two-photon Excitation (poster), M. Sakamoto, *S. S. Kim, M. Fujitsuka, T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), *S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Development of TiO₂ Photocatalyst: Real-Time Single Molecule Imaging of TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, Jan. 13-16, 2009.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion, Pohang, Korea, Jan. 20, 2009.

Interfacial Electron Transfer Process in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), S.-C. Cui, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu³⁺-Doped TiO₂ Nanocrystals Revealed at the Single-Particle Level (poster), *T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reactions in Mesoporous TiO₂ Nanotube (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Development of New TiO₂ Photocatalyst (invited), T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Approach Toward Efficient Photo-electronic Devices by Supramolecular Chemistry (invited), *M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (invited), T. Majima: Asian Academic Seminar 2008 on "Frontiers in the Photocatalysis and Photochemistry of Advanced Materials" Kawasaki, Japan, Mar. 2-6, 2009.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: Kyudai International Symposium on Photo and Supramolecular Chemistry, Fukuoka, Japan, Mar. 7, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

真嶋 哲朗 2007 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (組織委員長)
 真嶋 哲朗 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008) (組織委員)
 真嶋 哲朗 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (組織委員)
 真嶋 哲朗 Langmuir Symposium in Beijing 2008 (組織委員)
 真嶋 哲朗 2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion (組織委員)
 真嶋 哲朗 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials' (組織委員)
 真嶋 哲朗 Langmuir, American Chemical Society (Senior Editor)

[国内学会]

第 30 回光生物・光医学会	1 件
2008 年光化学討論会	8 件
第 23 回生体機能関連化学シンポジウム	1 件
第 51 回放射線化学討論会	2 件
日本化学会第 89 春季年会	7 件

[取得学位]

修士 (工学)
 武田 雄一郎 ベンゾフェノチアジン修飾法による DNA 中の過剰電子移動
 中谷 武史 オリゴチオフェンの高励起三重項状態からの電子移動に関する研究
 博士 (工学)
 小阪田 泰子 DNA 内電荷移動と光増感 DNA 酸化損傷機構に関する研究
 内藤 一也 単一分子蛍光分光法を用いた酸化チタン光触媒反応機構に関する研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円
基盤研究 (S)	
真嶋 哲朗 光機能性DNAのナノサイエンス	8,840
萌芽研究	
真嶋 哲朗 光機能化タバコモザイクウイルス超分子による光電変換デバイスの創製	800
基盤研究 (B)	
藤塚 守 フェムト秒マルチレーザーを用いた分子素子の創製	6,370
特定領域研究	
藤塚 守 高分子鎖内光誘起超高速過程の解明	1,700
若手研究 (B)	
立川 貴士 二酸化チタン-DNA ナノ高次構造体の構築と光機能評価	650

特別研究員奨励費 佐守 真悟	高効率発光分子デバイス創成に向けてのラジカルイオンを原料とするビーム反応化学	900
特別研究員奨励費 小阪田 泰子	がん治療への応用を目指した DNA 内電荷分離を介した光増感 DNA 酸化損傷機構の解明	900
特別研究員奨励費 内藤 一也	単一分子蛍光法を用いた光機能化カーボンナノチューブの評価とバイオセンサーへの応用	900

[共同研究]

真嶋 哲朗	積水化学工業株式会社	酸化チタン光触媒作用による超親水性	400
真嶋 哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノ構造を用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,732
真嶋 哲朗	トヨタ自動車株式会社	光励起還元法による高比表面積水素吸蔵合金の研究	5,000

分子合成化学研究分野

教授	笹井 宏明
准教授	鬼塚 清孝(～平成 20 年 6 月 15 日)、滝澤 忍(平成 21 年 1 月 16 日～)
助教	市原 潤子、竹中 和浩(平成 20 年 12 月 16 日～)
研究支援推進員	鈴木 薫
研究員	Rashid Nabisaheb Nadaf (～平成 20 年 9 月 15 日)
大学院学生	井上 直人、Doss Rajesh、Kazem Ghozati、Gabr Randa Kassem Mohamed、 Mohanta Suman Chandra、平田 修一、伊藤 則之、桐山 貴美子、田中 薫理、 谷垣 勇剛、永野 豊浩、神林 直哉、箱井 雄太郎、橋本 慎太郎、杵本 啓輔
学部学生	阿辻 裕美子(～平成 20 年 7 月 1 日)
事務補佐員	大浜 美帆(～平成 20 年 5 月 23 日)、岸 朋子(平成 20 年 5 月 16 日～)

a) 概要

不斉触媒は極微量の使用により医薬品などの原料となる有用な光学活性化合物の大量供給を可能とする。限りある資源を有効かつ最大限に活かし環境汚染物質の排出を抑制するためには、実用的な高活性不斉触媒の開発が最重要課題の一つとなっている。当研究分野では、新しい触媒的不斉合成法の開発とその反応メカニズムの解明に積極的に取り組み、酵素的な作用機序で働く多機能な不斉触媒の開発に成功している。既存触媒の単純な不斉化とは異なる新しい活性化機構を基盤とする新規反応の開拓的研究である。現在、これら多機能不斉触媒の固定化、強固な骨格に基づく効果的不斉環境を有する新規光学活性配位子ならびに有機分子触媒の設計・創出を重点的に推進している。

b) 成果

・二重活性化能を有する二核バナジウム金属触媒の開発と不斉カップリング反応への応用

3,3'-ジホルミルピナフトールと二当量の *L-tert*-ロイシンの縮合反応で生成するシッフ塩基配位子に、三塩化オキシバナジウムを用いて錯形成することで、5 価の二核バナジウム触媒 **1** を高純度で得ることに成功した。触媒 **1** を 2-ナフトール類の不斉酸化カップリング反応に用いると、空気雰囲気下、24 時間で反応は完結し、カップリング体がほぼ定量的に得られた。これは触媒分子中の二つのバナジウムが二分子の 2-ナフトールのそれぞれを活性化、配向制御して効率的に反応を促進するためである。本二重活性化機構を反応速度論的解析から証明した。

触媒 **1** のより簡便な調製法を検討し、酸素雰囲気下、3,3'-ジホルミルピナフトールと二当量の *L-tert*-ロイシン、および四当量の酸化硫酸バナジウムをメタノール中加熱還流するのみで、触媒 **1** が一挙に調製できる **one-pot** 法を開発した。

キララなピフェナントロールは、光学分割剤や不斉触媒の原料として有用である。しかしながら、これまでに触媒的不斉酸化カップリング反応に適用された例は無かった。触媒 **1** を用いて、9-フェナントロールのカップリング反応を検討したところ、酸素雰囲気下、 -10°C で反応を行うことで、*S* 体のピフェナントロールを不斉収率 93% で定量的に得ることに成功した。

・キラルスピロビスイソオキサゾリン-パラジウム錯体触媒による新規エナンチオ選択的環化反応

キララなスピロビスイソオキサゾリン配位子 (SPRIX) とパラジウムから成る触媒が、Pd(IV) 中間体を經由するエニン類の酸化的環化反応において有効であることを見出し、合成化学的に有用な二環式ラクトンの高エナンチオ選択的合成に成功した。すなわち、Pd-SPRIX 錯体を不斉触媒に用い、超原子価ヨウ素試薬を酸化剤として加え、酢酸-アセトニトリル混合溶媒中 30°C にて基質であるエニン化合物を反応させたところ、四級不斉炭素を有する二環式 γ -ラクトンが最高 95% ee で得られた。これは、Pd(II)/Pd(IV) サイクルを経るエナンチオ選択的触媒反応の初めての例である。

先述したエナンチオ選択的 Pd(II)/Pd(IV)触媒反応と併せ、以前より展開している Pd(0)/Pd(II)機構に準じた触媒の不斉合成に関しても検討した。その結果、6-endo-trig 型で進行する新規不斉環化反応の開発に成功した。すなわち、2-アリルフェノール類に *p*-ベンゾキノン存在下 Pd-SPRIX 触媒を作用させると酸化的環化反応が進行し、収率、エナンチオ選択性ともに中程度ながらも利用価値の高いクロメン誘導体が得られた。

・不斉合成法を利用するハイブリッド型キラルスピロ配位子の効率的創製

不斉合成を利用した新規ハイブリッド型キラルスピロ配位子の効率的合成法を開発した。別途調製した光学活性なアルコールとマロン酸ジエステルから常法により鍵中間体となるジオキシムを合成した後、鍵段階となるジアステレオ選択的ダブルニトリルオキシド環化付加反応を行うことで、目的とする光学活性キラルスピロ（イソオキサゾール-イソオキサゾリン）配位子の合成に成功した。

・キラルスピロビラクタムを基盤とした機能性化合物の開発

以前に創製に成功した光学的に純粋なスピロビラクタムを基幹物質として用い、不斉触媒反応への応用に即した化合物群の開発を試みた。分子内ダブル Buchwald-Hartwig 反応を活用する不斉合成により簡便に得られるスピロビラクタムに、求電子芳香族ブロモ化、ヒドリド還元など通常の有機合成手法を施し、環境調和性の高い相間移動触媒として機能するジアンモニウム塩や、キラルスピロ骨格の特異的不斉環境を生かしたキラルビス（アミン-ホスフィン）配位子などの合成に成功した。

・グリーンケミストリーを指向した有機溶媒を用いない固相系酸化触媒反応の開発

“固体分散剤”というアイデアを導入した、ソルベントフリーの粉体状態で有機化合物の酸化反応を行う新規触媒反応システムを開発した。有機化合物と過酸化水素水とを、固体触媒/固体分散剤の粉末に浸みこませて、粉体状態で反応を行うものである。従来の有機溶媒を用いる不均一液相系より温和な条件で選択的に酸化反応が進み、固体触媒/固体分散剤は再利用できる、効率のよいシステムである。固体分散剤にはアパタイトや粘土鉱物類など環境に低負荷なものを用いる。エポキシ化反応のほか、アルコールの酸化反応、硫黄化合物や窒素化合物の酸化に適用できた。

[原著論文]

Divergent Synthesis of Chiral Spiro (Isoxazole-isoxazoline) Hybrid Ligands, K. Takenaka, S. Nakatsuka, T. Tsujihara, P. S. Koranne, H. Sasai: *Tetrahedron: Asymmetry*, 19 (21) (2008) 2492-2496.

Dicationic Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex for Highly Enantioselective Isotactic Copolymerization of CO with Styrene Derivatives, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai: *Synlett*, (2) (2009) 310-314.

Pd^{II}/Pd^{IV} Catalytic Enantioselective Synthesis of Bicyclo[3.1.0]hexanes via Oxidative Cyclization of Enynes, T. Tsujihara, K. Takenaka, K. Onitsuka, M. Hatanaka, H. Sasai: *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (10) (2009) 3452-3453.

Enantioselective Synthesis of C₂-symmetric Spiro lactams via Pd-catalyzed Intramolecular Double N-Arylation, K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: *Org. Lett.*, 11 (7) (2009) 1483-1486.

Regio- and Enantioselective Allylation of Indole Catalyzed by a Planar-chiral Cyclopentadienyl-Ruthenium Complex, K. Onitsuka, C. Kameyama, H. Sasai: *Chem. Lett.*, 38 (5) (2009) 444-445.

[解説、総説]

Development of Chiral Spiro Ligands for Metal-catalyzed Asymmetric Reactions, G. B. Bajracharya, M. A. Arai, P. S. Koranne, T. Suzuki, S. Takizawa, and H. Sasai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 82[3] (2009) 285-302.

複数の構成要素を持つ不斉触媒“Multicomponent Asymmetric Catalyst (MAC)”の固定化, 滝澤忍, 荒井孝義, 笹井宏明, 有機合成化学協会誌, 67[3] (2009) 194-207.

Dinuclear Chiral Vanadium Catalysts for Oxidative Coupling of 2-Naphthols via a Dual Activation Mechanism, S. Takizawa, T. Katayama, and H. Sasai, Chem. Commun., [35] (2008) 4113-4122.

[特許]

「新規バナジウム化合物」滝澤忍、笹井宏明、片山智美、特開 2008-63250

「エポキシ化合物の製造方法」市原潤子、特願 2008-162155

「Solid-phase Oxidation Reaction System」市原潤子、山口俊郎、WO 2008/093711

[国際会議]

Catalytic Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via an Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: Third International Conference on Advanced Organic Synthesis Directed toward the Ultimate Efficiency and Practicability, Shiga, Japan, May 26-27, 2008.

Novel Enantioselective Reactions Catalyzed by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (poster), *H. Sasai, S. Takizawa, K. Takenaka, T. Tsujihara, R. N. Nadaf, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, K. Onitsuka: International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHC-16), Florence, Italy, July 6-11, 2008.

Chiral Dinuclear Vanadium(V) Catalyst for Dual Activation of 2-Naphthols in Oxidative Couplings, *H. Sasai, S. Takizawa, T. Katayama: 6th International Vanadium Symposium, Lisbon, Portugal, July 17-19, 2008.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: The First International Symposium on Process Chemistry (ISPC 08), Kyoto, Japan, July 28-30, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by a Pd-SPRIX Complex (invited), *H. Sasai: 3rd International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Hangzhou, China, October 19-23, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (invited), *H. Sasai: 11th International Symposium on Natural Product Chemistry, Karachi, Pakistan, October 29-November 1, 2008.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, K. Sugimoto, H. Sasai: UK/Japan Joint Symposium on Asymmetric Catalysis, Kyoto, Japan, December 8-9, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by Pd-SPRIX Complexes (invited), *H. Sasai: UK/Japan Joint Symposium on Asymmetric Catalysis, Kyoto, Japan, December 8-9, 2008.

Iridium-catalyzed Oxidative Dimerization, Tishchenko Reaction and Oxidative Desymmetrization (poster), *T. Suzuki, G. Kazem, N. K. Mangu, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Novel Enantioselective Reactions Catalyzed by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (poster), T. Tsujihara, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, R. N. Nadaf, *K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald–Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, K. Sugimoto, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Development of Dinuclear Vanadium Catalysts and Acid-Base Organocatalysts for Enantioselective Reactions via Dual Activation Mechanism (poster), *S. Takizawa, K. Matsui, T. Katayama, N. Inoue, D. Rajesh, S. Hirata, K. Kiriya, T. Suzuki, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

An Eco-Process; Selective Oxidation of Sulfide (poster), *J. Ichihara, K. Sakamoto, I. Fujihara: 2nd International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials (ISMASM2008), Hyogo, Japan, May 28-29, 2008.

Oxidative Dehydration of Terpene by Eco-Process (poster), *J. Ichihara: 2nd International Symposium on the Manipulation of Advanced Smart Materials (ISMASM2008), Hyogo, Japan, May 28-29, 2008.

[国内学会]

日本化学会春季年会	12 件
有機反応懇談会	2 件
有機金属化学討論会	2 件
有機合成シンポジウム	1 件
日本薬学会	1 件
コンビケム研究会	1 件
モレキュラー・キラリティー	1 件

[取得学位]

修士 (理学)	
伊藤 則之	パラジウム触媒反応を機軸としたキラルスピロビラクタムのエナンチオ選択的 合成
桐山 貴美子	新規酸-塩基型不斉有機分子触媒の開発
田中 薫理	キラル相間移動触媒への応用を指向した新規光学活性スピロ型第四級アンモニ ウム塩の開発
谷垣 勇剛	Pd-SPRIX 触媒を用いる新規不斉分子内 Wacker 型環化反応の開発
永野 豊浩	新規スピロ型配位子の不斉合成
博士 (理学)	
辻原 哲也	キラル配位子スピロビスイソオキサゾリンを用いる不斉酸化的環化反応
Rashid Nabisaheb Nadaf	The Realization of Copper Catalyzed Enzymatic Reactions and Palladium Catalyzed 5-Endo-Trig Type Cyclizations

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円
特定領域研究

笹井 宏明	相乗的活性化により反応を促進する不斉有機触媒の創製	2,300
鬼塚 清孝	有機金属ハイブリッド共役ポリマーの創製と新機能発現	1,400
鬼塚 清孝	面不斉有機金属錯体を触媒とする高立体選択的反応の開発	1,900

[奨学寄附金]

笹井 宏明	明治製菓株式会社	1,000
笹井 宏明	ダイソー株式会社	1,200
笹井 宏明	日産化学工業	400
笹井 宏明	ナガセケムテックス	1,000
市原 潤子	共同印刷株式会社	800
市原 潤子	株式会社A D E K A	600

[その他の競争的研究資金]

鬼塚 清孝	財団法人池谷科学技術 振興財団	面不斉シクロペンタジエニール ルテニウム錯体を活用した不斉触 媒反応の開発	1,500
滝澤 忍	財団法人小笠原科学技 術振興財団研究助成金	二重活性化能を有する高分子不斉 触媒の開発と精密有機合成への応 用	3,000

知能システム科学研究部門

概要

膨大な情報がデジタル化され、ネットワークを通じ世界中を飛び交うようになった今日の高度情報化社会では、知的情報処理は日常生活を含む社会のあらゆる局面で必要不可欠な要素となりつつある。本研究部門は人間の知能を科学し、高度な知識情報処理機能を計算機に付与し広く工学的諸問題の解決や知的活動支援全般へ応用することを目指した、互いに有機的に関連する4研究分野で構成されている。研究内容はオントロジー工学、知識の共有、再利用の研究（知識システム分野）、多元的な情報の利用と多角的な処理の研究（複合知能メディア分野）、人間と計算機との理想的な相互作用の形態を追求したインタフェースおよびエージェントの研究（知能アーキテクチャ分野）、データマイニング、知識発見、機械学習の研究（知能推論研究分野）など、人間の知的活動の根源に関する諸問題を情報科学／工学の観点から追求している。各研究分野は、それぞれの分野名によって代表される観点から独自性を重視しつつ研究を進めているが、その一方で、互いに連携を保った研究開発も同時に推進している。また、当研究所の他部門との間においても、上記のような目標を追求する過程において得られる成果を研究開発支援ツールとして提供する一方、逆に他部門からは実際の適用課題についての示唆を受けるなどの形で、相互に協調性を図りながら研究を進めている。

成果

- ・ ロール理論とその記述開発環境、及びオントロジー分散開発環境の実践的機能拡張
- ・ オントロジー工学に基づく機能的知識の体系化方法論の洗練とその実証ツールの開発
- ・ 学習・教授理論オントロジーOMNIBUSの公開と理論・標準化準拠オーサリングシステムの開発
- ・ 医療オントロジー、サステナビリティ科学オントロジー、上位オントロジーの開発
- ・ 協調学習用オーサリングシステムの開発とメタ認知モデル構成
- ・ タスク指向モバイルサービスナビゲーションインタフェースの開発と評価
- ・ 全方位ビジョンセンサの設計と応用
- ・ 知能ロボットのための環境モデリング
- ・ 医用画像解析
- ・ 全方位監視システムと人物行動解析
- ・ 述語の発明機構
- ・ 構成的適応インタフェースへのセンサーの導入
- ・ 適応エージェント
- ・ 適応能力を持ったチュータリングシステムに関する研究
- ・ **Web** の要約
- ・ 共鳴に基づく人と環境とのインタラクションフレームワークの創出
- ・ 大規模次元ダイナミクスデータからの知識発見に関する研究
- ・ 大規模多頻度共起部分グラフ構造パターン導出基礎原理の探求
- ・ グラフ系列パターン導出基礎原理の探求
- ・ 大規模次元データ類似性データからの知識発見
- ・ イベント系列 OLAP データベース技術の開発

知識システム研究分野

教授	溝口 理一郎
准教授	來村 徳信
助教	笹嶋 宗彦
特任助教	林 雄介、国府 裕子、周 俊
大学院学生	垂見 晋也、磯谷 セイジ、太田 衛、遠藤 諭、古谷 孝一郎、住田 光平、 瀬川 翔、廣田 健
研究生	孟 帥
学部学生	佐藤 俊作、中山田 淳、西村 悟史
事務補佐員	馬野 直美

a) 概要

情報科学の進展はめざましく、「情報」を越えた「知識」がますますその重要性を増すと考えられている。実社会においては小型化が極限にまで進化しつつあるコンピュータと地球規模に発達したコンピュータネットワークによって「大量情報／知識の知的処理」が一般家庭にまで浸透しつつある。学界における知識処理研究は「考える、判断する、推論する」といった人間固有の知的機能を計算機で実現する「知的機能代行型」の研究から、人間と共生する「知的パートナーとしてのコンピュータ」の研究へと展開している。当分野では学術的に優れた研究成果をあげつつこれらの社会的状況に応えることを目指して、次世代の知識処理システム構築のための新しい基礎理論と基盤技術としての「オントロジー工学」を提唱し、それに関連する幅広い研究を行っている。具体的には、オントロジー基礎論に基づく開発方法論とその環境、知識の体系化に基づく知的設計支援システム、知識の共有・再利用、知的教育・訓練システムとオントロジーに基づくオーサリングシステムに関する研究を行っている。

b) 成果

・オントロジー構成論

知識工学の基礎理論としてオントロジー構成論を展開している。知識ベースシステムの知的振る舞いは人間の知的振る舞いを模倣したものであり、その源は人間にある。また、それがサービスを提供する対象もまた人間である。それにも関わらず、知識ベースシステムの大多数においては、人間が持つ概念体系の豊かな意味あい失われ、人間からみて従来型のソフトウェアと本質的な差異を認めることができないという問題がおこっている。この問題は、知識ベースの共有・再利用の困難さや、人間からみたソフトウェアの振る舞いの「硬さ」といった問題に通じている。これは、人間が知識ベースシステムを「作る」、あるいは「使う」ときのための基礎的理論が確立していないことに原因がある。オントロジーに関する理論は、人間の対象に対する認識の世界とソフトウェアの中に作り出される世界を明確に対応づけながら知識工学的成果を積み重ね、それに基づいて現実の問題に応用するための必要不可欠な基礎理論である。オントロジー構成論に関して当分野では、オントロジー研究の意義、機能と役割、研究すべき課題などを整理した「オントロジー工学序説」「オントロジー研究の基礎と応用」「オントロジー工学基礎論」と題する啓蒙的な論文を公表するなど我が国において先導的立場で研究を行って来た。また、2005年1月にはその時点での学問の到達点を示す意味で「オントロジー工学」を出版した。まず基礎となる理論を確立すべく、人間が認識する概念の成り立ちを独自の観点で分析し、その結果を新しい基礎理論として定式化し公表し、「知識」に関する情報科学的に重要な疑問に解答を与え始めている。さらに、基礎論から実践的研究への展開に向けて、既存の情報基盤技術との連携技術について重点的に検討している。これらの成果は当分野で開発したオントロジー工学研究の基盤ツール「法造」におけるオントロジーエディタ、技術ドキュメントからのオントロジー抽出過程を支援する概念工房、そしてオントロジーサーバーとして実装した。さらに、法造の実用ツールへ向けた強化とセマンティックウェブ

を指向した分散環境でのオントロジー開発支援システムを開発した。今年度は、オントロジーを視点依存の形で俯瞰して概念マップを作成するツールを開発し、サステナビリティ知識の組織化において応用を開始した。また、臨床医学オントロジー、遺伝子オントロジーの本格的な構築を開始した。さらに、理論的な側面において、インスタンス管理の観点からロール理論の精緻化、およびオブジェクト、プロセス、イベントのオントロジー的理論の再構築を目指して考察を進めた。また、メタロールを用いたロール理論の再構築、全体・部分の理論的検討を開始した。更に、10年来開発を進めてきた上位オントロジーYATOの第一版を完成させ、Home Page上に公開した。

・工学的知識体系化の枠組みの開発とその知識記述・共有における利用

昨今の工業社会において大きな役割を果たしている工学的知識の中で、数値や形状などのデータレベル知識の共有は普及してきたが、機能などの概念レベルの知識は属人的かつ暗黙的になっており、明示化されたとしても有効活用されていないことが多い。そのためには、共通の一貫した視点に基づいて知識を捉え、知識に用いられる概念を統一することが必要である。本研究では、人工物の概念レベルモデルの成り立ちを深く考察し、工学的知識の枠組みを与える概念体系（オントロジー）の構築を目標としている。本年度まででは、「装置」を中心とした観点から人工物を捉える視点を与えるデバイスオントロジーと、機能的知識の語彙を提供する機能概念オントロジーを構築した。本枠組みはある大手製造業企業において生産装置・工程に関する知識共有に実用されており、大きな成果を上げている。さらに、それらのオントロジーを拡張し、企業内セマンティックウェブ環境における技術文書の機能的メタデータ検索や、不具合知識などとの融合を実現してきた。本年度は、機能の上位レベル概念を整理した「機能に関する参照オントロジー」に基づいた既存の機能概念体系との双方向の対応付けを実現し、そのマッピング結果を詳細に分析した。その結果をメタデータ検索システムに応用することによって、知識の相互運用性の向上を実現した。また、機能に関する存在論的な考察をさらに深め、機能の存在の変化を表すモデルを構築することで、機能概念の諸相を明らかにした。さらに、物質基盤センターと共同で、より高い拡張性・外部連携性・知識外化支援機能を備えた技術知識統合管理プラットフォームを目指して、先進的XML技術に基づいた機能的知識外化・共有支援ツールOntoGearの実装を進めた。本年度は特に失敗知識に注目し、テキストから失敗知識を半自動抽出する技術について検討し、実装した。

・学習支援システムの構築方法論

学習支援システムに関する研究領域では、教育という人間の知的活動を部分的に計算機システムに代行させることを目的として、様々な方面から基礎と応用の両面から研究がなされてきている。しかし、残念ながらその知見は散発的で、工学的な方法論の確立には集約していないというのが実状である。このような状況を打開するためには、基礎理論とシステム構築方法論の対応関係を明確にするための枠組みが必要である。その中核となる技術として我々が提唱しているのがオントロジー工学である。オントロジーは、対象に関して人間が持っている専門的知識と、それを埋め込んだソフトウェアの構造や振る舞いととの対応関係を、人間にとって分かり易い形態で明確にするための知識工学の理論である。本研究では、教育タスクのオントロジーを明確にし、それに基づいた人間に親和性の高いオーサリングツール（教育システム構築環境）を開発することを目標とし、これまでに積み重ねられた様々な教育システムを解析し、その構成原理をオントロジーとして明確にする作業を進めている。これまでに、この理論を企業内教育に適用し、Ontology-Awarenessという概念を提案し、従来疎遠であった学習理論や教授理論までを包含したオントロジーを開発して、教育タスクオントロジーと合わせた包括的なオントロジーに基づいた新しいオーサリング環境を実現している。また、オーサリングタスクオントロジーとそれに基づく革新的なオーサリングシステムのオントロジー、協調学習のためのオーサリングシステム、メタ認知機能のフレームワークの開発を行ってきた。本年度は、一般公開している学習理論・教授理論のオントロジーの一部を精緻化しながら既存の理論の分析を行い、理論の理解を深める支援を実現するための機能について考察を行った。また、別プロジェクトで行われてきた情報教育教授設計を支援する包括的なオントロジーと組み合わせることで、様々な理論の観点から設計された教材を分析し理論的な助言を行うシステムの設計を行った。協調学習のためのオーサリングシステムに関しては、昨年度行った協調学習理論オントロジーに基づく協調学習実施評価実験の結果を基に、協調学習デザインを支援するシス

テムのプロトタイプを開発した。メタ認知機能のフレームワークの開発に関しては、ディベートをこれまで開発してきたメタ認知システムの包括モデルに基づいて分析を行い、実際に支援方法を考案し実践的にその効果を確認した。

・オントロジー工学の適用によるモバイルサービスの利便性向上

携帯電話サービスに代表されるモバイルインターネット環境が普及し、時間や場所を問わずにネットワーク上のさまざまなサービスを楽しむことができるようになった。しかし近年、モバイルサービスの数や種類が増えるに従いユーザが所望のサービスメニューを簡単に見つけられないという問題が起きている。本研究では本分野が長年取り組んできたオントロジー工学の技術をモバイルサービスおよびその利用者の分析とモデル構築に適用し、利用者にとって利便性の高いモバイルサービスの実現を目指している。前年度に終了したモバイルサービス提供企業との共同研究の契約を再度更新し、サービス利用者行動モデル構築方法論に基づくタスク指向型のモバイルサービス誘導メニューを実規模で試作し、実運用されているサービスとリンクさせた。さらに、試作ソフトウェアを用いた最初の評価実験を実施し、提案方式が、実規模であっても、特に初心者モバイルユーザの誘導に有効であることを確認した。

[原著論文]

オントロジー工学と XML 技術に基づく技術知識統合管理プラットフォームの構築-人工物の機能的知識の外化・共有・共創支援基盤の実現-, 高藤 淳, 來村 徳信, 溝口 理一郎: 人工知能学会論文誌, 23 (6) (2008) 424-436.

Obstacles Reveal the Needs of Mobile Internet Services -OOPS: Ontology-Based Obstacle, Prevention and Solution Modeling Framework-, Munehiko Sasajima, Yoshinobu Kitamura, Takefumi Naganuma, Kunihiro Fujii, Shoji Kurakake and Riichiro Mizoguchi: Journal of Web Engineering, 7 (2) (2008) 133-157.

モバイルサービスのタスク指向型メニュー搭載を目指して-ユーザ行動モデル記述方式とその利用についての一考察-, 笹島 宗彦, 來村 徳信, 長沼 武史, 倉掛 正治, 溝口 理一郎: 日本知能情報フレンジ学会誌, 20 (2) (2008) 171-189.

メタ認知活動の困難さに関するフレームワークの提案, 茅島 路子, 稲葉 晶子, 溝口 理一郎: 教育システム情報学会誌, 25 (1) (2008) 19-31.

Research Directions on Semantic Web and Education, Ig Ibert Bittencourt, Seiji Isotani, Evandro Costa and Riichiro Mizoguchi: Journal Scientia - Interdisciplinary Studies in Computer Science, 19 (1) (2008) 59-66.

Toward Knowledge Structuring of Sustainability Science Based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takanori Matsui and Riichiro Mizoguchi: Sustainability Science, 4 (1) (2009) 99-116.

An Ontology-based Framework and Its Application to Effective Collaboration, Seiji Isotani and Riichiro Mizoguchi: CLEI electronic Journal, 11 (1) (2008) 1-9.

[解説、総説]

ロボット分野アカデミック・ロードマップの統括、佐藤知正、溝口理一郎、富田豊、内山隆、日本ロボット学会誌、Vol. 26 No. 7(2008) 722-727

私のブックマーク「オントロジーの構築と利用」、笹島宗彦、人工知能学会誌、Vol.23 No.4(2008) 572-576

[著書]

「環境のオントロジー」(河野哲也、染谷昌義、齋藤暢人編著)、三嶋博之、溝口理一郎、関博紀、倉田剛、加地大介、柏端達也著、春秋社、(2008)

A Device-oriented Definition of Functions of Artifacts and Its Perspectives, Yoshinobu Kitamura, Riichiro Mizoguchi, Functions in Biological and Artificial Worlds: Comparative Philosophical Perspectives, Ulrich Krohs, Peter Kroes (eds.), MIT Press,(2009)

[国際会議]

Semantics of the Integrated BioMedical Database Project -A Japanese National Project-, Jun Nakaya, Saburo Sakota, Riichiro Mizoguchi, Kouji Kozaki, Kaei Hiroi, Keisuke Ido, Michio Kimura, Hiroshi Tanaka: 9th International HL7 Interoperability Conference (IHIC2008), Crete, Greece, Oct.8-11, (2008)

Multi-Entry System for Supporting Teachers in Designing Instruction, Toshinobu Kasai, Kazuo Nagano and Riichiro Mizoguchi: 16th International Conference of Computers in Education (ICCE'08), Taipei, Taiwan, Nov. 27-31, (2008) 79-86.

Toward Accumulation of Learning/Instructional Design Knowledge for Authoring Systems, Yusuke Hayashi, Jacqueline Bourdeau and Riichiro Mizoguchi: 16th International Conference of Computers in Education (ICCE'08), Taipei, Taiwan, Nov. 27-31, (2008) 19-26.

Adventure in the Boundary between Domain-Independent Ontologies and Domain-Specific Content for CSCL, Seiji Isotani and Riichiro Mizoguchi: 12th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems (KES'08), Zagreb, Croatia, Sep. 3-5, (2008) 523-532.

Theory-Driven Group Formation through Ontologies, Seiji Isotani and Riichiro Mizoguchi: 9th International Conference on Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008) 646-655.

Structurization of Learning/Instructional Design Knowledge for Theory-aware Authoring systems, Yusuke Hayashi, Jacqueline Bourdeau and Riichiro Mizoguchi: 9th International Conference on Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008) 573-582.

Toward Establishing an Ontological Structure for the Accumulation of Learning/Instructional Design Knowledge, Yusuke Hayashi, Jacqueline Bourdeau and Riichiro Mizoguchi: 6th International Workshop on Ontologies and Semantic Web for E-Learning (SWEL'08), Montreal, Canada, June 22, (2008) 1-10.

Yet Another Top-level Ontology: YATO, Riichiro Mizoguchi: Second Interdisciplinary Ontology Meeting, Tokyo, Japan, February 28 - March 1, (2009) 91-101.

Toward Integration of Mouse Phenotype Information, Hiroshi Masuya and Riichiro Mizoguchi: Second Interdisciplinary Ontology Meeting, Tokyo, Japan, February 28 - March 1, (2009) 35-44.

Understanding Semantic Web Applications, Kouji Kozaki, Yusuke Hayashi, Munehiko Sasajima, Shinya Tarumi and Riichiro Mizoguchi: 3rd Asian Semantic Web Conference (ASWC 2008), LNCS 5367, Bangkok, Thailand, February 2-5, (2009) 524-539,.

Instance Management Problems in the Role Model of Hozo, Kouji Kozaki, Satoshi Endo and Riichiro Mizoguchi:

10th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08), LNAI 5351, Hanoi, Vietnam, December 15-19, (2008) 614-625.

Deep Semantic Mapping between Functional Taxonomies for Interoperable Semantic Search, Yoshinobu Kitamura, Sho Segawa, Munehiko Sasajima, Shinya Tarumi and Riichiro Mizoguchi: 3rd Asian Semantic Web Conference (ASWC 2008), LNCS 5367, Bangkok, Thailand, February 2-5, (2009) 137-151.

Prototyping of Task-Oriented Mobile Navigation System with Real Scale Mobile Services, Munehiko Sasajima, Koichiro Furutani, Yoshinobu Kitamura, Takefumi Naganuma, Shoji Kurakake and Riichiro Mizoguchi, Advances in Computer Science and Engineering (ACSE 2009), Phuket, Thailand, Mar.16-18,(2009) 205-210.

Knowledge Structuring Process of Sustainability Science based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Takanori Matsui, Keishiro Hara, Michinori Uwasu, Yohei Yamaguchi, Yugo Yamamoto, Kouji Kozaki, Osamu Saito and Riichiro Mizoguchi: 8th International Conference on Eco Balance, Tokyo, Japan, December 10-12, (2008).

Knowledge Structuring Tool for Sustainability Science Based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takanori Matsui and Riichiro Mizoguchi: 1st International Workshop on Intelligent Systems for Environmental (Knowledge) Engineering and EcoInformatics (i-SEEK' 09) , Fukuoka, Japan, March 16-19, (2009) 1138-1143.

Knowledge Structuring and an Exploration System for Global Sustainability and its Application to the Biofuel Issue, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takeru Hirota, Riichiro Mizoguchi: Climate Change: Global Risks, Challenges and Decisions, Copenhagen, Denmark, March 10-12, (2009).

Towards a Reference Model to Semantic Web-based Educational Systems, Ig Ibert Bittencourt, Evandro Costa, Seiji Isotani, Riichiro Mizoguchi, Ibsen Mateus Bittencourt: Workshop on Semantic Web and Education, Fortaleza, Brazil, November 12-14, (2008) 1-10.

HOZO: An ontology building environment (poster), Riichiro Mizoguchi and Kouji Kozaki: Demonstrations Program of 9th International Conference of Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008) 35-36.

Tying Ontologies to Domain Contents for CSCL (poster), Seiji Isotani and Riichiro Mizoguchi: 9th International Conference on Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008) 752-754.

CHOCOLATO: A Concrete and Hepful Ontology-Aware Collaborative Learning Authoring Tool (poster), Seiji Isotani and Riichiro Mizoguchi: Demonstrations Program of 9th International Conference of Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008) 21-24.

SMARTIES: a Theory-aware and Standard-compliant Authoring System (poster), Yusuke Hayashi, Jacqueline Bourdeau and Riichiro Mizoguchi: Demonstrations Program of 9th International Conference of Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Montreal, Canada, June 23-27, (2008), 65-67.

Development of a Conceptual Map Generation Tool for Exploring Ontologies (poster), Kouji Kozaki, Takeru Hirota and Riichiro Mizoguchi: Poster Noets of the 5th European Semantic Web Conference (ESWC 2008), Tenerife, Spain, Jun. 1-5th, (2008).

Divergent Exploration of an Ontology (poster), Takeru Hirota, Kouji Kozaki and Riichiro Mizoguchi: Poster &

Demo Notes of the 7th International Semantic Web Conference (ISWC 2008), Karlsruhe, Germany, October 26-30, (2008).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

溝口理一郎	Semantic Web Science Association (副会長)
溝口理一郎	International Journal of Web Semantics (編集委員長)
溝口理一郎	International Artificial Intelligence in Education Society (Executive Committee 委員)
溝口理一郎	Asia-Pacific Society for Computers in Education (APSCE) (理事)
溝口理一郎	The 16 th International Conference on Computers in Education (ICCE2008) Conf. on AIED/ITS & Adaptive Learning (プログラム委員長)
溝口理一郎	The Tenth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08) (プログラム委員会副委員長)
溝口理一郎	The 3 rd European Conference on Technology Enhanced Learning (EC-TEL 2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 9 th International Conference on Intelligent Tutoring System (ITS2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 9 th International Conference on Intelligent Tutoring System (ITS2008) (パネル委員長)
溝口理一郎	The 5 th European Semantic Web Conference (ESWC2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 2008 IEEE International Conference on Information Reuse and Integration (IEEE IRI-08) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 17 th International World Wide Web Conference Semantic Web Track (トラックプログラム委員会委員)
溝口理一郎	ODBASE 08 : Intl. Conf. on Ontologies, DataBases, and Applications of Semantics (プログラム委員)
溝口理一郎	The 3 rd Asian Semantic Web Conference (ASWC2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 7 th international semantic web conference (ISWC2008) (上級プログラム委員)
溝口理一郎	EKAW 2008 - 16th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management Knowledge Patterns (プログラム委員)
溝口理一郎	Formal Ontologies Meet Industry: FOMI 2008 (プログラム委員)
溝口理一郎	IIP2008 - 5th International Conference on Intelligent Information Processing (プログラム委員)
溝口理一郎	14th Collaboration Researchers' International Workshop on Groupware (プログラム委員)
溝口理一郎	The 6 th International Workshop on Applications of Semantic Web Technologies for E-Learning (SWEL'08) (組織委員長)
溝口理一郎	International Journal of Advanced Engineering Informatics (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Applied Ontology (編集委員)
溝口理一郎	Research and Practice in Technology Enhanced Learning (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Artificial Intelligence in Education (編集委員)
溝口理一郎	Frontiers in AI and Application (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Web Engineering and Technology (編集委員)
溝口理一郎	Asian Semantic Web Conference (運営委員長)
來村徳信	The 3 rd Asian Semantic Web Conference (ASWC2008) (プログラム委員)
來村徳信	International Journal of Advanced Engineering Informatics (編集委員)
林雄介	The 16 th International Conference on Computers in Education (ICCE2008) Conf. on AIED/ITS & Adaptive Learning (プログラム委員)

林雄介	The 16 th International Conference on Computers in Education (ICCE2008) Conf. on Advanced Learning Technologies, Open Contents, & Standards (プログラム委員)
林雄介	The 7 th International Conference on Practical Aspects of Knowledge Management (PAKM2008) (プログラム委員)
林雄介	The 1 st International Workshop on Distributed Knowledge Management (DKM 2008) (プログラム委員)
笹嶋宗彦	The 5 th International Conference on Autonomic and Autonomous Systems (ICAS 2009) (プログラム委員)
笹嶋宗彦	International conference on Internet and Multimedia Systems and Applications (IMSA 2009) (プログラム委員)

[国内学会]

人工知能学会	18 件
電子情報通信学会	1 件
日本デザイン学会	1 件
日本機械学会	1 件
教育システム情報学会	1 件
日本教育工学会	1 件
医療情報学会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
遠藤 諭	インスタンス管理問題におけるロール理論と identity の考察
古谷 孝一郎	実規模モバイルサービスを対象としたタスク指向型メニューシステムの開発とその評価

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (A)		
溝口 理一郎	学習理論・標準化技術 Compliant 知識サーバーの構築	15,340
特定領域研究		
溝口 理一郎	人工物オントロジーに基づく製造業における技術ドキュメントの融合に関する研究	5,000
若手研究 (B)		
笹嶋 宗彦	モバイルサービス改善のための消費者行動モデリングに関する研究	1,430
林 雄介	学習コンテンツ設計の理論と実践の知識循環を指向した実践的知識リポジトリの構築	1,430

[受託研究]

溝口 理一郎	東京大学	医療情報システムのための医療知識基盤データベース研究開発；意味関係モデル設計開発	15,000
溝口 理一郎	東京大学	アジア太平洋地域を中心とする持続可能な発展のためのバイオ燃料	2,401

利用戦略に関する研究；オントロ
 ジーを用いた問題の構造化と政策
 立案支援ツールの開発

[奨学寄附金]

溝口 理一郎	(株)ジャストシステム		2,500
溝口 理一郎	(株)ワイ・エム・ピー・イ ンターナショナル		650
溝口 理一郎	(株)ニイガタマシテクノ		650
溝口 理一郎	(株)ワイ・エム・ピー・イ ンターナショナル		650
溝口 理一郎	(株)沖データ		1,000

[共同研究]

溝口 理一郎	(株) エヌ・ティ・ティ・ ドコモ	モバイルユーザーの実世界コンテ キスト理解に向けたオントロジー の研究	3,000
溝口 理一郎	(株) ジャストシステム	オントロジー工学と自然言語処理 を融合した安全・安心物作りのた めの情報共有に関する研究	20,000
溝口 理一郎	出光興産株式会社	ナノ材料に関わる知識基盤システ ムの構築	3,300
溝口 理一郎	(株) トヨタ IT 開発セン ター	クルマにおけるオントロジー技術 に関する研究	3,000

複合知能メディア研究分野

教授	八木 康史
准教授	向川 康博
助教	佐川 立昌、槇原 靖
博士研究員	王 君秋、Md. Altab HOSSAIN、近藤 一晃、華 春生
大学院学生	青木 伸也、Hai VU、万波 秀年、Ngo Thanh TRUNG、姉崎 隆、 杉浦 一成、東 はるか、赤坂 清隆、辻 顯、 田川 聖一、Nguyen Da TAN、大田 雄也、西出 祐輔、森 敦史
学部学生	奥村 麻由、馬場 葉子、椛島 誠一郎、竹内 友弥
短期留学生(FrontiaLab@OsakaU)	Xiang XIANG(2008.10.1-2009.2.16)
事務補佐員	家村 雅子、安井 紀子、藤本 真紀子

a) 概要

本研究分野では、コンピュータビジョンとメディア処理に関する研究をしている。センサデザインやカメラ校正などの基礎技術から、計算機やロボットに高度な視覚機能を与えることを目指した知能システムの開発まで、視覚情報処理に関する幅広いテーマを扱っている。例えば、1台のカメラで周囲360度の近接物体を検出できる複眼全方位センサ、全方位センサの撮像系校正、内視鏡映像による診断支援のための映像解析、物体の反射特性の計測とCGへの応用、広域監視のための歩容認証、知能移動ロボットのための環境モデリングなどの研究をしている。

b) 成果

・ Video Capsule Endoscopy Analysis For Diagnostic Assistance

Video capsule endoscopy (VCE) represents a significant advance in examinations of digestive diseases by providing a non-invasive method to view the small bowel. In addition, VCE provides a valuable source for visualizing the intestinal contractions, which are mainly events for intestinal motility assessment. However, the advantages of VCE diagnosis technique are facing with the time consuming for reading video sequence as well as challenging to detect the intestinal contractions. In this thesis, computer-assisted applications are motivated from these drawbacks through techniques of VCE analysis.

Because of non-scene, non-object characteristics of VCE, and natural movement of the capsule device, VCE interpretations could be implemented by analyzing spatial and temporal features. First, several image features such as color, edges, and motion displacement are extracted. Then their temporal analyses are presented in several ways to adapt with different tasks. Two applications utilizing this framework are developed. In the first application, we propose a new method to reduce diagnostic time under the constraint that all original images should be displayed to an examining doctor without skipping frames. To realize such a system, delay time for drawing images between frames is controlled in adaptive rate, according to the states of capturing images. Several techniques for the state classification, delay time calculation, and log-based analysis are deployed in this application. In the second application, we develop a three-stage procedure for the intestinal contraction detections. Based on the characteristics of contractile patterns, the possible contractions can be investigated using essential images features extracted from VCE such as changes in edge of the intestinal folds and by evaluating similarities features in consecutive frames. Then true contractions are determined through spatial analysis of directional information. To exclude as many non-contractions as possible, we consider about information of contractions frequencies along capsule transit time. Both the quality and quantity indices are analyzed in experiments for performance evaluations.

・液晶を用いた適応的な光量調節による広ダイナミックレンジ撮影システムに関する研究

屋外などの明暗の差が激しいシーンの情報を損失なく撮影するためには、ダイナミックレンジ性能の高い撮影システムが必要である。それらのシステムにより撮影される光量は、通常より多くの光量情報を持つため、例えば画像処理など、様々な用途での活用が考えられる。一方、ダイナミックレンジの低い表示機器においては、撮影された光量を直接表示できず、光量情報を圧縮して表示を行う必要がある。そのため、撮影システムは、シーンの光量をより正確に表すダイナミックレンジの高い出力のみでなく、表示機器に合わせてダイナミックレンジの低い出力を、用途に応じて出力することが望まれる。そこで本研究では、液晶を用いた適応的な光量調節による高ダイナミックレンジ撮像システムを提案する。光量に対して適応的に液晶の制御を行い、各画像素子の受光量を調節して撮影する。画像素子における受光量と液晶の制御情報からシーンの光量を計算することで高ダイナミックレンジ画像の出力を行える。この手法では画像素子としては通常のものを用いるため、光量調節により各画像素子の出力をそのままダイナミックレンジの低い出力として用いることができる。撮影システムは、液晶の種類とレンズの構成により分類される。液晶の種類として透過型液晶と反射型液晶が考えられ、また、レンズの構成として単レンズとリレーレンズを考える。分類のうち、透過型液晶及び単レンズを用いたシステムは光学系が簡単であるため、構築コストが少ないという利点があるものの、画素単位の光量調節が難しい。一方、反射型液晶及びリレーレンズを用いたシステムは画素単位の光量調節が実現できるものの、光学系が複雑になるという問題があり、それぞれ一長一短であるため、実際に両者を構築し、その特性を評価した。透過型液晶を用いたシステムにおいては、人間の視覚特性を考慮した光量調節の実現を確認した。光量調節の効果が広がりをもつが、この広がり関数を実データから求めることで、より正確に光量を求められることを確認した。また、反射型液晶を用いたシステムにおいては、液晶面にフォーカスを合わせているためより密に適応的な光量調節が可能であり、また光量調節の情報から元の光量を復元することで適応的な光量調節による高ダイナミックレンジ撮像システムが実現できることを確認した。

・全方位カメラと方向変換モデルを用いた多方向照合による歩容認証

近年、カメラから離れた場所での個人認証手法として、歩き方の個人差に基づく歩容認証が注目を集めている。歩容認証においては多方向の特徴を用いることで、認証性能が向上することが知られている。しかしながら、ギャラリーとプローブのシーケンス間で観測される方向が異なる場合、多方向の照合を行うことができないため、認証性能の向上は望めない。よって本研究では、全方位カメラと方向変換モデルから得られる多方向の歩容画像を用いた個人認証手法を提案する。全方位カメラによって観測されるシーケンスには俯角と方位角の変化が含まれ、俯角に比べて方位角の変化が大きいという性質がある。そこで、その性質を考慮した適切な変換を俯角と方位角に対して行う。まず、俯角に関しては矢状面の透視投影により正規化を行う。次に、方位角に関しては因子分解法に基づく特徴変換手法を適用し、ギャラリーとプローブのシーケンス間で互いに欠けている方向の特徴を生成する。認証には、元々の特徴と生成した特徴を併せた多方向の特徴を用いる。22人の被験者に対して個人認証実験を行い、本手法の有効性を確認した。

・装着型複眼全方位センサを用いた時空間ライフログ

本研究では、装着型複眼全方位センサを用いた時空間ライフログを提案する。ライフログとは、日常の活動をデジタル化して記録すること、もしくはその記録であり、記憶の補完・過去の追体験・思い出の共有などに有用である。装着型全方位センサは、双曲面鏡と凹型放物面鏡、四つの凸型放物面鏡、単一のカメラで構成されている。このセンサを装着することにより、全周囲の画像と距離情報を取得することができる。センサにより取得した情報は、空間の理解と時間の理解のそれぞれに重点を置いた二つのビューを持つブラウザで提示する。ユーザの周囲の人物や物体は、距離情報に基づいて前景と背景に分類される。このような時空間ライフログにより、日々の生活を時間的と空間の二つの側面から効率的に振り返ることができる。

・テクスチャ付距離画像を用いた非剛体形状マッチング

形状計測を行い、観測対象をモデリングする従来の研究には静止した物体を扱う研究が殆どであった。

我々はこの形状モデリングを運動・変形する非剛体に対しても行えるように拡張した。拡張には、高速に形状計測が行えるセンサと従来剛体に対して行われてきた形状間のマッチング手法の非剛体への適用という二つの問題点があった。高速に形状計測を行う問題に対しては、構造化光投影法と呼ばれるプロジェクタとカメラを用いたレンジセンサを近赤外光を用いて実装し、解決を図った。非剛体の形状マッチングについては、ラプラシアンによる初期変形と初期変形後にガウス・ニュートン法による最適化プロセスを実施する事で良好な変形を得る事が出来た。

・歩容認証のための速度変化に応じたシルエット変換

近年、遠方の人物が認証可能な歩容認証が注目されている。歩容認証には歩行速度の変化に応じた歩容特徴量の変化という問題点がある。そこで本研究では速度変化に応じて、ある速度の歩容シルエット列を異なる速度のシルエット列に変換する手法を提案する。本手法は、まず人物モデルを用いて歩容シルエット列から静的特徴量と動的特徴量を分離する。次に、あらかじめ複数被験者における複数速度の動的特徴量を学習して、速度変換モデルを生成し、参照速度から異なる速度の動的特徴量に変換する。最後に、分離した静的特徴量および変換した動的特徴量を用いてシルエット列を復元する。また周波数領域特徴による個人認証実験により本手法の有効性を確認した。

[原著論文]

医療用内視鏡のための全方位視覚アタッチメントの開発, 阪井 拓郎, 佐川 立昌, 越後 富夫, 八木 敬子, 斯波 将次, 樋口 和秀, 荒川 哲男, 八木 康史: 電子情報通信学会論文誌 D, J91-D (7) (2008) 1778-1787.

全方位カメラを用いた複数方向の観測による歩容認証, 杉浦 一成, 榎原 靖, 八木 康史: 情報処理学会論文誌 コンピュータビジョンとイメージメディア, 49 (2) (2008) 76-85.

Detection of Contractions in Adaptive Transit Time of the Small Bowel from Wireless Capsule Endoscopy Videos, H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi: Computers in Biology and Medicine, 39 (1) (2009) 16-26.

Rapid BRDF Measurement using an Ellipsoidal Mirror and a Projector, Y.Mukaigawa, K.Sumino, Y.Yagi: IPSJ Transactions on Computer Vision and Applications, 1 (2009) 21-32.

Controlling the Display of Capsule Endoscopy Video for Diagnostic Assistance, H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi: IEICE Transactions on Information and Systems, E92-D (3) (2009) 512-528.

[解説、総説]

私の研究開発ツール 歩容データベース, 榎原 靖, 映像情報メディア学会誌, 63[1](2009) 55-58

私の研究開発ツール CG ツール POV-Ray, 向川康博, 映像情報メディア学会誌, 63[7](2008) 1029-1031

[著書]

「CVIM チュートリアルシリーズ コンピュータビジョン最先端ガイド 1 Level Set, Graph Cut, Particle Filter, Tensor, AdaBoost」(八木康史, 斎藤英雄編集), アドコム・メディア株式会社, (2008)

[特許]

[国際会議]

Accurate Calibration of Intrinsic Camera Parameters by Observing Parallel Light Pairs, *Ryusuke Sagawa, Yasushi Yagi: 2008 IEEE International Conference on Robotics and Automation, Pasadena, California, May, 2008.

Robust and Real-Time Egomotion Estimation Using a Compound Omnidirectional Sensor, *Thanh Trung Ngo, Hajime Nagahara, Ryusuke Sagawa, Yasuhiro Mukaigawa, Masahiko Yachida, Yasushi Yagi: 2009 IEEE International Conference on Robotics and Automation, Pasadena, California, May, 2008.

Human Tracking and Segmentation Supported by Silhouette-based Gait Recognition, *Junqiu Wang, Yasushi Makihara, Yasushi Yagi: 2010 IEEE International Conference on Robotics and Automation, Pasadena, California, May, 2008.

Dynamic scene shape reconstruction using a single structured light pattern (poster), *H. Kawasaki, R. Furukawa, R. Sagawa, Y. Yagi: IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, Anchorage, Alaska, USA, Jun., 2008.

3D Scanning Method for Fast Motion using Single Grid Pattern with Coarse-to-fine Technique (poster), *R. Furukawa, H. Kawasaki, R. Sagawa, Y. Yagi: British Machine Vision Conference 2008. Leeds, UK, Sep., 2008.

Free-form Mirror Designing based on Integrability of its Gradient Field (poster), *Kazuaki Kondo, Yasuhiro Mukaigawa, Yasushi Yagi: MIRU International Workshop on Computer Vision 2008, Karuizawa, Japan, Jul., 2008.

Analysis of Subsurface Scattering under Generic Illumination (poster), *Y.Mukaigawa, K.Suzuki, Y.Yagi: MIRU International Workshop on Computer Vision 2008, Karuizawa, Japan, Jul., 2008.

Free-Form Mirror Design Inspired by Photometric Stereo (poster), *Kazuaki Kondo, Yasuhiro Mukaigawa, Yasushi Yagi: the IEEE Workshop on OMNIVIS, Marseille, France, Oct. 2008.

Spatio-Temporal Lifelog Using a Wearable Compound Omnidirectional Sensor, *Haruka Azuma, Yasuhiro Mukaigawa, Yasushi Yagi: the IEEE Workshop on OMNIVIS, Marseille, France, Oct. 2008.

Omnidirectional Gait Identification by Tilt Normalization and Azimuth View Transformation, *Kazushige Sugiura, Yasushi Makihara, Yasushi Yagi: the IEEE Workshop on OMNIVIS, Marseille, France, Oct. 2008.

One-Shot Range Scanner Using Coplanarity Constraints (poster), *Ryo Furukawa, Huynh Quang Huy Viet, Hiroshi Kawasaki, Ryusuke Sagawa, Yasushi Yagi: IEEE Int'l. Conf. on Image Processing 2008, San Diego, California, USA, Oct., 2008.

Patch-based adaptive tracking using spatial and appearance information (poster), *Junqiu Wang, Yasushi Yagi: IEEE Int'l. Conf. on Image Processing 2008, San Diego, California, USA, Oct., 2008.

People Tracking and Segmentation Using Spatiotemporal Shape Constraints, Junqiu Wang, Yasushi Makihara, *Yasushi Yagi: 1st ACM International Workshop on Vision Networks for Behaviour Analysis, Vancouver, Canada, Oct., 2008.

Silhouette Extraction Based on Iterative Spatio-Temporal Local Color Transformation and Graph-Cut

Segmentation, *Yasushi Makihara, Yasushi Yagi: the 19th Int. Conf. on Pattern Recognition, Tampa, Florida USA, Dec., 2008.

Clothes-Invariant Gait Identification Using Part-Based Adaptive Weight Control, *Md. Altab Hossain, Yasushi Makihara, Junqui Wang, Yasushi Yagi: the 19th Int. Conf. on Pattern Recognition, Tampa, Florida USA, Dec., 2008.

Switching Local and Covariance Matching for Efficient Object Tracking, Junqui Wang, *Yasushi Yagi: the 19th Int. Conf. on Pattern Recognition, Tampa, Florida USA, Dec., 2008.

Scale-Invariant Density-Based Clustering Initialization Algorithm and Its Application (poster), *Chunsheng Hua, Ryusuke Sagawa, Yasushi Yagi: the 19th Int. Conf. on Pattern Recognition, Tampa, Florida USA, Dec., 2008.

Analysis of Subsurface Scattering under Generic Illumination, *Yasuhiro Mukaigawa, Kazuya Suzuki, Yasushi Yagi: the 19th Int. Conf. on Pattern Recognition, Tampa, Florida USA, Dec., 2008.

Evaluating the Control of the Adaptive Display Rate for Video Capsule Endoscopy Diagnosis, *H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi: the 2008 IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics, Bangkok, Thailand, Feb., 2009.

Towards an Interpretation of Intestinal Motility Using Capsule Endoscopy Image Sequences (poster), *H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi: the 2nd Pacific-Rim Symposium on Image and Video Technology, Tokyo, Japan, Jan., 2009.

Computer-Assisted Intestinal Contraction Detections In Small Bowel From Wireless Capsule Endoscopy Image Sequence, *H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi: the 2nd International Gastrointestinal Consensus Symposium (IGICS), Tokyo, Japan, Jan., 2009.

Image Stabilization Algorithm for Video with Large Image Fluctuation, *H.Yamada, M.Kimura, J.Ohmiya, J.Tagawa, T.N.Thanh, Y.Mukaigawa, Y.Yagi: IEEE International Conference on Consumer Electronics, Las Vegas, Nevada, USA, Jan., 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

八木 康史	International Journal of Automation and Computing International Journal of Automation and Computing (編集委員)
八木 康史	Bentham Science Publishers. Ltd (編集委員)
八木 康史	IEEE Robotics and Automation Society ICRA2008 (編集委員)
八木 康史	IEEE Computer Society CVPR2008 (プログラム委員)
八木 康史	OMNIVIS '2008 (プログラム委員)
八木 康史	IPSJ Trans. on Computer Vision and Applications (副編集委員長)
八木 康史	Workshop on Omnidirectional Robot Vision (プログラム委員)
八木 康史	IEEE Robotics and Automation Society ICRA2009 (テクニカルツアール委員長)
八木 康史	IEEE Robotics and Automation Society ICRA2009 (編集委員)
八木 康史	IEEE Computer Society CVPR2009 (プログラム委員)
向川 康博	The 19th Int'l Conference on Pattern Recognition (技術委員)
向川 康博	IEEE Computer Society CVPR2009 (プログラム委員)

向川 康博	ICCV2009 (査読委員)
佐川 立昌	IPSN Trans. on Computer Vision and Applications (編集委員)
佐川 立昌	IEEE Computer Society CVPR2009 (副編集委員長)
佐川 立昌	PSIVT 2009 WCVIMM (プログラム委員)

[国内学会]

情報処理学会	2 件
画像情報学フォーラム	4 件

[取得学位]

修士 (情報科学)		
杉浦 一成	全方位カメラと方向変換モデルを用いた多方向照合による歩容認証	
東 はるか	装着型複眼全方位センサを用いた時空間ライフログ	
赤坂 清隆	テクスチャ付距離画像を用いた非剛体形状マッチング	
辻 顯	歩容映像解析のための速度変化に応じたシルエット変換	
博士 (情報科学)		
H. VU	Video Capsule Endoscopy Analysis For Diagnostic Assistance	
万波 秀年	液晶を用いた適応的な光量調節による広ダイナミックレンジ撮影システムに関する研究	

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (S)		
八木 康史	装着型全方位ステレオ監視システムの提案	21,370
若手研究 (B)		
榎原 靖	全方位カメラを用いた複数観測方向に基づく高精度歩容認証に関する研究	1,560
特別研究員奨励費		
万波 秀年	年代間の歩容傾向の解析に基づく歩容認証に関する研究	780

[受託研究]

八木 康史	松下電器産業株式会社	露光制御撮影を用いたぶれ補正高感度撮影技術に関する研究	500
八木 康史	松下電器産業株式会社	ウェアラブル環境下における広角撮影・スタビライズ技術に関する研究	16,590
八木 康史	松下電器産業株式会社	測距/測位用途に適した超広角ステレオ単眼カメラ技術	21,966

[奨学寄附金]

八木 康史	フジノン株式会社	960
向川 康博	人工知能研究振興財団	700

[その他の競争的研究資金]

八木 康史	科学技術振興調整費	新映像技術ダイブイントゥザムービーの研究	62,000
-------	-----------	----------------------	--------

知能アーキテクチャー研究分野

教授	沼尾 正行
准教授	栗原 聡
助教	森山 甲一
特任助教	福井 健一
博士研究員	Roberto Legaspi
大学院学生	清原 良三 (平成20年9月30日卒業)、山下 長義、中村 和志、河野 稔、 松本 光弘、杉本 知仁、玉置 洋、西川 敬之、佐藤 和宏、長岡 諒、 赤崎 省悟、Simon Ortiz
学部学生	巖 康平、上田 明頌
交換留学生	Lin, Tsung Han (平成19年10月1日～平成20年7月30日)
事務補佐員	中尾 史江

a) 概要

パソコンを初めとする情報環境が普及するにつれて、インタフェースの悪さに起因するテクノストレスや、スパムメール、多量データによる情報洪水の問題に社会の関心が集まっている。本研究部門では、これらの原因がコンピュータシステムの柔軟性の欠如にあることを早くから指摘し、その対策として適応能力を持ったコンピュータの開発を提唱してきた。心理実験と高度な機械学習技術の組合せにより、こうした課題の克服を目指している。具体的な研究課題は、以下の通りである。

【研究課題】

1. 構成的適応インタフェース
2. Intelligent Tutoring System
3. 知的ユビキタスセンサーネットワーク

b) 成果

・構成的適応インタフェース

基本的な研究テーマとして、学習機能を持ったコンピュータの開発を進めており、高効率化のためのアルゴリズム、学習のための背景知識の獲得、ITS (Intelligent Tutoring System) への応用など、数々の新技術を開発し、情報環境の整備を支援してきている。これらは、適応ユーザインタフェースの技術として定着しつつある。これまでの適応ユーザインタフェースは、あらかじめ用意されている反応の中から過去のユーザの振る舞いに適応して、適切な反応を選択するものであった。これだけでも現在の複雑で扱いにくいユーザインタフェース、たとえばナビゲーションシステムなどを相当に改良できる。しかし、人間の知性や創造性を刺激するには、不十分である。そこで適切な反応を選択するだけでなく、新たなコンテンツを構成する手法の研究を行っている。その技術を背景として、極めてユニークな研究テーマとして、感性獲得機構を提案し、ユーザの個性と感情に適応して自動作曲を行うシステムを開発した。

・Intelligent Tutoring System

指導プランに学習過程の指針を持たせることは様々な教育方法にとって有効であり、ITSにおいて重要な課題である。この課題に対して様々な取り組みがなされたが、ITSにとって極めて必要となってくるのは、動的に立てられたプランを自己改善することである。学習者のカテゴリーから得られた知識を利用することが、ITS側からのプランの改善に極めて有用であると仮定している。つまりカテゴリー知識によって効果的なプランが得られる。我々は、学習者のカテゴリーから学習した知識を利用してプランを自己改善するプランナー(CSPM)を提案する。CSPMの学習は、教師なし機械学習と経験から学習するための知識獲得ヒューリスティクスを用いて行われる。記録された教育計画を用いてCSPMの可能性

を確かめる実験を行った。

・知的ユビキタスセンサーネットワーク

近年のユビキタス各種技術やRFIDなどのタグ技術の発展に伴い、現状においても既に情報過多の問題に直面しているインターネットを中心とする情報空間に対し、実空間からの情報までもが大量に流れ込もうとしている。そうすると、もはや「検索的手法」ではすべての情報を網羅することは困難なものとなり(現状でも既にその状況にある)、これからは「発見的手法」が望まれる。これまでも情報発見手法としてデータマイニング研究など精力的な研究がなされて来ているものの、「情報空間+実空間」という、巨大で複雑かつ動的な世界からの有用な情報抽出技術に対して、これまでの技術がそのまま適用できると断言することは出来ない。

一方、我々は相手と以心伝心や阿吽の呼吸の関係が出来ている時、一体感を感じるなど心地よく感じる。これはお互いがお互いの意図や習慣的な行動を予測できるからであり、対話や五感を通して長い時間をかけた学習によるものである。このようなヒトとヒトでの関係を、ヒトと環境との間においても構築することが出来ると、日常生活がより効率的になり、また小さな異変などを自動的に発見できることからリスク回避のための技術としても有用なものとなる。

このように、これからのユビキタス社会では単に情報空間や実空間からデータを抽出するだけでなく、得られた有用な情報を能動的に人に対して環境側からインタラクションを起こすためのフレームワークを創出することも有用であり、具体的には、(1)環境へのヒトの行動を知覚するセンシング能力の付加、(2)センサーデータマイニングによるヒトの習慣的行動パターンの抽出、並びに抽出結果を用いたヒトの行動予測を行うアルゴリズムの創出、そして(3)予測結果に基づくヒトへのインタラクション能力の環境への付加を行う必要がある。本年度は環境への実験的なセンサーネットワークの設置、ならびにセンサーデータからのセンサー間の位置関係情報の抽出に関して研究を進めた。

[原著論文]

Modelling affective-based music compositional intelligence with the aid of ANS analyses, Toshihito Sugimoto, Roberto Legaspi, Akihiro Ota, Koichi Moriyama, Satoshi Kurihara, Masayuki Numao: Knowledge-Based Systems, 21 (3) (2008) 200-208.

Reinforcement Learning on a Futures Market Simulator, Koichi Moriyama, Mitsuhiro Matsumoto, Ken-ichi Fukui, Satoshi Kurihara, Masayuki Numao: Journal of Universal Computer Science, 14 (7) (2008) 1136-1153.

囚人のジレンマゲームにおける Q 学習による協調の維持, 森山 甲一: コンピュータソフトウェア, 25 (4) (2008) 145-153.

リンク構造に基づいた WWW からのトピック抽出, 山下 長義, 森山 甲一, 沼尾 正行, 栗原 聡: 情報処理学会論文誌:数理モデル化と応用, 2 (1) (2009) 133-144.

アドレスの動的変更による自律防御基盤の設計と実装, 黒田 大陽, 廣津 登志夫, 福田 健介, 栗原 聡, 明石 修, 菅原 俊治: 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム, 2 (1) (2009) 223-32.

分散仮想ルータのための動的中継点制御機構, 廣津 登志夫, 福田 健介, 栗原 聡, 明石 修, 菅原 俊治: 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム, 2 (1) (2009) 123-132.

[解説、総説]

センシングネットワークと人間行動マイニング、栗原 聡、人工知能学会誌. 23 [5] (2008) 611-616.

[著書]

「デジタル人工知能学事典」 沼尾 正行(編集幹事、執筆分担者)、人工知能学会編、(2008)

(Book Chapter) Indirect Coordination Mechanism of MAS, Satoshi Kurihara, Kensuke Fukuda, Shinya Sato and Toshiharu Sugawara, Multiagent Systems, Edited by Salman Ahmed and Mohd Noh Karsiti, Publisher: IN-TECH (2009) 221-232.

[特許]

「交通情報推定システム、推定方法、提供システムおよびコンピュータプログラム」 栗原 聡、玉置洋、香川浩司、矢野純史、鷺見公一、特願 2009-34292、平成 21 年 2 月 17 日出願

[国際会議]

An Empathy Learning Problem for HSI: To Be Empathic, Self-improving and Ambient, *Roberto Legaspi, Satoshi Kurihara, Ken-ichi Fukui, Koichi Moriyama, Masayuki Numao: Conference on Human System Interaction (HSI), Krakow, Poland, May 25-27, 2008.

Self-improving Empathy Learning, *Roberto Legaspi, Satoshi Kurihara, Ken-ichi Fukui, Koichi Moriyama, Masayuki Numao: 5th International Conference on Information Technology and Applications (ICITA), Cairns, Australia, June 23-26, 2008.

Web Page Classification Based on Structural Equivalence, *Nagayoshi Yamashita, Koichi Moriyama, Masayuki Numao, Satoshi Kurihara: 5th International Conference on Information Technology and Applications (ICITA), Cairns, Australia, June 23-26, 2008.

Proposition of The Context-Aware Interface for Cellular Phone Operations (poster), *Mitsuhiro Matsumoto, Ryoza Kiyohara, Hidenori Fukui, Masayuki Numao, Satoshi Kurihara: Fifth International Conference on Networked Sensing Systems(INSS 2008), Kanazawa, Japan, June 17-19, 2008.

Elucidating Relationships among Research Subjects from Grant Application Data, *Ryutaro Ichise, Kazuhiro Satoh, Masayuki Numao: 12th International Conference on Information Visualization.

Learning-Rate Adjusting Q-learning for Prisoner's Dilemma Games, *Koichi Moriyama: 2008 IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligent Agent Technology (IAT'08), Sydney, Australia, Dec. 9-12, 2008.

Pheromone Approach to the Adaptive Discovery of Sensor-Network Topology, *Hiroshi Tamaki, Ken-ichi Fukui, Masayuki Numao, and Satoshi Kurihara: 2008 IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligent Agent Technology (IAT'08), Sydney, Australia, Dec. 9-12, 2008.

Analysis on Grant Application Data (poster), *Kazuhiro Satoh, Ryutaro Ichise, Satoshi Kurihara, Masayuki Numao: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, Jan. 22, 2009.

Web Page Classification Based on Structural Equivalence (poster), *Nagayoshi Yamashita, Koichi Moriyama, Satoshi Kurihara, Masayuki Numao: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, Jan. 22, 2009.

Constructive Adaptive User Interfaces and Empathic Computing (invited), *Masayuki Numao: 9th Philippine Computing Science Congress (PCSC 2009), Dumaguete City, Philippines, Mar. 2-3, 2009.

Co-occurrence Analysis Focused on Blogger Communities, *Shin-ya Sato, Kensuke Fukuda, Toshio Hirotsu, Satoshi Kurihara, Toshiharu Sugawara: the 2008 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence, , Sydney, Australia, Dec. 9-12, 2008.

Controlling Contract Net Protocol by Local Observation for Large-Scale Multi-Agent Systems, *Toshiharu Sugawara, Toshio Hirotsu, Satoshi Kurihara, Kensuke Fukuda: 12th International Workshop on Cooperative Information Agents (CIA2008), Prague, Czech Republic, Sep. 10-12, 2008.

Adaptive Manager-side Control Policy in Contract Net Protocol for Massively Multi-Agent Systems, *Toshiharu Sugawara, Toshio Hirotsu, Satoshi Kurihara, Kensuke Fukuda: 6th International Joint Conference on Autonomous Agents and Multiagent Systems (AAMAS2008), Estoril, Portugal, May 12-16, 2008.

Controlling Contract Net Protocol by Local Observation for Large-Scale Multi-Agent Systems, *Satoshi Kurihara: The First International Workshop on Content Creation Activity Support by Networked Sensing(CCASNS08), Kanazawa, Japan, June 16, 2008.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

- | | |
|-------|---|
| 沼尾 正行 | The Twelfth International Conference on Discovery Science (DS09) (プログラム委員) |
| 沼尾 正行 | The Ninth ACIS International Conference on Software Engineering, Artificial Intelligence, Networking, and Parallel/Distributed Computing (SNPD2008) (プログラム委員) |
| 沼尾 正行 | Pacific Rim Knowledge Acquisition Workshop (PKAW'08) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The First International Workshop on Contents Creation Activity Support by Networked Sensing (CCASNS2008) (オーガナイザー) |
| 栗原 聡 | 5th International Workshop on Networked Sensing Systems (INSS2008) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | 6th International Workshop on Networked Sensing Systems (INSS2009) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The Second International Workshop on Coordination and Control in Massively Multi-Agent Systems (CCMMS 2008) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The Tenth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | 2008 Winter Workshop on Economics with Heterogeneous Interacting Agents (WEHIA) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | Autonomic and Trusted Computing (ATC-08) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | IEEE 8th International Conference on Computer and Information Technology (CIT2008) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligence Agent Technology(IAT'08) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligence Agent Technology(IAT'09) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The 1st International Symposium on u- and e- Service, Science and Technology(UNESST) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The Fifth International Conference on Autonomic and Autonomous Systems (ICAS 2009) (プログラム委員) |
| 栗原 聡 | The 12th Pacific Rim International Conference on Multi-Agents, Industrial Track (プログラム委員長) |
| 栗原 聡 | The Third International Workshop on Emergent Intelligence on Networked Agents (WEIN'09) (Workshop Chair) |

栗原 聡	The 1 st IJCAI Workshop on Social Simulation (プログラム委員)
森山 甲一	The 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008) (現地準備委員)

[国内学会]

人工知能学会	13 件
情報処理学会	8 件
日本ソフトウェア科学会	2 件
電子情報通信学会	2 件

[取得学位]

修士 (情報科学)	
佐藤 和宏	共同研究の関係をを用いた研究領域の時系列予測
杉本 知仁	脳波解析に基づく曲中の感情変化を予測する楽曲推薦システム
玉置 洋	複数の交通情報を効率的に利用する最適な交通情報提供手法の構築
長岡 諒	関連語情報を用いたブログ記事における言及地名の類推
西川 敬之	楽曲の部分構造と全体構造を考慮した自動作曲システム
博士 (情報科学)	
清原 良三	携帯電話のソフトウェアアドインに関する研究
山下 長義	構造同値に基づくWWW解析に関する研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (C)		
栗原 聡	トップダウン制御可能なマルチエージェント協調アルゴリズムの提案	1,950
若手研究 (B)		
森山 甲一	エージェントの学習における適切な効用の導出方法	910

[受託研究]

沼尾 正行	日本学術振興会	人工知能分野に関する学術振興方策及び学術動向の調査・研究	14,500
-------	---------	------------------------------	--------

[共同研究]

栗原 聡	住友電気工業株式会社	マルチエージェントアプローチによる安全安心を目指した次世代交通制御システムおよび情報セキュリティシステム構築に関する研究	1,950
------	------------	--	-------

[その他の競争的研究資金]

栗原 聡	総務省・戦略的情報通信研究開発推進制度	インターユビキタスネットワーク情報基盤の研究	14,741
------	---------------------	------------------------	--------

高次推論方式研究分野

教授	鷺尾 隆
助教	大原 剛三、猪口 明博
博士研究員	清水 昌平 (平成 20 年 4 月 1 日-平成 20 年 7 月 31 日)
大学院学生	Hadiyanto、Nguyen Viet Phuong、大西 智之、Nguyen Ha Hong、Nguyen Vinh Duy
研究生	李 紅平 (平成 20 年 9 月 1 日-)
学部学生	十河 泰弘、稲積 孝紀
事務補佐員	岡田 拓子

a) 概要

我々人間はデータを眺めると、頭の中で推論してそこから様々な知識を読み取ることができる。しかし、コンピュータネットワークを通じて入手できる膨大で複雑なデータを、人間の能力ですべて処理することには無理がある。そこで、我々の研究室では、コンピュータによる膨大なデータから知識の読み取りや発見を可能にするための新しい推論方法や技術を研究している。このような技術をデータマイニングないし知識発見という。そして、これらを科学、情報ネットワーク、品質・リスク管理、医療、セキュリティ、マーケティング、金融など、様々な分野のデータ解析に役立てる研究も行っている。今年度は、大規模次元ダイナミクスデータからの知識発見、グラフ構造データからの知識発見、大規模次元類似性データからの知識発見に関する研究について、以下の成果を得た。

b) 成果

・ 大規模次元ダイナミクスデータからの知識発見に関する研究

コンピュータネットワークとユビキタスセンシング、科学計測技術の発達により、例えば大規模な都市交通システムや発電・製造プラント、生体内における数万個の遺伝子の発現相互作用といった、多数事象の同時平行生起情報を膨大な変数の測定データ（大規模次元データ）として収集できるようになった。昨年度に引き続き、本研究分野においては、このような対象の時間的変化ダイナミクスや対象状態を、複雑、大規模なデータから推定する手法の研究に取り組み深化させた。

具体的には、粒子フィルタと呼ばれる方法を、大規模次元時系列データから対象の状態推定やダイナミクス推定を行うことができるように拡張した。これにより、従来方法では困難であった上記のような複雑、大規模な対象のモデル化や状態を把握できるようになった。

・ グラフ構造データからの知識発見に関する研究

近年、一般的な関係データベースによって扱うことが困難なグラフ構造を有するデータを対象とするデータマイニング手法の研究が世界的注目を集めている。当研究室では世界に先駆けて、約 10 年前から、一般の知識や概念はグラフ構造で記述できることに注目し、グラフ構造データからの知識発見を種々の観点から試みている。グラフ構造内の多頻度共起部分構造パターンを完全厳密にすべて求める問題は、数学的に非多項式時間でしか解けない難解なものであることが分かっている難しい問題である。本年は昨年度に引き続き、以下に述べる 2 項目について、従来の限界を超える手法の開発に取り組んだ。

1) 大規模多頻度共起部分構造パターン導出基礎原理の探求

従来、グラフ構造データから導出できる多頻度共起部分構造パターンは、大きさが数十頂点程度までが限界であった。本年は、この限界を克服するための基礎原理として、グラフ構造を特徴づけるグラフスペクトルの性質の解析を行った。グラフスペクトルがグラフの構造を反映する仕組みを明らかにし、これを基に高効率に大規模な多頻度共起部分構造パターンを導出できる見通しを得た。

2) グラフ系列パターン導出基礎原理の探求

従来のグラフマイニングは、多数のグラフから共通する多頻度共起部分構造パターンを導出する手法の研究に留まっていた。本年度は、新たにグラフの変化系列が与えられた際に、そこに頻出する多頻度共起部分グラフ系列パターンを効率よく導出する手法の基礎原理の検討、開発を行った。それにより、本格的な多頻度共起部分グラフ系列パターンマイニング手法を確立する見通しを得た。

・大規模次元データ類似性データからの知識発見

一昨年度から、数万変数以上から構成されるデータについて、変数間の相関係数や対象間のユークリッド距離を効率的に高速推定計算する手法の開発を行って来た。本年度は、研究スコープを更に一般化し、膨大な変数や対象間の一般的な関係の確率分布をそれらの一部の既知な関係から推定する手法の研究に取り組んでいる。この手法により、種々の実験から得られる表や行列データの補完推定、工学的、社会的データからの種々の欠測値の推定など、実用的に有用なデータ推定が可能になりつつある。

・複雑時系列データのための OLAP データベースシステムに関する研究

既存の OLAP データベースシステムでは、系列データや時区間データを扱うことが困難であった。一昨年度から、系列データや時区間データからなる診療履歴データを対象とし、対話的に多次元分析するための OLAP データベースシステムの研究・開発を行ってきた。時区間データを垂直配置型のテーブルスキーマに格納し、時区間用の OLAP 演算を定義することで、診療データを多次元分析する手法を実現した。さらに、分析対象データを N 台の計算機に分散し、N 台の計算機で並列に OLAP 演算を行うことで線形速度向上を実現し、大規模データに対する実用性を見通しを得た。

[原著論文]

A Range Query Approach for High Dimensional Euclidean Space Based on EDM Estimation, Kentarou Kido, Hiroshi Kuwajima, Takashi Washio: The Eighth SIAM International Conference on Data Mining (SDM08), (2008) 387-398.

Modeling Dynamic Substate Chains among Massive States, Nguyen Viet Phuong, Takashi Washio: Intelligent Data Analysis, 2 (3) (2008) 271-291.

A Bank Run Model in Financial Crises, Katsutoshi Yada, Takashi Washio, Yasuharu Ukai, Hisao Nagaoka: KES 2008(The 12th International Conference on Knowledge-Based and Intelligent Information & Engineering Systems), LNAI 5178 (2008) 703-710.

A Fast Method to Mine Frequent Subsequences from Graph Sequence Data, Akihiro Inokuchi, Takashi Washio: 2008 Eighth IEEE International Conference on Data Mining, (2008) 303-312.

Causal discovery of linear acyclic models with arbitrary distributions, Patrik O. Hoyer, Aapo Hyvarinen, Richard Scheines, Peter Spirtes, Joseph Ramsey, Gustavo Lacerda, Shohei Shimizu: The 24th Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence, (2008) 282-289.

Causal modelling combining instantaneous and lagged effects: an identifiable model based on non-Gaussianity, Aapo Hyvarinen, Shohei Shimizu, Patrik O. Hoyer: The 25th International Conference on Machine Learning (ICML2008), (2008) 424-431.

[解説、総説]

一流国際会議発表のための研究戦略とは?、鷲尾隆、人工知能学会誌、23[3] (2008) 362-366.

Featured section on data mining and statistical science, Tomoyuki Higuchi and Takashi Washio (Eds.), *Anal. of the Institute of Statistical Mathematics*, 60[4] (2008)

「特集 データマイニングと統計数理」について、樋口 知之、鷺尾 隆、*統計数理*、56[2] (2008) 167-168.

独立成分分析による線形逐次モデルの探索、清水昌平、*日本統計学会誌*、37[2] (2008) 223-237.

[著書]

「21世紀の統計科学 —自然・生物・健康の統計科学— 第10章 グラフマイニングとその統計的モデリングへの応用」鷺尾 隆、他編集、東京大学出版会、(2008) 291-314.

Applications of Data Mining in E-Business and Finance, Carlos Soares, Younghong Peng, Jun Meng, Takashi Washio and Zhi-Hua Zhou (Eds.), *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, IOS Press, No.177, (2008).

Advances in Knowledge Discovery and Data Mining, Takashi Washio, Einoshin Suzuki, Kai Ming Ting and Akihiro Inokuchi (Eds.), *Proc. of 12th Pacific-Asia Conference of Knowledge Discovery and Data Mining, PAKDD 2008, Lecture Notes in Computer Science (LNCS) Vol.5012*, Springer (2008).

A Method to Search ARX Model Orders and Its Application to Sales Dynamics Analysis, Data Mining for Design and Marketing, Kenta Fukata, Takashi Washio, Katsuyoshi Yada and Hiroshi Motoda, CRC Press, Taylor & Francis Corp., Chapter 5 (2008) 81-94.

PAKDD 2008 International Workshops, Osaka, Japan, May 20-23, 2008, Revised Selected Papers, LNCS: Lecture Notes in Computer Science, LNAI: Lecture Notes in Artificial Intelligence, S. Chawla, T. Washio, S. Minato, S. Tsumoto, T. Onoda, S. Yamada, A. Inokuchi, Vol. 5433 (2008).

[特許]

「多次元データ分析方法、多次元データ分析装置、及びそのプログラム」猪口明博、鷺尾隆、高林健登、国際出願 PCT/JP2008/003366

「頻出変化パターン抽出装置」猪口明博、鷺尾隆、国際出願 PCT/JP2009/000092

[国際会議]

Feasibility of Graph Sequence Mining based on Admissibility Constraints, *Akihiro Inokuchi, Takashi Washio: *The 3rd International Workshop on Data Mining and Statistical Science (DMSS2008)*, Tokyo, Japan, September, 25-26, 2008.

On Feasibility of Graph Spectrum-based Frequent Sub-graph Mining, *Kouzou Ohara, Takashi Washio, Vinh Duy Nguyen: *The 3rd International Workshop on Data Mining and Statistical Science (DMSS2008)*, Tokyo, Japan, September, 25-26, 2008.

Isomorphism Identification by Using Graph Spectra and Its Application to Graph Mining (invited), Kouzou Ohara, *Takashi Washio: *The Joint Meeting of 4th World Conference of the IASC and 6th Conference of the Asian Regional Section of the IASC on Computational Statistics & Data Analysis*, Kanagawa, Japan, December 5-8, 2008.

Regression with interval output values, *Hisashi Kashima, Kazutaka Yamasaki, Akihiro Inokuchi, Hiroto Saigo:
The 19th International Conference on Pattern Recognition (ICPR 2008), Florida, USA, December 8-11, 2008.

Linear non-Gaussian structural equation models (invited), *Shohei Shimizu, Patrik O. Hoyer, Aapo Hyvarinen:
IMPS 2008, the 73rd Annual Meeting of the Psychometric Society, University of New Hampshire, U.S.A., June
29-July 2.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

- 鷺尾 隆 The 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008) (プログラム委員長)
- 鷺尾 隆 The First Again Conference on Machine Learning (ACML-2009) (プログラム委員長)
- 鷺尾 隆 The 10th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08) (ワークショップ委員長)
- 鷺尾 隆 The 9th SIAM International Conference on Data Mining (SDM09): Program Committee Member and Area Chair (領域プログラム委員長)
- 鷺尾 隆 Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (運営委員)
- 鷺尾 隆 The Eleventh International Conference on Discovery Science (DS-2008) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 Algorithms for Large-Scale Information Processing in Knowledge Discovery (ALSIP 2008) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 ACM 17th Conference on Information and Knowledge Management (CIKM2008) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 10th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 2nd International Conference on Mining and Learning with Graphs (MLG-08) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 International Conference on Large-scale Knowledge Resources (ILKR2008) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 8th SIAM International Conference on Data Mining (SDM) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 2008 edition of the IEEE International Conference on Data Mining series (ICDM 2008) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The Fourteenth ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (SIG-KDD08) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 2008 IEEE/WIC/ACM International Conference on Web Intelligence (WI'08) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The fifteenth ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (SIG-KDD09) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 7th International Workshop on Mining and Learning with Graphs (MLG-2009) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The 18th ACM Conference on Information and Knowledge Management (CIKM 2009) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 2009 IEEE International Conference on Data Mining (ICDM09) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The Twelfth International Conference on Discovery Science (DS09) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 The First International Workshop on LEarning and Mining for Robotics (LEMIR 2009) (プログラム委員)
- 鷺尾 隆 Knowledge and Information Systems: Special Issue on Selected Papers of The 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008) (招待編集委員長)

鷺尾 隆	New Generation Computing: Special Issue on Selected Papers of The 3 rd International Workshop on Data Mining and Statistical Science (DMSS2008) (招待編集委員長)
大原 剛三	Local Arrangement Committee Co-Chair of the 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008) (現地実行委員会副委員長)
大原 剛三	Program Committee of the 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008) (プログラム委員)
大原 剛三	Program Committee of the 2008 International Symposium on Ubiquitous Multimedia Computing (UMC2008) (プログラム委員)
大原 剛三	Program Committee of the 2008 Pacific Rim Knowledge Acquisition Workshop (PKAW'08) (プログラム委員)
大原 剛三	Program Committee of the 22nd Australasian Joint Conference on Artificial Intelligence (AI'08) (プログラム委員)
大原 剛三	Program Committee of the 22nd Australasian Joint Conference on Artificial Intelligence (AI'09) (プログラム委員)
猪口 明博	The 12 th Program Committee of Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD 2008) (出版委員長)
猪口 明博	The 12 th Program Committee of Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD 2008) (プログラム委員)
猪口 明博	IADIS European Conference on Data Mining (ECDM 2008) (プログラム委員)
猪口 明博	Editorial Review Board of International Journal of Applied Evolutionary Computation (IJAEC) (論文誌編集委員)
猪口 明博	International Workshop on Data-Mining and Statistical Science (DMSS2008) (プログラム委員)
猪口 明博	The 13 th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2009) (プログラム委員)
猪口 明博	The 9 th SIAM International Conference on Data Mining (SDM2009) (プログラム委員)
猪口 明博	International Workshop on Data-Mining and Statistical Science (DMSS2009) (プログラム委員長)
猪口 明博	The 1 st Asian Conference on Machine Learning (ACML2009) (プログラム委員)
猪口 明博	IADIS European Conference on Data Mining (ECDM 2009) (プログラム委員)

[国内学会]

人工知能学会	8 件
日本医療情報学会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
大西 智之	データからのポートフォリオ最適投資配分比率発見手法に関する研究
学士 (工学)	
十河 泰弘	独立成分分析を用いた外生的発現遺伝子同定に関する研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位 : 千円
基盤研究 (A)	
鷺尾 隆	大規模変数次元データの因果構造マイニング手法開発と遺伝子 12,350

	機能関係知識ベースの作成		
特定領域研究 鷺尾 隆	大規模次元観測時系列からのダイナミクス知識体系化と理解支援手法の開発		3,000
若手研究 (B) 大原 剛三	領域知識を制約として用いるグラフマイニング手法の実現		2,080
猪口 明博	時間変化するネットワーク構造データの局所特徴的パターンマイニング手法の開発		2,210
特別研究奨励費 清水 昌平	独立成分分析と構造方程式モデリングの統合：新しい多変量解析のフレームワーク		1,100

[受託研究]

鷺尾 隆	株式会社富士通総研	トラブル分析のためのサービス共通技術の改良 (リスクモデリング & シミュレーション) のトラブル情報の高度な分析・活用を実現するための技術開発の指導	348
猪口 明博	日本航空インターナショナル	『情報大航海プロジェクトー新総合安全運航支援システム』に関わる技術調査・研究	6,090

[奨学寄附金]

鷺尾 隆	株式会社京都テクニカ		1,000
------	------------	--	-------

[その他の競争的研究資金]

猪口 明博	科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業	大規模グラフ系列からの知識体系化と理解支援手法の開発	3,315
猪口 明博	科学技術振興機構 地域イノベーション創出総合支援事業	複雑時系列データの医療用多次元データベースシステムの開発と検証	2,000

生体応答科学研究部門

概要

生体応答科学研究部門は生体触媒科学、高次細胞機能、生体情報制御学の3つの研究分野によって構成されており、物質変換反応、情報受容と制御、エネルギー変換、膜輸送、遺伝子発現制御など生物にとって最も基本的な反応に注目し、いずれの分野の研究も生体膜やタンパク質に重点をおいている。研究対象は各種細菌、酵母、線虫、植物、哺乳動物と多岐にわたっており、生物の普遍的な理解と共に生物の多様性にも目を向けている。各分野は生化学、分子生物学、細胞生物学、生物物理の手法を駆使してそれぞれの分担の研究を進めている。同時に、生物を対象とする当研究所の部門としての特色ある幅広い共同研究が行なわれようとしている。理学研究科（生物科学専攻）、工学研究科（応用生物工学専攻）、薬学研究科（分子薬科学専攻）、及び生命機能研究科から大学院学生を受け入れており、広い視野を持つ研究者の教育を目指している。

成果

- ・ 銅含有アミン酸化酵素反応におけるセミキノンラジカル中間体形成機構の解析
- ・ 膜透過ペプチド提示型バイオナノカプセルの作製と機能評価
- ・ *Streptococcus mutans*のバイオフィーム形成に関与する情報伝達タンパク質のX線結晶構造解析
- ・ キノヘムプロテイン・アミン脱水素酵素の補酵素生合成における α -サブユニット結合ヘムの役割
- ・ エマルジョン型のフェムトリットルチャンバーを用いた超高感度バイオセンシング
- ・ 細胞内ATPイメージング用の蛍光タンパク質を用いたアポトーシス中のATPレベル計測
- ・ F1モーターの反応スキームの完成
- ・ 異物排出蛋白質の細菌情報伝達による発現制御の解明
- ・ オーフエン輸送体の機能解析
- ・ S1P細胞外放出機構とその輸送体の同定
- ・ 個体での細胞遊走を制御するS1P輸送体*spns2*の同定と機能解析
- ・ 赤血球のS1P放出輸送体の機能の生化学的解析

生体触媒科学研究分野

教授	谷澤 克行
准教授	黒田 俊一
助教	立松 健司 (平成 20 年 9 月 1 日—研究留学のため休職)
特任助教	松崎 高志
特任研究員	良元 伸男、松下 葉子、四角 紀子、飯嶋 益巳、
大学院学生	粕谷 武史、山田 光男、多田 敦朗、野々村 英典、米倉 弘倫、元山 暁仁、
	松井 ゆかり、中川 乃梨子、池田 優子、濱口 章央、高石 泰行、谷村 梓
事務補佐員	村井 摩由子、大久保 亜依

a) 概要

当研究分野では、広く生化学、分子生物学、細胞生物学などの立場から、生命現象を担う種々の生体機能分子の構造と機能の相関を分子レベルで解明することを目指して研究を行っている。物質代謝やエネルギー代謝を担う生体触媒“酵素”を対象として、活性部位構造や立体構造、触媒反応機構を明らかにするべく研究を展開している。特に、銅アミン酸化酵素のトパキノン補酵素をはじめとして、最近相次いで発見されているアミノ酸残基由来の新規な共有結合型補酵素（いわゆるペプチド・ビルトイン型補酵素）の構造と触媒機能、タンパク質翻訳後修飾による生合成機構の解明に力を注いでいる。一方では、細胞内情報伝達機構において中心的な役割を果たすプロテインキナーゼ群と相互作用する新規なタンパク質の同定とその構造と機能の解析を通じて、シグナル伝達分子の細胞内ネットワークの解明を目指している。また、生体認識分子を提示したバイオナノカプセルを用いる細胞及び組織特異的な遺伝子導入法やドラッグデリバリー法の開発を行っている。

b) 成果

・銅含有アミン酸化酵素反応におけるセミキノンラジカル中間体形成機構の解析

各種の一級アミン類の酸化的脱アミノ反応を触媒する銅含有アミン酸化酵素は、活性中心に二価銅イオンとビルトイン型補酵素のトパキノン (TPQ) を含有している。本酵素の触媒反応は、TPQの酸化状態に基づいて前半の還元的半反応と後半の酸化的半反応に分けられる。後半の半反応は、前半の半反応において生成した還元型TPQ (TPQ_{red}) から2電子が酸素分子に転移することで開始する。この過程で、TPQ_{red}と酸素分子間で直接的に電子が移動する経路とセミキノンラジカル中間体 (TPQ_{sq}) /Cu¹⁺が生成する経路が提唱されているが、どちらが主要な反応経路であるのか最終的な結論は得られていない。本研究では、本酵素の触媒反応を阻害し、還元的半反応におけるTPQ_{sq}生成量に影響を与える各種の陰イオンの存在下で反応速度論的解析やX線結晶構造解析を行うことにより、TPQ_{sq}が本酵素の反応経路に占める位置を明らかにすることを目的としている。大腸菌で発現させた土壌細菌*Arthrobacter globiformis*由来の銅含有アミン酸化酵素 (AGAO) を銅イオンとTPQを含まない不活性型酵素として精製し、これに好氣的条件下で銅イオンを添加することにより、活性型酵素に変換した。溶液状態ならびに結晶中の酵素に過剰量の基質 (フェニルエチルアミン) を嫌気条件下で加えることにより、TPQ_{sq}中間体を生成させた。結晶中での還元的半反応の反応中間体形成を顕微分光法で確認した後、X線結晶構造解析を行った。まず、各種の無機塩をAGAOの還元的半反応の反応液中に添加し、TPQ_{sq}形成量への影響を調べた結果、塩素や臭素などのハロゲンイオンを含む塩の存在下でTPQ_{sq}に特徴的な436、466 nmの吸収ピークが著しく減少し、これらの陰イオンはTPQ_{sq}/Cu¹⁺とTPQ_{red}/Cu²⁺の平衡をTPQ_{red}/Cu²⁺側にシフトさせることが明らかになった。また、定常状態の反応速度論的解析において、これらの陰イオンは不競合阻害を示した。次に、嫌氣的ストップフロー法による前定常状態の反応速度論的解析を行った結果、塩素イオンや臭素イオンの存在下では一度生成したTPQ_{sq}が徐々に消失していくことが判明した。さらに、TPQ_{sq}を含むAGAOの結晶にNaClやNaBrを添加したところ、TPQ_{sq}の吸収ピークが減少し、生成物シッフ塩基

中間体 (PSB) に類似した顕微分光スペクトルを示した。これらの結晶のX線結晶解析から、PSBの形成が構造学的にも確認できた。PSBは、還元的半反応の生成物のアルデヒドとTPQ_{red}との間の逆反応で形成されると考えられる。一方、臭素イオンの異常分散ピークは銅イオンのごく近傍にのみ存在しており、ハロゲンイオンは銅イオンに結合することが明らかになった。これまでの研究から、TPQは活性部位においてコンフォメーションのフレキシビリティに富み、温度やpHなどの溶液条件や触媒反応過程でさまざまなコンフォメーションをとることが分かっている。このことから、還元的半反応で生じたTPQ_{red}がコンフォメーション変化してCu²⁺に配位することでCu²⁺への1電子移動が起こり、TPQ_{sq}/Cu¹⁺中間体が形成されると考えられる。本研究の結果、ハロゲンイオンはCu²⁺に配位してTPQ_{red}の配位を妨げるため、TPQ_{sq}/Cu¹⁺とTPQ_{red}/Cu²⁺の平衡をTPQ_{red}/Cu²⁺側にシフトさせ、結果的にTPQ_{sq}形成量を低下させると推定される。また、ハロゲンイオンは定常状態反応では不競合阻害を示したが、前定常状態の還元的半反応におけるTPQ_{sq}形成までの反応素過程の速度定数は、非存在下の速度定数と大きく違わなかったことから、これらのハロゲンイオンがCu²⁺に配位結合する速度は触媒反応の各素過程の速度よりも遅いと考えられる。以上を総合すると、AGAOの触媒反応は、主としてTPQ_{sq}/Cu¹⁺を経由する機構で進行する可能性が強く示唆される。

・膜透過ペプチド提示型バイオナノカプセルの作製と機能評価

近年、患者体内の疾患部位特異的に治療用薬剤を必要濃度でかつ必要時期にのみ送達する Drug Delivery System (DDS) が、ナノテクノロジーの発展とともに実用化されつつある。当研究室では、これまでにB型肝炎ウイルスの表面抗原Lタンパク質を出芽酵母に発現させて得た中空ナノ粒子 (バイオナノカプセル、BNC) に治療用薬剤や遺伝子を内包させることにより、ヒト肝臓特異的に送達できることを報告してきた。さらに、Lタンパク質中のヒト肝細胞認識領域を他の生体認識分子に置換することで、任意の細胞や組織へ再標的化可能であることも明らかにしており、BNCをプラットフォームとする新しい汎用的ピンポイントDDS法への発展を目指している。一方、BNCはB型肝炎ワクチンとして既に臨床応用されておりヒトに対して安全であるが、抗原性を持つため、可能な限り使用量を抑えつつ細胞内への物質導入効率を高める必要があった。この様な状況に関連して、近年、アルギニン残基を含む塩基性ペプチドが高い細胞膜透過能を示し、連結した様々な高分子を細胞内へ高効率で導入できることが明らかにされてきた。そこで本研究では、BNCの細胞内侵入活性及び物質導入効率に対する上記膜透過ペプチドの効果を検討した。まず、蛍光標識したBNC表面に膜透過性TATペプチドを付加し、各種培養細胞へ添加後、共焦点レーザー顕微鏡を用いて観察したところ、TATペプチド提示型BNCは、様々な細胞種に対し極めて高い集積能を示した。また、免疫染色法によって細胞内部へ侵入したBNCを特異的に検出・定量化したところ、TATペプチドの提示によりBNCの細胞内侵入活性が40倍以上に増加することが明らかとなった。さらに、ルシフェラーゼの発現プラスミドをレポーターとして、TATペプチド提示型BNCによる遺伝子導入効率を検討したところ、TATペプチド提示型BNCはコントロールに比べ約3倍の遺伝子導入効率を示した。以上の結果から、TATペプチド提示型BNCは優れた物質送達能をもつ有用なGene Delivery System (GDS) ベクターとして利用できると考えられた。次に、TATペプチド提示型BNCの細胞内侵入経路及び細胞内動態の解析を行った。各種阻害剤を用いた解析から、TATペプチド提示型BNCは、クラスリン依存的かつカベオラ非依存的なエンドサイトーシス経路及びマクロピノサイトーシス経路の二つの異なる経路で細胞内へ侵入していることが示唆された。また、細胞内へ侵入したTATペプチド提示型BNCは、初期エンドソームを経て後期エンドソーム・リソソームに蓄積することが明らかになった。今後、これらの膜コンパートメントから細胞質へのBNCの脱出能をさらに高めることが、TATペプチド提示型BNCによる高効率物質送達法の開発に必須であると考えられた。

・ *Streptococcus mutans* のバイオフィーム形成に関与する情報伝達タンパク質のX線結晶構造解析

二成分情報伝達系 (TCS) は、センサーヒスチジンキナーゼ (HK) とレスポンスレギュレーター (RR) で構成される細菌の主要な情報伝達系である。内膜上に存在するHKが、外界からの環境因子により活性化し、リン酸基転移によって細胞内のRRを活性化させる。活性化したRRが転写因子として働き、環境変化に対応した遺伝子制御を可能にしている。各種のTCSが細菌の病原性発現に関与することが明ら

かにされているが、歯のう蝕（虫歯）の原因菌の一種、*Streptococcus mutans*では、HK11とRR11から成るTCSが、バイオフィーム形成密度に関わる遺伝子の発現を制御している。従って、これら2つのTCSタンパク質の機能を詳細に解明することは、バイオフィームの形成を阻害し、虫歯を予防する効果をもつ新規薬剤の開発につながる。本研究では、機能解析と薬剤開発の基礎となる両タンパク質の主要ドメインのX線結晶構造を決定した。まず、*S. mutans* UA159株ゲノムDNAから、RR11のC末端側DNA結合ドメイン（RR11-C、125-215残基）とHK11のC末端側キナーゼドメイン（HK11-5、153-334残基）に対応する遺伝子領域をPCRにより増幅し、pET-22bベクターに挿入した。両タンパク質は、大腸菌BL21（DE3）を用いHis-tagタンパク質として過剰発現させ、Niキレートカラムと陰イオン交換カラムを用いて精製した。結晶化スクリーニングにより得られた結晶を用い、SPRing-8 BL44XUにおいてX線回折データを取得した。その結果、RR11-Cについては分解能2.8 Åまでの回折データを得た（空間群 $P2_12_12_1$ 、格子定数 $a = 67.8$ 、 $b = 68.6$ 、 $c = 125.9$ Å）。*Mycobacterium tuberculosis*のRRであるDosR-DNA複合体（PDB: 1zlk）をサーチモデルとし、位相は分子置換法によって決定した。構造解析の結果、非対称単位中には、ほぼ等価な4つのRR11-C分子が含まれており、各RR11-C分子は4本の α -helix ($\alpha 1$ - $\alpha 4$)で構成されていた（ $R = 20.5\%$ 、 $R_{\text{free}} = 24.8\%$ ）。DosR-DNA複合体との構造比較により、RR11-Cは $\alpha 4$ ヘリックスを介してダイマーを形成し、 $\alpha 3$ ヘリックスがDNAの主溝に入り込む結合様式をもつと推定された。一方、HK11-5については分解能2.3 ÅまでのX線回折データを取得した（空間群C2、格子定数 $a = 173.6$ 、 $b = 36.5$ 、 $c = 84.3$ Å、 $\beta = 114.39^\circ$ ）。相同性の高い分子モデルがなかったため、位相決定はSe-Met標識タンパク質による多波長異常分散法を用いた。構造解析の結果、非対称単位中にはほぼ等価な2つのHK11-5が含まれ、それらはダイマーを形成していることがわかった（ $R = 22.0\%$ 、 $R_{\text{free}} = 25.0\%$ ）。興味深いことに、これら2分子はN末端 α -helixで強く相互作用しているだけでなく、C末端の $\beta 4$ - $\alpha 4$ - $\beta 5$ 構造がサブユニット間でドメインスワッピングして相互作用していることが判明した。このような構造は、これまで報告されたHKの構造には見られず、HKキナーゼドメインとしては初めてのものである。今後、さまざまな結晶条件下でHK11の構造解析を行う必要があるが、HKキナーゼドメインの構造変化によるHK11のセンサー活性制御の可能性が示された。

・キノヘムプロテイン・アミン脱水素酵素の補酵素生合成における α -サブユニット結合ヘムの役割

グラム陰性細菌*Paracoccus denitrificans*のキノヘムプロテイン・アミン脱水素酵素（QHNDH）は、 $\alpha\beta\gamma$ ヘテロ3量体構造をもつペリプラズム局在性酵素である。約60 kDaの α -サブユニットには2分子の c 型ヘムが、約9 kDaの γ -サブユニットには新規なペプチド・ビルトイン型キノン補酵素、システイントリプトフィルキノン（CTQ）が含まれている。 α -サブユニットに含まれる2分子のヘムは、触媒反応において基質アミンによって2電子還元されたCTQから1電子ずつ外部の電子受容体タンパク質に受け渡す役割を担っている。さらに、 γ -サブユニット内の残り3個のCys残基のすべてはAsp残基またはGlu残基のメチレン炭素にチオエーテル結合している。本研究では、この極めてユニークな構造をもつ本酵素タンパク質の翻訳後修飾による生合成機構を明らかにすることを目的としており、これまでに本酵素遺伝子を含むオペロンの第2番目と第5番目にコードされるタンパク質（ORF2、ORF5タンパク質）の役割について検討し、両タンパク質は、ともにQHNDHの生合成に必須の役割を担っていることを明らかにした。細胞質に存在するORF2タンパク質とORF5タンパク質は、 γ -サブユニットの構造形成の初期過程（それぞれ、分子内チオエーテル架橋形成とN-末端延長配列の除去）に関わっていると考えられる。一方、 γ -サブユニット中に含まれるビルトイン型補酵素のCTQの形成は、トリプトファン残基のキノン型への酸化反応を伴うことから、細胞質よりも酸化的な細胞内環境であるペリプラズム画分内で起こると推定される。CTQと類似した補酵素のトリプトファントリプトフィルキノン（TTQ）をもつメチルアミン脱水素酵素では、別の遺伝子にコードされた2ヘムタンパク質（MauG）がペリプラズム画分内でのTTQ生成に必須の役割（インドール環への2番目の酸素原子導入と別のトリプトファン残基との架橋形成）を担うことが明らかにされている。そこで今回は、QHNDHのCTQ補酵素生成における α -サブユニットに結合した2つのヘム分子の役割を明らかにすることを目的として、 α -サブユニット中のヘム結合や鉄配位等に関わるアミノ酸残基へ変異を導入し、CTQ生成に及ぼす影響を検討した。ヘムとのチオエーテル結合に関わるアミノ酸残基（C100S、C103S、C11A、C14A）、及びヘム鉄の配位に関わるアミノ酸残基（H104A、H104M、H126A、M43A、H15A）にそれぞれ部位特異的変異を導入した。 α -サブユニ

ットのN末端に (His)₆-tagを付加した各変異型酵素は、*P. denitrificans*野生株を宿主として発現させ、金属キレートカラムを用いて精製した。全ての変異型酵素は、野生型酵素と同様に各サブユニットが会合したヘテロ3量体として精製された。C103SはヘムとCTQを含有し、野生型と同等な酵素活性を示したが、M43Aでは野生型酵素と同程度のCTQを含有するものの、ヘム含量は低く、酵素活性も非常に低かった。その他の変異型酵素では、ヘムもCTQも含まれておらず、酵素活性も全く検出されなかった。以上の結果より、 α -サブユニットに含まれるヘムの少なくとも一方（恐らくヘム1）は、触媒反応だけでなく、CTQの生成にも必須であると考えられた。また、QHNDHにおいてCTQは自己触媒的に生成する可能性が示唆された。

[原著論文]

Efficient bacterial production of functional antibody fragments using a phagemid vector, H. Kuba, A. Furukawa, T. Okajima and K. Furukawa: *Protein Expr. Purif.*, 58 (2) (2008) 292-300.

Identification of ubiquitin ligase activity of RBCK1 and its inhibition by splice variant RBCK2 and protein kinase C β , K. Tatematsu, N. Yoshimoto, T. Okajima, K. Tanizawa and S. Kuroda: *J. Biol. Chem.*, 283 (17) (2008) 11575-11585.

Yeast-based fluorescence reporter assay of G protein-coupled receptor signaling for flow cytometric screening: FAR1-disruption recovers loss of episomal plasmid caused by signaling in yeast, J. Ishii, T. Tanaka, S. Matsumura, K. Tatematsu, S. Kuroda, C. Ogino, H. Fukuda and A. Kondo: *J. Biochem.*, 143 (5) (2008) 667-674.

Enigma homolog 1 scaffolds protein kinase D1 to regulate the activity of the cardiac L-type voltage-gated calcium channel, A.D. Maturana, S. Wälchli, M. Iwata, S. Ryser, J. Van Lint, M. Hoshijima, W. Schlegel, Y. Ikeda, K. Tanizawa and S. Kuroda: *Cardiovascular Res.*, 78 (3) (2008) 458-465.

Crystal structures of *Lymnaea stagnalis* AChBP in complex with neonicotinoid insecticides imidacloprid and clothianidin, T. Okajima, M. Ihara, A. Yamashita, T. Oda, K. Hirata, H. Nishiwaki, T. Morimoto, M. Akamatsu, Y. Ashikawa, S. Kuroda, R. Mega, S. Kuramitsu, D.B. Sattelle and K. Matsuda: *Invert. Neurosci.*, 8 (2) (2008) 71-81.

Further insight into the mechanism of stereoselective proton abstraction by bacterial copper amine oxidase, M. Taki, T. Murakawa, T. Nakamoto, M. Uchida, H. Hayashi, K. Tanizawa, Y. Yamamoto and T. Okajima: *Biochemistry*, 47 (29) (2008) 7726-7733.

In vivo protein delivery to human liver-derived cells using hepatitis B virus envelope pre-S region, T. Kasuya, T. Yamada, A. Uyeda, T. Matsuzaki, T. Okajima, K. Tatematsu, K. Tanizawa and S. Kuroda: *J. Biosci. Bioeng.*, 106 (1) (2008) 99-102.

In vivo delivery of bio-nanocapsules displaying L4-PHA isolectin to malignant tumors overexpressing N-acetylglucosaminyltransferase V, T. Kasuya, J. Jung, H. Kadoya, T. Matsuzaki, K. Tatematsu, T. Okajima, E. Miyoshi, K. Tanizawa and S. Kuroda: *Hum. Gene Ther.*, 19 (9) (2008) 887-895.

Response regulator YycF essential for bacterial growth: X-ray crystal structure of the DNA-binding domain and its PhoB-like DNA recognition motif, T. Okajima, A. Doi, A. Okada, Y. Gotoh, K. Tanizawa and R. Utsumi: *FEBS Lett.*, 252 (23, 24) (2008) 3434-3438.

Expression of squamous cell carcinoma antigen-1 in liver enhances the uptake of HBV envelope-derived bio-nanocapsules in transgenic rats, T. Kasuya, S. Nomura, T. Matsuzaki, J. Jung, T. Yamada, K. Tatematsu, T. Okajima, K. Tanizawa and S. Kuroda: *FEBS J.*, 275 (22) (2008) 5714-572.

The peroxisomal membrane protein import receptor Pex3p is directly transported to peroxisomes by a novel Pex19p- and Pex16p-dependent pathway, T. Matsuzaki and Y. Fujiki: *J. Cell Biol.*, 183 (7) (2008) 1275-1286.

[解説、総説]

“Nanoparticles for Human Liver-specific Drug and Gene Delivery Systems: In Vitro and In Vivo Advances”, T. Kasuya, and S. Kuroda, *Expert Opinion Drug Delivery* 6 (2009) 1-14.

[著書]

“Copper Amine Oxidases: Structure, Catalytic Mechanism and Role in Physiopathology” (G. Floris and B. Mondovi, Eds.), Chapter 3: Cofactors of Amine Oxidases: Copper Ion and Its Substitution and the 2, 4, 5-Trihydroxylphenylalanine Quinone, S. Suzuki, T. Okajima, K. Tanizawa, and M. Mure, CRC Press, New York (2009) 19-37.

“Copper Amine Oxidases: Structure, Catalytic Mechanism and Role in Physiopathology” (G. Floris and B. Mondovi, Eds.), Chapter 8: Mechanism of TPQ Biogenesis in Prokaryotic Copper Amine Oxidase, T. Okajima and K. Tanizawa, CRC Press, New York (2009) 103-118.

「機能性 DDS キャリアの製剤設計 (分筆)」(岡田弘晃編集)、バイオナノカプセル、黒田俊一、CMC 出版 (東京) (2008) 360.

[国際会議]

In vivo delivery of bio-nanocapsules displaying L4-PHA isolectin to malignant tumors overexpressing N-acetylglucosaminyl-transferase V (poster), *T. Kasuya, J. Jung, H. Kadoya, T. Matsuzaki, K. Tatematsu, T. Okajima, E. Miyoshi, K. Tanizawa and S. Kuroda: 35th Annual Meeting & Exposition of the Controlled Release Society, New York, USA, July 12-16, 2008.

Direct observation of cell entry of hepatitis B virus envelope L-derived bio-nanocapsules (poster), *M. Yamada, T. Kasuya, T. Matsuzaki, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Enhancement of cellular uptake of HBV envelope L-derived bio-nanocapsules by liver-specific expression of SCCA1 in transgenic rat model (poster), *T. Kasuya, T. Matsuzaki, M. Yamada, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Analysis of the fusogenic activity of the HBV L protein utilizing bio-nanocapsule (poster), *T. Matsuzaki, Y. Sasaki, T. Kasuya, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Involvement of an iron sulfur protein and a subtilisin-like protease in the biogenesis of quinohemoprotein amine dehydrogenase (invited), T. Okajima, K. Ono and *K. Tanizawa: Japan-Holland Joint Seminar on New Aspects in Enzyme Science and Biotechnology, Fukuoka, Japan, September 28-30, 2008.

X-ray crystal structure of *Streptococcus mutans* response regulator involved in biofilm formation (poster), *A. Tada, S. Nomura, Y. Eguchi, R. Utsumi, S. Kuroda, K. Tanizawa and T. Okajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Suita, Osaka, Japan, Sept. 29-Oct. 1, 2008.

In vivo pinpoint gene/drug delivery system using bio-nanocapsules (invited), *S. Kuroda: 1st International Symposium on Innovative-Cancer Therapy, Seoul, Korea, October 24-25, 2008.

Conformational flexibility of the TPQ cofactor in bacterial copper amine oxidase (poster), *T. Okajima, S. Nakanishi, T. Murakawa, H. Hayashi and K. Tanizawa: The Second International Interdisciplinary Conference on Vitamins, Coenzymes, and Biofactors, Athens, Georgia, USA, October 26-31, 2008.

Involvement of an iron sulfur protein and a subtilisin-like protease in the posttranslational modification of quinohemoprotein amine dehydrogenase (invited), *K. Tanizawa, K. Ono and T. Okajima: The Second International Interdisciplinary Conference on Vitamins, Coenzymes, and Biofactors, Athens, Georgia, USA, October 26-31, 2008.

Conformational Flexibility of the TPQ Cofactor in Bacterial Copper Amine Oxidase (poster), *T. Okajima, S. Nakanishi, and K. Tanizawa: 12th SANKEN International Symposium /Joint Meeting of The 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium/The 2nd SANKEN MSTeC Symposium/ The 1st SANKEN Alliance Symposium, Suita, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

谷澤 克行	Federation of Asian and Oceanian Biochemists and Molecular Biologists (日本代表)
谷澤 克行	The Journal of Biochemistry (編集委員)
谷澤 克行	Journal of Nutritional Science and Vitaminology (編集委員)
黒田 俊一	The Open Veterinary Science Journal (Bentham Science Publishers Ltd.) (編集委員)
黒田 俊一	The Open Nanomedicine Journal (Bentham Science Publishers Ltd.) (編集委員)

[国内学会]

日本生化学会・日本分子生物学会合同大会 (BMB2008)	12 件
日本 DDS 学会	5 件

[取得学位]

修士 (理学)	
中川 乃梨子	膜透過ペプチド提示型バイオナノカプセルの作製と機能評価
池田 優子	出芽酵母におけるサイトカインシグナル伝達経路の再構成
米倉 弘倫	キノヘムプロテイン・アミン脱水素酵素の補酵素合成における α -サブユニットに結合したヘムの役割
多田 敦朗	<i>Streptococcus mutans</i> のバイオフィーム形成に関与する情報伝達タンパク質の X 線結晶構造解析
野々村 英典	骨形成因子 NELL1 のシグナル伝達因子の同定と血清中 NELL1 の測定系の開発
修士 (工学)	
元山 暁仁	銅アミン酸化酵素における TPQ 補酵素と前駆体のコンフォメーションのフレキシビリティとその制御
松井 ゆかり	カチオン性担体-バイオナノカプセル複合体の遺伝子送達能の最適化
博士 (工学)	

粕谷 武史 B型肝炎ウイルス外皮タンパク質由来バイオナノカプセルの生体内標的化機構の解析と応用

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円
 基盤研究 (B)
 谷澤 克行 ペプチド・ビルトイン型キノン補酵素の生合成機構と触媒機能 2,600

(分担者として配分されたもの) 単位：千円
 基盤研究 (B)
 黒田 俊一 分子標的ナノ粒子を用いた診断と治療を同時に行う超音波力学的がん治療 2,000

[厚生労働科学研究費補助金 (医療機器開発推進研究事業)]

(分担者として配分されたもの)
 黒田 俊一 ナノサイズリポソームを用いた急性心筋梗塞治療法の開発 200

[受託研究]

黒田 俊一 科学技術振興機構 医薬品の生体内ピンポイントデリバリーを可能にするバイオナノカプセルの開発 109,920
 地域研究開発資源活用促進プログラム

[奨学寄附金]

谷澤 克行 ビタミン B 研究委員会 250
 谷澤 克行 応用酵素協会 1,000
 松崎 高志 1 型糖尿病研究基金 1,000

[共同研究]

黒田 俊一 株式会社アズワン One Cell Pick-Up 装置を用いた各種生理活性物質の超高速スクリーニング法の開発 10,010
 黒田 俊一 株式会社ジェノラック BL 乳酸菌を用いた経口ワクチンの開発に関する研究 1,000

高次細胞機能研究分野

教授	野地 博行
准教授	和田 洋
助教	田端 和仁、飯野 亮太
さきがけ研究員	今村 博臣
博士研究員	奥野 大地、上野 博史、榎 佐和子、中野 雅裕
大学院学生	渡邊 力也、籠谷 嘉人、中村 真梨子、西川 芳弘、游 慧娟、谷川原 瑞恵、 Uner Nacite Esma、新 久美子、松陰 悠希、Peng Jizhou、Huynh Nhat Phuong Kim、
学部学生	新木 卓、大坂 拓也、富山 佳祐
技術補佐員	長谷川 理恵、葉山 浩平、吉海江 国仁、深澤 美希
事務補佐員	酒井 和代、伊達 里沙

a) 概要

本研究分野では、1分子イメージングと1分子操作技術を駆使して生体回転分子モーターであるATP合成酵素の回転メカニズムを徹底的に理解することを目指している。また、ATP合成酵素を含む膜タンパク質の機能を1分子計測するための新規計測システムの開発を行っている。さらに、1分子レベルまたは1細胞レベルでの計測と微細加工技術を組み合わせた新しいバイオデバイスの作製を行っている。これらの研究は、ナノバイオロジー、ナノバイオテクノロジー分野に該当する。

b) 成果

- F_1 -ATPaseの結晶構造と回転中の構造の対応
ウシミトコンドリア由来の F_1 (MF_1) の結晶構造を基にして、好熱菌由来の F_1 (TF_1) の回転子と固定子サブユニットにシステイン残基を導入し、回転中の TF_1 をジスルフィド結合により強制的に停止させることに成功した。この結果から、 MF_1 の結晶構造は回転中の TF_1 のATP加水分解待ちの状態に対応すること明らかにした
- F_0F_1 -ATP合成酵素の ϵ サブユニットの役割の解明
大腸菌由来の F_0F_1 -ATP合成酵素 (EF_0F_1) のATP合成活性を多分子計測により徹底的に調べ、回転子を構成する ϵ サブユニットがATP加水分解時のみでなくATP合成時においても、基質の結合と生成物の解離を抑制することを明らかにした
- オフセットプリンティングマイクロチャンバーアレイの開発
オフセットプリンティングの手法を応用して、水-油混合系により形成され外部からのアクセスが可能な新規なフェムトリッターチャンバーアレイを開発し、緑膿菌1細胞の並列培養に成功した。

[原著論文]

Correlation between the conformational states of F_1 -ATPase as determined from its crystal structure and single-molecule rotation, D. Okuno, R. Fujisawa, R. Iino, Y. Hirono-Hara, H. Imamura, H. Noji.: Proc. Natl. Acad. Soc. U.S.A., 105 (2008) 20722-20727.

Loop-mediated isothermal amplification of a single DNA molecule in polyacrylamide gel-based microchamber, L. Lam, S. Sakakihara, K. Ishizuka, S. Takeuchi, H.F. Arata, H. Fujita, H. Noji: Biomed Microdevices, 10 (2008) 539-546.

[解説、総説]

超微小溶液チャンバーを利用した 1 分子バイオアッセイ、野地博行、パリティ、2008 年 9 月号

[著書]

「最新分子マシン. ナノで働く“高度な機械”を目指して (分筆)」、野地博行、田端和仁、飯野亮太、化学同人、(2008)

「マイクロ・ナノ化学チップと医療・環境・バイオ分析 (分筆)」、飯野亮太、野地博行、技術教育出版、(2008)

「Single Molecule Dynamics in Life Science (分筆)」、飯野亮太、野地博行、WILEY-VCH (Germany)、(2008)

[特許]

「回転式輪帯全反射偏光照明光学系」、吉田賢右、鈴木俊治、塩育、飯野亮太、特許番号 4245914 号

「Polarized total internal reflection illumination optical system by rotary annulus light」、吉田賢右、鈴木俊治、塩育、飯野亮太、特許番号 : US 7,486,440 (米国)

[国際会議]

Femtoliter chamber for single-molecule and single-cell analysis (invited), H.Noji: 4th IEEE-NEMS09.

Single molecule biophysics of F1-ATPase: Mechanical modulation of reaction rate constants and equilibrium constants by F1-ATPase (invited), H.Noji: 6th Asian Biophysics Association Symposium.

Mechanical modulation of ATP-binding and hydrolysis by single F1-ATPase molecule (invited), H.Noji: MPSA2008.

Single-molecule Imaging of the transport-vesicle formation mediated by COPII system reconstituted on a planar bilayer system. (invited), H.Noji: The 17th CDB Meeting - Towards Synthesis of Cells.

Single molecule studies on F1-ATPase molecular motor (invited), H.Noji: 16th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy.

Single-molecule study on the rotation of FoF1-ATPase (invited), R.Iino: 5th NSF-MEXT Young Researcher Exchange Program.

Single-molecule studies on the rotation of F_oF₁-ATPase (invited), R.Iino: 4th HANDAI Nanoscience and Nanotechnology Symposium.

Correlation among mechanical steps in rotation, chemical reaction, and crystal structure of F1-ATPase unraveled by single-molecule studies (invited), R.Iino: The Fourth Workshop of the UK-Japan Bionanotechnology Collaboration.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

野地 博行 4th HANDAI Nanoscience and Nanotechnology Symposium. (委員)
 野地 博行 The 17th CDB Meeting - Towards Synthesis of Cells (Organizer)

[国内学会]

日本生物物理学会	12 件
日本蛋白質科学会	1 件
日本分子生物学会	2 件
電気学会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
谷川原 瑞恵	ATP 合成酵素のイオン輸送過程が回転運動に及ぼす影響
游 慧娟	Development of a force-clamping system to study the torque generation mechanism of F ₁ -ATPase
西川 芳弘	V ₁ -ATPaseの活性化状態と不活性化状態の 1 分子計測
籠谷 嘉人	F ₁ -ATPaseにおけるArg-fingerの役割の解明
中村 真梨子	サブユニット間クロスリンクを用いたF ₁ -ATPaseの中間体構造に関する研究

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
特定領域研究		
野地 博行	F ₀ F ₁ -ATP合成酵素の回転動作機構の解明	59,700
基盤研究A		
野地 博行	超微小溶液チャンバーを用いた生体分子 1 分子計測技術の開発	7,800
若手研究 B		
飯野 亮太	プロトン駆動力で回転する生体分子モーターATP 合成酵素の 1 分子計測	800
特別研究員奨励費		
上野博史	ATP合成酵素のF ₀ モーターの 1 分子回転観察ー平面膜による膜電位の制御ー	1,100

[受託研究]

今村 博臣	科学技術振興機構	蛍光 ATP プローブを用いた ATP 代謝の解析	17,920
-------	----------	---------------------------	--------

生体情報制御学研究分野

教授	山口 明人
准教授	西 毅 (平成 20 年 7 月 16 日採用)
助教	西野 邦彦 (平成 20 年 4 月 1 日－平成 21 年 1 月 15 日)
特任助教	西野 美都子 (平成 20 年 4 月 1 日－平成 20 年 8 月 31 日)
博士研究員	松本 佳巳、小林 直木
大学院学生	岩田 歩、大東 穂、久野 悠、二階堂 英司、坂田 博樹、中濃 知志、上田 珠美、城阪 郁江、田中 真奈美、村田 真紀
技術員	福島 愛子、前田 知保 (平成 20 年 11 月 16 日採用)
事務補佐員	松岡 澄恵

a) 概要

生物界には、異物排出トランスポーターとよばれる一群の膜輸送体が広く分布していて、細胞レベルにおけるもっとも基本的な生体防御機構となっている。本研究分野では、細菌から動物細胞まで、生体異物排出トランスポーターの構造と機能、発現制御、生理的役割の解析から、新規排出タンパク遺伝子の検索まで幅広く研究を展開している。

私たちの研究室では、細菌の代表的異物排出輸送体 AcrB の結晶構造を世界に先駆けて 2002 年に報告し、さらに 2006 年には基質結合型結晶構造を報告して、異物の排出と多剤認識の構造的基礎を明らかにした。また、細菌で初めて異物排出輸送体遺伝子のポストゲノム解析を行い、発現制御機構を明らかにしてきた。2008 年度はこれらの研究をさらに推し進め、以下の成果を得た。

b) 成果

・異物排出タンパク結晶構造解析

昨年度、細菌の異物排出タンパク AcrB の基質結合型結晶構造決定に成功し、異物排出の機能的回転輸送機構と、マルチサイト結合が多剤認識の構造的基礎であることを明らかにした。AcrB は膜融合タンパク AcrA および外膜チャンネルタンパク TolC と 3 者複合体を形成して排出輸送装置を構成している。これらの結晶構造は個々には解かれているが、3 者複合体の構造はまだ解かれていない。また、AcrA の決定された構造では、AcrB と相互作用すると推定されている部分の構造が欠けている。そこで、複合体構造決定へのステップとして、AcrA の AcrB と相互作用すると考えられる領域の構造 (単独結晶中では構造不定) を、NMR を用いて構造決定することを試みた。その結果、この部分は一定の構造を取っていないと考えられる結果が得られた。

TetA は最初に発見された異物 (薬物) 排出タンパクで、AcrAB とは異なり、MFS 型と呼ばれるファミリーに属し、外膜チャンネルとは共役していない。また、テトラサイクリン系薬剤に特異的な排出タンパクである。これについても結晶化を試み、安定に大量精製する条件を見いだしたが、まだ結晶化に成功するには至らなかった。

・AcrS による大腸菌 AcrAB 発現制御機構の解明

acrS は異物排出トランスポーターをコードしている遺伝子 *acrEF* の上流に存在し、*acrEF* を負に制御するレギュレーター AcrS をコードしていると考えられてきたが、実際には、異物排出トランスポーター制御における詳しい役割については分かっていなかった。我々は、これまでの予想に反して、AcrS は、AcrEF ではなく大腸菌における主要な異物排出トランスポーター AcrAB の発現を抑制するリプレッサーとして機能していることを発見した (J. Bacteriol. 190: 6276-9, 2008)。

・RamA によるサルモネラ AcrAB 発現制御機構

サルモネラには9個の異物排出トランスポーターが存在する。中でも、AcrABは薬剤耐性を生み出すトランスポーターとして注目され、幅広い基質を認識する。我々は、インドール、胆汁や大腸菌の培養上清がサルモネラ特異的なレギュレーターRamAを介して、AcrABの発現を誘導することを見出した。RamAの結合領域は、*acrAB*と*tolC*の上流に存在することを明らかにした。RamAはインドールによるAcrAB発現誘導に必要であるのに対して、これまでに知られているMarA, SoxS, Rob, SdiAやAcrRといったAcrABのレギュレーターは、この発現誘導には関係していなかった。インドールは*ramA*の発現を誘導し、*ramA*の過剰発現はAcrAB発現レベルを上昇させた。一方で、胆汁によるAcrAB発現誘導に、*ramA*の発現上昇は伴わないことが分かった。胆汁構成成分であるコール酸はRamAに結合することから、胆汁はRamAの構造を変化させることで、レギュレーターを活性化させるものと考えられる。これらことから、環境シグナルは、二つの異なる制御モードによりAcrAB-TolC異物排出トランスポーターの発現を誘導していることが明らかとなった。(J. Biol. Chem. 283: 24245-53, 2008)。

・ Yde0による大腸菌異物排出トランスポーター発現制御

AraC-XylSファミリーに属するYdeOレギュレーターが、大腸菌異物排出トランスポーターMdtEFの発現を上昇させることで大腸菌を薬剤耐性化させる機構を明らかにした。ゲノムDNA断片を用いたオキサシリン耐性スクリーニングから、酸耐性に関係していることが知られていたYdeO遺伝子を含むプラスミドを得た。YdeOを発現させると、大腸菌はオキサシリン、クロキサシリン、ナフシリン、エリスロマイシン、ローダミン6G、SDS等の化合物に対して耐性化した。これらYdeOによる大腸菌薬剤耐性化は*tolC*遺伝子を破壊することで見られなくなった。TolCは数多くの異物排出トランスポーターと複合体を形成していることが知られている。定量的リアルタイムPCRより、YdeOは*mdtEF*の発現を上昇させていることが分かった。MdtEF欠損株ではYdeO依存的な大腸菌多剤耐性化が消失した。YdeOはMdtEF依存的な大腸菌薬剤排出活性上昇に関係していることを発見した。我々の結果から、酸耐性に関与しているYdeOは異物排出トランスポーターを制御することにより、薬剤耐性化にも関与していることが明らかにされた(J. Antibiot. in press: doi:10.1038/ja.2009.23, 2009)。

・ S1P細胞外放出に関わる輸送体の同定

私たちはこれまでに血小板に豊富に存在し、血小板が活性化されることで細胞外へ放出される脂質メデイエーターであるスフィンゴシン1リン酸(S1P)に着目し、その細胞外放出機構を解析してきた。昨年度までに血小板以外にも赤血球においてもS1Pが合成され、細胞外へ放出されることを新たに見出し、血小板と赤血球では同じ輸送体を使って細胞外へS1Pが放出されている可能性を明らかにした。

しかしながら、輸送体分子の同定には至っていなかった。本年度は機能未知のオーファン輸送体の解析を進めることで、S1Pを細胞外へ放出する輸送体の分子を明らかにすることに成功した。哺乳類において、細胞外へ放出されたS1Pは免疫細胞の遊走やがん細胞の転移に関与することが知られており、S1Pが特異的な受容体(S1P1-5)と結合することが必要である。この受容体は、他の脊椎動物、例えば魚のモデル動物として使用されるゼブラフィッシュにおいても存在し、受容体遺伝子の1つ(S1P2)の機能欠損により心臓の形成に異常が起こることがわかっていた。この異常は心臓の2つある前駆細胞が完全な心臓になるために融合する場所へ移動できず、2つの心臓をもつ個体が出来たものである。最近、国立循環器病センターの川原室長らは、ゼブラフィッシュに変異を誘発させ、心臓の発生に関与する遺伝子の解析を進めていた。その中にS1P受容体の変異と同じ2つの心臓を持つ変異体を同定した。この変異体の変異部位を調べたところ、*spinster-like protein 2 (spns2)*遺伝子上にあることが明らかとなった。この遺伝子から推定される蛋白質の構造は10回の膜貫通領域を持ち、バクテリアのMFS型輸送体と類似の構造を持っていた。このことから、この遺伝子がS1P輸送体である可能性が考えられた。我々がすでに構築していた細胞からのS1P放出活性を測定する細胞系にこの遺伝子を導入したところ、時間依存的なS1Pの細胞外への放出が観察できた。また、ゼブラフィッシュの変異体で変異の起こっていたアミノ酸残基に変異が入った輸送体ではS1P輸送活性が見られなかった(図2)。この結果とゼブラフィッシュの個体を用いた解析から、心臓の前駆細胞が完全な心臓を形成する場所へ移動するための道しるべとして、S1P輸送体Spns2によって細胞外へと放出されたS1Pが働いていることを示すことができた。哺乳動物においても、免疫細胞のリンパ組織からリンパ管や血管への移行やがん細胞の転移、浸潤にも

S1P が関わっていることが示されており、S1P は細胞の移動を制御する共通の情報伝達分子として働いている可能性が示唆された。

[原著論文]

Secreted indole serves as a signal for expression of type III secretion system translocators in enterohaemorrhagic *Escherichia coli* O157:H7, H. Hirakawa, T. Kodama, A. Takumi-Kobayashi, T. Honda and A. Yamaguchi: *Microbiology*, 155 (pt2) (2009) 541-550.

The Sphingolipid Transporter Spns2 Functions in Migration of Zebrafish Myocardial Precursors, A. Kawahara, T. Nishi, Y. Hisano, H. Fukui, A. Yamaguchi and N. Mochizuki: *Science*, 323 (5913) (2008) 524-527.

An Atg4B mutant hampers the lipidation of LC3 paralogues and causes defects in autophagosome closure, N. Fujita, M. Hayashi-Nishino, H. Fukumoto, H. Omori, A. Yamamoto, T. Noda and Y. Tamotsu: *Mol Biol Cell.*, 19 (11) (2008) 6451-6459.

Physiological functions of drug efflux systems in Gram-negative bacteria: Their roles in bacterial drug resistance and virulence, K. Nishino and A. Yamaguchi: *Jpn. J. Chemother.*, 56 (4) (2008) 443-452.

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Pumps in *Escherichia coli* and *Salmonella*, K. Nishino and A. Yamaguchi: *Bioscience and Microflora*, 27 (3) (2008) 75-85.

AcrS/EnvR Represses the Expression of the *acrAB* Multidrug Efflux Genes in *Escherichia coli*, H. Hirakawa, A. Takumi-Kobayashi, U. Theisen, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi: *J. Bacteriol.*, 190 (18) (2008) 6276-6279.

AcrAB Multidrug Efflux Pump Regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium by RamA in Response to Environmental Signals, E. Nikaido, K. Nishino and A. Yamaguchi: *J. Biol. Chem.*, 283 (35) (2008) 24245-24253.

Role of Xenobiotic Transporters in Bacterial Drug Resistance and Virulence, K. Nishino and A. Yamaguchi: *IUBMB Life*, 60 (9) (2008) 569-574.

[解説、総説]

トランスポーターによる多剤認識の構造的基礎、山口明人、中島良介、遺伝子医学 MOOK 最新トランスポーター研究 2009、12 (2009) 61-66

シナプス小胞再生経路におけるダイナミン 1 の選択的役割、西野一林美都子、Pietro De Camilli、蛋白質核酸酵素、53 [16] (2008) 2225-2230

グラム陰性菌における薬剤排出システムの役割、西野邦彦、山口明人、日本化学療法学会雑誌、56 (2008) 443-452

大腸菌とサルモネラにおける薬剤排出ポンプ役割解明に関する研究、西野邦彦、腸内細菌学雑誌、22 (2008) 64

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Pumps in *Escherichia coli* and *Salmonella*, K. Nishino and A. Yamaguchi, *Bioscience and Microflora*, 27 (2008) 75-85

シナプス終末の内膜系を 3D で見る、西野一林美都子、山口明人、細胞工学、別冊 (2008) 107-113

多剤排出トランスポーターの構造と多剤認識・排出機構、山口明人 (分担執筆)、トランスポーター科学最前線、(2008) 305-320

[特許]

「スフィンゴシン 1-リン酸の新規トランスポーター分子」望月直樹、川原敦雄、西毅、山口明人、特願 2008-245177

[国際会議]

Physiological functions of multi-drug efflux systems in *S. enterica* (invited), *K. Nishino: Gordon Research Conference on Multi-Drug Efflux Systems (22-27 Mar. 2009, Texas, USA).

Roles of drug efflux pumps in bacterial multidrug resistance and virulence (invited), *K. Nishino: 3rd Annual Japanese-French Frontiers of Science Symposium (24-26 Jan. 2009, Kanagawa, Japan).

AcrAB multidrug efflux pump regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium in response to indole (poster), *I. Shirosaka, E. Nikaido, K. Nishino and A. Yamaguchi: 12th Sanken International Symposium/7th nanotechnology center international symposium/2nd MSTEC international symposium/1st Sanken Alliance Symposium(22 Jan. 2009, Osaka).

Sphingosine-1-phosphate (S1P) Release From Erythrocytes Mediated By ATP-dependent Transporter (poster), *N. Kobayashi, N. Kobayashi, T. Nishi and A. Yamaguchi: 12th Sanken International Symposium/7th nanotechnology center international symposium/2nd MSTEC international symposium/1st Sanken Alliance Symposium(22 Jan. 2009, Osaka).

Electron Tomography Revealed the Endoplasmic Reticulum as a Cradle for Autophagosome Formation (poster), *M. Hayashi-Nishino, N. Fujita, T. Noda, A. Yamaguchi, T. Yoshimori and A. Yamamoto: The American Society for Cell Biology 48th Annual Meeting, San Francisco, 2008.13-17 December.

AcrAB multidrug efflux pump regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium by RamA in response to environmental signals, *K. Nishino, E. Nikaido and A. Yamaguchi: The Awaji International Forum on Infection and Immunity, Awaji Island(10 Sep. 2008, Hyogo).

Regulatory network of multidrug efflux pumps reveals their physiological role in *Salmonella* virulence, *K. Nishino and A. Yamaguchi: Gordon Research Conference (6-11 Jul. 2008, MA, USA).

Molecular Design of the Carbenicillin Hyper-Resistance AcrB Multidrug Exporter in *Escherichia coli* (poster), *A. Iwata, N. Kobayashi, S. Murakami and A. Yamaguchi: 22nd Annual Symposium of The Protein Society (July 19-23, 2008, San Diego, California USA).

Structure and Mechanism of the Tripartite Multidrug Exporter, *A. Yamaguchi: The Joint 4th AOHUPO(Asian Oceania Human Proteome Organisation) and 2nd PRICPS(Pacific Rim International Conference on Protein Science) (22-26 Jun. 2008, Carins Convention Center, Australia).

Zebrafish spinster2 involved in the migration of myocardial precursors is a novel regulator in sphingosine-1-phosphate (S1P) signaling (poster), *A. Kawahara, T. Nishi, A. Yamaguchi and N. Mochizuki: 8th

International Meeting on Zebrafish development & Genetics (Jun 25-29, 2008, Madison, USA).

Regulatory Network of Multidrug Transporters Reveals their Physiological Role in *Salmonella* Virulence, *K. Nishino and A. Yamaguchi: American Society for Microbiology 108th General Meeting (1-5 Jun. 2008, Boston Convention and Exhibition Center, Boston, Massachusetts).

Regulation of the AcrAB Multidrug Efflux Pump in *Salmonella enterica* by RamA in Response to Environmental Signals, *E. Nikaido, K. Nishino and A. Yamaguchi: American Society for Microbiology 108th General Meeting (1-5 Jun. 2008, Boston Convention and Exhibition Center, Boston, Massachusetts).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

山口 明人 Journal of Bacteriology (編集委員)

[国内学会]

第 82 回日本細菌学会総会	5 件
第 31 回日本分子生物学会年会・第 81 回日本生化学会大会 合同大会	7 件
第 56 回日本化学療法学会西日本支部総会	1 件
第 46 回生物物理学会年会	1 件
第 61 回日本細菌学会関西支部総会	1 件
第 12 回 SPring-8 シンポジウム	1 件
第 30 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	7 件
第 60 回日本細胞生物学会大会	1 件
第 12 回腸内細菌学会	1 件
第 56 回日本化学療法学会総会	1 件
第 82 回日本感染症学会総会	1 件

[取得学位]

修士 (薬学)	
坂田 博樹	サルモネラ病原性における異物排出タンパク質の役割の解析
中濃 知志	抗菌ペプチド耐性におけるサルモネラ異物排出タンパク質の役割
博士 (薬学)	
岩田 歩	異物排出タンパク質 AcrAB-TolC 複合体の結晶構造を基にした機能および構造に関する研究
大東 穂	ABC 輸送体 ABCA 5 の細胞特異的な発現とその機能

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (S)		
山口 明人	異物排出トランスポーターの構造・機能・制御と生理的役割	21,580
若手研究 (S)		
西野 邦彦	オーファン輸送体による多剤耐性菌機構の解明と新規治療薬開発	12,740
特定領域研究		
西野 邦彦	細菌ゲノム生存戦略のレジストーム研究	4,700

特別研究員奨励費

西 晶子	環境応答としてのプロトンポンプの活性制御機構の解明	800
二階堂 英司	異物排出トランスポーター発現制御ネットワーク解析ならびにその生理機能解明	600
久野 悠	血小板における脂質メディエーター輸送体の同定と機能解析	600
大東 穂	情報伝達物質輸送系の同定を目指した ABCA 輸送体の機能解析	900

[受託研究]

山口 明人	医薬基盤研究所 保健医療分野における基礎研究推進事業	多剤耐性菌感染症を克服する新規治療薬の開発	93,000
西野 邦彦	科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 さきがけ	異物排出トランスポーターによる細胞機能制御の解明	15,600

[その他の競争的研究資金]

山口 明人	武田科学振興財団 生命科学研究助成	分泌輸送介在型情報伝達の解明	10,000
西野 邦彦	稲盛財団 研究助成	薬剤排出システム発現制御機構の解明	1,000
西野 邦彦	かなえ医薬振興財団 研究助成	薬剤排出ポンプの構造・機能と生理的役割の解	1,000
西野 邦彦	持田記念医学薬学振興財団 研究助成	異物排出トランスポーターによる薬剤耐性機構の解明と新規治療薬開発	2,000
西野 邦彦	病態代謝研究会 研究助成	感染時における細菌および宿主防御システム動作原理の解明	1,000
西野 邦彦	上原記念生命科学財団 特定研究助成	排出トランスポーター機能解析と新薬開発	3,000

量子ビーム科学研究部門

概要

量子ビームとは量子力学的な現象を物質や材料に誘起する全ての種類の放射線ビームの総称である。量子ビームには、レーザー、X線、放射光、 γ 線や自由電子レーザーなどの光量子ビームと、電子線、陽電子線、ミュオンビームやイオンビームなどの荷電粒子ビーム、ならびに中性子ビーム等多くの種類がある。量子ビーム科学は放射線科学から発展して来た研究領域であるが、近年著しく発展しつつある新しい高輝度・高品質の量子ビームの発生・制御・計測の研究と、この新しい量子ビームが物質中で引き起こされる基礎過程の研究、ならびにこの量子ビーム誘起現象の正確な理解に基づいた物質科学への応用に関する研究を行う。

量子ビーム科学研究部門は、量子ビーム発生科学研究分野と量子ビーム物質科学研究分野より構成される。量子ビーム発生科学研究分野では量子ビーム発生の主要な装置である加速器に関する研究とそれに基づいた新しい量子ビームの発生や制御ならびに計測の研究を行い、量子ビーム物質科学研究分野では量子ビーム誘起現象を解明する基礎研究と、その物質科学への応用、すなわち新しい機能性材料や極限材料等の物質創製と応用に関する基礎研究を行う。両者は量子ビームの発生とその物質科学への応用という観点で密接な関係を持ち研究を進める。さらに当部門は加速器・量子ビーム実験室との密接な協力のもとに国立研究所等とは視点の異なる大学の特徴を活かした先端的な研究を行う。また、近年、新しい種類の高輝度・高品質ビームの発生や物質科学へのビーム応用が行える多くの加速器が国内外で開発・建設されているが、これらの新しい加速器を開発するための共同研究や加速器からのビームを利用した研究も積極的に進めていくとともに、高機能材料開発の面でも多くの研究機関・企業と共同研究を行っている。

成果

- ・ Lバンド電子ライナックの高性能化を目指して、SHB システム用 RF 空洞のモニター用 RF 結合器を磁気結合ループ型に交換し、RF パワーの振幅・位相を高速・高精度で制御する新しい手法を開発中であり、電子銃の性能を向上するために新しいグリッドパルサーの開発を始めた。
- ・ エネルギーと時間から構成される位相空間で電子バンチの分布を直接測定できる装置を開発中である。
- ・ 遠赤外 FEL 波長を 40 から 110 μm の領域に拡大すると共に高出力領域での FEL 物理を研究した。
- ・ 高エネルギー電子ビームの輝度を格段に増大する L バンド RF 電子銃の開発研究を開始した。
- ・ 放射光光源加速器の高度化の共同研究をタイの放射光研究所と開始した。
- ・ レジスト材料として用いる高分子化合物の放射線化学反応の初期過程を系統的に明らかにした。
- ・ マイクロ波技術を用い、高分子および低分子材料中における電荷キャリアの移動度を電極レスで測定するシステムを開発し、キャリアダイナミクスを解明した。
- ・ 半導体の超微細加工の主反応である高感度レジストの光・放射線反応機構を解明し、ナノ構造体中での不均一反応を可視化することに成功した。
- ・ 新規材料である π 共役系高分子の物性解明と量子ビームによる高機能化を行った。
- ・ 放射線照射による遺伝子損傷の初期過程をパルスラジオリシス法により、直接観測するのに成功した。

量子ビーム発生科学研究分野

教授	磯山 悟朗
准教授	加藤 龍好
助教	池田 稔治、柏木 茂
大学院学生	森尾 豊、寺澤 賢和、古橋 建一郎

a) 概要

粒子加速器は基礎科学から産業まで広く利用されている。当研究分野は、高輝度電子ビームや光、陽電子ビームなど量子ビームの発生という観点から加速器をとらえて研究している。加速器は人工物であるが、極限性能を追求すると非線形性や集団運動などの興味有る物理の基本問題が現れる。新しい量子ビームは人が見る事の出来る世界を広げるので基礎研究から応用まで広い範囲の利用が期待できる。具体的には、電子線形加速器による高エネルギー・高輝度電子ビームの発生とそれに伴う電子ビームのダイナミクスの研究や、線形加速器からの電子ビームを用いて赤外からミリ波までの自由電子レーザー（FEL）の実用化へ向けての開発研究、X線レーザーを実現する有力な手法と期待されている SASE（Self-Amplified Spontaneous Emission）の赤外領域での基礎研究を行っている。

b) 成果

・Lバンド電子ライナックの性能向上

昨年度製作したサブハーモニックバンチャー（SHB）システム用のRF加速空洞3台は順調に稼動している。これらのRF空洞に当初、電気結合用アンテナ型のRFモニターを使用していたが、電子ビーム集束用ヘルムホルツコイルを励磁すると原因は不明であるがパルス波形のゼロ点の変動する。以前の空洞で使用していた磁気結合用ループ型モニターでは、このような現象は見出されなかったため、結合度が 10^{-3} ~ 10^{-2} 程度のループ型結合器に交換した。

FELで使用する多バンチモードでは、エネルギーの揃った長パルスの電子ビームが必要であり、そのためにはライナックに供給するパルスRFパワーの振幅と位相は、パルス幅8 μ sにわたり一定であることが要求される。現在のところフィードフォワード法によるRF振幅と位相の制御により、位相変動 0.3° 、振幅変動0.89%の安定性を実現している。この時に使用した位相器は応答時間が1 μ s程度と遅いので補正の精度にも限りがある。そこで、位相と振幅を同時に高速で制御することが出来るIQモジュレータの使用を検討している。理想的なIQモジュレータは各チャンネルの制御電圧に対する出力振幅を測定して較正すれば指定した位相と振幅を持つRF信号を出力するが、実際の機器ではIとQチャンネルの結合や非線形応答により振幅と位相に大きなずれを生ずる。この特性を測定して制御方法を研究している。

Lバンド電子ライナックの熱陰極電子銃でパルス幅5ナノ秒、37ナノ秒間隔のバンチ列を発生することが出来るFETパルサーを開発中である。電子銃性能試験装置を組立てて準備測定を開始した。数マイクロ秒のパルス幅であるが、要求性能を満たすピーク電流が2.4Aの電子線パルスを発生できることを確認した。

・電子ビームの高輝度化と特性評価

Lバンド電子ライナックの加速エネルギーと時間よりなる縦方向位相空間上で電子ビームの分布を直接測定することが出来る位相空間モニターの開発研究を進めている。偏向磁石で運動量分散を生じた電子ビームが疎水性シリカ・エアロジェル（屈折率 $n=1.050$ ）を通過するときのチェレンコフ光をストリークカメラで計測する。本年度は昨年度製作した装置を立上げた。FELビームラインに設置した装置から測定室に置いたストリークカメラに光を導く光学系が未だ完成していないので、汎用光学素子を用いて光輸送路を構築した。大気側に設置したミラーで大きな発散角を持つチェレンコフ光全体を集光する

ことは困難であるため、発生するチェレンコフ光の一部だけを集光ミラーで切り出す。一度の測定ではエネルギー幅 1.1%の位相空間分布が得られるだけであるので、偏向磁石の励磁電流を変えて測定した多くのデータから広いエネルギー範囲の位相空間分布を復元する。単バンチ電子ビームを、RF クレスト付近の3つの異なる位相で加速した時の位相空間分布を求めた。得られた位相空間分布は、サイン型の RF 電場とウエーク場の効果を考慮すると定性的に理解できる。これにより本装置で電子ビームの位相空間分布が測定できることを実験的に示すことが出来た。

・遠赤外自由電子レーザーの開発研究

平成 19 年度に波長 70 μm 付近で遠赤外 FEL の高出力運転に成功して以来、FEL 特性の測定と波長領域を拡大する研究を進めている。電子ビームのエネルギーとウイグラー磁場を変えて 40 から 110 μm まで波長範囲での FEL 発振を実現した。速い時間応答を持つ Ge:Ga 半導体検出器を用いて波長 105 μm でパルス幅 3~4 μs の FEL 光の時間スペクトルを光共振器の長さを変えて測定した。測定した時間スペクトルは FEL の動力学を反映してさまざまな様相を示す。パルスのパルスの立ち上がりと立ち下りから FEL 増幅率と光共振器の損失を求めると、増幅率の最大値は約 45 %で光共振器損失は 8~9.5 %である。この測定と平行して FEL 波長スペクトルの共振器長依存性を回折格子分光器で測定した。共振器長が短くピーク値が小さい場合にはピーク幅は狭く鋭いが、共振器長が長くなるにつれてピーク幅が広がりピークも低くなる。これらの振る舞いは波長がより短い近赤外や中赤外 FEL の特性と同一である。

FEL パワーがパルス内で飽和した後、平坦であるべきパルス頂上部に時間と共にサイン型に変動する光強度変動が観測される。我々が観測した振動の周期は共振器長の増加と共に徐々に増大する。最新の FEL 理論を用いるとこの光共振器長依存性が良く説明できるので、リミットサイクル型の FEL 発振であると結論した。

・LバンドRF電子銃の開発研究

高エネルギー加速器研究機構 (KEK) と共同で L バンド RF 電子銃の開発研究を開始した。KEK の超伝導 RF 試験施設 (STF) 用の L バンド RF 電子銃の開発に参加して、米国フェルミ国立研究所 (FNAL) で製作中の RF 空洞立上げ準備を進めた。具体的には、製作した RF 電子銃空洞の共振周波数と電場分布を調整する方法について、計算機コードを用いて検討した。次に、阪大産研用 RF 空洞と入力結合器の物理設計と機械設計を行った。入力結合器に関しては、FNAL で製作中の同軸導波管入力結合器を参考にしながら、より合理的な構造を持つ物へと改造した。アルミ製の試作空洞と入力結合器を KEK 機械工学センターで製作し、それらの高周波特性を測定、評価した。この入力結合器は、FNAL 製 RF 空洞の特性を調整するときに活用した。その他、エミッタンス補正用ソレノイド電磁石形状および設置方法を検討し、より適切な解を見出した。FNAL で製作中の RF 空洞は、共振周波数と電場分布を調整するために一時的に KEK に送付された。調整後直ぐに冷却配管の最終ロウ付けのために空洞を FNAL へ返送した。

・放射光光源の高度化

タイの放射光科学研究所 (Synchrotron Light Research Institute) と共同で放射光光源加速器システムの高度化の共同研究を開始した。光源の高度化には 40MeV 電子ライナックと 1GeV 電子シンクロトロンからなる入射用加速器システムの高性能化と高安定化が必要不可欠である。そのため、電子ライナックのビームモニターシステムの開発研究を開始した。又、放射光光源である 1.2 GeV ストレージリングに超伝導ウイグラーを設置してたんぱく質の構造解析を行う計画が進行中である。超伝導ウイグラー下流の 4 極磁石部真空ダクトを新たに製作して交換する必要があるため、その設計作業を行っている。

[原著論文]

Development of FEL and SASE in the far-infrared region at ISIR, Osaka University, Goro Isoyama, Ryukou Kato, Shigeru Kashiwagi, Tetsuya Igo, Yutaka Morio: Infrared Physics & Technology, 51 (2008) 371-374.

Recent Progress of a Soft X-ray Generation System Based on Inverse Compton Scattering at Waseda University,

Kazuyuki Sakaue, Tomoko Gowa, Hitoshi Hayano, Yoshio Kamiya, Shigeru Kashiwagi, Ryunosuke Kuroda, Akihiko Masuda, Ryo Moriyama, Junji Urakawa, Kiminori Ushida, Xijie Wang and Masakazu Washio: Radiation Physics and Chemistry, 77 (10-12) (2008) 1136-1141.

[解説、総説]

「阪大産研 L バンド電子ライナックの改造」、加藤龍好、柏木 茂、磯山悟朗、日本加速器学会誌 「加速器」第 5 巻第 3 号、(2008) 208-217.

「加速器研究」、柏木 茂、生産と技術 第 61 巻 第 1 号、(2009) 54-56.

[国際会議]

Study on Longitudinal Phase-space of High-brightness Electron Beams at ISIR, Osaka University (poster), *R. Kato, S. Kashiwagi, T. Igo, Y. Morio, G. Isoyama: 11th European Particle Accelerator Conference (EPAC'08), Genoa, Italy, June 23 - 27, 2008.

Compact EUV Source Based on Laser Compton Scattering between Micro-bunched Electron Beam and CO₂ Laser Pulse (poster), *S. Kashiwagi, R. Kato, G. Isoyama, R. Kuroda, J. Urakawa, K. Sakaue, A. Masuda, T. Nomoto, T. Gowa, M. Washio: 11th European Particle Accelerator Conference (EPAC'08), Genoa, Italy, June 23 - 27, 2008.

Design of LINAC Based Compact X-ray Source via Inverse Compton Scattering at Waseda University (poster), *A. Masuda, T. Gowa, C. Igarashi, T. Kashino, N. Mitsuda, K. Sakaue, M. Washio, R. Kuroda, S. Kashiwagi, H. Hayano, K. Ushida: 11th European Particle Accelerator Conference (EPAC'08), Genoa, Italy, June 23 - 27, 2008.

Development of Laser System for Compact Laser Compton Scattering X-ray Source (poster), *R. Kuroda, H. Toyokawa, M. Koike, K. Yamada, T. Gowa, A. Masuda, K. Sakaue, M. Washio, S. Kashiwagi, T. Nakajyo: 11th European Particle Accelerator Conference (EPAC'08), Genoa, Italy, June 23 - 27, 2008.

Improvement of an S-band RF-gun cavity with a Cs-Te Photo-cathode (poster), *A. Murata, Y. Kato, K. Sakaue, T. Suzuki, Y. Hama, T. Hirose, M. Washio, J. Urakawa, T. Takatomi, N. Terunuma, H. Hayano, S. Kashiwagi, Y. Kamiya, R. Kuroda, M. Kuriki: 11th European Particle Accelerator Conference (EPAC'08), Genoa, Italy, June 23 - 27, 2008.

Development of High Power Coherent Terahertz Sources Based on the L-Band Electron Linac (poster), *R. Kato, S. Kashiwagi, T. Igo, Y. Morio, G. Isoyama, K. Tsuchiya, S. Yamamoto: 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Development of Compact Coherent EUV Source Based on Laser Compton Scattering (poster), *S. Kashiwagi, R. Kato, G. Isoyama, K. Sakaue, A. Masuda, T. Nomoto, T. Gowa, M. Washio, R. Kuroda and J. Urakawa: 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Development of a Photocathode RF Gun for an L-band Electron Linac (poster), *S. Kashiwagi, R. Kato, Y. Morio, K. Furuhashi, Y. Terasawa, G. Isoyama: 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Development of High Power Coherent Terahertz Light Sources (poster), *R. Kato, S. Kashiwagi, Y. Morio, K. Furuhashi, Y. Terasawa, S. Suemine, G. Isoyama: 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国内学会]

日本加速器学会	9 件
日本放射光学会	1 件
日本物理学会	3 件

[取得学位]

修士 (理学)

森尾 豊 Lバンド電子ライナック加速用パルス RF の速い位相・振幅制御とそれによる電子ビームの高輝度化

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

基盤研究 (C)

加藤 龍好 高輝度電子ビームの縦方向位相空間分布測定手法の開発 780

若手研究 (B)

柏木 茂 電子ビームとレーザーアンジュレータ場の相互作用を用いたコヒーレント光源の開発 1,950

[その他の競争的研究資金]

磯山 悟朗 高エネルギー加速器研究 LバンドRF電子銃による電子源の 1,000
機構大学等連携支援事業 高度化

量子ビーム物質科学研究分野

教授	田川 精一
助教	小林 一雄、佐伯 昭紀
特任助教	山本 洋揮
特任教授	堀江 一之
大学院学生	山上 隆平、夏田 健一郎、 福山 雄大、田中 将史、土方 勇人、池田 定達、東野 早希
学部学生	大西 亮輔、阿部 達也
事務補佐員	小嶋 薫

a) 概要

量子ビーム物質科学研究分野では放射線化学初期過程や照射効果における線質効果の研究、機能性高分子、マイクロエレクトロニクス用高分子、生体分子に対する光・放射線反応についての研究、及びこれら高分子材料応用のための物性研究を行っている。現在の研究の中心は、1) ピコ秒・サブピコ秒パルスラジオリシスの開発と放射線化学初期過程の解明、2) π 共役高分子等の高機能性高分子の設計・合成や、量子ビームを用いた電子構造解析・物性評価、放射線誘起反応の研究 3) 半導体プロセス中で使用される高分子材料であるレジスト材料の反応解明・制御、4) マイクロ波技術を用いた有機材料の電極レス伝導度測定、5) 生体における放射線損傷過程の解明として、DNA の電子移動過程や切断過程等である。

b) 成果

1) 放射線化学初期過程の解明

放射線化学初期過程は、放射線と物質の相互作用の出発点であり、放射線化学反応全体を知る上でも重要である。昨年度、CCDカメラ・高安定フェムト秒白色光・ダブルパルス法を用いた高精度過渡吸収スペクトル測定システムを開発し、従来の性能を2桁近く向上させることに成功した。これを用い、有機凝縮相中におけるラジカル、励起状態、電子などの生成に伴う過渡吸収分光を行った。特に、放射線照射直後に生成するテトラヒドロフラン (THF) 中の溶媒和電子および溶媒和前電子の反応性を研究した。溶質としてビフェニルを用い、後者への電子移動をビフェニルアニオンラジカルの過渡吸収を測定することによってそのダイナミクスおよび収量を検討した。その結果、溶媒和前電子が高効率でビフェニルと反応することが判明し、また、ビフェニルをより高濃度で存在させると、THFラジカルカチオン由来の活性種とジェミネートイオン再結合の様子が始めて観測された。

また、芳香族系高分子は放射線に対する高いエッチング耐性を示し、多くのレジストにおいてベース樹脂として利用されており、このような芳香族系高分子の放射線誘起反応機構を理解することは、次世代ナノリソグラフィ用レジストの開発指針を得るために重要であると考えられる。本研究ではポリスチレン等の芳香族分子をモデル化合物としてとらえ、ナノ・ピコ・サブピコ秒パルスラジオリシス法、低温マトリクス法により、これらの芳香族分子の放射線誘起反応を解明した。また分子科学的にも重要であるラジカルカチオン種に着目し、このダイナミクスの解明を行った。

2) 主鎖共役高分子についての研究

飽和高分子ながら分子内に広がった共役系を有すると考えられるポリシラン・ポリゲルマンは、1次元らせん骨格構造をとると考えられ、このらせんの「巻き」を制御することにより、主鎖共役系がダイナミックに変化することを明らかにした。光伝導性や高分子反応等の物理的特性・物理化学反応過程が大きく変化し、高分子骨格のマイクロ構造と物性との強い相関を示すとともに、各種機能を有するシリコン・ゲルマニウム骨格高分子の設計指針の確立と1次元量子細線としての可能性を指摘した。また、 π 共役分子の代表的な一つであるフルオレンオリゴマーの1電子酸化・還元状態の光学特性をパルスラ

ジオリシスによって検討した。アニオンラジカルは主鎖上に電荷を非局在化し、高い平面性を示すことを実験的に、また理論計算でも明らかにした。

3) 化学増幅型レジストの反応機構

半導体の微細化が進むにつれて、レジストパターンのナノスケールのLine edge roughness (LER) やLine width roughness (LWR)がデバイスの性能に対して大きな影響を与えるため、これらの低減はEUVなどの次世代リソグラフィの実現のために最も重要な問題の一つとされている。従来の光リソグラフィでは酸発生剤を直接励起することによって酸が生成するが、電子線・EUVはレジスト樹脂のイオン化ポテンシャルより十分高エネルギーであるため、まずレジスト樹脂自身のイオン化が主として起こり、レジスト樹脂の脱プロトン化で生成するプロトンと、イオン化で飛び出した電子と酸発生剤が反応することで生成するカウンターアニオンとの再結合によって酸が生成する。

この反応機構の違いで引き起こされるプロトン・酸のナノスケールダイナミクスが、潜像のLERにどのように影響するかをモンテカルロ法により検証した。電子線の軌跡に沿ってプロトンを配置し、実験を基にした分布関数にしたがってカウンターアニオンを配置し、酸形成およびPEB中でのプロトン・酸のダイナミクスをモンテカルロ法により再現し、照射線量依存性、PEB中の酸拡散長、クエンチャー濃度の潜像LERに与える影響等を検証した。また、現像モデルを用いて現像後のパターンについても検討した。

4) マイクロ波による電極レス伝導度測定

電極レスで有機半導体材料のナノスケール電気伝導度を測定できる時間分解マイクロ波伝導度測定 (TRMC) を用い、超分子ナノチューブ、 π 共役高分子の電気・光学物性を研究した。単結晶ルブレンは高い電荷キャリア移動度を示すことが報告され、近年特に注目を集めている。有機半導体材料の電気特性の測定には通常、FETやTOF法などが用いられているが、我々はマイクロ波つまり高周波が作り出すac電場と電荷キャリアの相互作用を利用し、電荷キャリアによるナノスケール電気伝導度とそのダイナミクスを研究している。今回、時間分解マイクロ波伝導度 (Time-Resolved Microwave Conductivity) と光過渡吸収分光 (Transient Absorption Spectroscopy) を組み合わせ、単結晶ルブレン中の電荷キャリアダイナミクスを電極レスで測定した。両者の信号は同じ時間挙動を示し、共に励起強度を上げることで減衰が加速されことから、結晶中で電荷が高効率で移動し2次の反応速度にしたがう電荷再結合が起きていることが分かった。さらにナノ秒電子線パルスラジオリシスによる過渡種の同定と併せて、電荷キャリア移動度・両極性・異方性・キャリア生成量子効率・S-S消光の励起強度依存性・一電子酸化還元状態の吸光係数・電荷再結合速度を実験的に求めることに成功した。

5) 放射線照射による遺伝子損傷の研究

放射線照射による遺伝子損傷の鍵となる初期過程として、DNAに電子付加後の電荷移動とそれに引き続いておこるプロトン付加過程をパルスラジオリシス法により追跡した。一重鎖GCの電子付加後のスペクトルはdCと類似であり、二重鎖GCでは400~450 nmに見られる吸収がわずかに長波長シフトしているのみであった。いずれのスペクトルにおいてもGに特徴的な400~500nmの吸収が観測されず、G-Cペアに電子が生成すると、二重鎖においてもこの時間領域でGからCへの電荷移動がおこり、dCと同様にCの中性ラジカルが生成していることが分かった。一方ATからなる一重鎖ATでは、パルス照射後得られるスペクトルはdTアニオンラジカルと同様のスペクトルを与えたが、二重鎖ATではAアニオンラジカルの寄与が考えられ、二重鎖ATにおいて観測されたスペクトルは相補鎖にある水素結合しているAとの相互作用によるものと考えられ、A-Tペア上に電荷が非局在化した状態が示唆された。さらに遅い時間領域でのTアニオンラジカルのプロトン化に対応する変化が観測でき、このときの速度定数はdTアニオンラジカルのプロトン化の速度と比べて一桁近く遅いものであった。

[原著論文]

Long-Lived Hole Stabilized at a Triphenylamine Core and Shielded by Rigid Phenylazomethine Dendrons: A Pulse Radiolysis Study, A. Saeki, S. Seki, N. Satoh, K. Yamamoto and S. Tagawa: J. Phy. Chem. B, 112 (48)

(2008) 15540-15545.

Prominent Electron Transport Property Observed for Triply Fused Metalloporphyrin Dimer: Directed Columnar Liquid Crystalline Assembly by Amphiphilic Molecular Design, T. Sakurai, K. Shi, H. Sato, K. Tashiro, A. Otsuka, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, S. Sasaki, H. Matsunaga, K. Osaka, M. Takata, and T. Aida: *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (42) (2008) 13812-13813.

Electrodeless Determination of Charge Carrier Mobility in Poly(3-hexylthiophene) Films Incorporating Peryleneimide as Photoconductivity Sensitizer and Spectroscopic Probe, A. Saeki, S. Ohsaki, S. Seki, and S. Tagawa: *J. Phys. Chem. C*, 112 (42) (2008) 16643-16650.

Intra-molecular mobility of charge carriers along oligogermane backbones studied by flash photolysis time-resolved microwave conductivity and transient optical spectroscopy techniques, S. Seki, A. Saeki, A. Acharya, Y. Koizumi, S. Tagawa, and K. Machida: *Radiat. Phys. Chem.*, 77 (12) (2008) 1323-1327.

Electrode-less measurement of conductivity transients in poly(n-alkylthiophene)s induced by 193 nm photoexcitation, A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa: *J. Photopolym. Sci. Technol.*, 21 (4) (2008) 559-562.

Amphiphilic Molecular Design as Rational Strategy for Tailoring Bicontinuous Electron Donor and Acceptor Arrays: Photoconductive Liquid Crystalline Oligothiophene-C60 Dyads, W.-S. Li, Y. Yamamoto, T. Fukushima, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, H. Matsunaga, S. Sasaki, M. Takata, and T. Aida: *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (28) (2008) 8886-8887.

Effect of the Heterointerface on Transport Properties of in Situ Formed MgO/Titanate Heterostructured Nanowires, K. Nagashima, T. Yanagida, H. Tanaka, S. Seki, A. Saeki, S. Tagawa, and T. Kawai: *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (15) (2008) 5378-5382.

Superstructure-Dependent Optical and Electrical Properties of an Unusual Face-to-Face, π -Stacked, One-Dimensional Assembly of Dehydrobenzo[12]annulene in the Crystalline State, I. Hisaki, Y. Sakamoto, H. Shigemitsu, N. Tohnai, M. Miyata, S. Seki, A. Saeki, and S. Tagawa: *Chem. Eur. J.*, 14 (14) (2008) 4178-4187.

Electronegative Oligothiophenes Fully Annelated with Hexafluorocyclopentene: Synthesis, Properties, and Intrinsic Electron Mobility, Y. Umemoto, Y. Ie, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, and Y. Aso: *Org. Lett.*, 10 (6) (2008) 1095-1098.

Mobility and Dynamics of Charge Carriers in Rubrene Single Crystals Studied by Flash-Photolysis Microwave Conductivity and Optical Spectroscopy, A. Saeki, S. Seki, T. Takenobu, Y. Iwasa, and S. Tagawa: *Adv. Mater.*, 20 (5) (2008) 920-923.

Crystal structure of the [2Fe-2S] oxidative-stress sensor SoxR bound to DNA, S. Watanabe, A. Kita, K. Kobayashi, and K. Miki: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 105 (11) (2008) 4121-4126.

Amino Acid Residues Interacting with Both the Bound Quinone and Coenzyme, Pyrroloquinoline Quinone, in *Escherichia coli* Membrane-bound Glucose Dehydrogenase, G. Mustafa, Y. Ishikawa, K. Kobayashi, C. T. Migita, MD Elias, S. Nakamura, S. Tagawa, and M. Yamada: *J. Biol. Chem.*, 283 (32) (2008) 22215-22221.

Effect of Base Sequence and Deprotonation of Guanine Cation Radical in DNA, K. Kobayashi, R. Yamagami, and S. Tagawa: *J. Phys. Chem. B*, 112 (32) (2008) 10752-10757.

Carbon- and nitrogen-centered radicals produced from L-lysine by radiation-induced oxidation, T. Ito, S. Morimoto, S. Fujita, K. Kobayashi, S. Tagawa, and S. Nishimoto: *Chem. Phys. Lett.*, 462 (3) (2008) 116-120.

Menaquinone as well as ubiquinone as a bound quinone crucial for catalytic activity and intramolecular electron transfer in in *Escherichia coli* membrane-bound glucose dehydrogenase, G. Mustafa, Catharina T. Migita, Y. Ishikawa, K. Kobayashi, S. Tagawa, and M. Yamada: *J. Biol. Chem.*, 283 (42) (2008) 28169-28175.

Formation of spectral intermediate G-C and A-T anion complex in duplex DNA studied by pulse radiolysis, R. Yamagami, K. Kobayashi, and S. Tagawa: *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (44) (2008) 14772-14777.

Pulse Radiolysis of Hexameric Nitrite Reductase Containing the two Type 1 Cu Sites in a Monomer, S. Suzuki, T. Maetani, M. Nojiri, K. Yamaguchi, K. Kobayashi, and S. Tagawa: *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 81 (11) (2008) 1525-1527.

Function of a bound ubiquinone in *Escherichia coli* quinoprotein glucose dehydrogenase, G. Mustafa, Y. Ichikawa, Kazuo Kobayashi, Catharin T. Migita, Seiichi Tagawa, and Mamoru Yamada: *BioFactors*, 32 (1) (2008) 23-29.

Line edge roughness after development in a positive-tone chemically amplified resist of post-optical lithography investigated by Monte Carlo simulation and dissolution model, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, H. Deng, and M. J. Leeson: *Nanotechnology*, 19 (1) (2008) 015705.

Point Spread Function for the Calculation of Acid Distribution in Chemically Amplified Resists for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa, A. Saeki, and S. Tagawa: *Appl. Phys. Express*, 1 (2) (2008) 027001.

Dependence of Acid Generation Efficiency on Molecular Structures of Acid Generators upon Exposure to Extreme Ultraviolet Radiation, R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: *Appl. Phys. Express*, 1 (2) (2008) 027004.

Enhancement of Acid Production in Chemically Amplified Resist for Extreme Ultraviolet Lithography, H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, H. Yukawa, M. Sato, and J. Onodera: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 1 (4) (2008) 047001.

Difference in Reaction Schemes in Photolysis of Triphenylsulfonium Salts between 248 nm and Dry/Wet 193 nm Resists, Y. Matsui, H. Sugawara, S. Seki, T. Kozawa, S. Tagawa, and T. Itani: *Appl. Phys. Express*, 1 (3) (2008) 036001.

Resolution degradation caused by multispur effect in chemically amplified extreme ultraviolet resist, T. Kozawa, S. Tagawa, and M. Shell: *J. Appl. Phys.*, 103 (8) (2008) 084306.

Relationship between Sensitivities of Chemically Amplified Resist Based on Adamantane Derivatives upon Exposure to ArF Excimer Laser, K. Furukawa, T. Kozawa, S. Seki, and S. Tagawa: *Appl. Phys. Express*, 1 (6) (2008) 067001.

X-ray reflectivity study on depth profile of acid generator distribution in chemically amplified resists, T. Fukuyama, T. Kozawa, S. Tagawa, R. Takasu, H. Yukawa, M. Sato, J. Onodera, I. Hirosawa, T. Koganesawa, and K. Horie: *Appl. Phys. Express*, 1 (6) (2008) 065004.

Feasibility Study of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists for 22 nm Fabrication, T. Kozawa, K.

Okamoto, J. Nakamura, and S. Tagawa: Appl. Phys. Express, 1 (6) (2008) 067012.

Feasibility Study of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists for 22 nm Fabrication, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (6) (2008) 4465-4468.

Effects of Rate Constant for Deprotection on Latent Image Formation in Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (6) (2008) 4926-4931.

Study of the Reaction of Acid Generators with Epithermal and Thermalized Electrons, K. Natsuda, T. Kozawa, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (6) (2008) 4932-4935.

Impact of nonconstant diffusion coefficient on latent image quality in 22 nm fabrication using extreme ultraviolet lithography, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: J. Photopolym. Sci. Technol., 21 (3) (2008) 421-427.

Quencher Effects at 22 nm Pattern Formation in Chemically Amplified Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: J. Appl. Phys., 47 (7) (2008) 5404-5408.

Simulation of amine concentration dependence on line edge roughness after development in electron beam lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, H. Deng, and M. J. Leeson: J. Appl. Phys., 104 (2) (2008) 024303.

Formation of Intramolecular Poly(4-hydroxystyrene) Dimer Radical Cation, K. Okamoto, T. Kozawa, K. Natsuda, S. Seki, and S. Tagawa: J. Phys. Chem. B, 112 (31) (2008) 9275-9280.

Theoretical Study on the Dependence of Acid Distribution on Material Properties of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, and M. Shell: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (8) (2008) 6288-6292.

Difference between Acid Generation Mechanism in Poly(hydroxystyrene)- and Polyacrylate-Based Chemically Amplified Resists upon Exposure to Extreme Ultraviolet Radiation, R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, D. Shimizu, T. Kai, and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (9) (2008) 7125-7127.

Theoretical Study on Difference between Image Quality Formed in Low- and High-Activation-Energy Chemically Amplified Resists, T. Kozawa, and S. Tagawa: Appl. Phys. Express, 1 (10) (2008) 107001.

Side Wall Degradation of Chemically Amplified Resists Based on Poly(4-hydroxystyrene) for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (10) (2008) 7822-7826.

High-Absorption Resist Process for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (11) (2008) 8354-8359.

Effects of Polymer Interference during Acid Generation on Latent Image Quality of Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa and S. Tagawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (11) (2008) 8328-8332.

Latent image formation in chemically amplified extreme ultraviolet resists with low activation energy for deprotection reaction, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: J. Vac. Sci. Technol. B, 26 (6) (2008) 2257-2260.

Dissolution characteristics of chemically amplified extreme ultraviolet resist, T. Itani, K. Kaneyama, T. Kozawa,

and S. Tagawa: J. Vac. Sci. Technol. B, 26 (6) (2008) 2261-2264.

[国際会議]

Chemically Amplified Molecular Resist Based on Fullerene Derivative for Nanolithography (poster), *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Ando, K. Ohmori, M. Sato, and J. Onodera: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Dependence of Acid Generation Efficiency on Molecular Structure and Concentration of Acid Generator in Chemically Amplified EUV Resists (poster), *R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Acid-base equilibrium in chemically amplified resist (poster), *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Base quencher effects in chemically amplified resist at sub-30-nm fabrication (poster), *T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Evaluation of Admantane derivatives for chemically amplified resist-a comparison between ArF, EUV and EB exposures- (poster), *K. Furukawa, S. Seki, T. Kozawa, and S. Tagawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Study on Reactivity of Halogenated Resist Polymer with Low-energy Electrons (poster), *H. Yamamoto, T. Kozawa, A. Saeki, S. Tagawa, T. Miura, H. Yukawa, and J. Onodera: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effect of acid generator structure on its depth distribution in chemically amplified resist films Fluorine Atom on Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists (poster), *T. Fukuyama, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, M. Irie, T. Mimura, T. Iwai, J. Onodera, I. Hirosawa, T. Koganesawa, and K. Horie: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effect of molecular structures of acid generators on acid generation in chemically amplified resists upon exposure to 75 keV electron beam (poster), *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Dynamics of Radical Cation of Poly(4-Hydroxystyrene) and its Complex (poster), *K. Okamoto, M. Tanaka, T. Kozawa, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effects of Polymer Interference in Acid Generation on Latent Image Quality of Extreme Ultraviolet Resists (poster), *T. Kozawa, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Latent image formation in chemically amplified extreme ultraviolet resists with low activation energy for deprotection reaction (poster), T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: 52nd International Conf. Electron, Ion, and Photon Beam Technology & Nanofabrication, Portland, Oregon, USA.

Multispur in chemically amplified electron beam resists (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: 52nd International Conf. Electron, Ion, and Photon Beam Technology & Nanofabrication, Portland, Oregon, USA.

Study on acid generation of acid generators in chemically amplified resists for electron beam Reactivity of Halogenated Resist Polymer with Low-energy Electrons (poster), *K. Natuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan.

Nano-fabrication of Fluoropolymers using Focused Ion Beam (poster), *N. Fukutake, T. Urakawa, Y. Takasawa, T. Gowa, T. Takahashi, T. Hirano, M. Washio, A. Oshima, K. Okamoto, and S. Tagawa: Fluoropolymer 2008, Charleston, South Carolina, USA.

Dynamics of Radical Cations of Resist Model Compounds (poster), *K. Okamoto, M. Tanaka, T. Kozawa, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Microfabrication of Nano-scale Pattern on Crosslinked PTFE using Focused Ion Beam (poster), *N. Fukutake, T. Urakawa, Y. Takasawa, A. Oshima, M. Washio, A. Oshima, K. Okamoto, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Plasmonic Waveguides with Wavelength Selective Function (poster), *M. Haraguchi, Y. Matsuzaki, T. Tsuzura, T. Okamoto, M. Fukui, K. Okamoto, S. Seki, and S. Tagawa: Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering.

Dynamics of Guanine Radical Cations in Duplex DNA Studied by Pulse Radiolysis (poster), *K. Kobayashi, R. Yamagami, and S. Tagawa: 10th International Workshop Radiation Damage to DNA, Urabandai Japan.

Dynamics of Excess Electron in Duplex DNA Studied by Pulse Radiolysis (poster), R. Yamagami, K. Kobayashi, and S. Tagawa: 10th International Workshop Radiation Damage to DNA, Urabandai Japan.

Effect of Base Sequence and Deprtonation of Guanine Cation Radical in DNA (poster), K. Kobayashi, R. Yamagami, and S. Tagawa: Gordon Conference, Waterville, USA.

Dynamics of Excess Excess Electron in Duplex DNA Studied by Pulse Radiolysis (poster), K. Kobayashi, R. Yamagami, and S. Tagawa: Gordon Conference, Waterville, USA.

Dynamics of Excess Electron in Duplex DNA Studied by Pulse Radiolysis (poster), K. Kobayashi, R. Yamagami, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Multispur effects in chemically amplified resists (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, A. Saeki, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Feasibility Study on High-Sensitivity Chemically Amplified Resists by Polymer Absorption Enhansment in Extreme Ultraviolet Lithography (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, J. Nakamura, and S. Tagawa: International Symposium on Extreme Ultraviolet Lithography, Lake Tahoe, California, USA.

Sentization mechanisms of chemically amplified resists and resist design for 22 nm node (poster), T. Kozawa and S. Tagawa: 2009 International Workshop on EUV Lithography, Oahu, Hawaii, USA.

Electrode-less measurement of conductivity transients in poly(n-alkylthiophene)s induced by 193nm photoexcitation (poster), A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa: Conference of Photopolymer Science and Technology 2008.

Dynamics of Intermediates in Chemically Amplified EB Resist (poster), A. Saeki, T. Kozawa, and S. Tagawa: 2nd

Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Charge dynamics in organic crystals, supermolecules, and dendrimers (poster), A. Saeki, S. Seki, and S. Tagawa: PULS'2008 (8th International Conference on Pulse Investigations in Chemistry, Biology and Physics).

Impact of Side-Chain Length on Alternating Current Mobility of Charge Carrier in Regioregular Poly(3-alkylthiophene) Films (poster), A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa: 18th Iketani Conference (International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers).

Electrodeless Determination of Charge Carrier Mobility in Poly(3-hexylthiophene) Films Incorporating Perylene diimide as Photoconductivity Sensitizer and Spectroscopic Probe (poster), A. Saeki, S. Ohsaki, S. Seki, S. Tagawa: Japan-Korea Polymer Young Scientist Symposium.

[国内学会]

応用物理学会	12 件
日本原子力学会	2 件
日本放射線化学会	10 件
日本化学会	2 件
高分子学会	2 件
日本生化学会	3 件

[取得学位]

修士 (工学)

田中 将史 ポリスチレン誘導体ダイマーラジカルカチオンの生成ダイナミックス
福山 雄大 放射光を用いた化学増幅型レジスト薄膜中の酸発生剤分布に関する研究
土方 勇人 極端紫外光に対するレジスト吸収係数評価のための感光性下地膜の開発

博士 (工学)

山上 隆平 DNA におけるホールおよび電子のダイナミックスの配列依存性

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位: 千円
基盤研究 (S)		
田川 精一	フェムト秒パルスラジオリシス法によるナノ時空間反応プロセスの解明	20,900
若手研究 (A)		
佐伯 昭紀	量子ビーム・マイクロ波複合利用による有機半導体の電荷ナノダイナミックス	9,100
基盤研究(C)		
小林 一雄	酸化ストレスをセンサーとする鉄イオウクラスターを持つ転写因子の制御機構の解明	1,200
特別研究員奨励費		
山上 隆平	非接触測定法による DNA 単一分子鎖の本質的伝導特性の評価	900

[受託研究]

田川 精一	JST CREST	極微細加工用レジスト研究とプロセスシミュレーターの開発	166,270
田川 精一	技術研究組合超先端電子技術開発機構	化学増幅レジストの反応機構の研究	1,000

[共同研究]

田川 精一	日産化学工業	EUV 光照射によるレジスト下層膜の特性と吸収係数測定法の研究	1,000
田川 精一	半導体先端テクノロジーズ	EUV レジストに関する研究	5,000
田川 精一	松下電器産業	EUV リソグラフィ用レジスト材料の溶解特性	1,000

新産業創成研究部門

概要

本研究部門は、平成 18 年度 10 月に設置され、新産業予測研究分野・新産業創造システム研究分野・知的財産研究分野の 3 つの研究分野で構成されている。本部門は、産研の持つ産業界との密接な連携の伝統を生かし、21 世紀の科学技術・産業技術の発展を先導する先端的应用研究に取り組み、成果の社会への還元に関する目標を達成するための具体的方策として「研究成果を新産業の創成に結びつける研究」を行っていく研究部門で、3 つの研究分野の研究内容は以下の通りである。

- ・ 新産業予測研究分野：今後進めるべき研究方向に密接に関連する未来社会の産業予測に関する研究を行う。
- ・ 新産業創造システム研究分野：大学の基礎研究を効率よく迅速かつ確実に新産業に結びつける基本的システムの構築に関する研究を行う。
- ・ 知的財産研究分野：大学の独創的な基礎研究から効率よく知的財産を創出し、新しい潜在ニーズに繋がる知財戦略に関する研究を行う。

新産業創成研究部門では、大学の研究成果の社会還元の進展、迅速な企業化、製品化により持続的な経済発展や国民生活の向上が期待できる研究の更なる展開を図る研究を行っていく予定である。

成果

- ・ 資本金で分類した日本企業の成長ダイナミクス
- ・ 新規知財マップの開発
- ・ 大学知財の活用促進に向けた特許の分析評価に関する研究
- ・ 欧州研究開発機関における知財活用促進策の調査研究

新産業予測研究分野

教授（兼任） 吉田 博
特任助教 中沢 誠
事務補佐員 浅田 美香、伊藤 僚子

a) 概要

21世紀を迎えた現在、日本の産業構造は、これまでのマテリアルやデバイスといったハードウェアを中心とした「工業化社会」から、システムやソフトウェアを中心とした「知識社会」へと大きく変化しつつある。この知識社会においては、工業化社会におけるようなプロセス・イノベーション（“いかに安く作るか”）ではなく、プロダクト・イノベーション（“何を作るか”）が求められており、そこでは産業構造の変化に対応した新たな戦略が必要となる。そこで我々は、既存産業の「分析」に基づいて、未来社会における新産業を「予測」（社会が求める基礎研究のシーズ予測も含む）するためのシステムの構築を目指している。

b) 成果

・ 既存産業の分析 - 資本金で分類した日本企業の成長ダイナミクス

既存産業の分析に基づいて新産業の予測を行なう上で、指標となる統計的数値項目の検討を行なってきた。日本企業を対象に資本金に基づくサイズ分布と利益成長率を調査した。売上高上位の企業の網羅的な解析によって、資本金に応じて分類した小・中・大会社の三つのグループにおいて、利益成長率は小・中・大会社の順に増加することがわかった。この結果は、資本金が企業の成長性を論じる際の重要な指標となり得ることを示している。

・ 知財マップの開発

技術シーズや市場ニーズの技術情報を可視化する手法が確立すれば、新産業を予測するための強力なツールとなり得る。そこで我々は、特許・学術論文等の文献情報から当該技術の特徴をよく表現するキーワードを抽出し、当該キーワードと文献とを同一の二次元平面上の所定の位置にマッピングする「知財マップ」の開発を進めている。従来はキーワードとその出現頻度からマッピングを行なっていたが、当該技術の特徴を十分には表すことができていなかった。今年度は、共起行列を利用することによりキーワード間のつながりを考慮し、当該技術の特徴をよりの確に表現することができるマッピング手法を確立した。これを用いて既存技術、新たな技術シーズおよび市場ニーズ等を視覚化し、新技術に基づく新産業を予測する手法に発展させる予定である。

知的財産研究分野

特任教授 清水 裕一
特任研究員 玉井 誠一郎（平成 20 年 10 月 1 日採用）

a) 概要

材料・情報・生体分野を融合した新しい科学技術分野における大学の独創的な基礎研究から生まれる多岐に亘る知見から、効率よく知的財産を創出することが求められている。本研究分野では、研究開発における知的財産の創出、知的財産の分析・評価を効率的に行う方法やプロセス等について、世界に先駆けて新しい潜在ニーズに繋がる知財戦略の研究を行う。

b) 成果

・大学知財の分析評価研究

大学知財の活用を促進する上で、出願された特許において何が課題かを明確にし、対策を検討するため、大学から出願された特許について公開特許の書誌情報および経過情報をもとに既存の定量評価ツールを用いて分析を行なった。その結果、大学の特許の質は、民間の代表的企業等と比較して相対的に低いことが分かった。また、特許明細書の品質として、実施可能な記載が不足していることが分かった。今後こうしたツールによる出願前のフィードバックが改善策として考えられる。

・欧州研究開発機関における知財活用促進策の調査研究

フランス、ドイツ、イギリスの大学を含む主要な研究開発機関を訪問し、新たな技術シーズを産業に結びつける産学連携による施策について調査を行った。調査は主としてナノテクノロジーの産業化について行なった。ドイツにおける重点地域に設置された量産を前提とした産学連携プロジェクトや、イギリスにおける大学のインキュベーション施設に企業が入り込みネットワーク型で事業化を推進するシステムが、日本と異なるシステムであり、今後の施策として有効であると考えられる。各国とも次世代の産業に向けた独自の産学連携システムの改良を進めている点が注目される。

・その他

講演：知的財産セミナー講演

「企業は基礎研究から生まれる発明をどのように権利化し活用しているか」玉井誠一郎、平成 21 年 2 月 5 日、大阪大学

特別プロジェクト研究部門

第2プロジェクト研究分野「感染制御学研究分野」

准教授 西野 邦彦(平成 21 年 1 月 16 日より)
技術員(派遣) 福島 愛子
大学院学生 二階堂 英司、坂田 博樹、中濃 知志、田中 真奈美、上田 珠美、城阪 郁江
(上記大学院生は連携研究室の生体情報制御学研究分野より受入)

a) 概要

本研究分野は、若手人材育成のシステムとして、平成 21 年 1 月 16 日に設置された。近年、薬で治療することのできない薬剤耐性菌による感染症が出現し、世界共通の深刻な問題となっている。第2プロジェクト研究分野「感染制御学研究分野」では、これら抗菌薬が効かなくなった薬剤耐性菌による感染症の振興を未然に防ぐことを目的として、研究に取り組んでいる。病原菌の適応力と進化の仕組みを明らかにした上で、細菌の薬剤耐性と病原性を同時に軽減することのできる新規治療法確立を目指している。

b) 成果

・ ヒストン様蛋白質 H-NS によるサルモネラ多剤耐性化制御機構の解明

近年、薬剤耐性菌の出現が問題となっており、耐性菌感染症を克服することは、世界共通の取り組むべき課題となっている。臨床、農業、食品工場等において食中毒原因菌であるサルモネラの薬剤耐性株が蔓延していることが問題化している。これまでに、私達の研究からサルモネラには少なくとも 9 個の薬剤排出ポンプが存在しており、いずれも薬剤耐性化に関与していることを明らかにしてきた。しかしながら、これら薬剤排出ポンプがいかなる状況において発現誘導されるのかといった発現制御ネットワークに関する情報はほとんど報告されていない。サルモネラ薬剤耐性制御機構を明らかにする目的で、耐性制御ネットワークの同定を試みたところ、サルモネラ病原性遺伝子発現調節に関与するヒストン様蛋白質 H-NS が多剤排出ポンプ AcrEF の発現調節を行っていることを発見した。H-NS は細菌多剤耐性化を克服するための新たな創薬ターゲットとしても注目される (*Antimicrob. Agents Chemother.* in press, 2009)。

・ YdeO による薬剤排出ポンプ発現制御機構の解明

AraC-XylS ファミリーに属する YdeO レギュレーターが、大腸菌薬剤排出ポンプ MdtEF の発現を上昇させることで大腸菌を多剤耐性化させる機構を明らかにした。ゲノム DNA 断片を用いたオキサシリン耐性スクリーニングから、酸耐性に関与していることが知られていた *ydeO* 遺伝子を含むプラスミドを得た。*ydeO* を発現させると、大腸菌はオキサシリン、クロキサシリン、ナフシリン、エリスロマイシン、ローダミン 6G、SDS 等の化合物に対して耐性化した。これら *ydeO* による大腸菌多剤耐性化は *tolC* 遺伝子を破壊することで見られなくなった。ToIC は数多くの薬剤排出ポンプと複合体を形成していることが知られている。定量的リアルタイム PCR より、*ydeO* は *mdtEF* の発現を上昇させていることが分かった。MdtEF 欠損株では *ydeO* 依存的な大腸菌多剤耐性化が消失した。YdeO は MdtEF 依存的な大腸菌薬剤排出活性上昇に関与していることを発見した。我々の結果から、酸耐性に関与している YdeO は薬剤排出ポンプを制御することにより、細菌多剤耐性化にも関与していることが明らかにされた (*J. Antibiot.* [Nature Publishing Group] in press, 2009)。

[原著論文]

Regulation of the AcrAB multidrug efflux pump in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium, E. Nikaido, I.

Shirosaka, A. Yamaguchi, K. Nishino: Recent Advances in Clinical Pharmacology, (2009) in press.

Regulation and physiological function of multidrug efflux pumps in *Escherichia coli* and *Salmonella*, K. Nishino, E. Nikaido, A. Yamaguchi: BBA-Proteins & Proteomics, (2009) in press.

Role of the AraC/XylS family regulator YdeO in multidrug resistance of *Escherichia coli*, K. Nishino, Y. Senda, M. Hayashi-Nishino, A. Yamaguchi: J. Antibiot., (2009) in press.

H-NS modulates multidrug resistance of *Salmonella enterica* serovar Typhimurium by repressing *acrEF* multidrug efflux genes, K. Nishino, Y. Senda, M. Hayashi-Nishino, A. Yamaguchi: Antimicrob. Agents Chemother., (2009) in press.

[解説、総説]

宿主免疫回避におけるサルモネラ薬剤排出ポンプの生理的役割、西野邦彦、坂田博樹、二階堂英司、城阪郁江、西野美都子、松本佳巳、松本靖彦、垣内力、関水久、山口明人、日本細菌学雑誌、64 [1] (2009) 91 & 110

サルモネラ異物排出トランスポーターAcrAB 発現制御機構の解析、二階堂英司、城阪郁江、山口明人、西野邦彦、日本細菌学雑誌、64 [1] (2009) 110

インドールによるサルモネラ異物排出トランスポーターAcrAB 発現制御機構の解析、城阪郁江、二階堂英司、山口明人、西野邦彦、日本細菌学雑誌、64 [1] (2009) 111

細胞侵入と細胞内増殖におけるサルモネラ異物排出トランスポーターの役割、坂田博樹、西野邦彦、西野美都子、寺尾豊、川端重忠、山口明人、日本細菌学雑誌、64 [1] (2009) 111

AcrAB-TolC exported energy-dependently permeated Fluorescein-di-β-D-galactopyranoside、松本佳巳、西野邦彦、山口明人、日本細菌学雑誌、64 [1] (2009) 130

[国際会議]

Physiological functions of multi-drug efflux systems in *S. enterica* (invited), *K. Nishino: Gordon Research Conference on Multi-Drug Efflux Systems (22-27 Mar. 2009, Texas, USA).

Roles of drug efflux pumps in bacterial multidrug resistance and virulence (invited), *K. Nishino: 3rd Annual Japanese-French Frontiers of Science Symposium (24-26 Jan. 2009, Kanagawa, Japan).

[国内学会]

第 43 回緑膿菌感染症研究会 1 件
第 82 回日本細菌学会総会 5 件

[取得学位]

修士 (薬学)
坂田 博樹 サルモネラ病原性における異物排出タンパク質の役割の解析
中濃 知志 抗菌ペプチド耐性におけるサルモネラ異物排出タンパク質の役割

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円

若手研究 (S)			
西野 邦彦	オーファン輸送体による多剤耐性菌機構の解明と新規治療薬開発		12,740
特定領域研究			
西野 邦彦	細菌ゲノム生存戦略のレジストーム研究		4,700
特別研究員奨励費			
二階堂 英司	異物排出トランスポーター発現制御ネットワーク解析ならびにその生理機能解明		600

[受託研究]

西野 邦彦	科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 さきがけ	異物排出トランスポーターによる 細胞機能制御の解明	15,600
-------	---------------------------------	------------------------------	--------

[共同研究]

山口 明人 西野 邦彦 中島 良介 松本 佳巳	第一三共株式会社	多剤耐性グラム陰性菌を克服する新規 抗菌剤の研究	0
----------------------------------	----------	-----------------------------	---

[その他の競争的研究資金]

西野 邦彦	稲盛財団 研究助成	薬剤排出システム発現制御機構の解明	1,000
西野 邦彦	かなえ医薬振興財団 研究助成	薬剤排出ポンプの構造・機能と生理的 役割の解	1,000
西野 邦彦	持田記念医学薬学振興財 団 研究助成	異物排出トランスポーターによる薬剤 耐性機構の解明と新規治療薬開発	2,000
西野 邦彦	病態代謝研究会 研究助 成	感染時における細菌および宿主防御シ ステム動作原理の解明	1,000
西野 邦彦	上原記念生命科学財団 特定研究助成	排出トランスポーター機能解析と新薬 開発	3,000

〔附 2〕 各附属研究施設の組織と活動

産業科学ナノテクノロジーセンター

センター長 菅沼 克昭
事務補佐員 林 真代

概要

2002年に当センターが発足してより7年間の活動を終え、2009年4月に無事に新たなナノテクセンターへ向けた活動へ繋げる事が叶った。当初の10年間の時限を待たずに、早期の改組となった。この間、さまざまにセンターの活動を担って来てくれた、専任教員と彼らを支え続けた兼任教授の尽力により、ナノテクに関する多大の成果が挙げられた。

当センターは、ナノテクノロジーが世界で標榜されてからかなり早い時期にその必要性を検討し始め、設立された。日本では「ナノテクノロジー」を冠したセンターとしては最も早い時期の設置であり、世界的に見ても先陣を切ってスタートしている。そのミッションは、ナノテクノロジーを支え新たな時代を切り開くための科学と技術を探ることに置かれた。設立当初は、「ナノマテリアルデバイス」、「ナノ量子ビーム」、「ナノテクノロジー産業応用」の3部門に3専任分野と7兼任分野で構成され、2005年より「ナノ構造評価部門」3兼任分野が加わっている。当初からセンター構想の説明図(下)に使われた、「トップダウン」から「ボトムアップ」を結びつける「量子ビーム」、「材料・情報」、「ナノデバイス」、「ナノ計測」の図は、産研にあるべきナノテクセンターの象徴を示してきた。ナノテクの幅広い領域に研究対象は及び、この度、時限を待たずして新たなセンターへ改組することになった。この間、本報告に見られるように、各分野が非常に多くの成果を挙げており、十分に当初のミッションはこなし得たと感じられる。ナノテクノロジー分野の重要性とこの一連の成果によって、新生ナノテクセンターは時限の撤廃を果たしている。

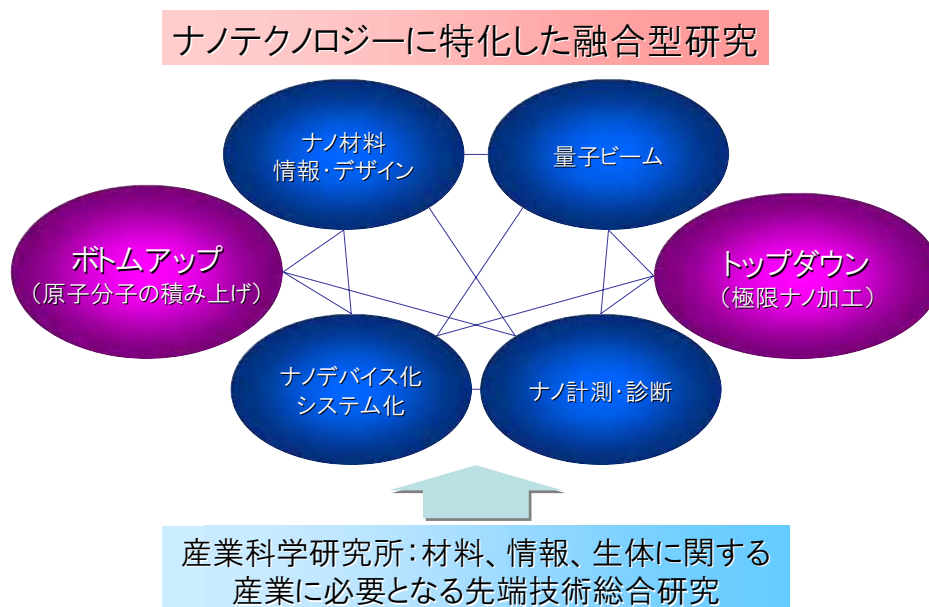


図 当センターが目指したナノテク融合研究.

ナノマテリアル・デバイス研究部門

概要

本部門は、ナノレベルで機能が調和し、巧みな情報変換・伝達を行い、自らが判断する知能を有する“人工生体情報ナノマテリアル”の創成を研究目的としている。また、有機、無機、金属といった従来の枠組みにとらわれず、個々の物質の持つ機能を最大限に利用する方法を確立する。量子効果が支配的となるナノスケールでの物質の性質を評価すること、エネルギー・情報変換、伝達機構を明らかにすること、ナノテクノロジーの1つである原子・分子層制御人工格子形成技術などのボトムアップ技術を駆使し、空間的、エネルギーレベル的に最適な配置・組み合わせを考慮した原子・分子配列を有する材料創製を目指す。一方で、単一分子の物性計測を可能とする合成・測定技術を開発し、単一・少数分子系の新規物理化学現象を開拓する。分子スケールエレクトロニクスを見据えて、単一分子機能が発現する自己組織的デバイス構築に必要な要素技術の確立を行う。さらに、単一分子を超えた機能を有する人工DNA、人工光合成分子、高いキャリア輸送特性の高分子などの超分子の設計と合成を行い、高機能性、多機能性、複合性、複合機能性を持つ分子システムの構築を行う。これら超分子の集合化・組織化を行い、人工細胞や固体素子など均一溶液系を超えた形の機能発現を行う。また、タンパク質を中心とする生体素子やその集合体をナノバイオデバイスと位置付け、それらのナノ構造と機能の解析を行う。さらに、ナノバイオデバイスを用いる超高感度バイオセンサーの開発や分子モーターを含むナノマシーンの創製に関する研究などを行う。

成果

- ・ 原子・分子層制御結晶成長による生体情報材料人工格子の制御形成
- ・ ナノスケール構造と物性相関の評価
- ・ 新規ボトムアップ材料形成装置の開発とナノスケール界面制御
- ・ 新規ナノ加工技術の開発とボトムアップ/トップダウン融合
- ・ 学習・判断機能をもつ脳型メモリ素子の創成
- ・ 分子自己集積現象を利用したデバイス形成の研究
- ・ 分子デバイスのための分子/電極界面設計
- ・ ゲーティングナノポアの開発
- ・ ナノウェルバイオチップの開発
- ・ DNA ナノブロックを利用した DNA 分子センサーの開発
- ・ 光増感 DNA 損傷機構の解明
- ・ π スタック分子間相互作用を誘起する分岐骨格を有するポリチオフェンの開発
- ・ ポリチオフェン塗布薄膜での高キャリア輸送
- ・ 銅含有アミン酸化酵素の触媒反応中間状態の構造解析
- ・ MFS 型大腸菌異物排出トランスポーターの大量精製と結晶化

人工生体情報ナノマテリアル分野

教授	田中 秀和
助教	神吉 輝夫
特任助教	CHA Nam Goo
学部学生	高見 英史
事務補佐員	池田 恵

a) 概要

様々な外場(光、磁場、電場、温度等)に対し巨大に応答する遷移金属酸化物材料群を対象とし、トップダウンナノテクノロジー(超微細ナノ加工技術)とボトムアップナノテクノロジー(超薄膜・ヘテロ接合・人工格子結晶成長)とを融合することによって、望みの位置に、望みの物質・電子状態の空間的配置と次元性をナノスケールで任意に制御する技術論・方法論の確立を行っています。その発展には、光・電界・磁界・温度の外場情報を検出し、界面を通じて巧みな情報交換・学習・記憶をする3次元多機能集積型ナノデバイス・システムの創出を目指しています。今年度の主な研究成果として、①ナノインプリントリソグラフィによる磁性酸化物ナノ構造の一括大面積形成と物性評価、及びナノ Box 構造の一括大面積形成、②原子間力顕微鏡(AFM)リソグラフィによる Fe 系酸化物ナノ細線構造の作製と物性評価、③酸化バナジウムを用いた巨大非線形応答材料の作製、が挙げられます。

b) 成果

・ナノインプリントリソグラフィによる磁性酸化物ナノ構造の一括大面積形成と物性評価、及びナノ Box 構造の一括大面積形成

機能性酸化物に対するナノ微細化加工技術の発展は、量子サイズ効果などのナノ物性の興味に加え、素子作製および高集積化に直結する重要な課題である。しかし、酸化物材料・デバイスにおいてフォトリソグラフィなどにより $1\mu\text{m}\sim 200\mu\text{m}$ 程度のサイズでプロトタイプが作製されているのが現状であり、集積化、高効率化、新動作原理発見などを実現するにはナノ加工技術手法の開発が非常に重要となってくる。ナノインプリント法は Si など半導体微細加工において、超高分解能、大量・大面積、低コスト一括ナノ構造生産の期待が寄せられている方法である。この方法が遷移金属酸化物薄膜形成に応用できれば、応用上および多面的な物性測定への適用範囲が非常に広がる。

そこで、私たちは、金属酸化物薄膜に対しては Mo をリフトオフ用のナノマスクとして用いるインプリントリソグラフィ法(Mo ナノマスクリフトオフインプリント法)を提案し研究を進めている。今年度は、磁性酸化物を用いたナノヘテロ構造の一括大面積形成と電気物性評価を行った。

n 型-Nb(0.2wt%)-SrTiO₃(100)基板上に高温強磁性酸化物(Fe,Zn)₃O₄薄膜のナノ構造体を以下のようなプロセスにより作製した。①Nb-STO(100)単結晶基板上に塗布したPMMA膜に石英モールドによりドットパターンを形成後、この上にスパッタリング法によりMo薄膜を積層する。②続いてアセトン中超音波洗浄により、PMMA層を除去しMoドットナノマスクを形成する。③その後、PLD法により、基板温度 360°C、酸素ガス圧 10^{-4}Pa において金属酸化物薄膜((Fe,Zn)₃O₄)を積層し、その後H₂O₂によって、Mo層からのリフトオフにより、酸化物ナノドットを形成する。

このようなナノ加工方法により、 $1\mu\text{m} \times 1\mu\text{m}$ から $300\text{nm} \times 300\text{nm}$ サイズのエピタキシャル成長した(Fe,Zn)₃O₄ナノドットアレイを大面積で得ることに成功し、物性評価の面ではFe_{2.1}Zn_{0.9}O₄/n型Nb-STOナノドット強磁性構造において、Schottkyダイオード型の電流電圧特性を得た。また、ナノインプリント法とスパッタリング薄膜形成法とを融合し、工程の工夫をすることで、中が空洞の箱型金ナノ構造体の形成にも成功した。この成果は、複雑な3次元ナノ構造体作製を可能にする技術であり、酸化物箱型ナノ構造体形成に向け研究を進めている。

・原子間力顕微鏡 (AFM) リソグラフィーによるFe系酸化物ナノ細線構造の作製と物性評価

遷移金属酸化物のナノスケール物質空間では、不均一な電子・磁気ドメインが約 100nmサイズで存在していることが知られている。ナノ構造体での物性は、バルクと大きく異なることが予想され、新規ナノ物性材料・デバイスの創出が期待される。そこで、本研究では、ナノスケールで簡便にナノポジショニングができ、任意ナノ構造体を作製できるAFMリソグラフィーを用いて、 $(\text{Fe,Mn})_3\text{O}_4$ ナノワイヤー構造体、ナノ狭窄構造体を作製した。ワイヤー幅を 120nmにまで制限することによって、磁気ドメインを一次元的に整列させることに成功した。また、狭窄部幅 50nmをもつナノ狭窄構造体は、非線形な電流電圧特性を示し、狭窄部に磁壁が制約されスピン偏極キャリアに対しバリアとして振舞うことが実験的に明らかになり、室温において巨大な磁気抵抗効果を発現させることに成功した。上記の結果は、ナノ空間に存在する電子・スピンの不均一ドメインの制御が可能であることを示唆しており、様々な機能性酸化物材料への応用が期待できる。

・酸化バナジウムを用いた非線形巨大応答材料の作製

酸化バナジウムは室温より高い 70°C付近で構造相転移をおこし、抵抗値が非線形に変化することが知られている材料である。本年度は、この材料の巨大非線形応答を利用した電子機能材料薄膜の作製を行った。そして、ある閾値電圧を越えると、パルス信号を出力するコンパレータ、構造相転移の不安定性を利用したノイズ発生源となる酸化バナジウム薄膜の作製に成功した。また、タングステンをドーブした $(\text{V,W})\text{O}_2$ において、高温 (約 70°C) にあった金属-絶縁体構造相転移を室温にまで下げることに成功し、室温動作デバイスの可能性を見出した。

[原著論文]

Crucial role of interdiffusion on magnetic properties of in situ formed $\text{MgO}/\text{Fe}_3\text{-}\delta\text{O}_4$ heterostructured nanowires, A. Marcu, T. Yanagida, K. Nagashima, K. Oka, H. Tanaka, T. Kawai: Appl. Phys. Lett., 92 (2008) 173119.

Effect of Heterointerface on Transport Properties of In-situ Formed $\text{MgO}/\text{titanate}$ Heterostructured Nanowires, K. Nagashima, T. Yanagida, H. Tanaka, S. Seki, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kawai: J. Am. Chem. Soc., 130 (2008) 5378-5382.

Hard X-ray Photoemission Spectroscopy Combined with Magnetic Circular Dichroism: Application to $\text{Fe}_{3-x}\text{Zn}_x\text{O}_4$ Spinel Oxide Thin Films, S. Ueda, H. Tanaka, J. Takaobushi, E. Ikenaga, J.-J. Kim, M. Kobata, T. Kawai, H. Osawa, N. Kawamura, M. Suzuki, and K. Kobayashi: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 077003.

Growth atmosphere dependence of transport properties of NiO epitaxial thin films, K. Oka, T. Yanagida, K. Nagashima, H. Tanaka, T. Kawai: J. Appl. Phys., 104 (2008) 13711.

Mechanism of critical catalyst size effect on MgO nanowire growth by pulsed laser deposition, T. Yanagida, K. Nagashima, H. Tanaka, T. Kawai: J. Appl. Phys., 104 (2008) 16101.

Mechanochemical preparation of magnetite nanoparticles by coprecipitation, T. Iwasaki, K. Kosaka, N. Mizutani, S. Watano, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai: Materials Lett., 62 (2008) 4155-4157.

Ferromagnetic oxide Schottky diode of $(\text{Fe, Mn})_3\text{O}_4/\text{Nb:SrTiO}_3$ heterostructure with strongly correlated electrons, I. Satoh, J. Takaobushi, H. Tanaka, T. Kawai: Solid State Commun., 147 (2008) 397-400.

Epitaxial Nanodot Arrays of Transition-Metal Oxides Fabricated by Dry Deposition in Combined with a Nanoimprint-Lithography-Based Molybdenum Lift-Off Technique, N. Suzuki, H. Tanaka, S. Yamanaka, M. Kanai, B. K. Lee, H. Y. Lee, T. Kawai: Small, 4 (2008) 1661-1665.

Effect of ferrous/ferric ions molar ratio on reaction mechanism for hydrothermal synthesis of magnetite nanoparticles, N. Mizutani, T. Iwasaki, S. Watano, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai: Bulletin of Materials Sci., 31 (2008) 713-717.

Mechanism and control of sidewall growth and catalyst diffusion on oxide nanowire vapor-liquid-solid growth, K. Nagashima, T. Yanagida, K. Oka, H. Tanaka, T. Kawai: Appl. Phys. Lett., 93 (2008) 153103.

Implications of phase-segregation on structure, terahertz emission and magnetization of $\text{Bi}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)\text{O}_3$ ($0 \leq x \leq 0.5$) thin films, D. S. Rana, I. Kawayama, K. Takahashi, K. R. Mavani, H. Murakami, M. Tonouchi, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai: European Phys. Lett., 84 (2008) 67016.

Influence of Mg and Cr substitution on structural and magnetic properties of polycrystalline $\text{Ni}_{0.50}\text{Zn}_{0.50-x-y}\text{Mg}_x\text{Cr}_y\text{Fe}_2\text{O}_4$, A. K. M. A. Hossain, T. S. Biswas, S. T. Mahmud, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai: Materials Chem. Phys., 113 (2009) 172-178.

Enhancement of initial permeability due to Mn substitution in polycrystalline $\text{Ni}_{0.50-x}\text{Mn}_x\text{Zn}_{0.50}\text{Fe}_2\text{O}_4$, A. K. M. A. Hossain, T. S. Biswas, S. T. Mahmud, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai: J. Mag. Mag. Mater., 321 (2009) 81-87.

Non-volatile Bipolar Resistive Memory Switching in Single Crystalline NiO Heterostructured Nanowires, K. Oka, T. Yanagida, K. Nagashima, H. Tanaka, T. Kawai: J. Am. Chem. Soc., 131 (2009) 3434-3435.

Fabrication of $(\text{Fe},\text{Mn})_3\text{O}_4$ ferromagnetic oxide nanostructure using Molybdenum nano-mask atomic force microscope lithography, K. Gotoh, H. Tanaka, T. Kawai: J. Appl. Phys., 105 (2009) 064301.

[特許]

「コンパレータ、ノイズジェネレータ、及び確率共振素子」神吉 輝夫、堀田 育志、浅川 直紀、川合 知二、田中 秀和、特願 2008-259480

「Tunneling Magnetoresistive Element, Semiconductor Junction Element, Magnetic Memory and Semiconductor Light Emitting Element」Hidekazu Tanaka, Tomoji Kawai、国際特許番号 US7, 468,282 B2

[国際会議]

Ferroelectric Control of Carrier mediated Ferromagnetism in Spinel Ferrite with High Curie Temperature (poster), *H. Tanaka, J. Takaobuishi, T. Kanki and T. Kawai: The IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference 2008, Kyoto, Japan, Oct. 20-22, 2008.

Epitaxial $(\text{Fe},\text{Mn})_3\text{O}_4$ Artificial Nano-Wire Structures Fabricated by a Combination of AFM Lithography and Molybdenum Lift-off with High Controllability in Their Shape and Positioning, K. Gotoh, *H. Tanaka and T. Kawai: MRS Fall Meeting 2008, Boston, USA, Dec. 1-5, 2008.

High Throughput Fabrication of Epitaxial Oxide Nano-dot and Nano-heterojunction Arrays Composed of Ferromagnetic Spinel Fe Oxide by Nanoimprint Lithography with Mo Lift-off Technique, H. Tanaka, *S. Yamanaka and T. Kawai: MRS Fall Meeting 2008, Boston, USA, Dec. 1-5, 2008.

Magnetic and electric properties of photo-induced magnet $(\text{Al},\text{Ru},\text{Fe})_3\text{O}_4$ spinel ferrite thin films (poster), *T.

Kanki, Y. Hotta, N. Asakawa, M. Seki, E. Ikenaga, H. Tabata, H. Tanaka, K. Kobayashi, and T. Kawai: The IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference 2008, Kyoto, Japan, Oct. 20-22, 2008.

Magnetic and Electronic Characters of Photo-induced Magnet (Al,Ru,Fe)3O4 Spinel Ferrite Thin Films, *T. Kanki, Y. Hotta, N. Asakawa, M. Seki, H. Tabata, H. Tanaka and T. Kawai: MRS Fall Meeting 2008, Boston, USA, Dec. 1-5, 2008.

Electronic Application of Stochastic Resonance by Utilizing Nonlinear Property of Vanadium Oxide: Toward Creation of Bio-Mimetic Devices (poster), *T. Kanki, Y. Hotta, N. Asakawa, H. Tanaka and T. Kawai: MRS Fall Meeting 2008, Boston, USA, Dec. 1-5, 2008.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

田中 秀和 The IEEE Nanotechnology Materials and Device Conference (NMDC 2008) (サブコミッティ)
 田中 秀和 4th Handai Nano science and Nanotechnology International Symposium (Organizing Committee. Chair)

[国内学会]

応用物理学会 6 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円
 若手研究 (B)
 神吉 輝夫 新規光誘起磁性酸化物の創製とスピントロニクス素子応用 2,300

[受託研究]

田中 秀和 (独) 物質・材料研究機構 3次元化学状態解析硬 X線光電子分光装置 1,050
 田中 秀和 (独) 日本学術振興機構 トップダウン・ボトムアップナノテクノロジー融合によるナノスケール酸化物ヘテロ構造の創製 1,200

[奨学寄附金]

田中 秀和 (財) マツダ財団 2,000
 田中 秀和 (財) 三豊科学技術振興協会 2,000
 田中 秀和 (財) スズキ財団 1,000
 田中 秀和 (財) 中部電力基礎技術研究所 (創立 20 周年記念特別研究助成) 5,000
 田中 秀和 (財) 中部電力基礎技術研究所 (研究発表会等開催助成) 260
 田中 秀和 (財) 関西エネルギー・リサイクル科学研究振興財団 300
 神吉 輝夫 (財) 村田学術振興財団 2,000

単分子素子集積デバイス分野

教授（兼任）	川合 知二
准教授	松本 卓也
特任助教	李 奉局
事務補佐員	野木 由美子

a) 概要

次世代の新しいエレクトロニクス of 担い手として、分子スケールデバイスが注目されている。分子の機能を引き出すには、分子を組織化することが必要である。プログラム自己組織化の考え方に基づく分子構造体の形成や、生体分子の機能解析や検出のための多機能性電気化学型ナノバイオセンサーシステムの開発を行っている。さらに絶縁体基板上に構築した分子回路の電気特性を計測するための、新しい走査プローブ顕微鏡測定手法の開発を行っている。また、ボトムアップ手法とトップダウン技術が融合した自己組織化配線法やプローブ生体分子のナノアレイ化手法を開発し、ナノ分子デバイスや生体分子センサーの要素技術開発をおこなっている。

一方、様々な生体分子の機能解析や検出のために自己組織化に基づいた多機能性電気化学型ナノバイオセンサーシステムの開発を行っている。このためには、トップダウン手法を利用した基板のナノパターンニング、ボトムアップ手法を利用したプローブ生体分子のナノ構造体への自己組織的なアレイ化、ナノバイオセンサーシステムのインテグレーションおよび電気化学的な手法による標的分子の検出などの要素技術の確立が必要である。本年度には、多機能性電気化学型ナノバイオセンサーシステムの開発に必要な各要素技術の確立を目指して研究を進めている。

b) 成果

・絶縁体表面におけるバイオ分子の静電気カイメージング

絶縁体上における DNA、タンパク質、金微粒子の表面電位像と微分静電気力像の観測に成功した。間接的な電場変調を用いるための十分な感度を確保し、探針-試料の接触による望ましくない電荷注入を避けるために、周波数シフト法はこの実験に不可欠である。絶縁体基板の表面電位は試料の準備や実験条件の影響を受け、定義し難い。しかしながら、基板表面と吸着物の間の電位差は、吸着物の電荷やダイポールを反映するので、意味がある。静電気力顕微鏡により DNA と転写複合体の間で、誘電分極の分極率の違いを反映して、特徴的なコントラストの反転現象があることを示した。この結果から、生体分子の構造体を維持しながら、絶縁体上にある個々の分子の静電的性質を画像化できることがわかった。

・走査プローブ顕微鏡を用いた時間分解静電気力検出法の開発

カンチレバーの振動を利用した新しい時間分解静電気力検出を試みた。シリコン表面にパルス光を照射したときに生じる過渡的な電荷生成とカンチレバー振動のタイミングを変化させることにより、振動振幅が変化することを見出した。振動振幅は光照射とカンチレバー振動の位相関係に敏感に反応し、1 μ 秒の分解能で時間分解静電気力の検出が可能であることがわかった。

・生体耐性材料のナノパターンニングおよび脂質二分子膜のナノアレイ化

生体分子のナノアレイを構築するための最善策は生体分子の非特異的な吸着を防ぐ材料でナノ構造体を作製し、逐次的な自己組織化を利用して生体分子を整列させることである。そこで、本年度は、ナノインプリントリソグラフィを利用して生体分子の非特異的な吸着を防ぐポリビニルアルコールをレジストするナノ構造体の作製し、リポソームおよびテザー脂質二分子膜などの生体分子をナノ規制空間へ自己組織的・逐次的にアレイ化する要素技術を確立した。

・高耐久性レプリカモールドの作製

近年、ナノインプリントリソグラフィ(NIL)が次世代ナノパターンニング手法として注目を集めている。しかしながら、この手法はレジストとモールドとの機械的な成型による高価のマスターモールドの変形や汚染などの問題がある。この問題を克服する一つの方法は、マスターモールドを機械的な強度の良い適切な材料で損傷なく短時間で複製し、NIL用のモールドとして利用することである。そこで、我々はUV硬化性の有機・無機ハイブリッドレジンをマスターモールドの複製材料として用いることにより機械的な特性の良い(ヤング率=1.76 GPa)レプリカモールドの作製に成功した。このレプリカモールドはUV-NILおよびthermal-NIL条件のもとで繰り返しインプリンティングを行っても高い耐久性を持っている。

[原著論文]

High-density DNA Alignment on an Au(111) Surface Starting from Folded DNA, H. Matsuura, A. Hirai, F. Yamada, T. Matsumoto, T. Kawai: *J. Am. Chem. Soc.*, 130 (15) (2008) 5002-5003.

Self-Organized Functional Lipid Vesicle Array for Sensitive Immunoassay Chip, H.- Y. Lee, B.- K. Lee, J.- W. Park, H.- S. Jung, T. Kawai: *Ultramicroscopy*, 108 (10) (2008) 1325-1327.

Electrical Resistivity of Molecular-Assembly Nanowires of Amphiphilic Bis-TTF Macrocyclic/2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane Charge Transfer Complex Characterized by PCI-AFM, R. Tsunashima¹, Y. Noda, Y. Tatewaki, S.- I. Noro, T. Akutagawa, T. Nakamura, T. Matsumoto, T. Kawai: *Appl. Phys. Lett.*, 93 (29) (2008) 173102-1-3.

Epitaxial Nano Dot Array of Transition Metal Oxide Fabricated by Dry Deposition in Combination with the Nanoimprint Lithography based Molybdenum Lift-off Technique, N. Suzuki, Hid. Tanaka, S. Yamanaka, M. Kanai, B.- K. Lee, H.- Y. Lee, T. Kawai: *Small*, 4 (10) (2008) 1661-1665.

Nanoarray of Tethered Lipid Bilayer Rafts on Poly(vinyl alcohol) Hydrogel, B.- K. Lee, H.- Y. Lee, P. Kim, K.- Y. Suh, T. Kawai: *Lab on a Chip*, 9 (1) (2009) 132-139.

[解説、総説]

絶縁体表面における吸着ナノ物質の静電気力イメージング — バイオ分子への応用 —
松本卓也、山田郁彦、佐藤一美、甘江利子、高木昭彦、川合知二
表面科学, 29, (2008) 246-252.

走査プローブ顕微鏡を用いた表面電荷のナノスケール画像化
松本卓也、川合知二
粘土科学 47 [1], (2008) 1-8.

走査プローブ顕微鏡を用いた時間分解静電気力検出法の開発
松本卓也、川合知二
顕微鏡 43 [2], (2008) 149-151.

機能性遷移金属酸化物薄膜の極限ナノ加工,
鈴木直毅, 田中秀和, 柳沢吉彦, 山中理, Luca PELLEGRINO, 李奉局, 李恵りょん, 川合知二
真空, 51[1], (2008) 37-43.

[著書]

バイオナノプロセス—溶液中でナノ構造を作るウェット・ナノテクノロジーの薦め—
「第23章、プログラム自己組織化によるナノ材料・デバイスの創製」
鈴木直毅, 安立京一, 李奉局, 川合知二,
CMC 出版社, (2008) ISBN978-4-88231-995-5.

[特許]

「ナノインプリントリソグラフィ用の高耐久性レプリカモールドおよびその作製方法」
川合知二, 李恵りょん, 李奉局, Lan-Young Hong, Dong-Pyo Kim, (出願日: 2008年9月18日)
特願 2008-239827

“Probe apparatus for measuring an electron state on a sample surface
Takkuya Matsumoto, Tomoji Kawai, (Feb. 10, 2009), US 7,486,667 B2

“Highly Durable Replica Mold for Nanoimprint Lithography and Fabrication Method”,
Tomoji Kawai, Hea Yeon Lee, Bong Kuk Lee, Dong-Pyo Kim, Lan-Young Hong, Korean
(Jan. 29, 2009), 10-2009-0006902

[国際会議]

Time-resolved Electrostatic Force Detection by Frequency Shift Mode (poster), T. Matsumoto, T. Kawai: 11th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy Madrid 2008, September 16-19, (2008), Madrid, Spain.

Electric Dipoles of Surface Nano-Structures on Insulating Substrates (poster), F. Yamada, A. Takagi, E. Mikamo-Satoh, T. Matsumoto, T. Kawai: 11th International Conference on Non-Contact Atomic Force Microscopy Madrid 2008, September 16-19, (2008), Madrid, Spain.

Integrated NanoBiochip through Soft NanoLithography (invited), B.- K. Lee, H.- Y. Lee, T. Kawai: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, September 29–October 1, (2008), Osaka, Japan.

Time-resolved Electrostatic Force Detection by Frequency Shift Mode, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Molecule Recognition Imaging by Frequency Shift Detection on Liquid (poster), T. Matsumoto, T. Kawahara, H. Hokonohara, M. Kawano, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Electric Dipoles of Surface Nano-Structures on Insulating Substrates (poster), F. Yamada, A. Takagi, E. Mikamo-Satoh, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Force Measurement between Protein, IL-6 and IL-6 Receptor, Immobilized at N-terminal (poster), H. Hokonohara, A. Takagi, T. Matsuura, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Arrays Mn12 Complex with DNA Template, Y. Segawa, F. Yamada, T. Matsumoto, T. Kawai: International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, November 9-13, (2008), Tokyo, Japan.

Conduction through Biomolecular Arrays, T. Matsumoto, T. Kawai: 4th International Meeting on Molecular Electronics elec mol'08, December 8-12, (2008) Grenoble, France.

Transverse Conduction DNA Probed by Simultaneous Measurements of STM and Non-contact AFM (poster), T. Matsumoto, Y. Maeda, T. Kawai: 4th International Meeting on Molecular Electronics elec mol'08, December 8-12, (2008) Grenoble, France.

Conduction through Biomolecular Arrays (poster), Takuya Matsumoto: Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5), March 15-18, (2009) Miyazaki, Japan.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

松本 卓也 表面科学とナノテクノロジーに関する国際会議 (ISSS-5) プログラム委員

[国内学会]

応用物理学会	4 件
日本表面科学会	2 件
日本生物物理学会	2 件
その他	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位 : 千円
新学術領域研究		
松本 卓也	トップダウン空間規制電極による自己組織的分子機能創発	9,500
基盤研究 (B)		
松本 卓也	パルス変調引力顕微鏡の開発と水溶液中における分子認識反応の解析	5,300
萌芽研究		
松本 卓也	DNA 自己組織化分子アレイを用いたナノスケールホッピング伝導デバイス	2,100

超分子プロセス研究分野

教授（兼任） 真嶋 哲朗
准教授 川井 清彦
助教 辛川 誠

a) 概要

当研究分野では、光・電子機能、分子認識、触媒作用、高次構造、機能集積などの機能性分子の機能解明に基づいて、機能性有機分子、高分子、生体分子などの設計・合成・集合化・組織化を達成し、高機能分子材料の創製、その機能発現機構や作用機構の解明、あるいは高機能分子、多機能分子や分子材料の創製のプロセス開発など産業応用化を目指して研究を行っている。特に、DNA が配列情報をもとに様々な構造を構築可能であることおよび DNA 内を電荷が移動可能であることを利用した、DNA 中における高効率光電荷分離系の構築に関して検討しており、同時に DNA 内電荷移動速度を利用した DNA 情報の読み出しを行っている。

また、での高いキャリア輸送の実現を目指して、強い π スタック分子間相互作用を誘起する分岐骨格を有するポリチオフェンの開発と移動度の評価、および、有機エレクトロニクスへの応用を推進している。

塗布薄膜での高いキャリア輸送の実現を目指して、強い π スタック分子間相互作用を誘起する分岐骨格を有する新規ポリチオフェンの合成と移動度の評価、および、有機エレクトロニクスへの応用を推進している。

b) 成果

・配列に依存しないDNA内高速電荷移動

DNA は G-C、A-T の二種類の塩基対の並び方、すなわち DNA の配列情報に基づいて 2 本鎖構造に留まらず、世界地図や立方体と言った様々な 2 次元、3 次元のナノ構造の形成に利用することができる。DNA が導線として働けばナノテクノロジーの進展に大きく寄与すると期待される。我々は、DNA 内の電荷移動速度について研究を行い、DNA 中を電荷が移動する効率は配列に大きく依存し、核酸塩基の中で最も HOMO レベルの高い G 間を介して電荷が移動すること示し、結果として高い電荷移動効率が得られる DNA は G-C 塩基対のみにより形成される DNA に制限されることを明らかにした。DNA を用いてナノ構造を形成するためには、G-C、A-T の 2 種の塩基対が混在する種々の配列情報を持つ DNA を用いる必要がある。本研究では、G-C 塩基対と A-T 塩基対の HOMO レベルを近づけることにより、配列依存性無く、電荷が高効率で移動する DNA の設計・構築に成功した。我々は、A-T 塩基対の A の一つの窒素原子に注目し、この窒素原子を炭素原子と水素原子の組み合わせに置き換えるだけで、DNA の持つ情報を保持したまま、A-T 塩基対の HOMO レベルを G-C 塩基対の HOMO レベルに近づけた Z-T 塩基対を設計した。DNA 中に 5 つ A-T 塩基対が並んだ配列を Z-T 塩基対に置き換えることにより、1,000 倍以上電荷移動効率を上昇させ、G-C 塩基対により構成された DNA と同等、あるいはそれ以上の電荷移動効率を得ることに成功した。また、10 nm を超える G-C 塩基対、A-T 塩基対が混在する DNA においても、A-T 塩基対を Z-T 塩基対に置き換えることにより高い電荷移動効率を達成した。DNA 中の Z-T 塩基対を一つ A-T 塩基対に戻すと電荷移動効率は約 100 倍低下し、Z-T 塩基対を 5 つ A-T 塩基対に戻すと電荷移動効率は 1,000 倍以下、測定できないレベルまで低下し、A-T 塩基対を Z-T 塩基対に置き換えることによるのみ配列に依存しない DNA 内高効率電荷移動を達成できることが示された。以上のように、DNA の二つの構成要素である A-T 塩基対と G-C 塩基対の HOMO レベルを近づけることにより、配列に依存せず高効率で電荷が移動する DNA を構築することに成功した。

・分岐型ポリチオフェンによる有機エレクトロニクス材料の開発研究

高分子半導体を使った有機Field-effect transistor (FET)に関して、一般にポリチオフェン薄膜で見られる π 共役分子のスタック構造と分岐鎖を有した新規化合物のスタック構造の違いを検証し、構造物性相関解明に関する研究を行っている。分岐構造を有するオリゴチオフェンが3次元的な π 共役系に由来する強い相互作用を示すことが知られていることから、我々は新たに分岐構造を有する高分子化合物(分岐ポリチオフェン)を合成し、分子量分析、紫外可視吸光、蛍光スペクトル分析、FET素子作製・評価により、分岐鎖が物性に与える影響を検討した。分岐鎖はフェニル末端を持つオリゴチオフェンを基本として、長さは0, 2, 4, 8量体とした。重合は分岐部を含む側鎖とチオフェン4量体とのカップリング反応により行い、分子量10000-30000程度の化合物を得た。得られた高分子化合物はHPLC分析において、化合物本来の分子量領域よりも高分子量体であるピークが検出された。分岐鎖が無い化合物でもこのようなピークは検出されるが、分岐鎖があるものよりは少ない。ベンゼン環の分岐部により一連の高分子は折れ曲がり、複雑な3次元構造をしていると予想されるが、さらに分岐鎖を含むことでより複雑化し、分子間のもつれを伴う相互作用を生じていると推測される。一方で、吸収、蛍光スペクトル分析においてはそれら超分子量体の影響は見られず、側鎖の伸長に伴うピークの長波長シフトのみが確認された。さらに一連の化合物を用いて、FET素子作製・評価を行った。FET素子は櫛形金電極が形成されたSi/SiO₂基板を用いて、クロロホルムあるいはトルエンを溶媒にスピコート法により作製した。分岐型ポリチオフェンのFET素子は典型的なP型半導体の電流電圧特性を示した。各ポリマーのFET測定においても、分岐鎖の伸長と共に電界効果移動度の向上が見られ、 π 共役の長い分岐鎖はFET特性の向上に寄与していることがわかった。

[原著論文]

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in bis-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (31) (2008) 7208-7213.

Excitation Energy Dependence of Photoinduced Processes in Pentathiophene-Perylenediimide Dyads with a Flexible Linker, M. Fujitsuka, K. Harada, A. Sugimoto, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (41) (2008) 10193-10199.

Photodecomposition Profiles of β -Bond Cleavage of Phenylphenacyl Derivatives in the Higher Triplet Excited States during Stepwise Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (45) (2008) 11306-11311.

Properties of Excited Radical Cations of Substituted Oligothiophenes, S. Samori, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 112 (45) (2008) 11312-11318.

Photoinduced Charge Transfer Processes on MOF-5 Nanoparticles: Elucidating Differences between Metal-Organic Frameworks and Semiconductor Metal Oxides, T. Tachikawa, J. R. Choi, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (36) (2008) 14090-14101.

Iodine-Doped TiO₂ Photocatalysts. Correlation between Band Structure and Mechanism, S. Tojo, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (38) (2008) 14948-14954.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate, S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. C*, 112 (49) (2008) 19625-19634.

Spatial Control of Protein Binding onto Lipid Bimembrane Using Photoeliminative Linker, K. Nakayama, T. Tachikawa, and T. Majima: *Langmuir (Letter)*, 24 (13) (2008) 6425-6428.

Fine-Tuning of Radiolysis Induced Emission by Variable Substitution of Donor-/Acceptor-Substituted Tetrakis(arylethynyl)benzenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, E. L. Spitler, M. M. Haley, and T. Majima: *J. Org. Chem.*, 73 (9) (2008) 3551-3558.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu^{3+} -Doped TiO_2 Nanocrystals Revealed at the Single-Particle or Single-Aggregate Level, T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 47 (29) (2008) 5348-5352.

Two-laser-guided Three-dimensional Microfabrication and Processing in Flexible Polymer Matrix, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Adv. Mater.*, 20 (18) (2008) 3427-3432.

Charge transfer in DNA assembly: effects of sticky end, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2008) 2656-2658.

Two Different Mechanisms Operating in Photoinduced Electron Transfer of 1,8-Naphthalimide-linker-phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 10 (30) (2008) 4393-4399.

Kinetic of charge transfer in DNA containing a mismatch, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Nucl. Acids Res.*, 36 (17) (2008) 5562-5570.

Triplet Level Dependent Photoluminescence and Photoconduction Properties of π -Conjugated Polymer Thin Films Doped by Iridium Complexes, J. An, J. Chang, J. Han, C. Im, Y.-J. Yu, D. H. Choi, J.-I. Jin, and T. Majima: *J. Photochem. Photobiol. A*, 200 (2-3) (2008) 371-376.

Photoreactivity of As-Fabricated Au Clusters at the Single-Cluster Level, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (1) (2009) 6-7.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO_2 Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures, K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (3) (2009) 934-936.

α -Bond Dissociation of *p*-Phenylbenzoyl Derivatives in the Higher Triplet Excited State during Two-color Two-laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 113 (9) (2009) 1696-1703.

Electron Transfer in Supramolecular Donor-Acceptor Dyad of Zinc Porphycene, M. Fujitsuka, H. Shimakoshi, S. Tojo, L. Cheng, D. Maeda, Y. Hisaeda, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 133 (14) (2009) 3330-3335.

Intramolecular Dimer Radical Anion of $[3_n]$ Cyclophanes: Transannular Distance Dependent Stabilization Energy, M. Fujitsuka, S. Tojo, T. Shinmyozu, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2009) 1553-1555.

High-Performance Poly(3-hexylthiophene) Field-Effect Transistors Fabricated by Slide-Coating Method, M. Karakawa, M. Chikamatsu, Y. Yoshida, M. Oishi, R. Azumi, K. Yase: *Appl. Phys. Express*, 1 (6) (2008) 061802.

[解説、総説]

DNA 中の電荷移動、真嶋哲朗、化学と生物、46[8] (2008) 520-522.

新規酸化チタンナノ粒子光触媒の開発、立川貴士、真嶋哲朗、ケミカルエンジニアリング、53[8] (2008) 17-23.

ユーロピウムイオンをドーブした発光性酸化チタンナノ粒子 —単一粒子分光法による発光測定—、立川貴士、真嶋哲朗、セラミックス、43[11] (2008) 958-960.

2 波長 2 レーザー照射による樹脂内に金属微粒子アレイの作成技術、坂本雅典、真嶋哲朗、Polyfile、45[538] (2008).

単一分子の観測から広がる化学研究—酸化チタン光触媒反応への応用—、立川貴士、真嶋哲朗、化学、64[1] (2009) 55-60.

2 波長 2 レーザーによる三次元加工、坂本雅典、真嶋哲朗、生産と技術、61[1] (2009) 55-61.

Light as a Construction Tool of Metal Nanoparticles: Synthesis and Mechanism, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Photochem. Photobiol. C, 10[1] (2009) 33-56.

DNA の物理化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「物理化学」6.生物物理化学 (2009) ①-83.

DNA の光電子移動反応、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「有機化学」12.光化学 3.電子移動 (2009) ⑥-54.

DNA 光化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「光化学」13.光生命科学 (2009) ②-16.

量子収率と光化学、真嶋哲朗、光化学、40[1] (2009) 巻頭言.

[著書]

“Consecutive adenine sequences serve as potential targets in photosensitized oxidative DNA damage”, K. Kawai and T. Majima, Nova, USA, (2008).

[特許]

「レーザー 3 次元光加工」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-161367

「金属クラスターの作成方法」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-276335

「重合体、これを用いた有機薄膜および有機薄膜素子」安蘇芳雄、辛川誠、上田将人 特願 2008-032021 (国内優先権出願)

「重合体、これを用いた有機薄膜および有機薄膜素子」安蘇芳雄、辛川誠、上田将人 国際出願 PCT/JP2009/052156

[国際会議]

Development of New TiO₂ Photocatalyst: Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions

(invited), T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligands to S₂-Excited Tetraphenyl Porphyrins (invited), T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 10th International Workshop on Radiation Damage to DNA, Fukushima, Japan, Jun. 8-12, 2008.

Real-Time Single Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species with Fluorescent Probes: Applications to TiO₂ Photocatalysts (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Single-Molecule Detection of Hole Transfer Through DNA (poster), *T. Tadao, M. Fujitsuka, and T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), *T. Majima, K. Kawai, and M. Fujitsuka: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

3-D Writing of metal nanoparticles in a polymer matrix with two-color laser beams (poster), *M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

Charge Transfer in DNA, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008), Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Intermolecular Photoinduced Electron-Transfer of 1,8-Naphthalimides in Protic Polar Solvents (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in *bis*-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Reversible Intramolecular Triplet-Triplet Energy Transfer in Benzophenone-*N*-methylphthalimide Dyad (poster), *S. S. Kim, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Three-dimensional Fabrication of Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: Langmuir Symposium in Beijing, Beijing, China, Oct. 31, 2008.

Photochemical Fabrication of 3D Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Solvent Effects on Photoinduced Electron Transfer in 1,8-Naphthalimide Dyads (poster), *D. W. Cho, U. C. Yoon, M. Fujitsuka, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Inter- and/or Intramolecular Excimer and Exciplex Emission in 1,8-Naphthalimide Derivatives (poster), *D. W.

Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Emission Mechanism of Doubly Orth-Linked Quinoxaline/Diphenylfluorene or *cis*-Stilbene/Fluorene Hybrid Compounds Based on the Transient Absorption and Emission Measurements during the Pulse Radiolysis (poster), Y. Wei, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-S. Lin, *C.-T. Chen, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 9th Int Symp Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Application, Shanghai, China, Nov. 11, 2008.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO₂ Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: Osaka University Forum in San Francisco: Grobal COE Program, Bio-Environmental Chemistry, San Francisco, USA, Dec.8-11, 2008.

Bilateral Cooperation between Korea and Japan: To the Future (invited), T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Design of Cyclic Reaction Driven by the Two-color Two-photon Excitation (poster), M. Sakamoto, *S. S. Kim, M. Fujitsuka, T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), *S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Development of TiO₂ Photocatalyst: Real-Time Single Molecule Imaging of TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, Jan. 13-16, 2009.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion, Pohang, Korea, Jan. 20, 2009.

Interfacial Electron Transfer Process in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), S.-C. Cui, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu³⁺-Doped TiO₂ Nanocrystals Revealed at the Single-Particle Level (poster), *T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th

SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reactions in Mesoporous TiO₂ Nanotube (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Development of New TiO₂ Photocatalyst (invited), T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Approach Toward Efficient Photo-electronic Devices by Supramolecular Chemistry (invited), *M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (invited), T. Majima: Asian Academic Seminar 2008 on "Frontiers in the Photocatalysis and Photochemistry of Advanced Materials" Kawasaki, Japan, Mar. 2-6, 2009.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: Kyudai International Symposium on Photo and Supramolecular Chemistry, Fukuoka, Japan, Mar. 7, 2009.

Poly(3-hexylthiophene) Field-Effect Transistors Fabricated by Slide-Coating Method (poster), *M. Karakawa, M. Chikamatsu, Y. Yoshida, M. Oishi, R. Azumi, K. Yase: 5th International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M and Be5), Miyazaki, Japan, March 15-18, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

真嶋 哲朗	2007 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (組織委員長)
真嶋 哲朗	2 nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008) (組織委員)
真嶋 哲朗	10 th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (組織委員)
真嶋 哲朗	Langmuir Symposium in Beijing 2008 (組織委員)
真嶋 哲朗	2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion (組織委員)
真嶋 哲朗	1 st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials' (組織委員)
真嶋 哲朗	Langmuir, American Chemical Society (Senior Editor)

[国内学会]

第 30 回光生物・光医学会	1 件
2008 年光化学討論会	8 件
第 23 回生体機能関連化学シンポジウム	1 件
第 51 回放射線化学討論会	2 件
日本化学会第 89 春季年会	7 件
第 56 回応用物理学会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円
基盤研究 (S)

真嶋 哲朗 萌芽研究	光機能性DNAのナノサイエンス	8,840
真嶋 哲朗	光機能化タバコモザイクウイルス超分子による光電変換デバイスの創製	800

[共同研究]

真嶋 哲朗	積水化学工業株式会社	酸化チタン光触媒作用による超親水性	400
真嶋 哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノ構造を用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,732
真嶋 哲朗	トヨタ自動車株式会社	光励起還元法による高比表面積水素吸蔵合金の研究	5,000

ナノバイオデバイス分野

教授（兼任） 谷澤 克行
准教授 岡島 俊英
助教 中島 良介

a) 概要

自然が作り出したナノバイオデバイスのナノ構造と機能の解析を詳細に行い、その精緻な作用メカニズムと設計指針を解明している。さらに、その成果にもとづいて、新規有用酵素の作製、ナノバイオデバイスを用いる超高感度バイオセンサーの開発、ナノマシンの創製などを目指している。

b) 成果

・キノヘムプロテイン・アミン脱水素酵素の生合成機構

QHNDHは、培地中の*n*-ブチルアミンやベンジルアミンなどの一級アミンを資化するために、*Paracoccus denitrificans*などのグラム陰性細菌のペリプラズムに誘導生成される。本酵素は α, β, γ -サブユニットからなるヘテロ三量体構造を有し、最も小さな γ -サブユニットは、新規キノン補酵素、システイントリプトフィルキノン（CTQ）を含有する。さらに興味深いことに、 γ -サブユニット内ではCTQを形成しているシステイン残基以外の全てのシステイン残基が、近傍のアスパラギン酸残基あるいはグルタミン酸残基のメチレン炭素原子とチオエーテル結合を形成している。このような分子内架橋は明確な二次構造含量が少ない γ -サブユニットのナノ構造維持に必要であると考えられるが、酵素機能における役割や翻訳後修飾による生成機構は未解明である。一方、QHNDH遺伝子はゲノム上でオペロンを形成していると考えられ、その第2番目と5番目のORF（ORF2とORF5）は、本酵素のどのサブユニットとも対応していない未知タンパク質をコードしている。配列比較に基づく、ORF2タンパク質は、種々の酵素活性化因子を含むラジカルSAMスーパーファミリーに属し、ORF5はセリンプロテアーゼに属すると考えられた。すでにORF2タンパク質については、チオエーテル架橋形成に果たす不可欠な役割が解明されている(*J. Biol. Chem.*, 2006, 281, 13672-13684)。

そこで、今回はORF5遺伝子の役割に着目し、ORF5遺伝子を破壊した*P. denitrificans* (Δ ORF5株)を用い、QHNDH生合成に関わるORF5タンパク質の役割を解析した。その結果、 Δ ORF2株と同様に、 Δ ORF5株でもQHNDH活性を欠失しており、*n*-ブチルアミンを唯一のC/N源として含有する最小培地において増殖することができないことがわかった。失われたQHNDH活性と最小培地における増殖能は、ORF5タンパク質発現プラスミドを Δ ORF5株に導入することによって回復させることができた。しかし、ORF5および相同を示したセリンプロテアーゼにおいて、高度に保存された反応中心残基に変異を導入したORF5発現プラスミドでは、QHNDH活性は回復されなかった。したがって、ORF5タンパク質は、セリンプロテアーゼとしてQHNDH生合成に必須の役割を果たしていることが明らかとなった。また、 Δ ORF5株において、 α -および β -サブユニットは野生株と同様にペリプラズム分画に存在していたが、 γ -サブユニットは細胞質画分に蓄積していた。そこで、この細胞質 γ -サブユニットの質量分析を行い、翻訳後修飾の状態を詳細に解析した。その結果、成熟型 γ -サブユニットとは対称的に、 Δ ORF5株の γ -サブユニットでは、チオエーテル架橋は形成されていたが、成熟型 γ -サブユニットにはないプレ配列が残存していた。このプレ配列は Δ ORF2株に由来した γ -サブユニットにおいても、その存在が見出されていた。以上の結果より、ORF5タンパク質はプレ配列の除去に関与する細胞内セリンプロテアーゼであることが判明した。

CTQ補酵素の生成機構に関しては、類似のキノン補酵素であるトリプトファントリプトフィルキノンがヘムタンパク質によってペリプラズムにおいて形成されることから、CTQもペリプラズムにおいて合成されると推定される。おそらく、ヘム分子を含む α -サブユニットが直接的に関与していると考えている。実際、QHNDHのヘムとのチオエーテル結合に関わるアミノ酸残基（C100S、C103S、C11A、C14A）、

及びヘム鉄の配位に関わるアミノ酸残基 (H104A、H104M、H126A、M43A、H15A) に部位特異的変異を導入し、CTQ 生成に及ぼす影響を解析した結果、多くの変異型酵素 (C100S、C11A、C14A、H104A、H104M、H126A、H15A) では、ヘムが欠失し、さらに補酵素 CTQ が形成されず、酵素活性が完全に消失していた。 α -サブユニットにヘムが存在する変異型酵素 (C103S、M43A) においてのみ、活性を有し γ -サブユニットに補酵素 CTQ が検出された。これらの結果は、ヘムの存在が CTQ 生成に必須であることを示唆している。つまり、QHNDH の γ -サブユニットに含まれる CTQ 補酵素は、 α -サブユニット中のヘム依存的な酸化反応によりペリプラズムにおいて自己触媒的に生成することが裏付けられた。

・ *Streptococcus mutans* のバイオフィーム形成に関与する情報伝達タンパク質の X 線結晶構造解析

二成分情報伝達系 (TCS) は、センサーヒスチジンキナーゼ (HK) とレスポンスレギュレーター (RR) で構成される細菌の主要な情報伝達系である。細胞膜上に存在する HK が、外界からの環境シグナルにより活性化し、リン酸基転移によって細胞内の RR を活性化させる。活性化した RR が転写因子として働き、環境変化に適応した遺伝子制御を可能にしている。TCS は酸素欠乏や栄養枯渇などに対する応答、薬剤耐性、あるいは病原性発現など様々な現象に関与することが明らかにされている。歯のう蝕 (虫歯) の原因菌、*Streptococcus mutans* では、複数の TCS がバイオフィーム形成に関与することが明らかにされている。本研究では、そのうち LiaS/LiaR (それぞれ HK と RR に対応) から成る TCS に着目した。本系の枯草菌および黄色ブドウ球菌におけるホモログは、 β ラクタム系およびグリコペプチド系抗生物質に対する耐性発現にも関与することが知られている。さらに、これらの TCS の機能を詳細に解明することは、バイオフィームの形成を阻害し、虫歯予防効果をもつ新規薬剤の開発につながる。本研究では、機能解析と薬剤開発の基礎となる LiaR タンパク質の DNA 結合ドメインの X 線結晶構造を決定した。

S. mutans UA159 株ゲノム DNA から、LiaR の C 末端側 DNA 結合ドメイン (LiaR-C、125-215 残基) に対応する遺伝子領域を PCR により増幅し、pET-22b ベクターに挿入した。本タンパク質は、大腸菌 BL21 (DE3) を用い His-tag タンパク質として過剰発現させ、Ni キレートカラムと陰イオン交換カラムを用いて精製した。結晶化スクリーニングによって結晶化条件を探索し、SPring-8 ビームライン BL44XU において分解能 2.0 Å までの X 線回折データを取得した (空間群: $P2_12_12_1$ 、 $a = 67.7$ 、 $b = 67.8$ 、 $c = 126.0$ Å)。Mycobacterium tuberculosis の RR である DosR-DNA 複合体 (PDB: 1zlk) をサーチモデルとし、位相は分子置換法によって決定した。構造解析の結果、非対称単位中には、ほぼ等価な 4 つの LiaR-C 分子が含まれており、各 LiaR-C 分子は、短い $\alpha 1$ ヘリックスおよびそれに続く 4 つの α ヘリックス ($\alpha 2$ - $\alpha 5$) から構成されていた ($R = 20.1\%$ 、 $R_{\text{free}} = 23.9\%$)。 $\alpha 2$ - $\alpha 5$ を含んだ領域は LuxR 型の helix-turn-helix DNA 結合モチーフを有していた。また、隣接する非対称単位中の分子との間において、サーチモデルとした DosR-DNA 複合体に対応する二量体相互作用が見出された。そこで、DosR-DNA 複合体構造に LiaR-C 二量体を重ね合わせることによって、LiaR-C 二量体-DNA の結合モデルを構築した。この結合モデルより、 $\alpha 4$ ヘリックスの N 末端側領域の Lys179、Thr180、Lys182、Thr183、および His184 において DNA の塩基と相互作用していることが推測された。これらの残基は枯草菌および黄色ブドウ球菌のホモログにおいても保存されており、おそらく、これらの残基が結合塩基配列の認識に寄与していると推測される。

・ ナノマシンとしての薬剤排出蛋白質

生物界には、生体異物排出ポンプと呼ばれる一群の膜輸送体が広く分布していて、細胞レベルにおける最も基本的な生体防御機構となっていることが近年注目されてきている。これらの排出ポンプは、ガン細胞や病原細菌の多剤耐性の原因となるばかりでなく、血液脳関門やその他の組織にも分布していて、さまざまな細胞機能を担っている。私たちは、生体異物排出ポンプの立体構造と分子機構を解明することを目標に研究を進めている。

2002 年に大腸菌の持つ AcrB 多剤排出蛋白質の立体構造決定に世界に先駆けて成功し、2006 年には基質結合型 AcrB 結晶の構造解析にも成功した。そして異物排出の機能的回転輸送機構と、マルチサイト結合が多剤認識の構造的基礎であることを明らかにした。

TetA は最初に発見された異物 (薬物) 排出タンパクで、AcrAB とは異なり、MFS 型と呼ばれるファミリーに属し、外膜チャネルとは共役していない。また、テトラサイクリン系薬剤に特異的な排出タンパクである。これについても結晶化を試み、安定に大量精製する条件を見いだしたが、まだ結晶化に成功

するには至らなかった。

[原著論文]

Efficient bacterial production of functional antibody fragments using a phagemid vector, H. Kuba, A. Furukawa, T. Okajima and K. Furukawa: *Protein Expr. Purif.*, 58 (2) (2008) 292-300.

Identification of ubiquitin ligase activity of RBCK1 and its inhibition by splice variant RBCK2 and protein kinase C β , K. Tatematsu, N. Yoshimoto, T. Okajima, K. Tanizawa and S. Kuroda: *J. Biol. Chem.*, 283 (17) (2008) 11575-11585.

Yeast-based fluorescence reporter assay of G protein-coupled receptor signaling for flow cytometric screening: FAR1-disruption recovers loss of episomal plasmid caused by signaling in yeast, J. Ishii, T. Tanaka, S. Matsumura, K. Tatematsu, S. Kuroda, C. Ogino, H. Fukuda and A. Kondo: *J. Biochem.*, 143 (5) (2008) 667-674.

Enigma homolog 1 scaffolds protein kinase D1 to regulate the activity of the cardiac L-type voltage-gated calcium channel, A.D. Maturana, S. Wälchli, M. Iwata, S. Ryser, J. Van Lint, M. Hoshijima, W. Schlegel, Y. Ikeda, K. Tanizawa and S. Kuroda: *Cardiovascular Res.*, 78 (3) (2008) 458-465.

Crystal structures of *Lymnaea stagnalis* AChBP in complex with neonicotinoid insecticides imidacloprid and clothianidin, T. Okajima, M. Ihara, A. Yamashita, T. Oda, K. Hirata, H. Nishiwaki, T. Morimoto, M. Akamatsu, Y. Ashikawa, S. Kuroda, R. Mega, S. Kuramitsu, D.B. Sattelle and K. Matsuda: *Invert. Neurosci.*, 8 (2) (2008) 71-81.

Further insight into the mechanism of stereoselective proton abstraction by bacterial copper amine oxidase, M. Taki, T. Murakawa, T. Nakamoto, M. Uchida, H. Hayashi, K. Tanizawa, Y. Yamamoto and T. Okajima: *Biochemistry*, 47 (29) (2008) 7726-7733.

In vivo protein delivery to human liver-derived cells using hepatitis B virus envelope pre-S region, T. Kasuya, T. Yamada, A. Uyeda, T. Matsuzaki, T. Okajima, K. Tatematsu, K. Tanizawa and S. Kuroda: *J. Biosci. Bioeng.*, 106 (1) (2008) 99-102.

In vivo delivery of bio-nanocapsules displaying L4-PHA isolectin to malignant tumors overexpressing N-acetylglucosaminyltransferase V, T. Kasuya, J. Jung, H. Kadoya, T. Matsuzaki, K. Tatemastu, T. Okajima, E. Miyoshi, K. Tanizawa and S. Kuroda: *Hum. Gene Ther.*, 19 (9) (2008) 887-895.

Response regulator YycF essential for bacterial growth: X-ray crystal structure of the DNA-binding domain and its PhoB-like DNA recognition motif, T. Okajima, A. Doi, A. Okada, Y. Gotoh, K. Tanizawa and R. Utsumi: *FEBS Lett.*, 252 (23, 24) (2008) 3434-3438.

Expression of squamous cell carcinoma antigen-1 in liver enhances the uptake of HBV envelope-derived bio-nanocapsules in transgenic rats, T. Kasuya, S. Nomura, T. Matsuzaki, J. Jung, T. Yamada, K. Tatematsu, T. Okajima, K. Tanizawa and S. Kuroda: *FEBS J.*, 275 (22) (2008) 5714-572.

[解説、総説]

トランスポーターによる多剤認識の構造的基礎、山口明人、中島良介、遺伝子医学 MOOK、12 (2009) 61-66.

[著書]

“Copper Amine Oxidases: Structure, Catalytic Mechanism and Role in Physiopathology” (G. Floris and B. Mondovi, Eds.), Chapter 3: Cofactors of Amine Oxidases: Copper Ion and Its Substitution and the 2, 4, 5-Trihydroxyphenylalanine Quinone, S. Suzuki, T. Okajima, K. Tanizawa, and M. Mure, CRC Press, New York (2009) 19-37.

“Copper Amine Oxidases: Structure, Catalytic Mechanism and Role in Physiopathology” (G. Floris and B. Mondovi, Eds.), Chapter 8: Mechanism of TPQ Biogenesis in Prokaryotic Copper Amine Oxidase, T. Okajima and K. Tanizawa, CRC Press, New York (2009) 103-118.

[国際会議]

In vivo delivery of bio-nanocapsules displaying L4-PHA isolectin to malignant tumors overexpressing N-acetylglucosaminyl-transferase V (poster), *T. Kasuya, J. Jung, H. Kadoya, T. Matsuzaki, K. Tatematsu, T. Okajima, E. Miyoshi, K. Tanizawa and S. Kuroda: 35th Annual Meeting & Exposition of the Controlled Release Society, New York, USA, July 12-16, 2008.

Direct observation of cell entry of hepatitis B virus envelope L-derived bio-nanocapsules (poster), *M. Yamada, T. Kasuya, T. Matsuzaki, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Enhancement of cellular uptake of HBV envelope L-derived bio-nanocapsules by liver-specific expression of SCCA1 in transgenic rat model (poster), *T. Kasuya, T. Matsuzaki, M. Yamada, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Analysis of the fusogenic activity of the HBV L protein utilizing bio-nanocapsule (poster), *T. Matsuzaki, Y. Sasaki, T. Kasuya, K. Tanizawa and S. Kuroda: The Molecular Biology of Hepatitis B Viruses, San Diego, USA, August 17-21, 2008.

Involvement of an iron sulfur protein and a subtilisin-like protease in the biogenesis of quinohemoprotein amine dehydrogenase (invited), T. Okajima, K. Ono and *K. Tanizawa: Japan-Holland Joint Seminar on New Aspects in Enzyme Science and Biotechnology, Fukuoka, Japan, September 28-30, 2008.

X-ray crystal structure of Streptococcus mutans response regulator involved in biofilm formation (poster), *A. Tada, S. Nomura, Y. Eguchi, R. Utsumi, S. Kuroda, K. Tanizawa and T. Okajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Suita, Osaka, Japan, Sept. 29-Oct. 1, 2008.

Conformational flexibility of the TPQ cofactor in bacterial copper amine oxidase (poster), *T. Okajima, S. Nakanishi, T. Murakawa, H. Hayashi and K. Tanizawa: The Second International

Interdisciplinary Conference on Vitamins, Coenzymes, and Biofactors, Athens, Georgia, USA, October 26-31, 2008.

Involvement of an iron sulfur protein and a subtilisin-like protease in the posttranslational modification of quinohemoprotein amine dehydrogenase (invited), *K. Tanizawa, K. Ono and T. Okajima: The Second International Interdisciplinary Conference on Vitamins, Coenzymes, and Biofactors, Athens, Georgia, USA, October 26-31, 2008.

Conformational Flexibility of the TPQ Cofactor in Bacterial Copper Amine Oxidase (poster), *T. Okajima, S. Nakanishi, and K. Tanizawa: 12th SANKEN International Symposium /Joint Meeting of The 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium/The 2nd SANKEN MSTeC Symposium/The 1st SANKEN Alliance Symposium, January 22, 2009, Suita, Osaka, JAPAN.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

谷澤 克行 Federation of Asian and Oceanian Biochemists and Molecular Biologists (日本代表)
谷澤 克行 The Journal of Biochemistry (編集委員)
谷澤 克行 Journal of Nutritional Science and Vitaminology (編集委員)

[国内学会]

日本生化学会・日本分子生物学会合同大会 (BMB2008) 6 件
日本農芸化学会 4 件
第 12 回 SPring-8 シンポジウム 1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円
基盤研究 (B)
谷澤 克行 ペプチド・ビルトイン型キノン補酵素の生合成機構と触媒機能 3,380
岡島 俊英 プロトン・電子移動を伴うビルトイン型キノン補酵素依存性酵素の精密反応機構 3,900
若手研究 (B)
中島 良介 テトラサイクリン排出タンパク質の結晶化 1,560

[受託研究]

岡島 俊英 農業・生物系特定産業技術研究機構・生物系特定産業技術研究支援センター (生物系産業創出のための異分野融合研究支援事業) 情報伝達阻害剤の作用機構解析と細菌情報ネットワークの立体構造解析 5,200

[奨学寄附金]

谷澤 克行 ビタミン B 研究委員会 250

谷澤 克行

応用酵素協会

1,000

ナノシステム設計分野

客員教授 阿多 誠文 (平成 20 年 4 月 1 日～平成 20 年 6 月 30 日)

a) 概要

ナノテクノロジーのような新しい科学技術領域において、これまでのような科学技術の研究開発側から社会への一方通行の応用ではなく、その科学技術が社会に与える様々な影響を研究開発の場へフィードバックしながら進める責任ある科学技術の研究開発の方法論を検討した。また、その効率的な社会価値創造のあり方、持続可能な社会を実現する為の科学技術と社会の新しい関係のあり方を考察した。

具体的にはナノテクノロジーに対する漠然とした不信や不安の要因である様々な不確かさを科学的に明らかにしていく方策と共に、ナノテクノロジーの社会的影響に関わる課題であるナノ材料の環境や健康影響の課題、倫理・法・社会的課題への取り組みについて考え、こういった課題をナノテクノロジー産業化のなかで規格や工業標準化といった社会基盤の整備にどのように直結させるのか、パブリックエンゲージメントの課題としてどのように取り組んでいくのか、課題の整理を行った。

b) 成果

・ナノテクノロジーの社会受容に関する研究

Nanotechnology R&D and Effective Engagement of Public

Mizuki Sekiya, SoonHwa An, Saori Ishizu, Tadashi Tanabe and Masafumi Ata

4th International Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation (INC4)

2008 年 4 月 15 日, Tokyo

Public Acceptance and Economic Effects on Nanotechnology-EHS Related Issue: Japanese Experience

SoonHwa An, Mizuki Sekiya, Saori Ishizu, Tadashi Tanabe and Masafumi Ata

APO Study Meeting on Strategic Industries: Nanotechnology

2008 年 6 月 11 日, Taipei

ナノテクノロジーと社会

関谷瑞木、安順花、石津さおり、田辺正剛、阿多誠文

SEMI Forum Japan 2008

2008 年 6 月 19 日

ナノテクノロジーの社会受容の課題;コア技術の責任ある研究開発から産業化へ

安順花、関谷瑞木、石津さおり、田辺正剛、阿多誠文

大阪大学産業科学研究所ナノテクノロジーセンター講演会

大阪大学産業科学研究所

2008 年 6 月 20 日

ナノテクの標準化・社会受容への取組み ; ナノテクノロジーの標準化とは何か、なぜ社会受容の課題として標準化が必用なのか

阿多誠文

ナノ高度学際教育研究訓練プログラム、ナノテクキャリアアップ特論

大阪大学ナノサイエンス・ナノテクノロジー研究推進機構

2008 年 6 月 27 日

ナノシステム設計分野

客員准教授 金澤 靖 (平成 20 年 4 月 1 日～平成 20 年 6 月 30 日)

a) 概要

コンピュータビジョンにおいて、距離計測や 3 次元形状復元等の幾何解析を正確に行うためには、事前のカメラ校正が極めて重要である。従来のカメラ校正は、内部パラメータと外部パラメータを同時に推定するものであったが実際には内部パラメータの結果しか利用しない場合も多い。しかし、画像処理による誤差は両方のパラメータによって補われるため、内部パラメータのみが必要な場合には、十分な精度が得られないという問題点があった。そこで、複数の平行光を観測することで、内部パラメータのみを安定に推定する手法を開発する。

b) 成果

まず、複数の平行光の観測として、無限遠を仮定できるシーンから抽出される特徴点を利用する。その際、複数のカメラ位置姿勢において特徴点の対応が必要となることから、ローカル特徴による画像間対応付けについての検討を行った。次に、二つの平行光を選択し、その光線間の相対角が不変であるという内部パラメータのみに依存する拘束条件を利用して推定を行う。実験においては内部パラメータが安定に求まることを示し、さらに、本手法を用いると、推定結果の誤差および入力データの縮退度を可視化することが可能であることを示した。

ナノシステム設計分野

客員教授 金子 敏明 (平成 20 年 7 月 1 日～平成 20 年 9 月 30 日)

a) 概要

アト秒・サブフェムト秒の電子線パルスは、サイズがナノメートル程度となり、物質の集団イオン化等の特異的な現象を引き起こす可能性が示唆されている。この特異的な現象の電子バンチ - 物質の相互作用モデルを構築し、理論的考察を行った。

b) 成果

・フェムト秒・アト秒電子線パルスによる物質中の阻止能および飛程の定式化と理論的考察

電子線パルスの時間幅が、フェムト秒からアト秒に達すると、電子バンチのサイズはナノメートル程度かそれ以下となる。電子バンチが数千から数万の電子を含むとすると、物質は、単一の電子ではなく集団としての電子バンチとの相互作用が支配的となる。この時、物質の集団イオン化等の特異的な現象を引き起こす可能性が示唆されており、この特異的な現象の電子バンチ - 物質の相互作用モデルを構築し、理論的考察を行った。物質に対する新しい量子ビーム照射効果の研究を行った。その結果、物質を電子ガスモデルとして、電子バンチが 1fs 程度まで圧縮されると、阻止能に集団効果が現れる事を見出した。

[原著論文]

- 1) T. Kaneko and S. Ikegami, "Average charge of MeV/atom carbon cluster ions impacted on foils", Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B, 258, 57-60, (2007)

ナノシステム設計分野

客員教授 秋永 広幸 (平成 20 年 10 月 1 日～平成 20 年 12 月 31 日)

a) 概要

従来の Si に替わる多彩な機能を持つ酸化物等のエキゾチックマテリアルのナノ構造（新機能界面、ナノ加工構造）形成と、そのナノエレクトロニクス素子応用に関する研究を行う。具体的には、金属酸化物界面および金属酸化物-金属界面で引き起こされる不揮発性メモリ効果（抵抗スイッチ効果、トンネル磁気抵抗効果など）に対する研究を行いその高性能化を図るとともに、これら新しいナノエレクトロニクスを、シリコンテクノロジー分野を初めとする異分野への融合を推進する研究を行う。ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクト（阪大複合機能ナノファウンダリ、ナノプロセッシング・パートナーシップ・プラットフォームなど）を通じたナノテクノロジーの普及およびネットワークの構築に関する議論を行う。

b) 成果

従来の Si に替わる多彩な機能を持つ酸化物等のエキゾチックマテリアルのナノ構造（新機能界面、ナノ加工構造）形成と、そのナノエレクトロニクス素子応用に関する研究を行った。様々な機能性酸化物ナノ構造における、その電子物性の統一的理解を進めることができた。また、ナノテクノロジー・ネットワークプロジェクト（阪大複合機能ナノファウンダリ、ナノプロセッシング・パートナーシップ・プラットフォームなど）を通じたナノテクノロジーの普及およびネットワークの構築に関する議論を行い、今後のナノテクノロジー展開とその在り方に関する共通理解を進めた。

ナノシステム設計分野

客員准教授 村上 健司 (平成 20 年 7 月 15 日～平成 20 年 10 月 14 日)

a) 概要

色素増感太陽電池は、半導体を利用した光電極、太陽光を吸収する色素、酸化還元反応のための電解質および対向電極から構成されている。ここで、対向電極には、酸化還元反応に触媒作用がある白金電極が使用されており、実用化に際してその使用量の削減が求められている。そこで、白金電極のナノ構造化による触媒作用の向上を目指し、原子間力顕微鏡(AFM)により白金層表面の構造を観察する。

b) 成果

ガラス基板上に、スパッタ法によりクロム導電層、厚さの異なる白金層を連続して堆積した。AFMを用いて表面を観察した結果、クロム層表面が多孔性であることが判明し、白金の堆積量が少ない場合には粒界の隙間に潜り込むと予想された。これに対し、クロム導電層の上にチタン耐食層を堆積した場合には多孔性は減少したが、白金の堆積状態を確認することができず、白金層の形成法を検討する必要があることが指摘された。また、関連分野の研究者・大学院生を対象に、「色素増感太陽電池の開発とナノテクノロジー」の題目でセミナーを行った。

ナノシステム設計分野

招へい教授 中許 昌美（平成 21 年 1 月 4 日～平成 21 年 3 月 31 日）

a) 概要

金属や酸化物セラミックスのナノ粒子を金属錯体の熱分解により合成し、プリントドエレクトロニクスのための各種ナノ粒子インクを合成する。銀、銅などの金属ナノ粒子や、ITO ナノ粒子の合成により得られるナノ粒子形態とキュア条件－インク特性の関係、微細組織の評価や得られる配線等の特性の最適化などを共同研究の元に進めた。

b) 成果

銀、銅などの金属ナノ粒子の合成により得られるナノ粒子形態とキュア条件－インク特性の関係、微細組織の評価や得られる配線等の特性の最適化などを共同研究の元に進めた。特に、銀塩や銅塩の還元における雰囲気制御が得られるナノ粒子の性状へ大きく影響することが指摘されたので、これらを解明する実験計画について議論を行った。

ナノ量子ビーム研究部門

概要

本研究部門は、量子ビームナノファブリケーション、ナノ量子ビーム開発、ナノビームプロセス、極限ナノ加工（学内兼任）、超高速ナノ構造（客員）の分野から成り、量子ビーム科学研究部門、加速器量子ビーム実験室と協力しながら研究を行っている。量子ビームは、ナノサイエンス・ナノテクノロジーの進展に重要な役割を果たすことが期待されている。そこで、電子線加速器からの短パルス電子線や陽電子ビーム、イオンビームおよび電子線露光機等のファブリケーション関連機器を駆使して、量子ビームによるナノサイエンス・ナノテクノロジーの総合的な展開を図っている。その特徴は、量子ビーム時間空間反応解析をはじめとした極限ナノ空間反応解析、陽電子ビームを利用したナノ構造解析、量子ビームによるプロセス開発にあり、トップダウン方式による極限ナノファブリケーションの実現や、新しいナノ量子ビーム科学の創出を目標としている。これらの研究を支えるために、量子ビームの高度化、測定手法の開発、支援機器の整備を分野間および部門間で協力しながら行っている。また、より成果を挙げるために、他大学、研究機関、民間企業との共同研究や国際的な共同研究も積極的に行っている。

成果

- ・ レーザーRFフォトカソードSバンドライナックの開発
- ・ フェムト秒超短パルス電子源の開発
- ・ 等価速度分光法によるフェムト秒パルスラジオリシスの研究
- ・ ダブルデッカー電子加速器の開発とアト秒パルスラジオリシスの研究
- ・ ナノ空間内の反応機構の解明
- ・ イオン液体の放射線化学
- ・ Lバンド電子加速器の高性能化とナノ量子ビームの研究
- ・ FEL と THZ に関する研究
- ・ 高強度低速陽電子ビームの生成
- ・ AMOC 法を用いた高分子内陽電子消滅過程に関する研究
- ・ 陽電子寿命測定法によるレジスト材料の放射線化学初期過程に関する研究
- ・ 単一粒子が引き起こす化学反応の特殊性とナノテクノロジー
- ・ 量子ビーム誘起反応を利用した単一分子物性の評価
- ・ 極限ナノビームプロセスの研究
- ・ レジストプロセスのモデリング化

量子ビームナノファブリケーション分野

教授	吉田 陽一
准教授	楊 金峰
助教	近藤 孝文
大学院生	菅 晃一、田中 治輝、加嶋 宏章
学部学生	坪井 瑞輝
事務補佐員	寺下 美絵

a) 概要

極限量子ビームナノファブリケーションには、今まで考慮されてこなかった新しい問題が発生すると予想している。すなわち、量子ビームと呼ばれる X 線や電子線の物質に及ぼす化学的影響は、二次電子によるイオン化の影響が大部分であり、その意味では、X 線と電子線の効果はほぼ同じと考えてよい。レーザー光励起の場合、レジスト内の酸発生剤を直接的に励起し、酸を発生させる。その後熱を加えることにより連鎖反応をひきおこさせる。一方、量子ビームは、直接的に酸発生剤に作用することはなく、レジストマトリックスをイオン化する。その際、放出された電子が酸発生剤と反応し、酸が生成する。従って、量子ビームが作用した場所から離れた所に酸が生成する。この距離は、スパークとよばれる領域にほぼ等しいことが今までの研究で明らかにしてきた。この距離が大きければ、必要とする解像度が得られないことになる。例えば、30 nm ナノファブリケーションで求められる解像度の精度は約 2~3 nm であるが、一方、スパークサイズは 6 nm 程度であることがこれまでの研究により明らかになっており、このままでは、目的の解像度が得られない結果となってしまう。極限ナノファブリケーションを実現するためには、スパーク効果の問題を解決する必要がある。現在、その方法として、①スパークサイズを制御するか、②スパークサイズに影響されない反応系を開発するとの二つの方法が考えられる。これらの問題を克服するためには、時間空間反応解析を通して、量子ビーム誘起初期過程の本質を明らかにし、この問題に対応する必要がある。

本研究分野では、フェムト秒・アト秒という超短パルス電子ビーム発生の研究を行い、その極限ビームを利用した高時間分解能のパルスラジオリシスを開発および時間空間反応解析を通して、量子ビーム誘起初期過程の本質を明らかにし、微細加工の精度を決めるナノ空間における反応機構の解明を行っている。平成 20 年度は、レーザーフォトカソード RF 電子銃ライナックから発生したフェムト秒電子ビームを用いて、次世代のパルスラジオリシスとして、フェムト秒時間分解能を持つパルスラジオリシスを世界に先駆けて実現した。世界初めてパルスラジオリシスによるフェムト秒時間領域での量子ビーム誘起反応現象の測定に成功した。

b) 成果

・フェムト秒パルスラジオリシスの開発と量子ビーム誘起高速現象の解明

量子ビーム誘起作用は、イオン化から始まり、その後、電子の熱化、水和・溶媒和、ジェミニネートイオン再結合などの初期反応を起こす。イオン化過程は量子ビーム照射の直後、アト秒 (10^{-18} 秒) 時間領域で引き起こされ、その後の初期反応はフェムト秒 (10^{-15} 秒) やピコ秒 (10^{-12} 秒) 時間領域で起こると考えられている。量子ビーム誘起初期過程の解明は、ナノテクノロジーにおけるナノファブリケーションの分野からの要請だけではなく、放射線化学分野やガン治療の医療応用分野からも強い要請がある。我々は、レーザーフォトカソード RF 電子銃加速器から発生したフェムト秒電子線パルスを利用して、フェムト秒時間分解能を持つパルスラジオリシス（電子線励起時間分解吸収分光法）の開発を行い、フェムト秒時間領域での量子ビーム誘起初期過程の解明を目指した研究を進めている。

本研究で開発したパルスラジオリシスシステムでは、加速器から発生したフェムト秒短パルスの電子線を試料に照射させ、電子線誘起反応・現象を、電子線パルスを同期したフェムト秒レーザー分析光パルスを用いて測定する。フェムト秒の時間分解能達成には、フェムト秒電子線パ

ルスや分析光パルスを利用するほかに、電子線パルスと分析光パルスの同期ジッターによる時間分解能の劣化、サンプル中での光の速度と電子の速度の差の違いから生じる時間分解能の劣化をフェムト秒までに抑える必要がある。電子線パルスと分析光パルスの同期時間ジッターを低減するために、電子線パルス発生と加速用の RF パワーの精密制御や室温の安定化を行い、電子線パルスと分析光パルスの同期時間ジッターによるパルスラジオリシスの時間分解能は 200fs に実現できた。サンプル中での光の速度と電子の速度の差の違いから生じる時間分解能の劣化は、電子ビームがサンプルを通り抜けるのにかかる時間と、レーザーがサンプルを通り抜けるのにかかる時間の差で表される。例えば、サンプル長 1mm の水 ($n = 1.33$) の場合、時間分解能の劣化は 1.1ps となる。フェムト秒の時間分解能を得るためには、サンプル長さが 1 mm 以下にする必要がある。従来の光吸収の測定では、電荷量が 1nC の電子ビームで 1 mm のサンプル長はほぼ測定できる限界レベルであり、サンプル長を短くして、その代わりにパルス当たりの電荷量を上げる必要がある。しかし、電荷量を上げることにより、電子線パルスの場合、空間電荷効果が大きくなり、フェムト秒の超短パルス電子ビームが生成できなくなる。そこで我々は、システムの安定化とダブルパルス測定法の利用により、光吸収強度変動による S/N の劣化を抑え、フェムト秒時間分解能を持つパルスラジオリシスを世界初めて実現した。従来のパルスラジオリシスでは、サンプル長 0.5mm 以下の光吸収が測定できないサンプルを 0.1mm まで、かつフェムト秒時間分解光吸収測定が実現できた。

本研究で開発したフェムト秒パルスラジオリシスを用いて、パルスラジオリシスでは、世界初めて水和電子の生成過程を観測することに成功した。その時、電荷量 0.1nC の電子線パルスを利用し、厚さ 0.2mm の水サンプルを用いた。分析光には、時間同期したフェムト秒 Ti:sapphire レーザー (パルス幅は 80 fs) を用い、測定波長は 800nm であった。測定結果により、パルスラジオリシスによる水和電子の生成過程は、光イオン化の場合と同じ、水和前の pre-solvated 電子 (または wet electron とも呼ばれている) を経由し、生成時間は 540 フェムト秒であることがわかった。また、データ解析から、電子パルス幅 (200fs)、レーザー光パルス幅 (80fs) と同期時間ジッター (~200fs) によるパルスラジオリシスの時間分解能は 250fs と得られ (セル長の効果を除く)、世界最高記録となった。

・アト秒電子ビームの発生とアト秒サイエンスへの展開

アト秒電子線パルスは、パルスラジオリシス時間分解能の向上やアト秒時間領域における量子ビーム誘起現象の解明には不可欠である。アト秒電子線パルスを発生するためには、エミッタンス、空間電荷効果、磁気パルス圧縮中高次効果によるパルス幅増大の解明が必要である。特に、磁気パルス圧縮器における高次効果の補正は、アト秒電子線パルスの生成には極めて重要である。そこで、我々は、フォトカソードRF電子銃にフェムト秒レーザー照射による極低エミッタンス電子ビームを発生し、磁気パルス圧縮中高次効果については六極や八極電磁石を用いてエネルギーの違い電子が磁場中を通過するパスの差を補正する手法を考案し、アト秒電子線パルスの発生研究を行った。シミュレーションにより、フェムト秒レーザー照射によりフォトカソードRF電子銃から電荷量が0.01pCの78fsの電子線パルスを発生し、磁気パルス圧縮により最短780アト秒の電子線パルスが発生できることが分かった。

パルスラジオリシスでは、時間領域がアト秒まで短くなるに伴い、分析光パルスの生成、時間ジッターおよびサンプル中での電子線パルスと分析光パルスの速度差による時間分解能劣化の問題が生じる。我々は、電子線パルス発生と分析光パルス発生を1台の加速器で実現するダブルデッカー電子ビーム加速器を開発し、分析光レーザーを使わない、ダブルデッカー電子ビームパルスラジオリシスの研究を行っている。世界初めて、1台の加速器で上下に時間差をつけられた2つのフェムト秒電子線パルスの発生に成功し、チェレンコ放射による短パルス分析光の発生も成功した。ダブルデッカー電子線パルスの発生と加速には、隣周期又は数周期をずらしたSバンドRFを利用しているため、電子パルスと分析光の時間ジッターは電子ビーム加速のRFの位相や振幅の変動によるものとなる。従って、RFの位相や振幅の安定化により、電子パルスと分析光の時間ジッターがアト秒までに低減できると考えられる。

サンプル中での光と電子の速度差による時間分解能劣化の問題解決については、我々は、等

価速度分光法と呼ぶ全く新規の概念の測定法を世界に先駆けて考案し、アト秒パルスラジオリシスの研究を行ってきた。等価速度分光法パルスラジオリシスを示す。そこで、励起用電子線パルスと分析光パルスをサンプルの屈折率に応じた角度で入射し、同時に電子線パルスの波面を入射角度と同じの角度で回転させる。電子線パルスの回転は、加速時のエネルギー変調と磁気パルス圧縮器を通るときのパス長の制御により行われた。従って、電子線パルスと分析光パルスをサンプル中に常に時間的に一致し、サンプル中での光と電子の速度差による時間分解能の劣化を完全に無くすることができる。以上の成果を活用することにより、超短時間分解能かつ大強度吸収信号を得ることができ、次世代のサブフェムト秒やアト秒の光吸収時間分解分光が実現可能となる。サブフェムト秒やアト秒パルスラジオリシス法により、次世代極限量子ビームナノファブリケーションの研究につなげることを示唆する。量子ビーム誘起現象のフェムト秒・アト秒時間領域における直接的な実時間追跡が実現でき、ナノテクノロジーや材料科学における大きなインパクトを与えると共に、量子効果や不確定性原理が顕著になる初めての時間領域に到達することになり、新しい発見とその応用に道を拓く。

[原著論文]

Dynamic Optical Modulation of an Electron Beam on a Photocathode RF Gun: Toward Intensity-Modulated Radiation Therapy (IMRT), T. Kondoh, H. Kashima, J. Yang, Y. Yoshida, S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1142–1147.

Effects of emittance and space-charge in femtosecond bunch compression, K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: Nucl. Instrum. Methods A, 597 (2008) 126–131.

Reactions of Solvated Electrons with Imidazolium Cations in Ionic Liquids, K. Takahashi, T. Sato, Y. Katsumura, J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, R. Katoh: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1239–1243.

Molar Absorption Coefficient and Radiolytic Yield of Solvated Electrons in Diethylmethyl(2-methoxy)ammonium bis (trifluoromethanesulfonyl)imide Ionic Liquid, A. Asano, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, R. Nagaishi, K. Takahashi, Y. Yoshida: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1244–1247.

Picosecond Pulse Radiolysis: Dynamics of Solvated Electrons in Ionic Liquid and Geminate Ion Recombination in Liquid Alkanes, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, R. Nagaishi, M. Taguchi, K. Takahashi, R. Katoh, S. V. Anishchik, Y. Yoshida, S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1233–1238.

Study on the Reaction of Chlorophenols in Room Temperature Ionic Liquids with Ionizing Radiation, A. Kimura, M. Taguchi, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, K. Hirota: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1253–1257.

xtension of the Heavy Ion Beam Pulse Radiolysis Using Scintillators, T. Kondoh, J. Yang, K. Kan, Y. Yoshida, H. Shibata, S. Kurashima, M. Taguchi and K. Hirota: JAEA-Review, 55 (2008) 158.

[国際会議]

Spatial Resolution and Contrast of the Intensity Modulated Electron Beam by the Photocathode RF Gun for the Radiation Therapy (poster), T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, H. Kashima, K. Kan, K. Norizawa, A. Ogata, S. Tagawa: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Femtosecond Photocathode Electron Source (poster), J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, K. Tanimura, Y. Yoshida, J. Urakawa: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Collective Ionization by Attosecond Electron Bunches (poster), A. Ogata, T. Kondoh, K. Norizawa, J. Yang, Y. Yoshida: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Pulse Radiolysis Study of Ion-Species Effects on the Solvated Electrons in Alkyl Ammonium Ionic Liquids, T. Kondoh, A. Asano, J. Yang, K. Norizawa, K. Takahashi, M. Taguchi, R. Nagaishi, R. Katoh, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Breaking Time-Resolution Limits in Pulse Radiolysis, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida, S. Tagawa: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Pulse Radiolysis Study of Trapped Electron in MgSO₄·7H₂O Single Crystal (poster), K. Norizawa, T. Kondoh, J. Yang, A. Ogata, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Observation of Optical Reflection Change due to Electron Pulse Irradiation in GaAs for Femtosecond Electron Pulse Measurement (poster), K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Development of Heavy Ion Beam Pulse Radiolysis in a Single Ion Nano-track (poster), T. Kondoh, J. Yang, K. Kan, Y. Yoshida, K. Norizawa, H. Shibata, M. Taguchi, S. Kurashima, T. Kojima and K. Hirota: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Study of Electron-induced Ultrafast Phenomena in GaAs for Femtosecond Electron Measurement (poster), K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Femtosecond Pulse Radiolysis for Study of Nanofabrication Process (poster), J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Femtosecond reaction analysis based on a femtosecond electron beam and a femtosecond laser light (poster), J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

Optical Modulation of Electron Beam by Digital Micromirror Device for Radiation Therapy based on Photocathode RF Gun (poster), T. Kondoh, H. Kashima, J. Yang, K. Kan, K. Norizawa, A. Ogata, Y. Yoshida, S. Tagawa: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

Optical Absorption Spectrum of Hydrated Electron in MgSO₄ Aqueous Solution (poster), K. Norizawa, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

Femtosecond electron source and its applications (invited), J. Yang: The 4th workshop on electron beam applications, Dwajeon, Korea, Mar. 13, 2009.

[解説、総説]

フェムト秒・アト秒量子ビーム利用, 吉田陽一、生産と技術、61 [2] (2009) 1-4

[国内学会]

日本物理学会	2 件
日本放射線化学会	4 件
日本加速器学会	4 件
日本原子力学会	2 件

高周波電子銃研究会	4 件
第 3 回高崎量子応用研究シンポジウム	1 件

[取得学位]

博士 (工学)		
菅 晃一	フェムト秒・アト秒電子線パルス発生に関する研究	
修士 (工学)		
田中 治輝	フェムト秒パルスラジオリシスによる放射線化学初期過程の研究	
加嶋 宏章	放射線ガン治療のための電子ビームの高速・高解像度光学変調	

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

基盤研究 (A)

吉田陽一	サブフェムト秒・アト秒パルスラジオリシス等価速度分光法の研究	10,790
------	--------------------------------	--------

基盤研究 (C)

楊金峰	重イオンビームパルスラジオリシスによる高密度励起効果の研究	2,210
-----	-------------------------------	-------

[共同研究]

楊 金峰	高エネルギー加速器研究機構	フォトカソードフェムト秒超短パルス電子源の開発	1,200
吉田 陽一	日本原子力研究開発機構 東海研究所	ナノストラクチャー内放射線誘起反応高時間分解測定	
	日本原子力研究開発機構 東海研究所	パルスラジオリシス法を用いたイオン液体の研究	
	日本原子力研究開発機構 高崎研究所	イオンビームによる超微細構造体の形成	
	日本原子力研究開発機構 高崎研究所	イオンパルスラジオリシス法による中間活性種の挙動の解明	
	放射線医学総合研究所	粒子線がん治療のためのビーム制御に関する研究	

ナノ量子ビーム開発分野

教授（兼任） 磯山 悟朗
准教授 誉田 義英
助教 木村 徳雄

a) 概要

本研究分野は、極限ナノ加工を実現するために必要な量子ビームの開発研究および新しいナノ計測手法の開発と利用法の研究を行うことを目的としている。具体的には、電子ライナックを利用した陽電子ビームの生成と材料科学への応用を行っている。陽電子は、物質内の空孔や自由体積に対し検出効率が高く、ナノスケールでの空孔サイズや分布を調べるための有効な手法と考えられている。特に低速陽電子ビームは、高分子などの薄膜に対してもこれらの情報を得ることができるので、その利用価値は高い。陽電子あるいは陽電子と電子が結合して束縛状態を形成しているポジトロニウムと物質との相互作用に関する理解を深め、高分子薄膜内の自由体積や表面・界面の評価を行い、これを新しい材料開発に役立てていこうとしている。このような研究を行うためには、高品質な陽電子ビームが必要であるため、これを可能とする電子ライナックを用いた大強度低速陽電子ビームの発生法の開発、及び陽電子ビームの利用法の開発研究を行っている。更に、これらの研究を進める実験装置を有する加速器量子ビーム実験室の管理・運営にも寄与している。

b) 成果

・角相関を用いた AMOC の検討

我々は親水基が多く存在する高分子電解質膜（Nafion-117等）に対し、 γ 線照射や熱負荷を与え、その性能変化の様子を陽電子消滅法を用いて調べてきている。これまでの結果から、 α -Psの寿命より消滅 γ 線のドップラー拡がり、より大きな差が現れることがわかってきた。ドップラー拡がり消滅相手電子の運動量に関係しているが、陽電子の自由消滅と α -Psの消滅とに大きな差がない限り、この変化が陽電子の自由消滅を反映しているのか、 α -Psの消滅を反映しているのか不明である。そこで、これらを区別するために陽電子寿命と消滅 γ 線光電ピークのドップラー拡がり測定を同時に行なうAMOC（Age-MOMentum Correlation）法を用いて測定を行っている。通常AMOC法ではゲルマニウム半導体検出器によるドップラー拡がり測定が行われているが、特に低エネルギー電子の運動量評価では分解能の点で角相関法に劣るため、角相関法をAMOC法に取り入れることを試みている。角相関を用いる場合は計数効率が大幅に落ちるため、ライナックを用いて生成される陽電子ビームのような、高強度な線源が必要となる。

角相関測定では5インチのBaF₂とBGOのシンチレータを設置し、位置検出型のフォトマルと組み合わせて、時間情報、角度情報を同時に取ることにし、特に γ 線の入射位置に関してはBaF₂の方が分解能の点でBGOに劣るため、条件的に厳しいBaF₂について、前年度は数値計算を用いてその厚さを決定した。本年度は実際に角相関型のAMOCで陽電子寿命、角相関が検出できるかの確認を試みた。テストは径が2インチ、厚さ1インチのBaF₂シンチレータの側面にフォトマルを設置し、これからの信号をストップ信号とし、通常使っているスタート用のフォトマルと組み合わせ、陽電子寿命スペクトルがとれるかを確認した。実際側面に設置したフォトマルからの信号レベルは、背面がもう位置検出用シンチレータ用に開口しており、この面からの散乱光を検出する効率が激減したため小さく、そのままでは消滅 γ 線を識別するための選別用ディスクリミネーターの閾値設定を使うことはできなかった。そこでアンプを製作しこれを介することで寿命スペクトルを測定することはできたが、それでもまだ計数効率は低く、スペクトルから判断した時間分解能は満足できるものではなく、今後さらに検討を進める必要がある。一方、BGOの5インチのシンチレータを使って、位置情報の検出を行った。 γ 線の入射位置による差異は検出できたが、分解能の測定には至っていないので、今後詳細に調べる予定である。

・陽電子を用いた固体高分子形燃料電池の劣化解析

本研究では陽電子消滅法を用いて燃料電池にも使われる電解質膜の構造評価、劣化の評価を行うことを目的としている。これまでの陽電子を用いた電解質膜の研究では、自由体積空孔径の評価が特に重視されてきたが、本研究では特にAMOC法や2光子消滅 γ 線を同時測定するCDB法等を用いて陽電子の消滅過程を調べることで、空隙の大きさだけでなく官能基近傍の電子状態の変化も調べている。これまで電解質膜の劣化に伴う、プロトン伝導度の低下と陽電子消滅に関連しているパラメータの関係を調べるため、代表的な電解質膜であるNafion[®]-117に対し γ 線照射を行い、その線量依存性を陽電子を用いて調べてきた結果、ポジトロニウム寿命における変化は顕著ではなく、Sパラメータで表わされる消滅 γ 線のドップラー幅に線量依存性が見られた。一方、 γ 線照射したNafion-117に対し、FTIR測定、ESR測定、イオン交換容量測定なども行い、 γ 線照射に伴うNafion-117の物性変化を調べてきた。電解質膜で起こる実際の劣化過程を調べるためには、 γ 線照射だけでなく、熱的劣化やヒドロキシラジカルによる劣化等も考慮する必要がある。本研究は工学研究科環境エネルギー工学専攻西嶋研究室との共同研究であり、本年度もNEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）からの支援も受けて行った。以下に本年度の成果を示す。

実際の燃料電池の運転では、電解質膜内に γ 線で作られるラジカル以外にも、劣化に関係するラジカルや不純物の混入等が考えられるため、本年度は電解質膜の劣化試験でよく用いられているフェントン試験を行ったNafion-117、熱負荷をかけたときのNafion-117等についても、プロトン伝導度とSパラメータとの相関を調べた。実験に用いたNafion-117は、買ったままのもの、前処理したもの、8ヶ月経過したものにそれぞれ γ 線照射したもの、また前処理したものに熱を加えたもの、フェントン試験を行ったものである。 γ 線照射した試料では、いずれの場合にも0.1 kGyでプロトン伝導度は最小となり、Sパラメータは最大となり、吸収線量の増大に伴い、プロトン伝導度は増大し、Sパラメータは減少する傾向を示し、これらはほぼ直線的な相関をもつことがわかった。ここで注目すべきはこの直線の傾斜がそれぞれの試料で異なっていることである。1000 kGyの試料については、直線から明らかに外れていたことから、物性に大きな変化が現れたことが推察された。この様な違いは他の電気化学的な研究結果からも示唆されており、詳細は現在考察中である。一方、熱処理した試料については50°Cから120°Cまで、温度上昇と共にプロトン伝導度は減少し、Sパラメータは増加した。ここでもプロトン伝導度とSパラメータとの直線的な相関が見て取れる。しかし、140°Cではそれまでの直線性から大きく外れて、プロトン伝導度は減少したが、Sパラメータは逆に減少する結果となった。これも高分子骨格構造の著しい変化に対応していると考えられ、ここではそれまでのクラスター構造が消失していく過程を表している可能性が考えられる。これらの結果から、陽電子消滅法は劣化初期過程でも敏感にプロトン伝導度の変化に反応し、異なる劣化過程でプロトン伝導度とSパラメータとは異なる相関（異なる勾配）を示すことがわかった。これはプロトン伝導度の低下につながる劣化は単一の過程で起こっているわけではなく、損傷が現れる場所、言い換えれば化学結合の変化する場所が複数存在していることを示唆している。このように陽電子消滅法により、劣化の種類が分類できる可能性が示されたことから、陽電子消滅法が劣化解析に有効な手法となりうることがわかった。

[原著論文]

Interlaboratory comparison of positron annihilation lifetime measurements for synthetic fused silica and polycarbonate, K. Ito, T. Oka, Y. Kobayashi, Y. Shirai, K. Wada, M. Matsumoto, M. Fujinami, T. Hirade, Y. Honda, H. Hosomi, Y. Nagai, K. Inoue, H. Saito, K. Sakaki, K. Sato, A. Shimazu, A. Uedono: J. Appl. Phys., 104 (2) (2008) 026102 1-3.

Radiation chemical yield for loss of carbonate ester bonds in PADC films exposed to gamma ray, Y. Mori, T. Ikeda, T. Yamauchi, A. Sakamoto, H. Chikada, Y. Honda, K. Oda: Radiation Measurements, 44 (2) (2009) 211-213.

[国際会議]

Analysis of Radiation Induced Phenomena in a Polymer Electrolyte Membrane with Positron Annihilation Technique (poster), Y. Honda, N. Kimura, P. K. Pujari, G. Isoyama, S. Tagawa, H. Miyauchi, Y. Shibahara, H. S. Sodaye, Y. Akiyama, Y. Izumi, S. Nishijima: 9th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry, May. 11-15, 2008, Wuhan, China.

Development of A New Detection System Using Positron (poster), Y. Honda, N. Kimura, G. Isoyama, S. Tagawa, H. S. Sodaye, Y. Shibahara, Y. Akiyama, S. Nishijima: 12th SANKEN International Symposium, Jan. 22, 2009, Osaka, Japan.

Application of coincidence Doppler broadening technique for polymer electrolyte membrane (poster), Y. Shibahara, H. S. Sodaye, Y. Miyauchi, Y. Akiyama, Y. Izumi, S. Nishijima, Y. Honda, N. Kimura, G. Isoyama, S. Tagawa: The 15th International Conference on Positron Annihilation, Jan. 18-23, 2009, Kolkata, India.

Aging Phenomenon in Nafion-117 Probed by Positron Annihilation Spectroscopy (poster), H. S. Sodaye, Y. Shibahara, H. Miyauchi, Y. Akiyama, Y. Izumi, S. Nishijima, Y. Honda, N. Kimura, P. K. Pujari, G. Isoyama, S. Tagawa: The 15th International Conference on Positron Annihilation, Jan. 18-23, 2009, Kolkata, India.

[国内学会]

日本原子力学会

1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

基盤研究 (C) 陽電子による高分子電解質膜の性能評価
菅田 義英

910

ナノビームプロセス分野

教授（兼任） 田川 精一
准教授 古澤 孝弘
特任助教 岡本 一将

a) 概要

ナノビームプロセス分野は電子、イオン、光子等の集束性に優れた量子ビームを用いたナノテクノロジープロセスの研究・開発を行っている。トップダウン型ナノテクノロジーの代表であるリソグラフィは現在 100 nm 以下の加工が可能なレベルに到達しているが、本研究分野では、さらなる高解像化を目指すため、極限ナノビームプロセスの追求と、その展開を目的に研究を行っている。ナノビームが微小空間内で引き起こす現象は物理・化学的に興味深いだけでなく、今後のトップダウン型ナノテクノロジーの進展のため、解明されなければならない必須項目である。さらに、ナノテクノロジーの発展のためにはトップダウン型ナノテクノロジーとボトムアップ型ナノテクノロジーの融合が必要不可欠であり、本研究分野では両者の融合を念頭に極限ナノビームプロセスの展開を目指した研究を進めている。

b) 成果

・化学増幅型レジストの反応機構

次世代電子ビーム・X線用レジストとして開発が進められている化学増幅型レジストの放射線反応過程を、パルスラジオリシス法および電子ビーム露光後の分光分析により調べ、ポリスチレン誘導体をはじめとする反応中間体のダイナミクス、酸発生機構における酸発生効率および高分子マトリクス中でのプロトン移動の高分子構造依存性を明らかにした。特に、 C_{37} パラメーターと酸の収率が相関することおよび高分子主鎖中のホール移動を明らかにした。

・微細加工材料のナノ空間内での量子ビーム誘起反応種の三次元ダイナミクスの研究

電子線リソグラフィはトップダウン型ナノテクノロジーにおいてもっとも解像度が高い加工システムである。微細加工材料においてパターン形成に利用される短寿命中間活性種のナノ空間内での三次元空間分布とその経時変化を解明することにより、ナノスケールのレジスト表面ラフネスと反応機構が密接に関係していることを明らかにした。

・レジスト薄膜中のポリマーおよび酸発生剤のナノ分布

微細化の進んでいる半導体加工用レジスト材料の加工誤差の制御は分子サイズまで要求が高まってきている。このため、ポリマー中の酸発生剤(PAG)分布、またポリマー自身の薄膜状態における配向など解明し、これらの制御を可能にしなければならない。本研究は薄膜の深さ方向での密度分布を測定し、薄膜状態におけるポリマー中の PAG のナノ分布を解明した。

[原著論文]

Line edge roughness after development in a positive-tone chemically amplified resist of post-optical lithography investigated by Monte Carlo simulation and dissolution model, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, H. Deng, and M. J. Leeson: Nanotechnology, 19 (2008) 015705.

Point Spread Function for the Calculation of Acid Distribution in Chemically Amplified Resists for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa, A. Saeki, and S. Tagawa: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 027001.

Dependence of Acid Generation Efficiency on Molecular Structures of AcidGenerators upon Exposure to Extreme Ultraviolet Radiation, R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 027004.

Enhancement of Acid Production in Chemically Amplified Resist for Extreme Ultraviolet Lithography, H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, H. Yukawa, M. Sato, and J. Onodera: Jpn. J. Appl. Phys., 1 (2008) 047001.

Difference in Reaction Schemes in Photolysis of Triphenylsulfonium Salts between 248 nm and Dry/Wet 193 nm Resists, Y. Matsui, H. Sugawara, S. Seki, T. Kozawa, S. Tagawa, and T. Itani: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 047001.

Resolution degradation caused by multispur effect in chemically amplified extreme ultraviolet resist, T. Kozawa, S. Tagawa, and M. Shell: J. Appl. Phys., 103 (2008) 084306.

Relationship between Sensitivities of Chemically Amplified Resist Based on Adamantane Derivatives upon Exposure to ArF Excimer Laser, K. Furukawa, T. Kozawa, S. Seki, and S. Tagawa: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 067001.

X-ray reflectivity study on depth profile of acid generator distribution in chemically amplified resists, T. Fukuyama, T. Kozawa, S. Tagawa, R. Takasu, H. Yukawa, M. Sato, J. Onodera, I. Hirosawa, T. Koganesawa, and K. Horie: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 065004.

Feasibility Study of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists for 22 nm Fabrication, T. Kozawa, K. Okamoto, J. Nakamura, and S. Tagawa: Appl. Phys. Express, 1 (2008) 067012.

Feasibility Study of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists for 22 nm Fabrication, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (2008) 4465-4468.

Effects of Rate Constant for Deprotection on Latent Image Formation in Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (2008) 4926-4931.

Study of the Reaction of Acid Generators with Epithermal and Thermalized Electrons, K. Natsuda, T. Kozawa, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (2008) 4932-4935.

Impact of nonconstant diffusion coefficient on latent image quality in 22 nm fabrication using extreme ultraviolet lithography, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: J. Photopolym. Sci. Technol., 21 (2008) 421-427.

Quencher Effects at 22 nm Pattern Formation in Chemically Amplified Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (2008) 5404-5408.

Simulation of amine concentration dependence on line edge roughness after development in electron beam lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, H. Deng, and M. J. Leeson: J. Appl. Phys., 104 (2008) 024303.

Formation of Intramolecular Poly(4-hydroxystyrene) Dimer Radical Cation, K. Okamoto, T. Kozawa, K. Natsuda, S. Seki, and S. Tagawa: J. Phys. Chem. B, 112 (2008) 9275-9280.

Theoretically Study on the Dependence of Acid Distribution on Material Properties of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa, S. Tagawa, and M. Shell: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 (2008) 6288-6292.

Difference between Acid Generation Mechanism in Poly(hydroxystyrene)-and Polyacrylate-Based Chemically Amplified Resists upon Exposure to Extreme Ultraviolet Radiation, R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, D. Shimizu, T. Kai, and T. Shimokawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 (2008) 7125-7127.

Theoretically Study on Difference between Image Quality Formed in Low- and High-Activation-Energy Chemically Amplified Resists, T. Kozawa, and S. Tagawa: *Appl. Phys. Express*, 1 (2008) 107001.

Side Wall Degradation of Chemically Amplified Resists Based on Poly(4-hydroxystyrene) for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 (2008) 7822-7826.

High-Absorption Resist Process for Extreme Ultraviolet Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 (2008) 8354-8359.

Effects of Polymer Interference during Acid Generation on Latent Image Quality of Extreme Ultraviolet Resists, T. Kozawa and S. Tagawa: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 47 (2008) 8328-8332.

Latent image formation in chemically amplified extreme ultraviolet resists with low activation energy for deprotection reaction, T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: *J. Vac. Sci. Technol. B*, 26 (2008) 2257-2260.

Dissolution characteristics of chemically amplified extreme ultraviolet resist, T. Itani, K. Kaneyama, T. Kozawa, and S. Tagawa: *J. Vac. Sci. Technol. B*, 26 (2008) 2261-2264.

[国際会議]

Chemically Amplified Molecular Resist Based on Fullerene Derivative for Nanolithography (poster), *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Ando, K. Ohmori, M. Sato, and J. Onodera: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Dependence of Acid Generation Efficiency on Molecular Structure and Concentration of Acid Generator in Chemically Amplified EUV Resists (poster), *R. Hirose, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Acid-base equilibrium in chemically amplified resist (poster), *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Base quencher effects in chemically amplified resist at sub-30-nm fabrication (poster), *T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, M. Toriumi, and T. Itani: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Evaluation of Admantane derivatives for chemically amplified resist-a comparison between ArF, EUV and EB exposures- (poster), K. Furukawa, S. Seki, T. Kozawa, and S. Tagawa: SPIE Advanced Lithography San Jose, California, USA.

Study on Reactivity of Halogenated Resist Polymer with Low-energy Electrons (poster), *H. Yamamoto, T. Kozawa, A. Saeki, S. Tagawa, T. Miura, H. Yukawa, and J. Onodera: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effect of acid generator structure on its depth distribution in chemically amplified resist films Fluorine Atom on Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists (poster), *T. Fukuyama, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, M. Irie, T. Mimura, T. Iwai, J. Onodera, I. Hirosawa, T. Koganesawa, and K. Horie: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effect of molecular structures of acid generators on acid generation in chemically amplified resists upon exposure to 75 keV electron beam (poster), *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Dynamics of Radical Cation of Poly(4-Hydroxystyrene) and its Complex (poster), *K. Okamoto, M. Tanaka, T. Kozawa, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Effects of Polymer Interference in Acid Generation on Latent Image Quality of Extreme Ultraviolet Resists (poster), *T. Kozawa, and S. Tagawa: 21st International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Fukuoka, Japan.

Latent image formation in chemically amplified extreme ultraviolet resists with low activation energy for deprotection reaction (poster), T. Kozawa, S. Tagawa, J. J. Santillan, and T. Itani: 52nd International Conf. Electron, Ion, and Photon Beam Technology & Nanofabrication, Portland, Oregon, USA.

Multispur in chemically amplified electron beam resists (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: 52nd International Conf. Electron, Ion, and Photon Beam Technology & Nanofabrication, Portland, Oregon, USA.

Study on acid generation of acid generators in chemically amplified resists for electron beam Reactivity of Halogenated Resist Polymer with Low-energy Electrons (poster), *K. Natuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa: International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan.

Nano-fabrication of Fluoropolymers using Focused Ion Beam (poster), *N. Fukutake, T. Urakawa, Y. Takasawa, T. Gowa, T. Takahashi, T. Hirano, M. Washio, A. Oshima, K. Okamoto, and S. Tagawa: Fluoropolymer 2008, Charleston, South Carolina, USA.

Dynamics of Radical Cations of Resist Model Compounds (poster), *K. Okamoto, M. Tanaka, T. Kozawa, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Microfabrication of Nano-scale Pattern on Crosslinked PTFE using Focused Ion Beam (poster), *N. Fukutake, T. Urakawa, Y. Takasawa, A. Oshima, M. Washio, A. Oshima, K. Okamoto, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Plasmonic Waveguides with Wavelength Selective Function (poster), *M. Haraguchi, Y. Matsuzaki, T. Tsuzura, T. Okamoto, M. Fukui, K. Okamoto, S. Seki, and S. Tagawa: Proceedings of SPIE-The International Society for Optical Engineering.

Multispur effects in chemically amplified resists (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, A. Saeki, and S. Tagawa: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda University, Japan.

Feasibility Study on High-Sensitivity Chemically Amplified Resists by Polymer Absorption Enhancement in Extreme Ultraviolet Lithography (poster), T. Kozawa, K. Okamoto, J. Nakamura, and S. Tagawa: International Symposium on Extreme Ultraviolet Lithography, Lake Tahoe, California, USA.

Sentization mechanisms of chemically amplified resists and resist design for 22 nm node (poster), T. Kozawa and S. Tagawa: 2009 International Workshop on EUV Lithography, Oahu, Hawaii, USA.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

古澤 孝弘	21st Microprocess and Nanotechnology Conference (論文委員セクションヘッド)
古澤 孝弘	2008 International Workshop on EUV Lithography (Technical Steering Committee)
古澤 孝弘	2008 International Extreme Ultraviolet Lithography (EUVL) Symposium (論文委員)
古澤 孝弘	The 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008) (Executive Committee)

[国内学会]

日本放射線化学会	4 件
日本化学会	2 件
日本応用物理学界	3 件
高分子学会	1 件

[取得学位]

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの) 単位：千円

基盤研究(S)		
田川 精一	フェムト秒パルスラジオリシス法によるナノ時空間反応プロセスの解明ーナノスケール量子ビーム利用の新展開ー	27,170
基盤研究(B)		
古澤 孝弘	極端紫外光による超微細加工実現へ向けた学術基盤確立のためのナノ空間反応研究	5,980
若手研究(B)		
岡本 一将	レジスト材料のナノサイズゆらぎ制御のための分子ダイナミクスと反応機構の解明	1,200

[受託研究]

田川 精一	JST CREST	極微細加工用レジスト研究とプロセスシミュレーターの開発	99,450
-------	-----------	-----------------------------	--------

[共同研究]

田川 精一	半導体先端テクノロジー	EUV レジストに関する研究	5,000
	ズ(SELETE)		
田川 精一	松下電器産業	EUVリソグラフィ用レジスト材料の溶解特性	1,000

超高速ナノ構造分野

客員教授 Hossain Akther A. K. M. (平成 20 年 10 月 1 日～平成 20 年 12 月 31 日)

a) 概要

スピネルフェライトは高密度なデータ保存、磁性流体、磁気共鳴イメージ、磁気冷凍等で幅広く展開されている材料である。中でもMLCIは電気製品の中で広く使用されており、スピネルフェライトは高周波特性及び低焼結温度における優れた磁気特性からMLCI応用に有望な材料である。本研究では、多層チップインダクタ(MLCI)として有望視されているナノ粒子形状のスピネルフェライトに着目し、その磁気特性を明らかにすることを目的とする。

b) 成果

本研究では、多層チップインダクタ(MLCI)として有望視されているナノ粒子形状のスピネルフェライトに着目し、その磁気特性を明らかにすることを目的とする。ここではNi-Cu-Znフェライトを取り上げ、固相反応法により様々なナノサイズの $\text{Ni}_{0.5-x}\text{Cu}_x\text{Zn}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ を調整し、その磁気特性に及ぼす 1) ナノサイズ効果、2) Cuドーピング量の影響を系統的に検討した。

超高速ナノ構造研究分野

客員外国人研究員

尹 奎植 (平成 20 年 7 月 10 日～平成 20 年 8 月 15 日)

a) 概要

機能的リガンドとしての炭水化物があるナノ粒子は **glyconanoparticles(GNPs)**と呼ばれています。**glyconanoparticles** は **nanobiotechnology** における多機能的役割を持っています。ここで、エタノールリノール酸(液体)、ナトリウムのリノレート金属(固体の)、およびエタノール水(解決策)の 1 を使用することで(LSS 戦略)私は、銀のグルコサミン GNPs の軽快な製作が始めていると熱水条件の下で金属 **nanoclusters** を入手していて報告します。

b) 成果

金属コロイドは、表面で変更されたコロイド金属の中のアルカンチオールの化学吸着をさせる前に **Tween-20** の単分子層が物理吸着します。コロイド金属は、より広い範囲の **pH2** の上では安定しています。**Tween-20** が吸着された層はエチレン・グリコールによる立体相互作用を行って表面活性剤の **headgroup** でナノ粒子の不可逆凝集を防ぎます。さらに、物理吸着された金属コロイドはカルボキシルで終えられたアルカンチオールによって電子対を共有して固定します。そして、**EDC/NHS** カップリング反応で塩でバッファリングされて、末端のカルボキシル基はリン酸塩のグルコサミンの表面の側鎖アミノ基と共に接着されました。トランスグルタミナーゼ抑制を通した悪性の癌の治療のためのアクティブな目標がある化学受容器増感体として統合銀- GNPs が利用できます。

超高速ナノ構造分野

外国人研究員 Jan Ivanco（平成 21 年 2 月 2 日～平成 21 年 3 月 13 日）

a) 概要

現代社会では欠くことのできない電子機器において、半導体デバイスはその根幹をなしている。とりわけ極薄絶縁膜／半導体界面ならびに極薄誘電体膜の性質は、デバイス特性に多大な影響を及ぼし、これらの物性研究は、基礎ならびに応用の両面において非常に重要である。これまで、半導体デバイスの研究は、無機半導体材料を用いたものが主であったが、フレキシブルディスプレイを始めとする低コストのプラスチック半導体の商業的競争力が証明されつつある。しかしながら、分子薄膜とその界面の形成プロセスの理解はまだ不十分で、有機電子デバイスの十分な実力を引き出すためにも基礎研究は重要である。そこで、有機薄膜におけるバンドベンディングなどの電子的挙動について、研究を行った。

b) 成果

小林グループで開発した電圧印加 X 線光電子分光法を用いて、有機薄膜におけるバンドベンディングを観察した。この分析法は、外部電圧によって誘起される内核準位の XPS ピークのシフトを検出し、バンドベンディングを求めるものである。内核準位は、有機薄膜上に蒸着した金属薄膜を通過して得られる光電子のスペクトルから得られる。このため、試料の設計や準備方法の最適化が、この分析法の感度の向上の鍵となる。

まず、Si(100)ウェーハ上にフタロシアニンまたはセキシチオフェン薄膜を超高真空中で金箔上に蒸着した。これらの分子薄膜上に厚さ約 2.5 nm の SiO₂ 薄膜、さらに、マスクを間に挟んで厚さ約 2.5 nm の白金薄膜を蒸着した。白金薄膜に金電極を接続し、分子薄膜に外部電圧を印加できるようにした。有機薄膜の主元素が炭素であるので、外部電場により誘起されるシフト量の観察に用いる内核準位を C1s とした。現在も電圧印加 X 線光電子分光法を用いた測定と測定結果の分析が進行中である。

ナノテクノロジー産業応用研究部門

概要

本分野は、環境調和ナノマテリアル分野（菅沼研）、計算機ナノマテリアルデザイン分野（兼吉田（博）研）、ナノバイオ知能システム分野（兼溝口研）、ナノテクノロジープロパテント分野（学内兼任）、ナノテクノロジートランスファー分野（外国人客員）の4分野から構成され、産業界にとって有用であり、また将来の新産業の創成に利すると考えられるナノテクノロジーに関する科学技術や知的所有権を産業応用するための中核となる研究を行っている。それぞれの名称通りに、ナノテクノロジーを用いた環境調和ナノマテリアル、高効率エネルギー変換ナノマテリアル、ナノマテリアルデザインソフト技術、ナノバイオ知能システム技術、超高密度記録演算素子技術の産業応用研究と技術移転および、知的所有権の戦略的研究と実施を行っている。具体的な個々の成果は、以下に要約される。ただし、ナノテクノロジープロパテント分野及びナノテクノロジートランスファー分野は、それぞれの記述をご覧ください。

成果

- ・ 高温鉛フリーはんだの基本設計の確立と実用化評価
- ・ 低温鉛フリーはんだの酸化メカニズム解明と耐湿性改善技術開発
- ・ 導電性接着剤実装技術の高信頼化と評価技術国際標準化
- ・ Printed Electronics 技術の開拓と、これにマッチした金属ナノ粒子インクの開発
- ・ ナノテクノロジーオントロジーに基づくコンテンツ管理システムの高度化
- ・ 性質と量に関するオントロジー的考察に基づくフェノタイプ記述の統合化の試み
- ・ 臨床医療オントロジー構築ためのオントロジー構築システムの高度化
- ・ 臨床医療オントロジーを用いた電子教科書システムの試作
- ・ オントロジーに基づくライフサイエンス分野のデータベース高度化
- ・ 半導体ナノストロニクスのマテリアルデザイン
- ・ 希薄磁性半導体のスピノダル分解によるナノ構造の生成
- ・ LDA-SIC 法の MACHIKANNEYAMA への実装
- ・ SiO₂ベース希薄磁性半導体の設計
- ・ 擬ポテンシャル法による電子状態計算コード「Osaka2002_nano」の開発改良
- ・ ダイナミクスを利用した半導体材料における超伝導マテリアルデザイン
- ・ 半導体中の不純物制御のためのマテリアルデザイン

環境調和ナノマテリアル分野

教授	菅沼 克昭
助教	井上 雅博、金 権鉄
博士研究員	酒 金婷、金 善植
技術補佐員	畑村 真理子、加賀美 宗子、濱崎 恭子
大学院学生	隈元 聖史、蔵本 雅史、和久田 大介、金 声俊、Alongheng、李 奇柱、姜 玫、 金 昌宰、桑名 貴弘、菰田 夏樹
事務補佐員	井手 こずえ、松下 美佐

a) 概要

無機・有機・金属などの異相界面ナノ構造制御技術を駆使し、電子機器分野を主とした鉛フリーはんだ技術、導電性接着剤技術、ナノ粒子インクを用いた粒子 Printed Electronics 技術など環境調和したファインな配線接続技術開発とこれらを支える新たな学際領域開拓、複合化技術を用いた金属基・金属間化合物基複合材料開発などを通し、産業界へ積極的な寄与を行っている。

b) 成果

・高温鉛はんだ代替技術開発

携帯電話などの携帯機器は、エレクトロニクスの最先端の集積化技術を実現するものだが、その微細接合部制御が、新たなエレクトロニクス機器開発の最重要課題になっている。材料は、低温実装と高温はんだ代替を担う導電性接着剤が注目を集めている。本研究では、半導体の内部接続には欠かせない高温鉛はんだの代替技術開発のため、ナノレベルの組織・機能解析および制御に基づく基礎技術開発し、協力企業・大学連合との連携で、新産業技術として高温鉛はんだ代替技術の世界デファクト形成を目指している。

・Printed Electronicsのための常温焼結用Agナノ粒子ペーストの開発

ナノテクノロジーの粋を集めた、ナノ粒子インクとインクジェット印刷が、新しいエレクトロニクス機器造りの世界を開こうとしている。それが、Printed Electronicsである。金属ナノ粒子ペーストの中で最も有望なAgペーストの場合、現状では、150°C程度の焼結処理が必要であり、基材に不良が起こる可能性が高いため、低温焼結技術が望まれている。今年度は、常温で溶剤の蒸発と共に焼結が進行する凝集ナノ粒子ペースト (Ag) を開発した。常温乾燥後TEM観察した結果、Agナノ粒子の常温焼結過程が確認できた。

・超フレキシブル配線を用いたソフトヒューマンインターフェースの開発

本研究室では、エラストマー系導電性接着剤を応用することで 100%以上の引張歪を与えても断線しない超フレキシブル配線を開発した。その配線技術を応用して、ヒューマノイドロボットおよび関連機器のための伸縮可能な触覚センサシートを開発するとともに、静電気の効果を利用した新規の接触センサの開発に成功した。さらに、これらのセンサシステムを自己組織化ネットワークシステムに接続することで、フェールセーフな情報処理システムの実証に成功した。

[原著論文]

Physical Factors Determining Thermal Conductivities of Isotropic Conductive Adhesives, M. Inoue, H. Muta, T. Maekawa, S. Yamanaka, K. Suganuma: J. Electron. Mater., 38 (2009) 430-437.

Interfacial Reaction and Die Attach Properties of Zn-Sn High-Temperature Solders, S.J. Kim, K.S. Kim, S.S. Kim,

K. Suganuma: J. Electron. Mater., 38 (2009) 266-272.

High-temperature lead-free solders: properties and possibilities, K. Suganuma, S.J. Kim, K.S. Kim: JOM, 61 (2009) 64-71.

Synthesis and nanostructure of boron nitride nanotubes grown from iron-evaporated boron, T. Oku, N. Koi, K. Suganuma: Diamond and Related Materials, 17 (2008) 1805-1807.

Room temperature sintering of Ag nanoparticles by drying solvent, D. Wakuda, K.S. Kim, K. Suganuma: Scripta Materialia, 59 (2008) 649-652.

Structures and purification of boron nitride nanotubes synthesized from boron-based powders with iron particles, N. Koi, T. Oku, M. Inoue, K. Suganuma: J. Materials Science, 43 (2008) 2955-2961.

Characteristics of Zn-Al-Cu Alloys for High Temperature Solder Application, S.J. Kim, K.S. Kim, S.S. Kim, C.Y. Kang, K. Suganuma: Materials Transactions, 49 (2008) 1531-1536.

Variations in polymeric structure of ferroelectric poly(vinylidene fluoride) films during annealing at various temperatures, M. Inoue, Y. Tada, K. Suganuma, H. Ishiguro: J. Applied Polymer Science, 111 (2008) 2837-2843.

Joint Strength and Microstructure for Sn-Ag-(Cu) Soldering on an Electroless Ni-Au Surface Finish by Using a Flux Containing a Cu Compound, S. Kumamoto, H. Sakurai, Y. Kukimoto, K. Suganuma: J. Electron. Mater., 37 (2008) 806-814.

Electronic and optical properties of boron nitride nanotubes, T. Oku, N. Koi, K. Suganuma: J. Physics and Chemistry of Solids, 69 (2008) 1228-1231.

Temperature dependence of electrical and thermal conductivities of an epoxy-based isotropic conductive adhesive, M. Inoue, H. Muta, T. Maekawa, S. Yamanaka, K. Suganuma: J. Electron. Mater., 37 (2008) 462-468.

[解説、総説]

インクジェット技術の最新動向、菅沼 克昭、電子材料、28[2] (2009) 67-73

エレクトロニクス分野の導電性接着剤技術の動向、菅沼 克昭、進藤 大輔、大塚 寛治、苅谷 義治、エレクトロニクス実装学会誌、12[1] (2009) 79-85

Printed Electronics の最先端技術動向、菅沼 克昭、コンバーテック、36[7] (2008) 29-32

インクジェット技術による製造革新、菅沼 克昭、和久田 大介、金 権銖、月刊ディスプレイ、14[6] (2008) 41-47

[著書]

「2009 プリントブルエレクトロニクス (分筆)」、第2編第16章 金属ナノ粒子インクのプリントブルエレクトロニクスへの応用、菅沼 克昭、和久田 大介、金 権銖、電子ジャーナル (株)、(2008) 89-95

[特許]

「物体検知センサ」菅沼 克昭、多田 泰徳、石黒 浩、井上 雅博、河崎 俊実、川人 康、特開 2008-190902

「 β -ケトカルボン酸銀から得られる金属銀を含む銀ペーストおよびその製造方法」山口 俊郎、畑村 真理子、菅沼 克昭、特開 2008-159535

[国際会議]

Interfacial Reaction and Thermal Cycling Reliability of Zn-Sn High Temperature Lead-Free Solders, *S.J. Kim, K.S. Kim, G. Izuta, K. Suganuma: 138th TMS Annual Meeting & Exhibition, San Francisco, CA, USA, Feb.15-19, 2009.

Degradation Mechanism of Conductive Adhesive/Sn Interface under High Humidity, *S.S. Kim, K.S. Kim, S.J. Kim, K. Suganuma: 41st Annual International Symposium on Microelectronics (IMAPS 2008), Rhode Island Convention Center, Providence, Rhode Island USA, Nov. 2-6, 2008.

Reliability of die attached AlN-DBC module using Zn-Sn high temperature lead-free solders, *S.J. Kim, K.S. Kim, G. Izuta, K. Suganuma: 2nd Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC 2008), Greenwich, London, UK, September 1-4, 2008.

Degradation Mechanism of Ag-Epoxy Conductive Adhesive Joints by Heat and Humidity Exposure, *S.S. Kim, K.S. Kim, K. Suganuma, H. Tanaka: 2nd Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC 2008), Greenwich, London, UK, September 1-4, 2008.

Room Temperature Sintering Mechanism of Ag Nanoparticle Paste, *D. Wakuda, C.J. Kim, K.S. Kim, K. Suganuma: 2nd Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC 2008), Greenwich, London, UK, September 1-4, 2008.

Room Temperature Sintering of Ag Nano-scale particles with drying of the solvent, *D. Wakuda, K.S. Kim, K. Suganuma: 7th IEEE Conference on Polymers & Adhesives in Microelectronics & Photonics, Germany, August 17-20, 2008.

Developing the Stencil Printing Process for 01005 Lead-Free Assemblies, *Y.W. Lee, K.S. Kim, K. Suganuma, J.H. Kim: 2008 International Conference on Electronic Packaging Technology & High Density Packaging (ICEPT-HDP 2008), Shanghai, China, July 28-31, 2008.

Large-scale synthesis of micrometer-scale single-crystal gold nanosheets by polyol process, *J. Jiu, K. Suganuma, K.S. Kim, T. Nemoto, T. Ogawa, S. Isoda: 2008 International Materials Research Conference, Chongqing, China, June 9-12, 2008.

Electrical and thermal properties of electrically conductive adhesives using a heat-resistant epoxy binder, *M. Inoue, J. Liu: 2nd Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC 2008), Greenwich, London, UK, September 1-4, 2008.

Recent progress of thermal interface materials, *J. Liu, T. Wang, B. Carlberg, M. Inoue: 2nd Electronics System-Integration Technology Conference (ESTC 2008), Greenwich, London, UK, September 1-4, 2008.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

菅沼 克昭	TMS Annual Meeting (組織委員)
菅沼 克昭	Electronic Components and Technology Conference (ECTC) (組織委員)

[国内学会]

エレクトロニクス実装学会	5 件
日本金属学会	1 件
日本熱物性学会	1 件

[取得学位]

修士 (工学)	
姜 玟	微細接続部の衝撃特性試験方法の検討及び高温鉛はんだ代替材料への適用
博士 (工学)	
金 声俊	Joining properties and joint reliability of Si die-attached joint with Zn-Sn based high temperature lead-free solders
隈元 聖史	強度向上フラックスの Ni-P/Au 電極はんだ接合メカニズム解析

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (A)		
菅沼 克昭	独立分散合金ナノ粒子の合成とナノペースト配線技術の基盤形成	4,940

[受託研究]

菅沼 克昭	(社) 電子情報技術産業協会	導電性接着剤実装技術に関する標準化調査	2,298
菅沼 克昭	(独) 新エネルギー・産業技術総合開発機構	温排水パイプに湾曲して装着可能な熱発電モジュールの研究開発	5,937
菅沼 克昭	日本電気(株)	導電性接着剤接続技術	1,050

[奨学寄附金]

菅沼 克昭	千住金属工業(株)	4,000
菅沼 克昭	トッパンフォームズ(株)	2,000
菅沼 克昭	昭和電工(株)	2,000
菅沼 克昭	東レエンジニアリング(株)	1,000
菅沼 克昭	上村工業(株)	1,000
菅沼 克昭	日油(株)	900
菅沼 克昭	バンドー化学(株)	500
菅沼 克昭	ローム(株)	500
金 榎鉢	銅及び銅合金技術研究会	300

[共同研究]

菅沼 克昭	三菱化学(株)	絶縁性と高熱伝導を有する 無機ナノ粒子材料の開発	10,143
菅沼 克昭	三菱電機(株)	ポスト Sn-Ag-Cu 鉛フリーはんだ 材料の研究	4,000
菅沼 克昭	帝人(株)	塗布型セラミックナノ粒子基板の開発	850
菅沼 克昭	(株)デンソー	電子部品における導電性接着剤接合 メカニズム研究	4,500
菅沼 克昭	日本アビオニクス(株)	純すずウイスカの成長性に関わる 基礎評価	1,500

計算機ナノマテリアルデザイン分野

教授（兼任）	吉田 博
准教授	白井 光雲
助教	佐藤 和則
博士研究員	Dinh Van An、濱田 幾太郎、柳澤 将
大学院学生	木崎 栄年、豊田 雅之、福島 鉄也、林田 英樹、豊田 健治、出倉 春彦、 原田 邦彦、江藤 基比古、中野 洋輔、山口 宏信、魚住 昭文、實宝 秀幸、
学部学生	寺谷 祐樹、富永 隆介
事務補佐員	浅田 美香、伊藤 僚子

a) 概要

計算機ナノマテリアルデザイン分野では、従来のバルクでは見られないような様々な物性が出現するナノ構造物質の性質を、理論的手法を用いて解明する。用いる手法は密度汎関数理論に基づく第一原理計算であり、あらゆる経験的パラメータを排除し原子番号のみの入力で行う。さらに、実験的に得られたナノ構造の解明だけでなく、新規な機能を持つ新たなナノ構造物質を理論的に設計し、ナノ物質探索をリードしていく。

また、このようなナノ領域現象の解明のためには従来の第一原理計算の発展・拡張が必須である。現在の第一原理計算の原理、密度汎関数理論の対象は基底状態に限られるが、実験的に多くの現象は励起状態に関係する。そのため、その重要性に鑑み、その方法論の発展をも行う。

b) 成果

・擬ポテンシャル法による電子状態計算コード「Osaka2002_nano」の開発改良

擬ポテンシャル法による電子状態の計算プログラム「Osaka2002_nano」を公開しているが、その拡充、発展を行っている。特に今年度の成果は、大規模計算を目指し、一部のスーパーコンピュータ向けに並列化を引き続き行ったこと。また、結晶の動的な性質を解明するためのフォノン計算を従来のゾーン中心だけのものからゾーン全体へのフォノン分散を行えるように拡張した。輸送現象を扱うための第一歩として、フェルミ面の計算を改良した。

具体的応用として、

・二十面体ベースの半導体ホウ素系材料における超伝導マテリアルデザイン

ホウ素系物質は二十面体構造を持った半導体で非常に多くの結晶多形がある。この系は高压下での超伝導転移で注目されている。この中で α 相は高い超伝導が期待されるものであるが、これまで良質の結晶を作ることが困難とされていた。本研究では、理論からホウ素の相図を作ることで、 α 相を液相から直接成長させる経路を発見した。さらに高压を利用したドーピング方法を提案して、それがLiおよびHについて有効であることを示した。

・高ドーブによる半導体の超伝導化とマテリアルデザイン

半導体は通常、超伝導を示さないが、最近母体に高ドーブすることにより、超伝導を示すことが分かって大きな話題となっている。特にダイヤモンドは強い電子—格子相互作用で高い T_c が期待されている。これにBを最初に高ドーブし超伝導を発見したのはEkimovで、彼らはそれを高温高压法で実現している。しかしそのメカニズムについてはほとんど議論されていない。第一原理計算による全エネルギー計算を拡張し有限温度、有限圧力下での化学ポテンシャルを計算することで、子の成長メカニズムを解明した。そしてそれに基づき更なる高ドーブを可能とする方法のデザインを行った。

・ Si中のCu不純物複合体の解明と発光素子デザイン

Si中のCuは非常に高速の拡散を行うが、そればかりか一部は複合体を作り、高効率発光センターとなることが知られている。しかしその複合体の実態は、この20年間Cuペアという誤った理解がなされていた。極く最近、実験的にそれはCu₄であることが示唆された。その構造を理論的に解明し、かつその形成過程に重要な示唆を与えた。その複合体形成の核には置換位置のCuが関与していることを示した。また重要な寄与として、この複合体のつくる複雑なフォトルミネッセンスの同位体分裂を初めて理論的に解明したことである。

・ Si中の格子空孔の物理とその結晶成長制御デザイン

Si中の格子空孔はヤーン・テラー歪みを引き起こすことは昔から知られていた。最近それを超音波測定により高精度に検出することができる可能性が出てきた。それが可能になると、リアルタイムでの空孔濃度測定が可能となり、より高度な結晶成長制御を目指す上で大きなインパクトを持つ。問題はこの超音波測定による、弾性定数の低温におけるソフト化という現象の解釈である。これに関しては現在、百家争鳴の議論が呼び起こされているが、我々は原子のダイナミクスという点からこれを研究し、従来、いろいろ矛盾のあった重要な問題点をいくつかを解決できた。重要な事は、従来空孔がヤーン・テラー歪みを起していることに付け加えて、対称中心をぐるぐる回転していることである。

・ 希薄磁性半導体中への格子間不純物同時ドーピング法のデザイン

希薄磁性半導体はその溶解度ギャップのために熱平衡状態では相分離を起こすため結晶成長にはMBE等の非平衡結晶成長法が採用される。ワイドギャップ半導体を母体とする希薄磁性半導体ではスピノダル分解を起こす傾向が特に強く、高い T_C を実現するために必要な濃度まで磁性イオンを母体半導体に均一に添加することは非常に難しい。今までに、希薄磁性半導体におけるスピノダル分解を抑制し、高濃度の遷移金属不純物添加により高いキュリー温度を実現する方法として、ドナー不純物の同時ドーピング法のデザインについて提案を行ってきた。例えば、GaMnAsやGaMnNの作成時にOまたはSi等のドナー不純物を同時添加することで、混合エネルギー ΔE を調整できることを示し、スピノダル分解の抑制と均一な固溶の可能性を第一原理から示した。しかし、同時添加したドーパントが、磁性イオンが誘起したホール状態を補償してしまうため磁性イオンを高濃度にドーブしたにもかかわらず、 T_C が逆に低下してしまうという問題点があった。

本年度はこの問題点を解決するため、格子間不純物を用いた同時ドーピング法をデザインした。KKR-CPA 計算パッケージ MACHIKANEYAMA2002 コードを用いて混合エネルギーを計算した結果、格子間不純物としてLi, Be, B, Na, Mg, K, Ca, Cu, Agなどを同時添加すると混合エネルギーが下がることがしめされ、同時ドーピングによりMnの溶解度を上げ高濃度の(Ga, Mn)Asを作成出来るようになる。

しかし、格子間不純物もやはり T_C を下げてしまうので、格子間不純物の磁性半導体中での拡散をモンテカルロ法によりシミュレートし、結晶成長後のアニーリングでそれらを取り除くプロセスデザインが必要である。まず、シミュレーションに必要なパラメータとして、拡散の活性化エネルギー、MnとLiとの間の束縛エネルギーを、ノルム保存・ウルトラソフト擬ポテンシャル、平面波基底を用いた第一原理計算法(STATE-SENRI)によって見積もり、これらのパラメータを使い、動的モンテカルロシミュレーションおよび簡単なモデル計算からLiの(Ga, Mn)As中での拡散係数を計算した。Liの場合は、Mnとの引力がそれほど大きくなく、現実的な温度((Ga, Mn)As中でMnAsが析出する温度 580°C以下)とアニーリング時間で薄膜表面まで拡散できることが示された。この結果から、GaAsにMnとLiを同時添加することで、Mnの溶解度を増大させ、さらに結晶成長後のアニーリングで T_C を上昇させることができるというマテリアルデザインが得られた。

・ MgO ベースの遷移金属を含まない強磁性体のデザイン

半導体スピントロニクスデバイスのためのスピン偏極源として、室温でも高いスピン偏極度を保つハーフメタリック物質が必要とされている。また、近年では大きなバンドギャップを持った酸化物等で格子欠陥や典型元素不純物が誘起する強磁性が理論計算や実験により示唆され、その真偽に興味を持たれ検証が行われている。我々は酸化物ベースのハーフメタリック材料として、磁性元素Ni, Coを添加した

MgO や、N を添加した MgO, CaO, SrO, BaO のように磁性元素を含まない強磁性体のデザインを第一原理計算とモンテカルロシミュレーションを用いそれらの系の電子状態とキュリー温度を評価した。

KKR-CPA法(MACHIKANEYAMA2002)を用いて電子状態と磁性原子間の交換相互作用を計算した。キュリー温度はモンテカルロシミュレーション(MCS)により評価した。窒素ドープMgO, CaO, SrO, BaOは磁性金属を含まないにもかかわらず強磁性状態が安定となる。このとき、スピン偏極の大部分はN原子が担っている。ハーフメタリックな状態密度を示し、スピン偏極源材料として有望な材料であると期待されるが、高い T_C のためには高濃度添加が必要であり、そのための同時ドーピング法の設計やスピノダル分解の制御が重要である。

・ IV 族半導体ベース希薄磁性半導体のマテリアルデザイン

これまで特によく調べられている希薄磁性半導体材料は III-V 族や II-VI 族化合物半導体を母体とするものであるが、既存の半導体エレクトロニクスとの整合性とその環境調和性の良さから IV 族半導体ベースのスピンエレクトロニクス材料の開発は非常に重要になると考えられる。Si, Ge ベース環境調和磁性半導体として Fe, Mn を添加した Si, Ge の磁性を KKR-CPA (MACHIKANEYAMA2002)を用いて系統的に調べた。その結果 Mn 添加 Ge で、Mn は最近接配置を避け Ge 中にドーピングされることがわかり、そのとき強磁性が安定となることが示された。また、Ge 中で Mn 間には引力的な原子対相互作用が働いていることが計算で示され、最近 Mn 添加 Ge において観測されたナノコラムの自己形成と矛盾しない結果を得た。

[原著論文]

Calculation of Fermi surface and its applicaion to Li-doped α -boron, H. Dekura, K. Shirai, A. Yanase: J. Comput. And Theor. Nanoscience, (2008) (in press).

The stable site and diffusion of impurity Cu in Si, H. Yamaguchi, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: J. Comput. And Theor. Nanoscience, (2008) (in press).

A new structure of Cu complex in Si, K. Shirai, H. Yamaguchi, A. Yanase, H. Katayama-Yoshida: J. Phys.: Condens. Matter, 21 (2009) 064249(7pages).

Utilization of high pressure for synthesizing superconducting semiconductors: -analysis of Ekimov's method-, K. Shirai, H. Dekura: Phys. Status Solidi B, 246 (2009) 673-678.

Computational nano-materials design for the wide band-gap and high- T_c semiconductor spintronics, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki and V. A. Dinh: Semiconductors and Semimetals, 82 (2008) 433-454.

Materials Design of CuAlO₂-based Dilute magnetic semiconductors by First-principles calculations and Monte Carlo Simulations, H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida: Jpn. J. Appl. Phys., 47 (2008) 6488-6495.

Computational nano-materials design for II-VI compound semiconductor-based spintronics, H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, V. A. Dinh and P. H. Dederichs: J. Korean Phys. Soc., 53 (2008) 1-12.

New high- T_c half-Heusler ferromagnets NiMnZ (Z = Si, P, Ge, As), V. A. Dinh, K. Sato and H. Katayama-Yoshida: J. Phys. Soc. Jpn., 77 (2008) 014705(6pages).

[解説、総説]

「赤外光励起による半導体中の不純物拡散制御」、白井光雲、「光技術コンタクト」 46 (2008) pp. 22-29.
光技術コンタクト特集号、(財) 日本オプトメカトロニクス協会

[著書]

「高圧における固体ホウ素の性質」、(第16回ホウ素・ホウ化物および関連物質国際会議組織委員会編、
「ホウ素・ホウ化物および関連物質の基礎と応用」) 白井光雲、(シーエムシー出版、2008)、pp. 34-48

[国際会議]

A new structure of Cu complex in Si (poster), *H. Yamaguchi, K. Shirai, A. Yanase, H. Katayama-Yoshida:
International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, May 31-June 3, 2008, Tokyo, Japan.

Effect of vacancy on the elastic properties of Si (poster), *J. Ishisada, K. Shirai, A. Yanase: International
Conference on Quantum Simulation and Design 2008, May 31-June 3, 2008, Tokyo, Japan.

Utilization of high pressure for synthesizing superconductivity in semiconductors: -analysis of Ekimov's method-
(poster), *K. Shirai, H. Dekura: International Workshop on Superconductivity in Diamond and Related Materials
(IWSDM2008), July 7-9, 2008, Tsukuba, Japan.

Cu complex in silicon and its photoluminescence, *K. Shirai, H. Yamaguchi, K. Matsukawa, A. Yanase, S.
Emura: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 27-Aug 1, 2008, Rio de Janeiro,
Brazil.

An investigation of material design for gettering (poster), K. Matsukawa, *K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: 29th
International Conference on the Physics of Semiconductors, July 27-Aug 1, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

Utilization of high pressure for synthesizing superconducting semiconductors (invited), *K. Shirai, H. Dekura, A.
Yanase: 13th High Pressure Semiconductor Physics -HPSP13, July 22-25, 2008, Fortaleza, Ceara, Brazil.

A new doping method to semiconducting boron for superconductivity application, *K. Shirai, H. Dekura, A.
Masago: 16th International Symposium on Boron, Borides and Related Materials, Sept. 7-12 2008, Matsue, Japan.

Metalization of α -boron for superconductive material (poster), *H. Dekura, K. Shirai, A. Yanase: 16th
International Symposium on Boron, Borides and Related Materials, Sept. 7-12 2008, Matsue, Japan.

Possibility of defect in α -boron (poster), *H. Dekura, K. Shirai, A. Yanase: 16th International Symposium on
Boron, Borides and Related Materials, Sept. 7-12 2008, Matsue, Japan.

An investigation of material design for gettering (poster), *K. Matsukawa, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida:
Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science (PRIME); The Joint International Meeting of
214th Meeting of the Electrochemical Society and 2008 Fall Meeting of the Electrochemical of Japan, Oct12-17,
2008, Hawaii.

Metallization of electron-phonon coupling in icosahedral α -B₁₂ and Li-doped B₁₂ (poster), *H. Dekura, N. Vast, E.
Betranhandy, K. Shirai, V. Trinite: 14th International Workshop on Computational Physics and Materials
Science: Total Energy and Force Methods, 8-10 Jan 2009, The Abdus Salam International Centre for Theoretical
Physics, Trieste, Italy.

MD simulation of phonon decay processes (poster), *K. Shirai, H. Dekura, J. Ishisada: 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, June 3-7, 2008, Tokyo.

Improvement of the gettering efficiency of Cu by BO Complexes (poster), *K. Shirai, K. Matukawa, N. Yamaguchi, H. Katayama-Yoshida: 11th Sanken, 6th Nanotechnology Center and 1st MSTEC International Symposium, Feb. 4-5 2008, Awaji Yumebutai International Conference Center.

The theoretical study of elemental solid boron under high pressure (poster), *H. Dekura, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: 11th Sanken, 6th Nanotechnology Center and 1st MSTEC International Symposium, Feb. 4-5 2008, Awaji Yumebutai International Conference Center.

The stable site and electronic states of Copper in Silicon (poster), *H. Yamaguchi, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: 11th Sanken, 6th Nanotechnology Center and 1st MSTEC International Symposium, Feb. 4-5 2008, Awaji Yumebutai International Conference Center.

The effects of monovacancy on the elastic properties of Si (poster), *J. Ishisada, K. Shirai, H. Katayama-Yoshida: 11th Sanken, 6th Nanotechnology Center and 1st MSTEC International Symposium, Feb. 4-5 2008, Awaji Yumebutai International Conference Center.

Electronic structure and pressure-induced transformation of graphite (poster), *N. Nakae, K. Shirai: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium Sep.29-Oct.1 2008, Icho Kaikan, Osaka Univ.

Imperfection of α -B (poster), *H. Dekura, K. Shirai, A. Yanase: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium Sep.29-Oct.1 2008, Icho Kaikan, Osaka Univ.

Molecular Dynamic Study of Single Lattice Vacancy in Si (poster), *J. Ishida, K. Shirai, A. Yanase: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium Sep.29-Oct.1 2008, Icho Kaikan, Osaka Univ.

Electronic study of B-C system for superconductivity application (poster), *N. Nakae, K. Shirai, A. Yanase: The 12th SANKEN International Symposium (Joint Meeting of the 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium, The 2nd SANKEN MSTeC Symposium, The 1st SANKEN Alliance Symposium) Jan.22 2009, Convention Center, Osaka Univ.

Superconductivity Research on Boron Solids (poster), *K. Shirai, H. Dekura, A. Yanase: The 12th SANKEN International Symposium (Joint Meeting of the 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium, The 2nd SANKEN MSTeC Symposium, The 1st SANKEN Alliance Symposium) Jan. 22 2009, Convention Center, Osaka Univ.

Molecular Dynamic Study of Single Lattice Vacancy in Si (poster), *J. Ishisada, K. Shirai: The 12th SANKEN International Symposium (Joint Meeting of the 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium, The 2nd SANKEN MSTeC Symposium, The 1st SANKEN Alliance Symposium) Jan. 22 2009, Convention Center, Osaka Univ.

First-Principles study on Electronic Structure of Co-doped TiO₂ (rutile) within Self-Interaction-Corrected LDA (poster), *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

A theoretical study of codoping with Li interstitials in Mn-doped GaAs (poster), *Lars Bergqvist, Kazunori Sato, Peter Heinz Dederichs and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and

Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-doping method (poster), *T. Fukushima, K. Sato and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

First principle study on the half-metallic ferromagnetism in half-Heusler alloys XMnSi (poster), *Van An Dinh, Kazunori Sato, and Hiroshi Katayama-Yoshida: International Conference on Quantum Simulation and Design 2008, June 1, 2008, Tokyo, Japan.

Design of dilute magnetic semiconductors with room temperature ferromagnetism by controlling spinodal decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, H. Katayama-Yoshida: The 1st International Conference of the Grand Challenge to Next-Generation Integrated Nanoscience, June 4, 2008, Tokyo, Japan.

Design of Dilute Magnetic Semiconductors with room Temperature Ferromagnetism by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K.Sato, T. Fukushima, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

First Principle Prediction of Half-Metallicity and Ferromagnetism above room Temperature in Half-Heusler Alloys (poster), *V.A. Dinh, K. Sato, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

Design of Colossal Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-Doping Method (poster), *T. Fukushima, K. Sato, and H.K.-Yoshida: 29th International Conference on the Physics of Semiconductors, July 29, 2008, Rio de Janeiro, Brazil.

Design of High Solubility of Magnetic Impurities for Semiconductor Spintronics by Co-doping Method (poster), *T. Fukushima, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Design of Dilute Magnetic Semiconductors by Controlling Spinodal Decomposition (poster), *K. Sato, T. Fukushima, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

First Principle Study of Spinodal Decomposition Thermodynamics in Half-Heusler Alloys (poster), *V. A. Dinh, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Ab-initio Electronic Structure Calculations of (Ti,Co)O₂ Within Self-interaction-corrected LDA (poster), *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida: Fifth International Conference on Physics and Applications of Spin-related Phenomena in Semiconductors, Aug 4, 2008, Iguacu, Brazil.

Computational Nano-materials Design for Semiconductor Nano-Spintronics (invited), *H.Katayama-Yoshida: Joint European Magnetic Symposia, Sep 19, 2008, Trinity College Dublin, Ireland.

First-Principles Calculations of Electronic Structure on(Ti,Co)O within Self-Interaction-Corrected LDA, *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida: 2nd International Symposium on Transparent Conductive Oxides, Oct 22, 2008, Crete .Greece.

Control of spinodal decomposition in dilute magnetic semiconductors and computational materials design for semiconductor spintronics (invited), *K. Sato: Computational Magnetism and Spintronics International Workshop, Nov 7, 2008, Dresden. Germany.

First-Principles Calculations of Electronic Structure on(Ti,Co)O within Self-Interaction-Corrected LDA, *H. Kizaki, M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida: 2nd International Symposium on Transparent Conductive Oxides, Oct 22, 2008, Crete. Greece.

Control of spinodal decomposition in dilute magnetic semiconductors and computational materials design for semiconductor spintronics (invited), *K. Sato: Computational Magnetism and Spintronics International Workshop, Nov 7, 2008, Dresden. Germany.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

白井 光雲 第16回ホウ素およびその化合物に関する国際会議（組織委員）

[国内学会]

日本物理学会	12 件
応用物理学会	4 件

[取得学位]

修士（工学）	
石定 惇	シリコン中の単一原子空孔がもたらす弾性的性質への影響の理論的考察
原田 邦彦	第一原理計算による環境調和性スピントロニクスのマテリアルデザイン
修士（理学）	
藤井 将	同時ドーピングによる高温強磁性半導体のマテリアルデザイン

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
特定領域研究		
佐藤 和則	計算機ナノマテリアルデザインエンジンの開発・応用	10,800
白井 光雲	二十面体構造のホウ素系物質による超伝導探索	1,300
若手研究 (B)		
佐藤 和則	非局所 CPA 法によるスピントロニクス材料の電子輸送特性の第一原理計算	1,690

[受託研究]

白井 光雲	科学技術振興機構 産学共同イノベーション 化事業・顕在化ステージ	半導体中の遷移金属不純物の新ゲ ッタリング方法の理論的開発とそ の実証研究	18,000
-------	--	---	--------

[奨学寄附金]

出倉 春彦	村田財団	海外派遣助成金	350
-------	------	---------	-----

[共同研究]

白井 光雲	日仏共同研究 (N. Vast, Ecole Polytech, Paris)	ホウ素系物質による超伝導探索	900
-------	---	----------------	-----

白井 光雲	〔株〕ルネサステクノロジ	半導体中の遷移金属不純物の新ゲッターリング方法の理論的開発とその実証研究	0
-------	--------------	--------------------------------------	---

白井 光雲	三菱電機株式会社	第一原理計算シミュレーション方法を用いた GaAs 半導体基板上の被膜特性に関する研究	0
-------	----------	---	---

ナノバイオ知能システム分野

教授（兼任） 溝口 理一郎
助教 古崎 晃司（平成20年8月1日より准教授）

a) 概要

ナノ・バイオ知的支援システムの開発、ナノ・バイオテクノロジーに関わる膨大なデータからのデータマイニング・知識発見、ナノ・バイオテクノロジー知識の構造化、オントロジー工学などの知能システム科学とナノ・バイオテクノロジーとを融合した研究の中で、特にナノテクノロジー知識の構造化に重点を置いて研究を行っている。

ナノテクノロジーに関する研究は多種多様な領域にまたがり、かつ、これらの領域は互いに密接に絡み合っている。このため、知識を異なる領域間で共有することができれば、互いの領域のさらなる発展の促進に貢献することが期待される。各領域に共通であるべきナノテク世界を構成する基盤概念を抽出し、構造化することに貢献するものが「オントロジー」である。本研究では、オントロジー工学の手法を用いて機能概念を組織化して、一般社会が要求する材料の機能概念を整理し、ナノテク基盤概念との関係を確立する。更に、構造化された知識を用いたナノテク材料開発発想支援システムの設計・開発を行う。

また、これらの研究より得られた知見に基づき、医療、ゲノム、サステナビリティ学など多彩な分野におけるオントロジーの構築および、その応用システムの開発も行っている。

b) 成果

・オントロジー工学に基づくナノ・バイオテクノロジー知的支援システムの開発

化学工学の領域を含む複数の領域を対象にして、全体に共通する基盤概念を構造化するために必要な共通オントロジーを開発するに先立ち、教科書や関連論文をから抽出した基本的な用語をプロセス、構造、機能、材料、応用の5つのカテゴリーに分類し、予備的なオントロジー（ナノテクインデックスオントロジー）を構築した。さらに、このナノテクインデックスオントロジーに基づいて、ナノテクノロジーに関する知識を記述したコンテンツを管理するシステムを開発した。今年度は、機能と性質に関するオントロジー的考察に基づいて、洗練したナノテクノロジーインデックスオントロジーを用いた検索システムを試作し、その有用性を確認した。

また、オントロジー工学に基づく知的支援システム開発技術を応用として、ライフサイエンス分野のデータベースを高度化する手法の基本設計を行った。

・臨床医学オントロジーの開発

近年、医療現場の高度情報化に伴い、多量に蓄積された多種多様な電子情報の多目的な高度情報処理に関心が払われつつある。これを実現にするためには、医療データに含まれる語彙の標準化やコード化だけでなく、それら用語の概念レベルの定義と、各概念間の意味的な関係性を含む医療知識の体系化が必要とされている。このような背景のもと、情報や知識を蓄積・共有・創発するための知識基盤の基盤となる臨床医療オントロジーの構築が進められている。このような背景のもと、我々は臨床医療オントロジーの構築に向けて、オントロジー工学の基礎理論に基づいた考察を進めてきた。

本研究では臨床医学オントロジー構築に向けて、特に重要な基盤知識の1つである疾患概念及び疾患知識の記述に必要となる人体構造知識に関して基礎的考察を行い、これらの上位概念を中心とした臨床医学オントロジーを構築した。本オントロジーの特徴は、疾患および人体構造の本質を捉えた汎用的な概念を導入し、それらの概念をコンテキストに応じて適宜特殊化して各疾患や人体構造を定義している点にある。これにより、複雑な医療知識の一貫性を持った体系化が可能となり、さらに、1つのオント

ロジー必要に応じて様々な視点から見た知識の体系を動的に生成することができる。今年度は、疾患および人体構造の上位概念構造を整備すると共に、構築した臨床医学オントロジーに基づいて医療知識を様々な視点から提示する「医療知識ナビゲーター」の開発を行った。

・オントロジー構築・利用環境の開発

オントロジー工学に基づくナノテク知識の構造化を進める為の基盤技術として、オントロジーの構築から利用に至る一連の過程を支援する計算機システム「法造」の開発を進めてきた。「法造」とはオントロジー (= “法”) を構築する (= “造”) 為の計算機環境で、以下の3つのシステムから構成される。オントロジーエディタ

オントロジーの基礎理論に関する考察に基づいて設計がなされた記述環境を提供し、オントロジーをグラフィカルに表示・編集する機能を持つ。概念間の関係はノード・リンクを用いたグラフ状に表現され、ユーザはマウス操作で容易にオントロジーの表示・編集を行うことができる。本研究で開発したオントロジーエディタは、専用の Web サイト (<http://www.hozo.jp/>) でフリーソフトウェアとして公開しており、国内外の多くのユーザに使用されている。

概念工房

オントロジー構築方法 AFM (Activity-First Method) に基づき、自然言語で書かれたドキュメントからオントロジーで記述される概念の抽出や組織化を支援するシステムで、ガイドラインに従いオントロジーの全体像を構築することができる。

オントロジーサーバー

オントロジーやモデルを管理するために必要な様々な機能を持ち、他のシステムとはネットワークを介して接続されている。構築されたオントロジーやモデルは、ネットワーク経由の参照や、LISP、XML など汎用形式での出力・組込みを通して、外部の知識システムから利用される。

また本システムで構築したオントロジーや知識モデルを処理する基盤ソフトウェア (API) の開発も行っており、先に述べたコンテンツ管理システムおよび設計支援システムは、この API を用いて開発された。

今年度は、法造で構築したオントロジー用の推論エンジンを開発し、それを用いたオントロジー整合性検証機能、編集支援機能、詳細検索機能といった「法造」の機能拡張を実施した。また、インスタンス管理問題におけるロール概念理論と identity の考察、is-a/part-of 関係の混同問題の考察、オントロジーの視点管理方法の検討など、今後のシステム拡張に向けた理論的検討を開始した。

[原著論文]

Toward Knowledge Structuring of Sustainability Science Based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takanori Matsui and Riichiro Mizoguchi: Sustainability Science, 4 (1) (2009) 99-116.

[国際会議]

Semantics of the Integrated BioMedical Database Project -A Japanese National Project-, Jun Nakaya, Saburo Sakota, Riichiro Mizoguchi, Kouji Kozaki, Kaei Hiroi, Keisuke Ido, Michio Kimura, Hiroshi Tanaka: 9th International HL7 Interoperability Conference (IHIC2008), Crete, Greece, Oct.8-11, (2008).

Toward Integration of Mouse Phenotype Information, Hiroshi Masuya and Riichiro Mizoguchi: Second Interdisciplinary Ontology Meeting, Tokyo, Japan, February 28 - March 1, (2009) 35-44.

Understanding Semantic Web Applications, Kouji Kozaki, Yusuke Hayashi, Munehiko Sasajima, Shinya Tarumi and Riichiro Mizoguchi: 3rd Asian Semantic Web Conference (ASWC 2008), LNCS 5367, February 2-5, Bangkok, Thailand, (2008) 524-539.

Instance Management Problems in the Role Model of Hozo, Kouji Kozaki, Satoshi Endo and Riichiro Mizoguchi: 10th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08), LNAI 5351, December 15-19, Hanoi, Vietnam, (2008) 614-625,.

Knowledge Structuring Process of Sustainability Science based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Takanori Matsui, Keishiro Hara, Michinori Uwasu, Yohei Yamaguchi, Yugo Yamamoto, Kouji Kozaki, Osamu Saito and Riichiro Mizoguchi: 8th International Conference on Eco Balance, December 10-12, Tokyo, Japan, (2008).

Knowledge Structuring Tool for Sustainability Science Based on Ontology Engineering, Terukazu Kumazawa, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takanori Matsui and Riichiro Mizoguchi: 1st International Workshop on Intelligent Systems for Environmental (Knowledge) Engineering and EcoInformatics (i-SEEK' 09), Fukuoka, Japan, March 16-19, (2009) 1138-1143.

Knowledge Structuring and an Exploration System for Global Sustainability and its Application to the Biofuel Issue, Osamu Saito, Kouji Kozaki, Takeru Hirota, Riichiro Mizoguchi: Climate Change: Global Risks, Challenges and Decisions, Copenhagen, Denmark, March 10-12, (2009).

HOZO: An ontology building environment (poster), Riichiro Mizoguchi and Kouji Kozaki: Demonstrations Program of 9th International Conference of Intelligent Tutoring Systems (ITS'08), Motreal, Canada, June 23-27, (2008) 35-36.

Development of a Conceptual Map Generation Tool for Exploring Ontologies (poster), Kouji Kozaki, Takeru Hirota and Riichiro Mizoguchi: Poster Noets of the 5th European Semantic Web Conference (ESWC 2008), Tenerife, Spain, Jun. 1-5th, (2008).

Divergent Exploration of an Ontology (poster), Takeru Hirota, Kouji Kozaki and Riichiro Mizoguchi: Poster & Demo Notes of the 7th International Semantic Web Conference (ISWC 2008), October 26-30, Karlsruhe, Germany, (2008).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

溝口理一郎	Semantic Web Science Association (副会長)
溝口理一郎	International Journal of Web Semantics (編集委員長)
溝口理一郎	International Artificial Intelligence in Education Society (Executive Committee 委員)
溝口理一郎	Asia-Pacific Society for Computers in Education (APSCE) (理事)
溝口理一郎	The 16 th International Conference on Computers in Education (ICCE2008) Conf. on AIED/ITS & Adaptive Learning (プログラム委員長)
溝口理一郎	The Tenth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI-08) (プログラム委員会副委員長)
溝口理一郎	The 3 rd European Conference on Technology Enhanced Learning (EC-TEL 2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 9 th International Conference on Intelligent Tutoring System (ITS2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 9 th International Conference on Intelligent Tutoring System (ITS2008) (パネル委員長)
溝口理一郎	The 5 th European Semantic Web Conference (ESWC2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 2008 IEEE International Conference on Information Reuse and Integration (IEEE IRI-08) (プログラム委員)

溝口理一郎	The 17 th International World Wide Web Conference Semantic Web Track (トラックプログラム委員会委員)
溝口理一郎	ODBASE 08 : Intl. Conf. on Ontologies, DataBases, and Applications of Semantics (プログラム委員)
溝口理一郎	The 3 rd Asian Semantic Web Conference (ASWC2008) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 7 th international semantic web conference (ISWC2008) (上級プログラム委員)
溝口理一郎	EKAW 2008 - 16th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management Knowledge Patterns (プログラム委員)
溝口理一郎	Formal Ontologies Meet Industry: FOMI 2008 (プログラム委員)
溝口理一郎	IIP2008 - 5th International Conference on Intelligent Information Processing (プログラム委員)
溝口理一郎	14th Collaboration Researchers' International Workshop on Groupware (プログラム委員)
溝口理一郎	The 6 th International Workshop on Applications of Semantic Web Technologies for E-Learning (SWEL'08) (組織委員長)
溝口理一郎	International Journal of Advanced Engineering Informatics (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Applied Ontology (編集委員)
溝口理一郎	Research and Practice in Technology Enhanced Learning (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Artificial Intelligence in Education (編集委員)
溝口理一郎	Frontiers in AI and Application (編集委員)
溝口理一郎	International Journal of Web Engineering and Technology (編集委員)
溝口理一郎	Asian Semantic Web Conference (運営委員長)
古崎晃司	The 3 rd Asian semantic web conference (ASWC2008) (プログラム委員)
古崎晃司	The 1 st International Workshop on Intelligent Systems for Environmental (Knowledge) Engineering and EcoInformatics (i-SEEK'09) (プログラム委員)

[国内学会]

人工知能学会	7 件
医療情報学会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円	
特定領域研究		
溝口 理一郎	人工物オントロジーに基づく製造業における技術ドキュメントの融合に関する研究	5,000
若手研究 (A)		
古崎 晃司	オントロジー工学に基づく知識の多次元的構造化アプリケーション開発プラットフォーム	3,510

[受託研究]

溝口 理一郎	東京大学	医療情報システムのための医療知識基盤データベース研究開発；意味関係モデル設計開発	15,000
溝口 理一郎	東京大学	アジア太平洋地域を中心とする持続可能な発展のためのバイオ燃料	2,401

利用戦略に関する研究；オントロ
ロジーを用いた問題の構造化と政策
立案支援ツールの開発

[共同研究]

溝口 理一郎

出光興産株式会社

ナノ材料に関わる知識基盤システ
ムの構築

3,300

ナノテクノロジートランスファー分野

客員准教授 ABDEL-MOLA Mohamed Almokhtar (平成 20 年 6 月 30 日～平成 20 年 9 月 21 日)

a) 概要

磁性量子井戸層、非磁性障壁層からなる 2 重量子井戸構造はスピントロニクスデバイス、スピン依存のフォトニクスデバイスにおける基本構造として重要である。室温強磁性半導体 GaCrN と非磁性半導体 AlGaIn からなる GaCrN/AlGaIn の 2 重量子井戸構造を分子線エピタキシ (MBE) 法により作製し、それに対して、構造的評価、磁気的评价ならびに光学的評価を行い、非磁性層を介したスピントンネリングおよびそれによる光学特性、磁化特性を明らかにすることを目的とした研究を行う。

b) 成果

MBE 法で作製した 2 重量子井戸構造の表面を、原子間力顕微鏡 (AFM) を用いて、調べたところ、原子ステップが観察され、大変平坦な表面が得られたと確認した。また、X 線回折測定からサテライトピークも確認され、良好な結晶性とヘテロ界面を持つことが分かった。SQUID を用いた磁化測定から室温強磁性を示した。更に、フォトルミネッセンス測定を行い、GaIn テンプレートの発光ピークより高エネルギー側に量子井戸層の GaGdN からの発光が観察された。このピークのエネルギーは井戸の厚さが薄くなるに従って、高エネルギー側へシフトが観測された。

ナノテクノロジー・トランスファー分野

客員教授 金 成植 (平成 20 年 11 月 27 日～平成 21 年 2 月 27 日)

a) 概要

2 色 2 光子反応によって生じる励起ラジカルは反応性が高いが、その多くは寿命が数～数十 ns と短い
ため化学反応に応用するのは困難である。そこで、2 色 2 光子反応によって完結する還元サイクルを設
計し、還元サイクルを利用した金属ナノ構造の構築を行う。

b) 成果

・ 2 色 2 光子反応による金属ナノ構造の作成

具体的にはベンゾフェノンと *N*-メチルフタルイミドをメチレン鎖で連結した分子 (**1**) を合成した。
第 1 励起光により **1** のベンゾフェノン部位を励起し、励起三重項状態からの水素引き抜き反応によりケ
チルラジカルを生じさせる。第 2 励起光によってこのケチルラジカルを励起することで励起ケチルラジ
カルが生じ、この励起ケチルラジカルがフタルイミドを還元することでカチオンと *N*-メチルフタルイミ
ドのラジカルアニオンを生じる。カチオンは脱プロトン化によってベンゾフェノンを再生し、一方、*N*-
メチルフタルイミドのラジカルアニオンは適切な電子受容体への電子移動が起こるので *N*-メチルフタ
ルイミドにもどる。

我々はこの還元サイクルを利用して金属ナノ構造を作成することを試み、**1** を基板上に修飾して波長の
異なる 2 つの光を照射することによって金属イオンを還元し、金属ナノ構造を光化学的に作成するこ
とに成功した。

[原著論文]

Reversible Intramolecular Triplet-Triplet Energy Transfer in Benzophenone-*N*-Methylphthalimide Dyad Aprotic Polar and Protic Polar Solvents, M. Sakamoto, S. S. Kim, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima, *J. Phys. Chem. A*, 112[7] (2008) 1403-1407.

ナノ構造機能評価研究部門

概要

本研究部門は、ナノ構造多次元評価、表面ナノ構造プロセス評価、量子マテリアルデバイス機能評価、ナノ構造機能理論・シミュレーションの4分野から構成され、材料機能物性研究分野、エネルギー材料研究分野、光・電子材料研究分野と協力しながら研究を進めている。本研究部門は従来の構造解析法・物性評価法を超えて、ナノメートルスケールの構造に特化した新たなナノ創製プロセス・ナノ構造・ナノマテリアルデバイス機能の高精度評価手法を開発・確立させ、それらを応用に繋げる研究を行う。また、ナノ構造制御マテリアルの時間分解創製プロセスや原子配列と電子状態、次世代量子マテリアルデバイスの機能・物性などの高精度評価手法を開拓し、ナノテクノロジー研究に反映させる。

成果

- ・ 電子線照射に伴う α -FeSi₂の構造変化
- ・ 相変化光ディスクにおける記録マーク部の直接観察
- ・ 電子ビームリソグラフィの基礎過程の解明
- ・ プラズモン励起による表面原子ボンド切断過程の発見
- ・ グラファイトのフェムト秒光パルス励起によるsp³結合型新規カーボンナノ構造相の創出
- ・ 半導体表面の局所的ボンド切断過程における確率共鳴効果
- ・ GaGdN ナノロッドのナノ評価
- ・ GaCrN/AlN 多重量子ディスクナノロッドのナノ評価

ナノ構造多次元評価分野

助教 内藤 宗幸

a) 概要

物質のナノ構造、ナノ組織に関する原子位置・原子種、原子結合状態・電子状態、ならびにそれらの温度、時間変化などについて、特に電子線を用いた高精度の評価・解析手法を開発する。これらの手法により、先端的ナノ材料・ナノデバイス極微構造の原子レベルでの評価や機能性予測を行い、新機能材料・デバイスの創製に寄与する。

b) 成果

・電子線照射に伴う α -FeSi₂の構造変化

電子線照射に伴う α -FeSi₂の構造変化を透過電子顕微鏡法により調べた。 α -FeSi₂は c 軸方向に沿った倍周期構造を有するが、電子線照射を行うことによりこの周期構造は消失する。電子回折実験の結果、電子線照射領域では α -FeSi₂からCsCl型構造を有する準安定相へと相変態していることが明らかとなった。また、エネルギー分散型X線分光法を用いた組成分析より、電子線照射前後で組成変化はほとんど生じないことが明らかとなった。さらに、照射電子の加速電圧の上昇に伴い、変態速度が上昇することが確認された。以上の結果から、 α -FeSi₂における相変態は電子励起効果ではなく、Fe原子の弾き出しにより進行していると考えられる。ところが、本実験においてFe原子の弾き出ししきいエネルギーは9eV以下と見積もられ、この値は従来報告されている金属やセラミックス中における原子の弾き出ししきいエネルギー(20-60eV)と比較すると著しく小さい。これは弾き出されたFe原子が α -FeSi₂中に存在する欠陥サイトで安定化されることに起因すると考えられる。

[原著論文]

Low temperature thermal annealing-induced α -FeSi₂ derived phase in an amorphous Si matrix, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez, K. E. Sickafus: Appl. Phys. A, 91 (2008) 353-356.

Direct observations of thermally induced structural changes in amorphous silicon carbide, M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: J. Appl. Phys., 104 (2008) 033503(1)-033503(3).

Electron irradiation-induced phase transformation in α -FeSi₂, M. Naito, M. Ishimaru, J. A. Valdez, K. E. Sickafus: J. Appl. Phys., 104 (2008) 073524(1)-073524(6).

Structural characterization of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, M. Naito, M. Ishimaru: Proc. 9th Asia-Pacific Microscopy Conf., (2008) 822-823.

[解説、総説]

高ドーズ鉄イオン注入シリコンの再結晶化過程、内藤宗幸、石丸 学、まてりあ 47 (2008) 640.

[国際会議]

Formation of metastable iron silicides in the Fe implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru: 16th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Dresden, Germany (August 31 - September 5, 2008).

Local structure analysis of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru:

7th Polish-Japan Joint Seminar on Micro and Nano Analysis, Warsaw, Poland (September 7-10, 2008).

Structural relaxation in amorphous SiC studied by in situ transmission electron microscopy, *M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju, Korea (November 2-7, 2008).

Structural characterization of metastable iron silicides formed in the Fe ion implanted Si, *M. Naito, M. Ishimaru: 9th Asia-Pacific Microscopy Conference, Jeju, Korea (November 2-7, 2008).

Transmission electron microscopy study on electron beam irradiation induced phase transformation of niobium nitride (poster), *J. H. Won, J. A. Valdez, K. E. Sickafus, M. Ishimaru, M. Naito: Materials Research Society 2008 Fall Meeting, Boston, USA (December 1-5, 2008).

Structural changes of amorphous SiC during post-implantation thermal annealing (invited), *M. Ishimaru, A. Hirata, M. Naito, I.-T. Bae, Y. Zhang, W. J. Weber: 16th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Dresden, Germany (August 31 - September 5, 2008).

[国内学会]

日本顕微鏡学会	1 件
日本金属学会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円	
若手研究(B)		
内藤 宗幸	断面 TEM による相変化光ディスク記録マーク部の直接観察とナノ構造解析	2,700

[受託研究]

内藤 宗幸	(株)日産アーク	二次電池における非晶質 Si の構造解析	1,000
-------	----------	----------------------	-------

[その他の競争的研究資金]

内藤 宗幸	(財) 風戸研究奨励会	国際会議発表研究費助成	100
-------	-------------	-------------	-----

表面ナノ構造プロセス評価研究分野

教授（兼任） 谷村 克己
准教授 金崎 順一

a) 概要

電子系の励起により基底構造が変化する現象は、多くの物質で観測される一般的事象である。電子系の励起状態を介した構造制御は、電子系が基底状態にある材料を熱的に制御することを基本原理とする従来のプロセスとは全く異なり、新規の先進的材料プロセスへの発展が期待される。本研究分野では、電子励起による原子過程の誘起性・選択性・促進性を積極的に利用して、新しい特性・機能をもった表面ナノ構造を制御・組織化し、新規の高次機能性表面を創製することを目指している。そのため、固体表面の電子励起状態が構造不安定性を誘起する基礎過程を完全に理解すると共に、そこで得られた基礎的知見をさらに発展させ、電子励起による表面原子過程の特徴を生かした表面ナノプロセス技術の基本原理を確立する。この目的を達成するため、短パルスレーザー光・高エネルギー分解能低エネルギー電子線ビーム、金属探針からの電子・正孔注入等を励起源とし、半導体及びグラファイト表面において誘起される構造変化の特徴を、走査型トンネル顕微鏡 (STM) を用いて原子スケールで明確にすると共に、構造変化の動力学を解明するための研究を展開している。

b) 成果

1・電子励起による半導体表面の構造不安定性

レーザー光、低エネルギー電子線、トンネル探針からのキャリア注入等を用いた電子系の励起により誘起される半導体表面の構造不安定性を系統的に研究し、これらの電子励起が表面固有サイトでボンド切断を発生させ、最外原子層に空孔を発生させることを明らかにした。本研究グループでは、観測される現象の特徴を、合理的かつ統一的に説明する理論モデルとして、表面原子サイトへの2正孔局在に起因するボンド切断機構を提唱した。半導体表面における励起誘起構造不安定性に関する理解を更に深めるため、次に挙げる2つの研究課題を推進した。

1. 低エネルギー電子線励起による Si(111)7x7 表面原子のボンド切断機構

数eVから 10eV程度のエネルギーを有する低エネルギー電子線と固体との相互作用機構は、量子性が顕在化し、Born近似などの代表的近似法が適応できない領域であり、今まで十分な物理的解明がなされていない。最も代表的な半導体再構成表面の一つであるSi(111)-(7x7)を対象として、低エネルギー電子線励起に対する構造的応答をSTMにより直接観測した。その結果、最上層Si原子のボンド切断が強いサイト依存性を持って発生すること、その効率が、入射電子がSi結晶内で非弾性的に電子系を励起できるエネルギーに換算して、 8 ± 2 eVの閾値エネルギーを示し、14eVの位置で最大値を示すこと、を明らかにした。ボンド切断効率の閾値及び最大値を示すエネルギーは、Si結晶のプラズモン励起エネルギーにほぼ対応する。本研究の成果は、プラズモン生成によるボンド切断機構を初めて実証した結果であり、電子線励起によるナノ構造創製・制御の方法論において重要な指針を与える。

2. Si(111)7x7 表面構造の光誘起ボンド切断における確率共鳴 (stochastic resonance) 効果

電子励起による構造不安定化における動的緩和過程は、温度に支配された結晶格子系の熱揺らぎの下で進行する。格子系の熱揺らぎと2正孔局在の動的過程との相乗的相互作用の効果を明らかにするため、Si(111)7x7 表面の光励起ボンド切断効率への試料温度効果を研究した。異なる試料温度において fs 光励起した表面を STM により直接観察し、試料温度を 300K から 500K へ増加させることにより 100 倍程度の効率の増大を観測した。この結果は、格子系の熱揺らぎと光誘起ボンド切断の動的過程との間に一種の確率共鳴効果が生じていることを明確に示している。

II・グラファイト表面における光誘起構造不安定性

グラファイトは強い結合異方性を有する半金属であり、強固な炭素原子間の sp^2 共有結合により形成される原子層が、弱いファンデルワース力により積層した六方晶構造を示す。一方、同じ炭素原子から構成されるダイヤモンドは、 sp^3 型共有結合からなる絶縁性の結晶である。物性の全く異なる多様な構造形態を示すカーボン材料は、基礎的・応用的に大きな注目を集めている。本研究では、フェムト秒光励起したグラファイト表面に、直径 5nm 程度の新規ナノカーボン相が非熱的に創出されることを世界ではじめて実証した。STMによる直接観察により、生成されたナノ構造が、 sp^3 型の原子層間結合を形成していること事、この構造がダイヤモンドとグラファイトとの中間的な新規構造 '*diaphite*' である事、を明らかにした。また、*diaphite*相において局所状態密度分布を測定し、フェルミレベルを挟んで約 $\pm 0.3\text{eV}$ のエネルギー位置を中心として、2つの局所状態密度のピークを観測した。LDA法による全エネルギー計算によれば、*diaphite*相は、グラファイト相と 0.5eV 程度のエネルギー障壁により隔てられた準安定構造相であり、この大きなエネルギー障壁は、STM観察に必要な時間スケールにおいて、*diaphite*構造が安定に保持されることを十分に保障する。さらに、計算より予見された*diaphite*相の構造と状態密度分布の結果が、STM/STS測定より得られた実験結果と十分な整合性を確保していることが判明した。本研究の成果は、光学的な手法を用いて、熱的に達成できない、カーボンの新規構造相を発現させる可能性を切り開いた画期的内容である。

[原著論文]

Formation of sp^3 -bonded carbon nanostructures by femtosecond laser excitation of Graphite, J. Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, H. Onishi, and K. Nasu, Physical Review Letters, 102(8), 087402-1-4 (2009).

Excitation-induced atomic desorption and structural instability of III-V compound semiconductor surfaces, K. Tanimura and J. Kanasaki, Surface Science 602(20), 3162-3171 (2008).

[国際会議]

Local bond rupture on Si surfaces induced by low-energy electron-beam excitation, J. Kanasaki, and K. Tanimura, Electron Induced Processes at Molecular Level, Low-Energy Electron Molecule Interaction, Electron Controlled Chemical Lithography, Roscoff, France, May 7-11, 2008.

Interlayer bond formation of a graphite crystal induced by femtosecond laser excitation, J. Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, and K. Nasu, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 26-August 1, 2008.

Local bond rupture on silicon surfaces induced by low-energy electron-beam excitation, J. Kanasaki and K. Tanimura, 12th SANKEN International Symposium, 7th Nanotechnology Center International Symposium, 2nd MSTEC International Symposium, 1st SANKEN Alliance Symposium, Osaka, January 22, 2009

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

谷村 克己 International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions (国際組織委員)

[国内学会]

日本物理学会 4 件
その他 5 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

特別推進研究

谷村 克己

光誘起構造相転移動力学の研究

175,760

量子マテリアルデバイス機能評価分野

教授（兼任） 朝日 一
助教 周 逸凱

a) 概要

本分野では、量子マテリアル、次世代 LSI を含む量子デバイスの構造・物性をナノレベルで解析する手法の開発研究、評価研究を行い、それにより新機能・高機能量子マテリアルデバイスの創製・実現に寄与することを目的に、

- ・量子マテリアルのナノレベルでの物性の解析手法の開発、評価
 - ・次世代 LSI を含む量子デバイスのナノレベルでの構造・物性の評価手法の開発、評価
 - ・量子デバイスのデバイス特性の解析技術の開発、評価
- に関する研究を行っている。

b) 成果

・ GaN ベース希薄磁性半導体ナノロッド構造のナノ評価

ナノ量子構造はデバイスの基本構造として知られている。希薄磁性半導体のナノ量子構造も同様に新機能スピンドバイスに大変重要な基本構造である。GaCrNナノロッドは、MBE法によりCrを縦型GaNナノ細線構造に添加し作製された。これまでに、STMナノ評価により、ロッドの形成過程ではGaN低温バッファ層が形成核となり大変重要な役割を果たしていることを明らかとした。今年度は、Si基板上に成長されたGaGdNナノロッドに対して評価した。GaGdNナノロッドは、高濃度のGdを相分離せずに添加させるために550°Cとやや低い温度で成長されている。X線回折測定よりナノロッドは六方晶且つc軸に配向しており、Gd濃度が高くなるにつれて六方晶GaGdNのピークは若干低角度側へシフトしていることが分かった。これは、Gdの原子半径が1.78 ÅとGaの1.2 Åよりも約1.5倍大きいのでGd濃度が増加するにつれてGaGdNの格子定数が大きくなるためである。AGM磁力計を用いた室温磁化測定から、すべてのGaGdNナノロッドサンプルにおいてヒステリシスが観測された。また、Gd濃度が高くなるにつれて飽和磁化はわずかではあるが大きくなることが確認された。Gdセル温度1150°Cで成長したGaGdNナノロッドにおいて最大の飽和磁化 3.7×10^{-6} emuが観測された。

・ GaN 上の Fe 薄膜のナノ評価

スピン注入現象は、半導体スピントロニクスデバイス形成上では大変重要である。スピン偏極走査トンネル顕微鏡 (SP-STM) 法は、ナノスケールでのスピン注入現象を明らかにする有用な方法と期待される。これまでに、GaN上に室温で成長したFeに対して、その結晶構造、成長様式、及び磁気特性のナノ評価を行った。AFM および STM を用いた観察から、成長初期段階で、ナノサイズ径のFeドットが形成され、無配向ということを確認した。今年度は、SP-STMを用いて、Feナノドットのナノ表面観察を行った。スピン偏極トンネル電流の注入により、スピンの向きにより電流電圧特性が変化し、その特性の変化はスピン偏極に依存することが分かった。

・ GaGdN の軟 X 線 MCD 及び XAFS 評価

軟X線領域 (1150–1250 eV) では、GaGdN中のGd元素に対して軟X線磁気円二色性(MCD)測定を行った。Gd原子中の3dから4fまでの遷移によるMCD強度が非常に強く、15Kでは30%に達した。MCD信号の温度依存性から、50-80 Kのキュリー温度を持つ強磁性相と室温以上のキュリー温度を持つ強磁性相を観察された。また、XANESのデータから、吸収スペクトルの高エネルギー側にショルダーが観察された。このショルダーはGdN、Gd₂O₃、及びGd金属のXANES信号から観察されておらず、ドイツのグループが理論モデルによる解析から提案したGdイオンの周りN空孔によるものと考えられる。すなわち、N空孔がキャリア（電子）を提供し、GaGdNの強磁性を強くしたと考えられる。

[原著論文]

Low temperature molecular-beam epitaxy growth of cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, Y. Yamauchi, Y. K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: J. Cryst. Growth, 310 (2008) 40-46.

Large magnetization in high Gd concentration GaGdN and Si-doped GaGdN grown at low temperatures, Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: Appl. Phys. Lett., 92(6) (2008) 6062505-1 - 6062505-3.

Growth and characterization of InCrN and (In,Ga,Cr)N, S. Kimura, S. Emura, K. Tokuda, Y. Hiromura, S. Hayakawa, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5 (6) (2008) 1532-1535.

Molecular-beam epitaxy fabrication and analysis of GaN nanorods on patterned silicon-on-insulator substrate, J.U. Seo, S. Hasegawa, and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5(9) (2008) 3004-3007.

Selective growth of InP on localized areas of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy, K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: Phys. Stat. Sol. (c), 5(9) (2008) 2766-2768.

Selective growth of InP on areas ($1\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$) of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy, K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: Proc. of the 20th Intern. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials, (2008) WeP12-1 - WeP12-4.

Studies on TlInGaAsN Double Quantum Well Structures, D. Krishnamurthy, M. Ishimaru, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa, Y. Hirotsu and H. Asahi: Proc. of the 20th Intern. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials, (2008) WeP10-1 - WeP10-4.

Electronic structure of $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{N}$ and Si-doping effects studied by photoemission and X-ray absorption spectroscopy, G. S. Song, M. Kobayashi, J. I. Hwang, T. Kataoka, M. Takizawa, A. Fujimori, T. Ohkouchi, Y. Takeda, T. Okane, Y. Saitoh, H. Yamagami, F.-H. Chang, L. Lee, H.-J. Lin, D. J. Huang, C. T. Chen, S. Kimura, M. Funakoshi, S. Hasegawa, and H. Asahi:, (2008) 033304-1 – 033304-4.

Local Structural Change in paramagnetic and Charge-Ordered Phase of $\text{Sn}_{0.2}\text{Pr}_{0.3}\text{Sr}_{0.5}\text{MnO}_3$: an EXAFS Study, K.R. Priolkar, V. Kulkarni, P.R. Sarode, and S. Emura: J. Phys.: Condensed matter, 20 (2008) 335227 – 335231.

[解説、総説]

半導体ヘテロエピタキシーの現状と展望、朝日一、応用物理、第 77 巻、第 5 号 (2008) 489-499.

[著書]

真空と真空蒸着、朝日一、「薄膜ハンドブック」(オーム社、2008) 10-14.

[国際会議]

TlInGaAsN Novel Semiconductors and Temperature-Stable Lasing Wavelength Laser Diodes (invited), H. Asahi, S. Hasegawa, A. Fujiwara and D. Krishnamurthy: 2008 SPIE Photonics West Conference.

Selective growth of InP on areas ($1\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$) of silicon (100) substrate by molecular beam epitaxy (poster), K. Araki, S. Hasegawa and H. Asahi: 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Versailles, France,.

Studies on TlGaInNAs Double Quantum Well Structures (poster), D. Krishnamurthy, M. Ishimaru, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa, Y. Hirotsu and H. Asahi,: 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Versailles, France,.

Formation of aligned CrN nano-clusters in Cr-delta-doped GaN (poster), Y. K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo.

Crystal growth and characterization of GaCrN nanorods on Si substrate (poster), H. Tambo, S. Kimura, Y. Yamauchi, Y. Hiromura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: The 2nd International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Japan.

Effects of morphologies on field emission characteristics of GaN nanorods grown on Si by MBE (poster), J. U. Seo, S. Hasegawa, and H. Asahi: The 2nd International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Japan.

Orbital ordering on dilute Cr³⁺ ions doped in GaN (poster), S. Emura, S. Kimura, K. Tokuda, Yi-Kai Zhou, S. Hasegawa and H Asahi: 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil.

Third magnetic phase of GaGdN detected by SX-MCD (poster), M. Takahashi, Y. Hiromura, S. Emura, T. Nakamura Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H Asahi: 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil.

Structural properties of AlCrN, GaCrN and InCrN (poster), S. Kimura, K. Tokuda, Y. K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Vancouver, Canada.

MBE growth and characterization of TlGaInNAs double quantum well structures (poster), D. Krishnamurthy, M. Ozasa, Y. Tanaka, S. Hasegawa and H. Asahi: 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Vancouver,Canada.

Annealing effect in GaDyN on optical and magnetic properties (poster), Y. K. Zhou, M. Takahashi, S. Emura, S. Hasegawa, H. Asahi: 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil.

Magnetic properties of GaGdN studied by SQUID and SX-MCD (poster), M. Takahashi, Y.K. Zhou, S. Emura, T. Nakamura, S. Hasegawa, and H Asahi: 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil.

Structural properties of AlCrN, GaCrN and InCrN (poster), K. Tokuda, S. Kimura, Y. K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: XXI International Union of Crsytallography, Osaka, Japan.

Crystal growth condition dependence of local structure around Gd in GaN nanorods (poster), S. Emura, H. Kameoka, H. Tambo, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: XXI International Union of Crsytallography, Osaka, Japan.

Growth and characterization of GaN nanorods towards the application to field emitters (invited), S. Hasegawa, J.U. Seo and H. Asahi: 14th Seoul International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications, Jeju Island, Korea.

SX-MCD and XAFS Analysis on GaGdN (poster), M. Takahashi, Y. Hiromura, S. Emura, T. Nakamura, Y.K. Zhou, S. Hasegawa, and H. Asahi: 4th Handai Nanoscinece and Nanotechnology International Symposium, Osaka

University, Osaka.

Gd concentration dependence of local structures around Gd atoms in GaGdN nanorod (poster), H. Kameoka, S. Emura, H. Tambo, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Growth and characterization of Fe nanostructures on GaN (poster), Y. Honda, M. Sotani, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Growth and characterization of transition-metal and rare-earth doped III-nitride based magnetic semiconductors for nano-spintronics (invited), H. Asahi, S. Hasegawa, S. Emura and Y.K. Zhou: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, Osaka.

Influence of native silicon oxides on the growth of GaN nanorods on Si (001) (poster), S. Hasegawa, J. K. Seo, K. Uchida, H. Tambo, H. Kameoka, M. Ishimaru, and H. Asahi: International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN-2008), Montreux, Switzerland.

Degradation mechanisms of GaAs PHEMTs under operation in high humidity conditions (poster), T. Hisaka, H. Sasaki, Y. Nogami, K. Hosogi, N. Yoshida, J.A. del Alamo, S. Hasegawa and H. Asahi: Reliability of Compound Semiconductors (ROCS) Workshop, Monterey, California, USA.

Growth and characterization of Fe nanostructures on GaN (poster), Y. Honda, S. Hayakawa, S. Hasegawa and H. Asahi: 4th Vacuum and Surface Sciences Conference of Asia and Australia, Matsue, Japan.

Ferromagnetism and Luminescence of Diluted Magnetic Semiconductors GaGdN and AlGdN (invited), S. Emura, M. Takahashi, H. Tambo, T. Nakamura, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi: Materials Research Society Fall Meeting, Boston, MA, USA.

Field emission characteristics of GaN nanorods grown on Si by MBE (poster), S. Hasegawa, J. U. Seo and H. Asahi: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, Awaji, Hyogo, Japan.

Magnetic properties of GaCrN nanorods (poster), Y. K. Zhou, H. Tambo, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea, Awaji, Hyogo, Japan.

[国際会議の組織委員、国際雑誌の編集委員]

- 朝日 ー 2008 International Conference on Solid State Devices and Materials (プログラム委員)
- 朝日 ー 20th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (国際運営委員)
- 朝日 ー 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy (国際諮問委員)
- 朝日 ー Second International Symposium on Growth of III-Nitrides (国際諮問委員)
- 朝日 ー 4th Vacuum and Surface Science Conference of Asia and Australia (プログラム委員)
- 朝日 ー International Conference on Functional Materials for Advanced Technology (国際組織委員)
- 朝日 ー 16th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy (出版委員)
- 朝日 ー 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials (プログラム委員)
- 朝日 ー 21st International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (国際運営委員)
- 朝日 ー Journal of Crystal Growth (編集委員)
- 朝日 ー Current Applied Physics (Editorial Board 委員)
- 朝日 ー J. Materials Science: Materials in Electronics (Editorial Board 委員)
- 朝日 ー Journal of Ceramic Processing Research (編集委員)

朝日 一 Journal of Physics: Condensed Matter (Advisory Editorial Board 委員)
 朝日 一 e-Journal of Surface Science and Nanotechnology (Advisory Board 委員)

[国内学会]

応用物理学会	12 件
電子材料シンポジウム	1 件
PASPS シンポジウム	3 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円
基盤研究 (B) (2)	
朝日 一 室温強磁性窒化物物半導体ナノ構造とナノスピントロニクスデバイス 応用に関する研究	2,300
特定領域研究	
朝日 一 InN をベースとした長波長円偏光半導体レーザー創製に関する研究	3,900
周 逸凱 難固溶不純物原子添加半導体のナノ量子構造に関する実験的研究	2,300
(分担者として配分されたもの)	
学術創成研究	
朝日 一 希土類元素添加の精密制御による物性・機能性の開拓 (代表者：藤原康文)	28,000

阪大複合機能ナノファウンダリ

主任・教授(兼任)	川合 知二 (兼任)
参画者・教授 (兼任)	田川 精一 (兼任)
参画者・教授 (兼任)	森 博太郎 (兼任)
特任研究員	鷹岡 昭夫(名誉教授)
特任研究員	村杉 政一
特任研究員	古庄 公寿
特任研究員	梶村 直子
特任研究員	西田 倫希
特任研究員	Chun Lin CHEN
特任研究員	Lin-Yen LIN
特任研究員	山田 直子
特任研究員	大西 秀人
特任研究員	大島 明博
特任研究員	北島 彰
派遣研究員	中村 安男
派遣研究員	梁守 尚美
派遣研究員	井上 欣彦
派遣研究員	戸屋 圭子(平成 20 年 4 月 21 日～平成 20 年 12 月 31 日)
研究補佐員	砂川 則雄
事務補佐員	圓見 恵子
事務補佐員	松本 智絵

a) 概要

文部科学省による「先端研究施設共用イノベーション創出事業【ナノテクノロジー・ネットワーク】(以後“ナノネット事業”と略す)」は、大きな期待がかかる真に新しいナノ材料やナノデバイス等の創出に貢献し、また、地域の企業や研究機関との有機的な連携等を深めることを目的としている。

このナノネット事業に参画する大阪大学『阪大複合機能ナノファウンダリ』は、産業科学研究所が保有する分子や薄膜の合成と超微細加工、そして超高压電子顕微鏡センターが保有するナノ計測や分析の3つの研究領域・機能を複合化させ、シナジー効果を発揮し、ナノプロセスやナノ構造・機能の解析に必要な施設・装置・技術等の提供による総合的な研究支援を行うとともに、先端装置・施設としての機能だけでなく、人材育成やイノベーションの核となる研究技術センター的機能を果たすことにしている。

具体的には、ナノネット事業の一環として国内外・学内外のナノテクノロジー研究を支援する共用研究施設として、全国の26機関が参画し13の共用グループを構成し、2007年4月に発足し、それぞれのグループが①ナノ計測・分析、②超微細加工、③分子・薄膜合成、④極限環境の4つの研究領域の機能を提供しており、当ナノファウンダリでは①②③の3つの研究領域の機能を複合化させた一環プロセスと地域との連携を以って以下の支援事業を遂行し、プロジェクトの2年度目である本年度(2008年度)は100件(技術相談15件含む)の支援をしてきた。

① 分子合成・薄膜合成の支援

有機物・無機物・金属等が持つ機能を最大限に利用し、空間的・エネルギー的に最適な配列や組合せを考慮した原子・分子配列を有する材料の創製、また、薄膜や人口格子の形成・物性測定等に対して支援する。

② 超微加工の支援

ビームテクノロジーを利用した薄膜試料の超微細加工とデバイス化、また、そのデバイスの評価等に対して支援する。

③ ナノ計測・分析の支援

μm のスケールの厚さの試料内部を nm スケール分解能で構造解析に対して、材料や生体の試料作成とテクニックによる効率的な分析・解析技術によって支援する。

b) 成果

ナノネット事業の一環として国内外・学内外のナノテクノロジー研究を支援する共用施設として、産業科学研究所が保有する分子や薄膜の合成と超微細加工そして超高压電子顕微鏡センターが保有するナノ計測や分析の3つの研究領域・機能を融合・複合化し、ナノスケールプロセスやナノ構造・機能の解析に必要な施設・装置・技術等の提供による総合的な研究支援を行った。プロジェクト初年度である本年度は、計85件の支援(技術相談15件は含まず)をしてきた。なお、当ファウンダリが保有する①ナノ計測・分析、②超微細加工、③分子・薄膜合成、の3機能による20年度の総支援件数の項目別内訳は表-1の通りである。

表-1；平成20年度の支援課題件数

	①分子・薄膜の合成				②超微細加工				③ナノ計測・分析				合計			
	学	産	独	計	学	産	独	計	学	産	独	計	学	産	独	計
共同研究	3	1	0	4	6	0	0	6	32	7	3	42	41	8	3	52
装置利用	10	0	0	10	9	1	1	11	12	0	0	12	31	1	1	33
技術代行	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
合計	13	1	0	14	15	1	1	17	44	7	3	54	72	9	4	85
技術相談	1	1	0	2	6	0	0	6	3	4	0	7	5	1	0	15

また、支援に当たって、装置講習などを随時行っているが、本年度は、ナノテクを地域の方や未来の研究者に理解して頂けるように、身近なナノテク(例えば、ナノ薄膜による光の干渉やリソグラフィ、ナノ粒子など)を使って、下記①～④のスクールを開催した。参加者は、小学生から社会人まで多岐に渡った。また、昨年同様、ナノテクノロジーセンターの一員として「nanotech2009」に参加し、活動内容の紹介を行った。

①2008年5月2-3日 シャボン玉教室(シャボン玉でナノテクに挑戦)計80名参加

②2008年8月6-8日 夏休みナノテク理科教室 計32名参加

③2008年11月30日 彩都サンデーサイエンス(彩都西中学校体育館)122名参加

④2008年12月12日 電子顕微鏡スクール 23名参加

[解説、総説]

マイクロ波を使った廃プラ処理とその物理学的コンセプト、丑田公規、岡本吉史、大島明博、日本物理学会誌、63 [7] (2008) 532-536.

[国際会議]

Micro- and Nano- Fabrication of Fluorinated- Polymers by means of SR and FIB (invited), *A. Oshima, T.Urakawa, N.Fukutake, Y.Takasawa, K.Okamoto, S.Seki, T.Katoh, M.Washio, S.Tagawa: The 9th RadTech

China, Hangzhou, China, April 8-11, 2008.

Fabrication of the hybrid PEM consists of perfluoro-sulfonic acid and sulfonated PS-g-FEP using EB-grafting (invited), *A.Oshima, Y.Satoukiko SATO, Y.Oshima, F. Shiraki, N.Mitani, K.Fujii, M.Ito, M.Washio: RADTECH UV&EB 2008, Chicago, USA, May 4-7, 2008.

Microfabrication of nano - scale pattern on crosslinked PTFE using focused ion beam (poster), *N.Fukutake, T.Urakawa, Y.Takasawa, A.Oshima, M.Washio, K.Okamoto, S.Tagawa: he 2nd Asia - Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008), Tokyo, Japan, August 29-September 1, 2009.

Surface Modification of Polymeric Materials Using Ultra Low Energy Electron Beam Irradiation (poster), *A.Oshima, Y.Takasawa, N.Fukutake, T.Urakawa, F.Shiraki, M.Washio: he 2nd Asia - Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008), Tokyo, Japan, August 29-September 1, 2008.

Nano- and Micro- Fabrication of Polymeric Materials Using Beam Technology (invited), *A. Oshima, M. Washio, S. Tagawa: 8th International Symposium on Ionizing Radiation and Polymers (IRaP2008), Angra dos Reis, Brazil, October, 12-17, 2008.

Nano-fabrication of Fluoropolymers using Focused Ion Beam (poster), *N.Fukutake, T.Urakawa, Y.Takasawa, T.Gowa, T.Takahashi, Y.Hirano, M.Washio, A.Oshima, K.Okamoto, S.Tagawa: FLUOROPOLYMER2008, South Carolina, USA, October 19-22, 2008.

Fabrication of Micro- and Nano-Structures of Crosslinked Polytetrafluoroethylene by Means of Focused Ion Beam, *A.Oshima, N.Miyoshi, N.Fukutake, Y.Takasawa, Y.Matsui, K.Okamoto, S.Seki, M.Washio, S.Tagawa: The IUMRS International Conference in Asia 2008(IUMRS-ICA 2008), Nagoya, Japan, December 9-13, 2008

Introduction of Handai Multi-Functional Nanofoundry (poster), N.Yanamori, Y.Nakamura, Y.Inoue, A.Kitajima, *H.Onishi, K.Enmi, M.Murasugi: The 2nd SANKEN Internatinal Symposium, Osaka, Japan, January 22,2009.

[国内学会]

日本高分子学会	2 件
日本アイソトープ協会	1 件
日本放射線化学会	2 件
日本化学会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円	
若手研究 (B)		
大島 明博	選択的な分子捕捉機能を有するナノマイクロ分子ふるいの開発研究	1,820

[受託研究]

川合 知二	文部科学省・科学技術試験研究委託事業	阪大複合機能ナノファウンダリ (ナノメートルスケールでの分	147,000
-------	--------------------	-------------------------------	---------

子・薄膜の合成、超微細加工、計測・分析の研究支援および地域連携と人材育成によるイノベーション創出)

オープンラボラトリー

教授（オープンラボラトリー管理室長、兼任）	吉田 陽一
教授（オープンラボラトリー管理室、兼任）	菅沼 克昭
教授（オープンラボラトリー管理室、兼任）	田中 秀和
技術担当研究員（オープンラボラトリー管理室）	法澤 公寛
事務補佐員（オープンラボラトリー管理室）	大橋 佳代子

a) 概要

オープンラボラトリーは、物質・材料やデバイスを対象としたナノテクノロジーの科学技術発展の基盤となるべき、独創的、先進的な学術研究の推進を目的とした総合的研究に利用するものとする。産業科学ナノテクノロジーセンターの学内兼任教員及び客員教員並びに産業科学研究所に属する研究者グループ及び大阪大学のナノテクノロジー研究者のグループに利用資格がある。

b) 成果

2004年度より新規利用者の募集をし、2008年度は以下に示す17の研究代表者より利用があった。

研究代表者	所属	研究代表者	所属
伊東一良 教授	工学研究科	生田和良 教授	微生物病研究所
井上佳久 教授	工学研究科	谷口直之 教授	微生物病研究所
掛下知行 教授	工学研究科	山崎義光 招聘教授	医学系研究科
中谷亮一 教授	工学研究科	森博太郎 教授	超高压電子顕微鏡センター
森勇介 教授	工学研究科	川合知二 教授	産業科学研究所
福井希一 教授	工学研究科	黒田俊一 准教授	産業科学研究所
藤原康文 教授	工学研究科	小林光 教授	産業科学研究所
伊藤正 教授	ナノサイエンス・ナノテクノロジー研究推進機構	田川精一 教授	産業科学研究所
		松本和彦 教授	産業科学研究所

加速器量子ビーム実験室

実験室長・教授	吉田 陽一（兼任）
室長補佐・教授	田川 精一（兼任）、磯山 悟朗（兼任）、真嶋 哲朗（兼任）
准教授	加藤 龍好（兼任）、菅田 義英（兼任）、藤塚 守（兼任）、古澤 孝弘（兼任）、川井 清彦（兼任）、楊 金峰（兼任）
助教	池田 稔治（兼任）、木村 徳雄（兼任）、小林 一雄（兼任）、藤乗 幸子（兼任）、柏木 茂（兼任）、佐伯 昭紀（兼任）、立川 貴士（兼任）
特任助教	坂本 雅典（兼任）、近藤 孝文（兼任）
技術職員	山本 保
事務補佐員	長尾 りつ子

a) 概要

加速器量子ビーム実験室（以下「実験室」という）は、旧放射線実験所の加速器・量子ビーム設備を維持、管理、運転する組織として、平成 14 年度産業科学ナノテクノロジーセンターに設立された。主要な装置は、L バンド電子ライナックと、S バンド電子ライナック、RF 電子銃ライナックの計 3 台の電子ライナック、およびコバルト 60 ガンマ線照射装置であるが、この内の L バンド電子ライナックとコバルト 60 ガンマ線照射装置を共同利用に供している。実験室は、量子ビーム科学研究部門とナノ量子ビーム研究部門を中心に、加速器・量子ビームを利用する産研の他部門からの兼任教員と、技術室所属の技術職員、事務補佐員より構成され、実験室の管理運営と共同利用を行なっている。

b) 成果

・L バンドライナック

L バンド電子ライナックは、電子ビームの長短とサブハーモニックバンチャー使用の有無の組み合わせることにより、過渡モード、定常モード、単バンチモード、マルチバンチモードの 4 種類の運転モードを有し、最大エネルギーが 40MeV、最大電荷量が 91nC（単バンチモード）、または最大電流 30.6A（過渡モード）、最大繰り返し 60Hz の性能をもつ。平成 20 年度の利用状況は、前期に保守作業の 21 日を含む 120 日が配分され、後期に保守作業の 18 日を含む 118 日が配分された。通算運転日数は 204 日で通算運転時間は 2,400 時間である。今年度はクライストロンの安定動作のために、サイラトロンシステムの更新を行った。

・S バンドライナック

S バンドライナックは、代表的電子エネルギーが 100 MeV、ピーク電流 0.2 A、繰り返し 30 Hz の電子ライナックであり、従来から陽電子生成に利用している。現在電源系のトラブルにより運転が停止しており、復旧の過程にある。

・RF 電子銃ライナック

フォトカソードS バンドRF 電子銃ライナックは、RF 電子銃と磁気パルス圧縮器を組み合わせることにより、低エミッタンス、フェムト秒短時間パルス電子線を発生する加速器であり、主として量子ビーム誘起反応現象の解明に関する研究に利用されている。平成 20 年度には、主にフェムト秒パルスラジオリシスの開発、パルスラジオリシスを通して微細加工の精度を決めるナノ空間における反応機構や放射線化学初期過程の解明、医療応用のための電子ビーム形状整形や動的強度変調の研究に利用された。運転状況としては、前期はサイラトロン故障（寿命の原因）と交換作業のため、利用実験はほぼ行われなかったが、後期は運転を再開し、ビーム利用を行った。平成 20 年度に実施した研究課題及び研究内容は、下記の通りである。

- ①フェムト秒パルスラジオリシスの開発
電子ビームの安定化、フェムト秒時間同期システムの開発
- ②フェムト秒時間領域での誘起反応の研究
水和・溶媒和電子の生成過程の研究、ジェミネートイオン再結合の研究
- ③ガン治療のための濃淡電子ビーム発生の研究
電子ビーム形状の整形と測定、電子ビームの動的強度変調の研究
- ④アト秒電子パルス発生と集団イオン化の研究

・コバルト 60 ガンマ線照射装置

コバルト棟に設置されているコバルト 60 ガンマ線照射装置は、広さの異なる 2 つの照射室を持ち、3 個の大強度コバルト 60 ガンマ線源を用いて照射実験を行っている。本年度も、産研をはじめ、理学研究科、工学研究科、微生物病研究所、ラジオアイソトープ総合センターならびに医学部その他の研究者に広く利用された。利用件数は 136 件、延べ稼働時間は約 2,950 時間であり、利用件数および時間は増加傾向にある。本年度はコバルト 60 照射設備管理システムの保守点検としてマニピレータの点検整備、制御システム点検整備、およびペリスコープ操作スイッチ交換を行った。また、本年度より利用者に対し、利用者負担金を負担していただくこととなった。

・共同利用

本年度の共同利用件数は、産研が 21 件、学内が 15 件、学外の利用者を含むものが 6 件の合計 42 件であった。また、平成 21 年 2 月 2 日から 3 日にかけて銀杏会館にて「加速器量子ビーム実験室とビーム科学の新展開」の題目で加速器量子ビーム実験室研究会を開催した。更に平成 21 年 3 月 4 日に「平成 20 年度成果報告会」を産研第 2 研究棟共同プロジェクト室で開催した。今年度は 220 名以上の見学者を受け入れた。

・放射線安全管理

産業科学研究所放射線施設における放射線業務従事者数は 162 名であった。これらの業務従事者に対する教育訓練は平成 20 年 4 月 8-10 日に、大阪大学コンベンションセンターM0ホールにて行った。新規登録者に対する教育訓練は平成 20 年 5 月 8 日に産研第 2 研究棟共同プロジェクト室で行なった

電子顕微鏡室

室長 教授 菅沼 克昭（兼任）

a) 概要

電子顕微鏡室は昭和 26 年に共通利用施設として設置され、以来、所内各研究部門の固体構造・組織に関する研究に大きく貢献してきた。平成 16 年度より産業科学ナノテクノロジーセンター附属の研究施設となり、ナノレベルでの形態観察および構造解析の立場から各研究部門におけるナノテクノロジー研究を支援している。

現在、300 kV 電界放射型透過電子顕微鏡(JEM-3000F)、走査電子顕微鏡 (S-2250N) が稼働しており、これらの装置はそれぞれ各種試料の局所構造解析、表面組織観察などに利用されている。特に、平成 10 年より稼働を始めた 300 kV 透過電子顕微鏡は最高分解能が 0.17 ナノメートルであり、また、本装置搭載のエネルギー分散型 X 線検出器による組成分析はホウ素以上で可能であることから、原子レベルでの組織観察やナノ領域における元素分析に極めて有効である。

b) 成果

2008 年度に 300 kV 電子顕微鏡を利用した研究室は 7 研究室であり、半導体、セラミックス、金属、高分子材料などの形態観察、局所構造解析が行われた。なお、総利用件数は 224 件であった。

電子プロセス実験室

室長 教授 (兼任)	朝日 一
准教授 (兼任)	長谷川 繁彦
准教授 (兼任)	松本 卓也
准教授 (兼任)	須藤 孝一
准教授 (兼任)	前橋 兼三
助教 (兼任)	周 逸凱

a) 概要

電子プロセス実験室は、平成3年(1991)に設置されたものである。当実験室は、ナノテクノロジーおよび関連基盤研究を推進するために、光・電子材料、量子分子素子材料、有機素子材料などに関連した研究で必要とされる共通のプロセス関係の装置を設置し、いろいろな素子材料のプロセス技術の向上をはかって研究の展開に役立てることを目的としている。

設備としては、小規模クリーンルーム、半導体等の結晶品質を評価できる二結晶X線回析装置、表面構造を調べるための原子間力顕微鏡・デジタル光学顕微鏡、パターン形成を行うためのフォトリソグラフィ装置・電子線描画装置、各種の絶縁層・電極形成を行うためのスパッタ薄膜形成装置・真空蒸着装置・電子ビーム蒸着装置、微細加工を行うための反応性イオンエッチング装置・集束イオンビーム装置、端面形成のための劈開機、配線のためのワイヤーボンダー装置、解析用パーソナルコンピュータなどが設置されている。

b) 成果

当実験室は、ナノテクノロジーセンターおよび関連研究室での各種材料に対する構造解析、表面解析、電極形成の実験研究や、これらをもとに各種材料の電気的性質等の測定、光素子、電子素子、分子素子などの試作等に寄与している。また、ユーザに対し装置使用方法の指導、各装置のメンテナンス、保守点検、修理などを行っている。平成20年度は11研究室・室で、ナノ加工室からの利用約100件を含め約270件の利用があった。

ナノ加工室

室長 教授 野地 博行（兼任）
技術職員 谷畑 公昭、榊原 昇一

a) 概要

ナノ加工室は、産研の有する各種ナノ加工装置およびナノ加工技術を相互に有効活用し、各分野の研究の推進を図るため2005年度発足した。微細加工の技術代行のほか、微細加工の応用に関心を持つ研究者にデバイスの開発・提供を行っている。

b) 活動内容

産研の改築に伴って、共通利用機器室として微細加工室を新たに設けることが出来た。これによりウェットとドライの各プロセス、フォトリソと電子線リソグラフィーを同じ場所で効率よく進めることが可能になった。

・加工依頼

12研究室から計77件の加工依頼があった。

・「マイクロデバイス作製・応用実習会」の実施

微細加工を利用したオブジェ作製の実習会を主催した。1日間の日程で2回実施し、計10名の参加者があった。

・「nanotech 2009 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議」への参加

2008年2月18日～20日に東京で行われた上記の展覧会に産研ナノテクノロジーセンターの一員として参加し、微小液滴を作製するデモンストレーションを行った。

材料解析センター

センター長・教授	安蘇 芳雄 (兼任)
准教授	鈴木 健之
技術職員	田中 高紀 (兼任)
	松崎 剛 (兼任)
技術補佐員	高井 嘉雄
事務補佐員	今井 珠沙世

a) 概要

材料解析センターは、材料解析のための各種の分析および測定を行い、かつ、その周辺技術に関する研究を行うことを目的としている。

産業科学研究所内研究部門のプロジェクト研究、基盤研究、および一般基礎研究などの遂行に当たり、当センター所属の分光分析機器、組成分析機器、状態分析機器類を用いる各種材料スペクトル測定、解析、評価などを通じて強力な研究支援活動を行っている。

一方、これら分析装置類を駆使して新しい材料合成法の開発と応用に関する研究、新規機能性物質の構造解析などの研究活動を行っている。

b) 成果

・イリジウム触媒を用いる酸化反応の開発と応用

クリーンな酸化剤を用いる触媒反応の開発は最重要課題の一つである。また対称ジオールの非対称化はキラルビルディングブロックを合成する上で有効な手段である。今回、メソジオールの酸化的非対称化反応を用い、強力なチューブリン阻害活性を示す *ottelione* 類や *sphingomyelinase* 阻害活性を有する *scyphostatin* の鍵中間体の効率的な触媒的不斉合成法を開発した。本反応では適切な共酸化剤、塩基、保護基を選択することが収率、選択性の向上に重要であることがわかった。今後、*ottelione* や *scyphostatin* の類縁体合成にも適用することで構造活性相関研究の推進にもつながると期待される。

[原著論文]

Chiral dinuclear vanadium(v) catalysts for oxidative coupling of 2-naphthols, Takizawa, S.; Katayama, T.; Kameyama, C.; Onitsuka, K.; Suzuki, T.; Yanagida, T.; Kawai, T.; Sasai, H.: Chem. Commun., (2008) 1810-1812.

Dual activation in oxidative coupling of 2-naphthols catalyzed by chiral dinuclear vanadium complexes, Takizawa, S.; Katayama, T.; Somei, H.; Asano, Y.; Yoshida, T.; Kameyama, C.; Rajesh, D.; Onitsuka, K.; Suzuki, T.; Mikami, M.; Yamataka, H.; Jayaprakash, D.; Sasai, H: Tetrahedron, 64 (2008) 3361-3371.

[国際会議]

Iridium-catalyzed Oxidative Dimerization, Tishchenko Reaction and Oxidative Desymmetrization (poster), *T. Suzuki, G. Kazem, N. K. Mangu, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Development of Dinuclear Vanadium Catalysts and Acid-Base Organocatalysts for Enantioselective Reactions via Dual Activation Mechanism (poster), *S. Takizawa, K. Matsui, T. Katayama, N. Inoue, D. Rajesh, S. Hirata, K.

Kiriyama, T. Suzuki, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国内学会]

日本化学会第 89 春季年会

4 件

[研究助成金]

単位：千円

鈴木 健之

KRI

材料解析センター研究助成

300

新産業創造物質基盤技術研究センター

概要

本センター（略称：「物質基盤センター」）は平成17年4月1日に発足した研究センターであり、大阪大学産業科学研究所（産研）と東北大学多元物質科学研究所（多元研）との連携のもとに運営を行っている。産研と多元研の研究集団が、対企業での個別的及び学内連合の壁を超えた相補的連携を組んで、シーズに則ったニーズ指向研究開発を時限展開することにより、大学主導で、我が国に不可欠な新産業の創造に貢献することを目的として設立され、5年間のプロジェクト研究を展開している。

これまで、産研並びに多元研の両研究所においては、材料技術革新への貢献を目指した原子・分子単位でのハイブリッド化に関する材料科学分野、および健康で活力に溢れる人間生活を目指した生命科学・医療科学・医薬品科学分野に関する基礎・応用研究が進められ、独創的な学術・技術に関する研究成果を挙げて来ている。そこで、本センターでは、両研究所が共同で「新産業の基となる科学技術の発信」を目的として、産業界において直接的に経済的・社会的ニーズが高い研究分野においてプロジェクト研究を集中的に推進し、必要に応じて企業が参画するなど、附置研究所の連携による相乗効果を産業界にすばやく、かつ効率的に発信する社会還元機構の役割を果たすことを目指している。

下記の2つの研究プロジェクト（合計4研究グループ）において、それぞれに、両研究所から相補的な組み合わせの人員配置を行い、さらに企業からの研究者を加えて集中的な研究を進める体制としている。具体的には、両研究所にそれぞれのセンター長と、グループ長4名（以下は産研のグループ長を示す）を置き、各グループには兼任教授、特任教員、PDなどを配置している。

- ・センター長：中嶋英雄教授
- ・P1 材料基盤研究プロジェクト
 - ・G1 ハード材料基盤研究グループ：グループ長：中嶋英雄教授

高次ナノ構造・組織・マクロ形態制御した構造材料および機能材料の創製、物性解明とその応用研究。ロータス型ポーラス材料の創製と物性、実用化、および異相界面ナノレベル制御による環境調和微細配線・接続技術の開発。

- ・G2 ソフト材料基盤研究グループ：グループ長：真嶋哲朗教授

光・電子機能、分子認識、触媒作用、高次構造、機能集積などの機能性分子の機能解明と、機能性有機分子、高分子、生体分子などの設計・合成・集合化・組織化、高機能分子材料の創製、その機能発現機構や作用機構の解明、高機能分子、多機能分子や分子材料の創製のプロセス開発などの産業応用化。

- ・P2 安全・安心ヒューマンインターフェース研究プロジェクト
 - ・G3 医療基盤研究グループ：グループ長：吉田陽一教授

新規輸送蛋白質の同定とその機能解析に基づいたトランスポーターオリエンテッドな創薬のための基盤技術開発。がん治療を目指した次世代の強度変調放射線治療の実現のための加速器ビーム開発。

- ・G4 ヒューマンインターフェース研究グループ：グループ長：沼尾正行教授

人に優しい安全・安心技術へのパラダイムシフトにあわせた新産業の予測、環境・情報・バイオ技術の融合研究。バイオセンサー遠隔ヘルスケアシステム、ナノテク技術による高感度バイオデバイス、認知科学・機械学習技術を応用した総合評価システム、知識共有システムの開発。

成果

- ・ロータス型ポーラス金属の気孔形態制御に関する研究
- ・強磁場下におけるポーラス材料の気孔形成メカニズムの解明と表面加工による高機能化に関する研究

- ・ ナノペースト・オンデマンド配線技術の開発研究
- ・ 環境調和鉛フリー実装技術に関する研究
- ・ 鉄砒素系高温超伝導体の基礎研究
- ・ レーザー機能化学とその応用に関する研究
- ・ スピロ型キラル配位子を活用した新規不斉触媒反応の創出に関する研究
- ・ 機能性キラルスピロ化合物の高効率的合成法の開発研究
- ・ 2波長2レーザーを用いたフレキシブル材料の三次元加工に関する研究
- ・ 放射線がん治療の新しい可能性の探索とフェムト秒パルスラジオリシスによる水和電子の観測
- ・ デジタルマイクロミラーデバイスを用いた強度変調放射線治療のための電子ビームの高速光学変調
- ・ 赤血球のS1P輸送体の機能解析
- ・ 細胞遊走を制御するS1P輸送体の同定
- ・ 電子線トモグラフィ法による細胞内オルガネラの動態および宿主感染菌相互作用の解明
- ・ 各種センサデータと機械学習による対象適応状況・解析インターフェースを具体化
- ・ 安全・安心・創造的ものづくり支援のための知識共有ソフトウェア「OntoGear」の高度化と応用
- ・ 人工生体情報ナノマテリアルの開発

材料基盤研究プロジェクト

概要

本研究プロジェクトは、金属・半導体・セラミックスを対象にするハード材料基盤研究グループと有機分子、高分子、生体分子を対象にするソフト材料基盤研究グループからなり、東北大学多元物質科学研究所、民間企業との共同研究を積極的に行っている。これからの高度化した材料の発展を支えるために、新しい機能を持つ新材料の創製および機能解明が不可欠である。ハード材料基盤研究グループでは、組織・形態制御したポーラス材料の製造プロセスの開発と物性解明、実用化研究、および異相界面ナノレベル制御による環境調和微細配線・接続技術の開発、高温超伝導など有用な量子機能を示す材料の基礎研究を行い、ソフト材料基盤研究グループでは、光・電子機能、分子認識、触媒作用、高次構造、機能集積などの機能性分子の機能解明に基づいて、機能性有機分子、高分子、生体分子などの設計・合成・集合化・組織化を達成し、新しい機能性分子材料に関する研究を行う。

成果

- ・ロータス型ポーラス金属の気孔形態制御に関する研究
- ・強磁場下におけるポーラス材料の気孔形成メカニズムの解明と表面加工による高機能化
- ・ナノペースト・オンデマンド配線技術の開発研究
- ・環境調和鉛フリー実装技術に関する研究
- ・鉄砒素系高温超伝導体の基礎研究
- ・レーザー機能化学とその応用に関する研究
- ・スピロ型キラル配位子を活用した新規不斉触媒反応の創出に関する研究
- ・機能性キラルスピロ化合物の高効率的合成法の開発研究
- ・2波長2レーザーを用いたフレキシブル材料の三次元加工に関する研究

ハード材料基盤研究グループ

教授 (兼任)	中嶋 英雄、菅沼 克昭、安藤 陽一
特任准教授	上野 俊吉
特任助教	村井 啓一
大学院学生	河染 満

a) 概要

高次ナノ構造・組織・マクロ形態を制御した構造材料および機能材料の創製、物性解明とその応用研究を行っている。具体的には、ロータス型ポーラス材料の創製と物性研究、実用化研究、および異相界面ナノレベル制御による環境調和微細配線・接合技術の開発を行っている。

ロータス型ポーラス材料は、孔の向きのそろったレンコン状のポーラス金属である。孔のサイズは1 μm から10mmの大きさで孔の空隙率は最大80%程度である。また、高強度材料の軽量化、孔や表面を利用した機能性材料などへの広範な用途が期待される。今年度は、ロータス型ポーラス金属の微細気孔形態制御法の開発を行なった。また、東北大学多元物質科学研究所との共同研究開発により、ロータス型ポーラス金属の気孔形成機構を強磁場環境下において調べ、超音波を利用したコーティング法による耐食性皮膜に関して研究を進めた。

新世代の各種情報機器あるいは車載機器では、高信頼性や高速化などに対応する微細な異相界面形成技術が求められる。それら異相界面形成においてナノレベルで生じる諸反応を解析し、その理想的な構造や制御技術を確認し、新たな産業技術の形成へ結びつけることを目的とし、ナノペースト・オンデマンド配線技術の開発と環境調和鉛フリー実装技術の開発を行った。

画期的なエネルギー材料やデバイス材料の創製のために、超伝導、スピンホール効果、巨大熱起電力など有用な量子機能を示すハード材料の基礎研究が重要性を増している。このような“量子機能材料”の試料作製から物性測定までを一貫して行い、新奇な電子機能物性の発現機構を明らかにしながら新材料創製を目指す研究を進めた。

また、新しい構造の鉄砒素系高温超電導体の提案を進めるとともに、LaFeAs(O,F)系の微小な単結晶の育成にも成功した。

b) 成果

・ロータス型ポーラス金属の気孔形態制御

底部に銅製の水冷チラーを配置した鋳型の内部に水分を保持し、アルゴン雰囲気下でNi溶湯を鋳型へ注ぐと、ロータス型ポーラスニッケルが得られる。ここで得られる試料の気孔径は小さく、水素ガス雰囲気(全圧は同じ)で作製された試料の1/10以下であった。鋳型に保持した水分はNi溶湯が注ぎ込まれたとき、(1)水素原子と酸素原子に解離し、(2)前者はNi溶湯へ溶解し、(3)後者はNi溶湯と反応して固相のNiOを生じ、(4)一方向凝固の過程で固相に固溶しきれない過剰の水素が固液界面で放出されて気孔が生成するが、NiOが気孔の生成核となるため、気孔径が小さくなる。水素ガス雰囲気下において、結晶粒径の異なるNiO粉末を一方向凝固時に添加したところ、NiOを添加して作製した試料の気孔径は添加しないで作製された試料の1/10以下になることが確認された。NiOを添加して作製した試料の気孔径は、NiOの粒径および添加量により制御可能である。これらの結果は、NiO粉末を添加するという簡便な方法でロータス型ポーラスニッケルの気孔径を精度よく抑制することが可能であることを示しており、100 μm 以下の微細な気孔径が要求される熱交換器やフィルターなどへロータス金属を応用することができる見込みが分かった。

・強磁場下におけるポーラス材料の気孔形成メカニズムの解明と表面加工による高機能化

融点における水素ガス溶解度差が金属および半導体の中で最も大きいシリコンに着目して、強磁場下で電磁浮遊法により凝固実験を水素ガス雰囲気下で行い、気孔形成に及ぼす磁場の影響を調べた。また、ロータス型ポーラス銅のヒートシンクへの応用を目指し、超音波コーティング法を利用してロータス銅の表面に SiC 層を形成させる技術を開発した。

・ ナノペースト・オンデマンド配線技術の開発

インクジェットなど配線技術での利用が期待される金属ナノ粒子ペーストは、加熱処理によってナノ粒子から分散剤などが剥離、蒸発し、活性な金属ナノ粒子は焼結する。金属ナノ粒子ペーストの中で最も有望な銀ペーストの場合、現状では 150°C 以上での焼成処理が必要である。回路形成基材に用紙や PET フィルムを想定した場合、150°C 以上の温度で長時間の焼成には、基材に不良が起こる可能性が高い。そこで、菅沼研開発の低温焼成銀塩技術を用い、紙上への回路形成を実現することを目的とし、本年度は、インクジェット印刷用銀塩インクを改善し、紙やフレキシブルなフィルム上に電子回路を形成し、配線や回路形成に成功した。また、紙やフィルムの表面にコート層を形成させることで、銀配線の特性が改善されることがわかった。

・ 環境調和鉛フリー実装技術の完遂

錫ウイスカは、はんだの鉛フリー化とともに電子機器の信頼性を低下させる大きな問題として浮上している。ますます高密度化が進む実装部品にとり、錫ウイスカ発生は深刻な問題となる。そこで、錫ウイスカの発生メカニズム解明からウイスカ抑制策に取り組んでいる。本年度は、錫めっき表面に Au、Pd、Ni の薄めっき処理を施し、各種雰囲気下でのウイスカ抑制効果を調べた。その結果、純錫めっきに比べ、すべての環境下でウイスカが抑制された。

従来の Si 系半導体素子に比べ、動作温度の上昇が想定される SiC 半導体素子では、その実装材料においても、従来の高鉛高温はんだに代わる新規材料の開発が必要である。実装材料には低抵抗、耐熱性に加え、上下アタッチメント間の高効率の応力緩和や熱伝達が必要条件になる。これらの条件を満たすためにナノ粒子を主とするペーストや形態を制御しやすいナノロッド、あるいはミクロン・オーダーの銀粉を銀ナノ粒子で結束させポーラス構造を形成するハイブリッド銀ペーストの適用が考えられる。本年度は、既に本研究室で開発した銀ナノ粒子、ナノロッドの合成方法を改良し、ナノロッドを安定化させる合成条件の最適化、収率の向上を目標とした。その結果、90% 近くの収率を達成、ナノロッドのアスペクト比制御、粒子/ロッド比制御、高温 (400°C 以下) でも形状の変化がない安定な粒子の開発に成功した。また、ハイブリッド銀ペースト接続部の基礎物性・信頼性を評価し、低電気抵抗、高接合強度、高熱伝導性を持ち、-40~300°C 区間で高効率の応力緩和が可能な接合技術を確立した。

・ 鉄砒素系高温超伝導体の基礎研究

2008 年 2 月にその発見が報告されて以来、超伝導研究にフィーバーを巻き起こしている新しい鉄砒素系高温超伝導体は試料合成が大変に難しい。我々は今年度中に SmFeAs(O,F)系で 40 K 以上の超伝導転移温度を示す多結晶試料の合成に成功するなど、この物質系の合成に関するノウハウを蓄積しつつある。このノウハウをもとにして、新しい構造の鉄砒素系高温超伝導体の探索を進めるとともに、LaFeAs(O,F)系の単結晶育成にも挑戦している。今年度中に新しい超伝導体に関する特許を 1 件申請し、さらに LaFeAs(O,F)系の微小な単結晶の育成にも成功した。

[原著論文]

In Vitro Corrosion Resistance of Lotus-type Porous Ni-free Stainless Steels, K. Alvarez, S.K. Hyun, S. Fujimoto, H. Nakajima: J. Mater. Sci.: Mater. Med., 19 (2008) 3385-3397.

Magnetization Process of Lotus-type Porous Metals, H. Onishi, S.K. Hyun, H. Nakajima, S. Mitani, K. Takanashi, K. Yakushiji: J. Appl. Phys., 103 (2008) 093539(5pages).

Fabrication of Lotus-type Porous Metals through Hydride Decomposition, H. Nakajima: *Adv. Eng. Mater.*, 10 (2008) 816-819.

粉末冶金法を用いて作製したアルミニウムフォームの気孔率・気孔形態に及ぼす昇温速度・保持温度・保持時間の影響, 関宏範, 佐々木新悟, 大塚正久, 中嶋英雄: *日本金属学会誌*, 72 (4) (2008) 278-284.

一方向気孔を有するポーラス金属の物性評価, 中嶋英雄, 多根正和, 中田一博, 藤本慎司, 市坪哲, 田中徹, 山田康雄: *ふえらむ*, 13 (6) (2008) 368-374.

ロータス型ポーラス銅を使用した高性能水冷ヒートシンクの開発, 千葉博, 大串哲朗, 中嶋英雄: *伝熱*, 47 (2008) 11-15.

Peculiar elastic behavior of Ti-Nb-Ta-Zr single crystals, M. Tane, S. Akita, T. Nakano, K. Hagihara, Y. Umakoshi, M. Niinomi, H. Nakajima: *Acta Mater.*, 56 (12) (2008) 2856-2863.

Equal-channel Angular Extrusion Process of Lotus-type Porous Copper, S. Suzuki, H. Utshunomiya, H. Nakajima: *Mater. Sci. Eng. A*, 490 (1-2) (2008) 465-470.

Shrinking of hollow Cu₂O and NiO nanoparticles at high temperatures, R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, H. Nakajima: *Acta Mater.*, 56 (18) (2008) 5276-5284.

Fabrication of Lotus-Type Porous Al-Si Alloys Using the Continuous Casting Technique, J.S. Park, S.K. Hyun, S. Suzuki, H. Nakajima: *Metal. Mater. Trans. A*, 40 (2) (2009) 406-414.

ECAE を利用したロータス型ポーラス銅の塑性加工, S. Suzuki, H. Utunomiya, H. Nakajima: *銅と銅合金*, (47) (2008) 93-100.

Preparation of Ag nanorods with high yield by polyol process, J. Jiu, K. Murai, D.S. Kim, K.S. Kim, K. Suganuma: *Materials Chemistry and Physics*, 114 (2009) 333-338.

Oxidation behavior of Sn-Zn solders under high-temperature and high-humidity conditions, J. Jiang, J.E. Lee, K.S. Kim, K. Suganuma: *J. Alloys and Compounds*, 462 (2008) 244-251.

The root causes of the "black pad" phenomenon and avoidance tactics, K. Suganuma, K.S. Kim: *JOM*, 60 (2008) 61-65.

Effects of Ag and Cu addition on microstructural properties and oxidation resistance of Sn-Zn eutectic alloy, J.E. Lee, K.S. Kim, M. Inoue, J. Jiang, K. Suganuma: *J. Alloys and Compounds*, 454 (2008) 310-320.

Quantum Phase Transition in the Magnetic-Field-Induced Normal State of Optimum-Doped High-T_c Cuprate Superconductors at Low Temperatures, F. F. Balakirev, J. B. Betts, A. Migliori, I. Tsukada, Y. Ando, and G. S. Boebinger: *Phys. Rev. Lett.*, 102 (1) (2009) 17004/1-4.

Mapping of the formation of the pairing gap in Bi₂Sr₂Ca₂CuO₈+ δ , K. K. Gomes, A. N. Pasupathy, A. Pushp, C. Parker, S. Ono, Y. Ando, G. Gu, and A. Yazdani: *J. Phys. Chem. Solids*, 69 (12) (2008) 3034-3038.

Implication of the Mott-limit violation in high-T_c cuprates, Y. Ando: *J. Phys. Chem. Solids*, 69 (12) (2008) 3195-3198.

Appearance of universal metallic dispersion in a doped Mott insulator, S. Sahrakorpi, R. S. Markiewicz, H. Lin, M. Lindroos, X. J. Zhou, T. Yoshida, W. L. Yang, T. Kakeshita, H. Eisaki, S. Uchida, S. Komiyama, Y. Ando, F. Zhou, Z. X. Zhao, T. Sasagawa, A. Fujimori, Z. Hussain, Z. X. Shen, and A. Bansil: *Phys. Rev. B*, 78 (10) (2008) 104513/1-6.

Inhomogeneous magnetic-field response of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ and $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ persisting above the bulk superconducting transition temperature, J. E. Sonier, M. Ilton, V. Pacradouni, C. V. Kaiser, S. A. Sabok-Sayr, Y. Ando, S. Komiyama, W. N. Hardy, D. A. Bonn, R. Liang, and W. A. Atkinson: *Phys. Rev. Lett.*, 101 (11) (2008) 117001/1-4.

Scanning Josephson tunneling microscopy of single-crystal $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ with a conventional superconducting tip, H. Kimura, R. P. Barber, S. Ono, Y. Ando, and R. C. Dynes: *Phys. Rev. Lett.*, 101 (3) (2008) 37002/1-4.

Superstructure formation at the metal-insulator transition in $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5.5}$ ($R=\text{Nd,Tb}$) as seen from reciprocal space mapping, D. Chernyshov, V. Dmitriev, E. Pomjakushina, K. Conder, M. Stingaciu, V. Pomjakushin, A. Podlesnyak, A. A. Taskin, and Y. Ando: *Phys. Rev. B*, 78 (2) (2008) 24105/1-7.

Electronic origin of the inhomogeneous pairing interaction in the high- T_c superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$, A. N. Pasupathy, A. Pushp, K. K. Gomes, C. V. Parker, J. S. Wen, Z. J. Xu, G. D. Gu, S. Ono, Y. Ando, and A. Yazdani: *Science*, 320 (5873) (2008) 196-201.

Pitfalls in the analysis of low-temperature thermal conductivity of high- T_c cuprates, Y. Ando: *J. Phys.: Conf. Series*, 108 (2008) 012001/1-4.

Formation of Silicon Hollow Sphere via Electromagnetic Levitation Method under Static Magnetic Field in Hydrogen-Argon Mixed Gas, S. Ueno, H. Kobatake, H. Fukuyama, S. Awaji and H. Nakajima: *Mater. Lett.*, 63 (2009) 602-604.

Fabrication of lotus-type porous cobalt and silicon through decomposition of moisture, H. Onishi, S. Ueno, S.K. Hyun and H. Nakajima: *Metall. Mater. Trans. A*, 40 (2009) 438-453.

Corrosion and Recession Mechanism of $\text{Lu}_2\text{Si}_2\text{O}_7/\text{Mullite}$ Eutectic, S. Ueno, H.T. Lin and T. Ohji: *J. Eur. Ceram. Soc.*, 28 (2) (2008) 2359-2361.

Effect of temperature on deposition of LaPO_4 coatings produced by ultrasonic-based coating process on steel substrates, S. Romankov, S.V. Komarov, N. Hayashi, S. Ueno, S. Kaloshkin and E. Kasai: *Surf. Coat. Tech.*, 202 (17) (2008) 4285-4290.

Production of LaPO_4 Coatings Using a Novel Ultrasonically-Assisted Plating Technique, S.V. Komarov, S.E. Romankov, S.H. Son, N. Hayashi, S.D. Kaloshkin, S. Ueno, Eiki Kasai: *Surf. Coat. Tech.*, 202 (21) (2008) 5180-5184.

An Effect of Addition of NiO Powder on Pore Formation in Lotus-type Porous Nickel, H. Onishi, S. Ueno and H. Nakajima: *Mater. Trans.*, 49 (11) (2008) 2670-2672.

一方向凝固法によって作製されるロータス型ポーラスセラミックス, 上野 俊吉, 林 礼明, 中嶋 英雄: *まてりあ*, 47 (8) (2008) 399-405.

Accuracy Verification of Steady State Comparative-Longitudinal Heat Flow Method Using Specimen of Different Thickness for Measuring Thermal Conductivity of Lotus-Type Porous Metals, H. Chiba, T. Ogushi, H. Nakajima, S. Ueno, K. Torii, T. Tomimura, F. Ono: Proc. 1st International Symposium on Thermal Design and Thermophysical Property for Electronics (e-Thermo 2008), (2008) 95-97.

Magnetic field induced modification of superfluid density and interplane spectral weight in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$, A. D. LaForge, W. J. Padilla, K. S. Burch, Z. Q. Li, A. A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. N. Basov: Phys. Rev. B, 79 (10) (2009) 104516/1-8.

Sum rules and interlayer infrared response of the high temperature $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ superconductor in an external magnetic field, A. D. LaForge, W. J. Padilla, K. S. Burch, Z. Q. Li, A. A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. N. Basov: Phys. Rev. Lett., 101 (9) (2008) 97008/1-4.

Fabrication and Characterization of Aluminum Nitride/Boron Nitride Nanocomposites by Carbothermal Reduction and Nitridation of Aluminum Borate, T. Kusunose, N. Sakayanagi, T. Sekino, and Y. Ando: J. Nanosci. Nanotechnol., 8 (11) (2008) 5846-5853.

Contact damage of machinable aluminum nitride/boron nitride nanocomposites, T. Kusunose, T. Sekino, and Y. Ando: J. Ceram. Soc. Jpn., 116 (1354) (2008) 762-766.

Synthesis of SiC/BN nanocomposite powders by carbothermal reduction and nitridation of borosilicate glass, and the properties of their sintered composites, T. Kusunose, T. Sekino, and Y. Ando: Nanotechnology, 19 (27) (2008) 275603/1-9.

[解説、総説]

一方凝固法によって作製されるロータス型ポーラスセラミックス, 上野 俊吉、林 礼明、中嶋 英雄, まてりあ, 47[8] (2008) 399-405.

ロータス型ポーラス銅を使用した高性能水冷ヒートシンクの開発, 千葉 博、大串 哲朗、中嶋 英雄, 伝熱, 47[5] (2008) 11-15.

ウイスカ研究の動向と発生メカニズムの理解, 菅沼 克昭, 表面技術, 59-4 (2008) 210 - 217.

スズウイスキー研究の最新動向, 菅沼 克昭、金 権鉄, 機能材料, 28[8] (2008) 6-14.

低温鉛フリーはんだ実装の現状と今後の展開, 金 権鉄、菅沼 克昭, エレクトロニクス実装技術, 24[8] (2008) 24-28.

スズウイスキーによる機器故障の歴史, 菅沼 克昭, 機能材料, 28[9] (2008) 5-12.

表面ナノめっき, 金 権鉄、菅沼 克昭、辻本 雅宣、梁田 勇, 機能材料, 28[9] (2008) 26-31.

[著書]

「ポーラス金属の圧縮試験方法 JIS H 7902」, 中嶋 英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-7.

「ポーラス金属の熱伝導率試験方法 JIS H 7903」, 中嶋 英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-16.

「ポーラス金属用語 JIS H 7009」, 中嶋 英雄, 日本工業標準調査会, (2008) 1-15.

「熱伝導率・熱拡散率の制御と測定評価方法」, 千葉 博、中嶋 英雄, サイエンス&テクノロジー, (2009) 146-156.

「2009 プリントブルエレクトロニクス (分筆)」, 第 2 編第 16 章 金属ナノ粒子インクのプリントブルエレクトロニクスへの応用, 菅沼 克昭、和久田 大介、金 権鉄, 電子ジャーナル (株), (2008) 89-95.

[特許]

「超電導体及びその製造方法」安藤 陽一、瀬川 耕司、特願 2008-243148

[国際会議]

Diffusion in Intermetallic Compounds and Fabrication of Hollow Nano-particle through Kirkendall Effect (plenary), *H. Nakajima, R. Nakamura: 4th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids, Barcelona, Spain, July 9-11, 2008.

Fabrication of Lotus-type Porous Aluminum through Thermal Decomposition Method (invited), *H. Nakajima, T. Ide, S.Y. Kim: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, January 13-16, 2009.

Fabrication of Lotus-type Porous Aluminum using Thermal Decomposition of Magnesium Hydroxide (poster), *J.S. Park, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Fabrication of Lotus-Type Porous Aluminum through Thermal Decomposition Method, *H. Nakajima, S. Y. Kim, J. S. Park: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Lotus-type Porous Ni-free Stainless Steel Biomaterial Produced by Continuous Zone Melting Technique (poster), K. Alvarez, *H. Nakajima: CELLMET2008, Cellular Metals for Structural and Functional Applications, 2nd International Symposium, Dresden, Germany, October 8-10, 2008.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Continuous Casting Technique and Application to Machine Tools, *M. Kashihara, H. Yonetani, S. Suzuki, S.Y. Kim, H. Nakajima: CELLMET2008, Cellular Metals for Structural and Functional Applications, 2nd International Symposium, Dresden, Germany, October 8-10, 2008.

Fabrication of lotus-type porous Al-Si alloy by continuous casting with using thermal decomposition method (poster), *T.B. Kim, S.Suzuki, H.Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Mechanical property of lotus-type porous carbon steel fabricated by continuous casting method (poster), *Y.Kawamura, S.Suzuki, S.Y.Kim, H.Nakajima, M.Kashihara, H.Yonetani: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Structure change and improvement of the mechanical properties of lotus-type porous copper by wire-brushing (poster), *J. Lobos, S. Suzuki, H. Nakajima, Y. S. Ji, H. Fujii, D. Terada, N. Tsuji: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Fabrication of lotus-type porous Al-Cu alloys by continuous casting technique (poster), *S.Suzuki, T.B.Kim, H.Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Structure change and improvement of the mechanical properties of lotus-type porous copper by ECAE process, *J. Lobos, S. Suzuki, H. Utunomiya, H. Nakajima: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, January 13-16, 2009.

Fabrication of Lotus-type Porous Magnesium through Thermal Decomposition Method (poster), *M. Tane, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Fabrication of Porous Magnesium with Directional Pores through Thermal Decomposition of Magnesium Hydride (poster), *M. Tane, H. Nakajima: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Hollow Oxide Formation via Oxidation of Metal Nanoparticles, *R. Nakamura, H. Nakajima: The 3rd International Workshop on Nano and Amorphous Materials, Miyagi, Japan, August 7-8, 2008.

Formation of Hollow and Porous Oxides through Oxidation of Metallic Nanoparticles (poster), *R. Nakamura, H. Nakajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, September 29-October 1, 2008.

Formation of Hollow Structure through Heat Treatment of Core-Shell Type Metal Nanoparticles (poster), *K. Taniguchi, R. Nakamura, H. Nakajima: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, September 29-October 1, 2008.

Formation of a Nano-hole via Oxidation of Metal Nanoparticles, *R. Nakamura, H. Nakajima, H. Mori: 7th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT2008), Canary Islands, Spain, October 28-31, 2008.

Shrinkage of Hollow Nanoparticles of Oxides of Cu and Ni at High Temperatures (poster), *R. Nakamura, H. Nakajima, H. Mori: 7th International Conference on Diffusion in Materials (DIMAT2008), Canary Islands, Spain, October 28-31, 2008.

Structural Stability of Hollow Oxide Nanoparticles at High Temperatures (poster), *R. Nakamura, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Morphology Change of Core-Shell Type Metal Nanoparticles through Heat Treatment (poster), *K. Taniguchi, R. Nakamura, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Fabrication of Lotus-type Porous Copper by Thermal Decomposition Method using Titanium Hydride (poster), *T. Ide, H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Synthesis of Ag nanorods and application to soft die attaching, *J. Jiu, K. Murai, K.S. Kim and K. Suganuma: 7th IEEE Conference on Polymers & Adhesives in Microelectronics & Photonics, Germany, August 17-20, 2008.

Effects of reflow atmosphere and flux on Sn whisker growth of Sn-Ag-Cu, *A. Baated, K.S. Kim, K. Suganuma, S. Huang, M. Ueshima, B. Jurcik, S. Nozawa: 2008 International Materials Research Conference, Chongqing, China, June 9-12, 2008.

Whisker Growth Behavior of Tin and Tin Alloy Lead-Free Finishes (invited), *K. Suganuma, K.S. Kim, S.S. Kim, A. Baated, K. Hamasaki: 138th TMS Annual Meeting & Exhibition, San Francisco, CA, USA, Feb.15-19, 2009.

Whisker Growth on Sn Plating with or without Surface Treatment during Heat and Humid Environments, *K.S. Kim, S.S. Kim, A. Baated, K. Hamasaki, K. Suganuma, M.Tsujimoto, I.Yanada: 138th TMS Annual Meeting & Exhibition, San Francisco, CA, USA, Feb.15-19, 2009.

The Anomalous Hall Effect in an Anisotropic Ferromagnet PrBaCo₂O_{5+x} (poster), A.A. Taskin, I. Tsukada, and Yoichi Ando: Symposium on Topological Aspects of Solid State Physics, Kyoto, Japan, June 24, 2008.

Two gap energy scales in La_{2-x}Sr_xCuO₄ observed by angle-resolved photoemission spectroscopy (poster), T. Yoshida, M. Hashimoto, K. Tanaka, N. Mannella, Z. Hussain, Z.-X. Shen, A. Fujimori, M. Kubota, K. Ono, S. Komiyama, Y. Ando, H. Eisaki, and S. Uchida: International Symposium on Anomalous Quantum Materials (ISAQM2008), Tokyo, Japan, November 7-10, 2008.

Chemical potential jump between hole- and electron-doped high-T_c superconductors of Y-based system (poster), M. Ikeda, M. Takizawa, T. Yoshida, A. Fujimori, K. Segawa, and Y. Ando: 9th Korea-Japan-Taiwan Symposium on Strongly Correlated Electron System, Taiwan, November 21, 2008.

Magnetotransport Properties of Carrier-controlled PbS Single Crystals (poster), K. Eto, T. Kusunose, K. Segawa, and Y. Ando: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Magnetic field-induced modification of superfluid density and interplane spectral weight in YBa₂Cu₃O_y, A. Laforge, W. Padilla, K. Burch, Z. Li, A. Schafgans, K. Segawa, Y. Ando, and D. Basov: 2009 APS March Meeting, Pittsburgh, USA, March 18, 2009.

Quasiparticle interference above and below T_c in underdoped cuprates, A. Pushp, C. Parker, A. Pasupathy, K. Gomes, S. Ono, Y. Ando, J. Wen, Z. J. Xu, G. Gu, and A. Yazdani: 2009 APS March Meeting, Pittsburgh, USA, March 19, 2009.

Formation of Pore in Silicon by Solidification under a High Static Magnetic Field in Hydrogen-Argon Mixed Gas (poster), *S. Ueno, H. Kobatake, H. Fukuyama, S. Awaji, H. Nakajima: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Fabrication of TiN Coatings by Ultrasonic-based Coating Process (poster), *N. Hayashi, S. Romankov, S. Komarov, S. Ueno, H. Nakajima, E. Kasai: The 12th Sanken International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Fabrication of Porous Magnesium Spinel with Cylindrical Pores by Unidirectional Solidification (poster), *S. Ueno, T. Akatsu and H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Effects of Static Magnetic Field and Gas Atmosphere on Solidification of Silicon by Electromagnetic Levitation (poster), *S. Ueno, H. Kobatake, H. Fukuyama, S. Awaji and H. Nakajima: International Conference on Advanced Structural and Functional Materials Design 2008, Osaka, Japan, November 10-12, 2008.

Uncertainty Measurement in SCHF-DT Method Using Lotus-type Porous Copper (poster), *H. Chiba, T. Ogushi, H. Nakajima, S. Ueno, K. Torii and T. Tomimura: 4th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids, Barcelona, Spain, July 9-11, 2008.

Accuracy Verification of Steady State Comparative-Longitudinal Heat Flow Method Using Specimen of Different Thickness for Measuring Thermal Conductivity of Lotus-Type Porous Metals (poster), *H. Chiba, T. Ogushi, H. Nakajima, S. Ueno, K. Torii, T. Tomimura, F. Ono: 1st International Symposium on Thermal Design and Thermophysical Property for Electronics, Tsukuba, Japan, June 18-20, 2008.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

中嶋 英雄	Sixth International Conference on Porous Metals and Metal Foaming Technology (MetFoam2009) (組織委員会委員)
中嶋 英雄	High Temperature Materials and Progress (国際編集委員)
中嶋 英雄	Diffusion and Defect Data (編集顧問)
中嶋 英雄	Materials Science Foundations (編集顧問)
中嶋 英雄	International Conference on New Frontiers of Process Science and Engineering in Advanced Materials (組織委員会委員)
中嶋 英雄	5th International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (組織委員会委員)
中嶋 英雄	International Conference on Eco-Materials Processing and Design 2010 (組織委員会委員)
中嶋 英雄	3rd International Symposium on Cellular Metals for Structural and Functional Applications (プログラム委員会委員)
中嶋 英雄	International Conference on Advanced Structure and Functional Materials Design (組織委員会委員)
中嶋 英雄	THRMEC 2009 International Conference on Advanced Materials (国際顧問)
菅沼 克昭	TMS Annual Meeting (組織委員)
菅沼 克昭	Electronic Components and Technology Conference (ECTC) (組織委員)
安藤 陽一	9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (組織委員)
安藤 陽一	12th Sanken International Symposium (委員長)

[国内学会]

エレクトロニクス実装学会	1 件
日本金属学会	4 件
高温学会	1 件
日本物理学会	9 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円
基盤研究 (C)	
上野 俊吉	高次構造制御酸化多孔体の生成メカニズム解明と触媒担体としての応用
	100

[受託研究]

菅沼 克昭	電子情報技術産業協会	電子実装の信頼性向上のためのウ	8,479
-------	------------	-----------------	-------

菅沼 克昭	新機能素子研究開発協会	イスカ防止技術の開発 SiC デバイス実装に対応可能な ハイブリッド銀ペーストの開発	14,700
-------	-------------	--	--------

[共同研究]

菅沼克昭	上村工業（株）	錫めっきウイスカの研究	420
------	---------	-------------	-----

ソフト材料基盤研究グループ

教授 (兼任) 真嶋 哲朗 (グループ長)、笹井 宏明
特任助教 坂本 雅典、竹中 和浩(～平成 20 年 12 月 15 日)、
CHENNAN Ramalingan (平成 21 年 2 月 1 日～)

a) 概要

光・電子機能、分子認識、触媒作用、高次構造、機能集積などの機能性分子の機能解明に基づいて、機能性有機分子、高分子、生体分子などの設計・合成・集合化・組織化を達成し、新しい機能性分子材料に関する研究を行う。

b) 成果

・2 波長 2 レーザーを用いた三次元光加工技術の開発

フレキシブル化や三次元化は、電子機器の高機能化、小型、軽量化を推進していく上で欠くことのできない重要な技術と考えられている。光によって三次元構造を形成する技術は、高価なフォトマスクや手間のかかる過程を伴わずに複雑な形状の加工を行うことが可能なため、さまざまな用途への応用が期待されている。

我々は、独自の三次元加工技術として 2 波長 2 レーザーを用いる技術を研究している。この技術は、前駆体および金属イオンを含む媒体に波長の異なる 2 つのレーザーを照射し、レーザーの交点に励起ラジカル等の反応活性種を生成させることによって金属イオンを還元して金属ナノ粒子を作成するというものである。交点を動かすことによって自在に金属ナノ粒子アレイを作成することができるため、三次元光加工技術として応用できる。

今年度は、前年度までの研究で得られた基礎データを生かして 2 波長 2 レーザー導入加工装置を開発し、実際にポリ酢酸ビニル、ポリメチルメタクリレート等の樹脂中において三次元的に金属ナノ粒子を作成することに成功した。2 波長 2 レーザーの照射により媒体中に自在に金属ナノ粒子を作成することができることを確認した他、レーザー強度を調整することにより、樹脂中に空孔やトンネルを作成することができることを発見した。一連の研究結果から、2 波長 2 レーザーを用いることにより、従来法では困難であった様々な光加工が可能となることが示された。

・顕微分光法による金クラスターの形成過程および光化学反応性の調査

直径 2 nm 以下の金クラスターは、バルク金属ともより粒径の大きなナノ粒子とも異なる性質を示すため、様々な分野で注目を集めている。光還元により高分子中で金クラスターを作成し、単一分子蛍光分光法を用いてその成長過程および光反応性を調査した。

HAuCl₄および光増感剤 (Irgacure-2959) を含むポリ酢酸ビニル薄膜にレーザー (408 nm) を照射することにより、HAuCl₄を光還元し、金クラスターを作成した。この過程を単一分子蛍光分光法により観察すると、光照射に伴い、クラスターの生成が確認された。単一クラスターの蛍光スペクトルの分布を調べると 17 個と 12 個以下の金原子からなるクラスターが主に形成されていることがわかった。また、このスペクトル分布は実験時間中に変化しないことから、金クラスターの分布は準安定な状態になっていることが示唆された。すなわち、成長過程においてクラスターのサイズ分布は安定なものに偏っていることがわかった。また、金クラスターの光反応性を調査し、金クラスターの励起状態から酸素への電子移動が起こることを発見した。

・キラルスピロビスイソキサゾリン-パラジウム錯体触媒による新規エナンチオ選択的環化反応

キラルなスピロビスイソキサゾリン配位子 (SPRIX) とパラジウムから成る触媒が、Pd(IV)中間体を經由するエニン類の酸化的環化反応において有効であることを見出し、合成化学的に有用な二環式ラ

クトンの高エナンチオ選択的合成に成功した。すなわち、Pd-SPRIX 錯体を不斉触媒に用い、超原子価ヨウ素試薬を酸化剤として加え、酢酸-アセトニトリル混合溶媒中 30 °Cにて基質であるエニン化合物を反応させたところ、四級不斉炭素を有する二環式 γ -ラクトンが最高 95% ee で得られた。これは、Pd(II)/Pd(IV)サイクルを経るエナンチオ選択的触媒反応の初めての例である。

先述したエナンチオ選択的 Pd(II)/Pd(IV)触媒反応と併せ、以前より展開している Pd(0)/Pd(II)機構に準じた触媒的不斉合成に関しても検討した。その結果、6-endo-trig 型で進行する新規不斉環化反応の開発に成功した。すなわち、2-アシルフェノール類に *p*-ベンゾキノン存在下 Pd-SPRIX 触媒を作用させると酸化的環化反応が進行し、収率、エナンチオ選択性ともに中程度ながらも利用価値の高いクロメン誘導体が得られた。

・不斉合成法を利用するハイブリッド型キラルスピロ配位子の効率的創製

不斉合成を利用した新規ハイブリッド型キラルスピロ配位子の効率的合成法を開発した。別途調製した光学活性なアルコールとマロン酸ジエステルから常法により鍵中間体となるジオキシムを合成した後、鍵段階となるジアステレオ選択的ダブルニトリルオキシド環化付加反応を行うことで、目的とする光学活性キラルスピロ（イソオキサゾール-イソオキサゾリン）配位子の合成に成功した。

・キラルスピロピラクトムを基盤とした機能性化合物の開発

以前に創製に成功した光学的に純粋なスピロピラクトムを基幹物質として用い、不斉触媒反応への応用に即した化合物群の開発を試みた。分子内ダブル Buchwald-Hartwig 反応を活用する不斉合成により簡便に得られるスピロピラクトムに、求電子芳香族ブロモ化、ヒドリド還元など通常の有機合成手法を施し、環境調和性の高い相間移動触媒として機能するジアンモニウム塩や、キラルスピロ骨格の特異的不斉環境を生かしたキラルビス（アミン-ホスフィン）配位子などの合成に成功した。

[原著論文]

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in bis-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: J. Phys. Chem. A, 112 (31) (2008) 7208-7213.

Excitation Energy Dependence of Photoinduced Processes in Pentathiophene-Perylenediimide Dyads with a Flexible Linker, M. Fujitsuka, K. Harada, A. Sugimoto, and T. Majima: J. Phys. Chem. A, 112 (41) (2008) 10193-10199.

Photodecomposition Profiles of β -Bond Cleavage of Phenylphenacyl Derivatives in the Higher Triplet Excited States during Stepwise Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: J. Phys. Chem. A, 112 (45) (2008) 11306-11311.

Properties of Excited Radical Cations of Substituted Oligothiophenes, S. Samori, M. Fujitsuka, and T. Majima: J. Phys. Chem. A, 112 (45) (2008) 11312-11318.

Photoinduced Charge Transfer Processes on MOF-5 Nanoparticles: Elucidating Differences between Metal-Organic Frameworks and Semiconductor Metal Oxides, T. Tachikawa, J. R. Choi, M. Fujitsuka, and T. Majima: J. Phys. Chem. C, 112 (36) (2008) 14090-14101.

Iodine-Doped TiO₂ Photocatalysts. Correlation between Band Structure and Mechanism, S. Tojo, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: J. Phys. Chem. C, 112 (38) (2008) 14948-14954.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate, S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: J. Phys. Chem. C, 112 (49) (2008) 19625-19634.

Spatial Control of Protein Binding onto Lipid Bimembrane Using Photoeliminative Linker, K. Nakayama, T. Tachikawa, and T. Majima: *Langmuir (Letter)*, 24 (13) (2008) 6425-6428.

Fine-Tuning of Radiolysis Induced Emission by Variable Substitution of Donor-/Acceptor-Substituted Tetrakis(arylethynyl)benzenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, E. L. Spitler, M. M. Haley, and T. Majima: *J. Org. Chem.*, 73 (9) (2008) 3551-3558.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu^{3+} -Doped TiO_2 Nanocrystals Revealed at the Single-Particle or Single-Aggregate Level, T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 47 (29) (2008) 5348-5352.

Two-laser-guided Three-dimensional Microfabrication and Processing in Flexible Polymer Matrix, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Adv. Mater.*, 20 (18) (2008) 3427-3432.

Charge transfer in DNA assembly: effects of sticky end, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2008) 2656-2658.

Two Different Mechanisms Operating in Photoinduced Electron Transfer of 1,8-Naphthalimide-linker-phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 10 (30) (2008) 4393-4399.

Kinetic of charge transfer in DNA containing a mismatch, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima: *Nucl. Acids Res.*, 36 (17) (2008) 5562-5570.

Triplet Level Dependent Photoluminescence and Photoconduction Properties of π -Conjugated Polymer Thin Films Doped by Iridium Complexes, J. An, J. Chang, J. Han, C. Im, Y.-J. Yu, D. H. Choi, J.-I. Jin, and T. Majima: *J. Photochem. Photobiol. A*, 200 (2-3) (2008) 371-376.

Photoreactivity of As-Fabricated Au Clusters at the Single-Cluster Level, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (1) (2009) 6-7.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO_2 Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures, K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Am. Chem. Soc. (Commun.)*, 131 (3) (2009) 934-936.

α -Bond Dissociation of *p*-Phenylbenzoyl Derivatives in the Higher Triplet Excited State during Two-color Two-laser Flash Photolysis, M. Yamaji, X. Cai, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 113 (9) (2009) 1696-1703.

Electron Transfer in Supramolecular Donor-Acceptor Dyad of Zinc Porphycene, M. Fujitsuka, H. Shimakoshi, S. Tojo, L. Cheng, D. Maeda, Y. Hisaeda, and T. Majima: *J. Phys. Chem. A*, 133 (14) (2009) 3330-3335.

Intramolecular Dimer Radical Anion of $[3_n]$ Cyclophanes: Transannular Distance Dependent Stabilization Energy, M. Fujitsuka, S. Tojo, T. Shinmyozu, and T. Majima: *Chem. Commun.*, (2009) 1553-1555.

Divergent Synthesis of Chiral Spiro (Isoxazole-isoxazoline) Hybrid Ligands, K. Takenaka, S. Nakatsuka, T. Tsujihara, P. S. Koranne, H. Sasai: *Tetrahedron: Asymmetry*, 19 (21) (2008) 2492-2496.

Dicationic Palladium(II)–Spiro Bis(isoxazoline) Complex for Highly Enantioselective Isotactic Copolymerization of CO with Styrene Derivatives, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai: *Synlett*, (2) (2009) 310-314.

Pd^{II}/Pd^{IV} Catalytic Enantioselective Synthesis of Bicyclo[3.1.0]hexanes via Oxidative Cyclization of Enynes, T. Tsujihara, K. Takenaka, K. Onitsuka, M. Hatanaka, H. Sasai: *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (10) (2009) 3452-3453.

Enantioselective Synthesis of C₂-Symmetric Spiro lactams via Pd-Catalyzed Intramolecular Double N-Arylation, K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: *Org. Lett.*, 11 (7) (2009) 1483-1486.

Regio- and Enantioselective Allylation of Indole Catalyzed by a Planar-chiral Cyclopentadienyl–Ruthenium Complex, K. Onitsuka, C. Kameyama, H. Sasai: *Chem. Lett.*, 38 (5) (2009) 444-445.

[解説、総説]

DNA 中の電荷移動、真嶋哲朗、*化学と生物*、46[8] (2008) 520-522.

新規酸化チタンナノ粒子光触媒の開発、立川貴士、真嶋哲朗、*ケミカルエンジニアリング*、53[8] (2008) 17-23.

ユーロピウムイオンをドーブした発光性酸化チタンナノ粒子 —単一粒子分光法による発光測定—、立川貴士、真嶋哲朗、*セラミックス*、43[11] (2008) 958-960.

2 波長 2 レーザー照射による樹脂内に金属微粒子アレイの作成技術、坂本雅典、真嶋哲朗、*Polyfile*、45[538] (2008).

単一分子の観測から広がる化学研究—酸化チタン光触媒反応への応用—、立川貴士、真嶋哲朗、*化学*、64[1] (2009) 55-60.

2 波長 2 レーザーによる三次元加工、坂本雅典、真嶋哲朗、*生産と技術*、61[1] (2009) 55-61.

Light as a Construction Tool of Metal Nanoparticles: Synthesis and Mechanism, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, *J. Photochem. Photobiol. C*, 10[1] (2009) 33-56.

DNA の物理化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「物理化学」6.生物物理化学 (2009) ①-83.

DNA の光電子移動反応、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「有機化学」12.光化学 3.電子移動 (2009) ⑥-54.

DNA 光化学、真嶋哲朗、日本化学会ディビジョンレポート「光化学」13.光生命科学 (2009) ②-16.

量子収率と光化学、真嶋哲朗、*光化学*、40[1] (2009) 巻頭言.

複数の構成要素を持つ不斉触媒“Multicomponent asymmetric catalyst (MAC)”の固定化、滝澤忍、荒井孝義、笹井宏明、*有機合成化学協会誌*、67[3] (2009) 194-207.

Development of chiral spiro ligands for metal-catalyzed asymmetric reactions, G. B. Bajracharya, M. A. Arai, P. S. Koranne, T. Suzuki, S. Takizawa, and H. Sasai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 82[3] (2009) 285-302.

Dinuclear chiral vanadium catalysts for oxidative coupling of 2-naphthols via a dual activation mechanism, S. Takizawa, T. Katayama, and H. Sasai, Chem. Commun., [35] (2008) 4113-4122.

[著書]

“Consecutive adenine sequences serve as potential targets in photosensitized oxidative DNA damage”, K. Kawai and T. Majima, Nova, USA, (2008).

[特許]

「レーザー 3 次元光加工」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-161367

「金属クラスターの作成方法」、真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2008-276335

「新規バナジウム化合物」滝澤忍、笹井宏明、片山智美、特開 2008-63250

[国際会議]

Development of New TiO₂ Photocatalyst: Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligands to S₂-Excited Tetraphenyl Porphyrins (invited), T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 213th Electrochemical Society meeting, Phoenix, USA, May 20, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 10th International Workshop on Radiation Damage to DNA, Fukushima, Japan, Jun. 8-12, 2008.

Real-Time Single Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species with Fluorescent Probes: Applications to TiO₂ Photocatalysts (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Single-Molecule Detection of Hole Transfer Through DNA (poster), *T. Tadao, M. Fujitsuka, and T. Majima: 21st IUPAC Symposium on Photochemistry, Gothenburg, SW, Jul. 28, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), *T. Majima, K. Kawai, and M. Fujitsuka: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

3-D Writing of metal nanoparticles in a polymer matrix with two-color laser beams (poster), *M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: 236th ACS National Meeting, Philadelphia, PA, Aug. 17-21, 2008.

Charge Transfer in DNA, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima: 2nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008), Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Intermolecular Photoinduced Electron-Transfer of 1,8-Naphthalimides in Protic Polar Solvents (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju,

Korea, Sep. 27, 2008.

Intramolecular Excimer Formation and Photoinduced Electron Transfer Process in *bis*-1,8-Naphthalimide Dyads Depending on the Linker Length (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Reversible Intramolecular Triplet-Triplet Energy Transfer in Benzophenone-*N*-methylphthalimide Dyad (poster), *S. S. Kim, M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima: 2008 KOREA-JAPAN Symposium on Frontier Photoscience, Jeju, Korea, Sep. 27, 2008.

Three-dimensional Fabrication of Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: Langmuir Symposium in Beijing, Beijing, China, Oct. 31, 2008.

Photochemical Fabrication of 3D Metal Nanoparticles in Polymer Matrix (invited), T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Solvent Effects on Photoinduced Electron Transfer in 1,8-Naphthalimide Dyads (poster), *D. W. Cho, U. C. Yoon, M. Fujitsuka, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Inter- and/or Intramolecular Excimer and Exciplex Emission in 1,8-Naphthalimide Derivatives (poster), *D. W. Cho, M. Fujitsuka, U. C. Yoon, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Emission Mechanism of Doubly Orth-Linked Quinoxaline/Diphenylfluorene or *cis*-Stilbene/Fluorene Hybrid Compounds Based on the Transient Absorption and Emission Measurements during the Pulse Radiolysis (poster), Y. Wei, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-S. Lin, *C.-T. Chen, and T. Majima: 5th Asian Photochemistry Conference, Beijing, China, Nov. 1-4, 2008.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 9th Int Symp Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Application, Shanghai, China, Nov. 11, 2008.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reaction in TiO₂ Nanotube: Importance of Molecular Transport through Porous Structures (poster), *K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: Osaka University Forum in San Francisco: Global COE Program, Bio-Environmental Chemistry, San Francisco, USA, Dec.8-11, 2008.

Bilateral Cooperation between Korea and Japan: To the Future (invited), T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Design of Cyclic Reaction Driven by the Two-color Two-photon Excitation (poster), M. Sakamoto, *S. S. Kim, M. Fujitsuka, T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The 21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Interfacial Electron Transfer Dynamics in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), *S.-C. Cui, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: International Symposium on Core University Program between Japan and Korea -New Processing and Nanostructure/Property Relationship for Multi-functional Materials - (The

21st JSPS-KOSEF CUP Seminar between Japan and Korea), Awajishima, Japan, Dec. 15, 2008.

Development of TiO₂ Photocatalyst: Real-Time Single Molecule Imaging of TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: The 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Xi'an, China, Jan. 13-16, 2009.

Single Molecule Imaging of the TiO₂ Photocatalytic Reactions (invited), T. Majima: 2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion, Pohang, Korea, Jan. 20, 2009.

Interfacial Electron Transfer Process in a Single CdTe Quantum Dot-Pyromellitimide Conjugate (poster), S.-C. Cui, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Defect-Mediated Photoluminescence Dynamics of Eu³⁺-Doped TiO₂ Nanocrystals Revealed at the Single-Particle Level (poster), *T. Tachikawa, T. Ishigaki, J.-G. Li, M. Fujitsuka, and T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Single-Molecule Observation of Photocatalytic Reactions in Mesoporous TiO₂ Nanotube (poster), K. Naito, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and *T. Majima: The 12th SANKEN International Symposium 2007 / SANKEN Nanotechnology Symposium / SANKEN MSTEC Symposium, Suita, Japan, Jan. 22, 2009.

Development of New TiO₂ Photocatalyst (invited), T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Approach Toward Efficient Photo-electronic Devices by Supramolecular Chemistry (invited), *M. Fujitsuka, A. Sugimoto, and T. Majima: The 1st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials, Seoul, Korea, Feb. 27, 2009.

Real-Time Single-Molecule Imaging of the Spatial and Temporal Distribution of Reactive Oxygen Species Generated on TiO₂ Photocatalysts (invited), T. Majima: Asian Academic Seminar 2008 on "Frontiers in the Photocatalysis and Photochemistry of Advanced Materials" Kawasaki, Japan, Mar. 2-6, 2009.

Charge Transfer in DNA (invited), T. Majima: Kyudai International Symposium on Photo and Supramolecular Chemistry, Fukuoka, Japan, Mar. 7, 2009.

Catalytic Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via an Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: Third International Conference on Advanced Organic Synthesis Directed toward the Ultimate Efficiency and Practicability, Shiga, Japan, May 26-27, 2008.

Novel Enantioselective Reactions Catalyzed by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (poster), *H. Sasai, S. Takizawa, K. Takenaka, T. Tsujihara, R. N. Nadaf, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, K. Onitsuka: International Symposium on Homogeneous Catalysis (ISHC-16), Florence, Italy, July 6-11, 2008.

Chiral Dinuclear Vanadium(V) Catalyst for Dual Activation of 2-Naphthols in Oxidative Couplings, *H. Sasai, S. Takizawa, T. Katayama: 6th International Vanadium Symposium, Lisbon, Portugal, July 17-19, 2008.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, H. Sasai: The First International Symposium on Process Chemistry (ISPC 08), Kyoto, Japan, July 28-30, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by a Pd-SPRIX Complex (invited), *H. Sasai: 3rd International Conference on Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Hangzhou, China, October 19-23, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (invited), *H. Sasai: 11th International Symposium on Natural Product Chemistry, Karachi, Pakistan, October 29-November 1, 2008.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, K. Sugimoto, H. Sasai: UK/Japan Joint Symposium on Asymmetric Catalysis, Kyoto, Japan, December 8-9, 2008.

Novel Catalytic Enantioselective Reactions Promoted by Pd-SPRIX Complexes (invited), *H. Sasai: UK/Japan Joint Symposium on Asymmetric Catalysis, Kyoto, Japan, December 8-9, 2008.

Iridium-catalyzed Oxidative Dimerization, Tishchenko Reaction and Oxidative Desymmetrization (poster), *T. Suzuki, G. Kazem, N. K. Mangu, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Novel Enantioselective Reactions Catalyzed by Palladium(II)-Spiro Bis(isoxazoline) Complex (poster), T. Tsujihara, G. B. Bajracharya, P. S. Koranne, R. N. Nadaf, *K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Enantioselective Synthesis of Spiro lactams via the Intramolecular Double Buchwald-Hartwig Reaction (poster), *K. Takenaka, N. Itoh, K. Sugimoto, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

Development of Dinuclear Vanadium Catalysts and Acid-Base Organocatalysts for Enantioselective Reactions via Dual Activation Mechanism (poster), *S. Takizawa, K. Matsui, T. Katayama, N. Inoue, D. Rajesh, S. Hirata, K. Kiriya, T. Suzuki, H. Sasai: The 12th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, January 22, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

真嶋 哲朗	2007 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (組織委員長)
真嶋 哲朗	2 nd Asia-Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC-2008) (組織委員)
真嶋 哲朗	10 th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (組織委員)
真嶋 哲朗	Langmuir Symposium in Beijing 2008 (組織委員)
真嶋 哲朗	2009 Korea-Japan Workshop on Photocatalysis and Solar Conversion (組織委員)
真嶋 哲朗	1 st Hanyang-Osaka Symposium on Fusion-Tech based Materials' (組織委員)
真嶋 哲朗	Langmuir, American Chemical Society (Senior Editor)

[国内学会]

第 30 回光生物・光医学会	1 件
2008 年光化学討論会	8 件
第 23 回生体機能関連化学シンポジウム	1 件
第 51 回放射線化学討論会	2 件
日本化学会第 89 春季年会	7 件
日本化学会春季年会	12 件
有機反応懇談会	2 件
有機金属化学討論会	2 件
有機合成シンポジウム	1 件
日本薬学会	1 件
コンビケム研究会	1 件
モレキュラー・キラリティー	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究 (S)		
真嶋 哲朗	光機能性 DNA のナノサイエンス	8,840
萌芽研究		
真嶋 哲朗	光機能化タバコモザイクウイルス超分子による光電変換デバイスの創製	800
特定領域研究		
笹井 宏明	相乗的活性化により反応を促進する不斉有機触媒の創製	2,300
若手研究 (B)		
坂本 雅典	2 色 2 レーザー照射による三次元金属ナノ粒子アレイ作成技術の研究	520

[奨学寄附金]

笹井 宏明	明治製菓株式会社	1,000
笹井 宏明	ダイソー株式会社	1,200
笹井 宏明	日産化学工業	400
笹井 宏明	ナガセケムテックス	1,000

[共同研究]

真嶋 哲朗	積水化学工業株式会社	酸化チタン光触媒作用による超親水性	400
真嶋 哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノ構造を用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,732
真嶋 哲朗	トヨタ自動車株式会社	光励起還元法による高比表面積水素吸蔵合金の研究	5,000

安全・安心ヒューマンインターフェース研究プロジェクト

概要

平成17年度から新たに設置された、東北大学多元物質科学研究所との大学研究所間連携機構である、新産業創造物質基盤技術研究センターが推進するプロジェクトの1つである。安全・安心ヒューマンインターフェース研究プロジェクトは、ヒトと環境に優しい、安全で持続可能な産業基盤技術の開発を目指し、医療基盤技術とヒューマンインターフェース技術の研究・開発を推進している。医療基盤研究グループでは、生体防御を担う異物排出トランスポーターの解明とトランスポーターオリエンテッドな創薬のための基盤技術開発、最先端加速器を応用したより安全な量子ビームがん治療の基盤技術開発を行っている。またヒューマンインターフェース研究グループでは、人間と各種情報との適切なインターフェース構築に役立つセンサ・ソフトウェアシステムなどの開発、オントロジー工学を用いた知識共有化技術開発、認識機能を持つような人工生体情報ナノマテリアルの開発を推進している。

成果

- ・ 放射線がん治療の新しい可能性の探索とフェムト秒パルスラジオリシスによる水和電子の観測
- ・ デジタルマイクロミラーデバイスを用いた強度変調放射線治療のための電子ビームの高速光学変調
- ・ 赤血球の S1P 輸送体の機能解析
- ・ 細胞遊走を制御する S1P 輸送体の同定
- ・ 電子線トモグラフィ法による細胞内オルガネラの動態および宿主感染菌相互作用の解明
- ・ 各種センサデータと機械学習による対象適応状況・解析インターフェースを具体化
- ・ 安全・安心・創造的ものづくり支援のための知識共有ソフトウェア「OntoGear」の高度化と応用
- ・ 人工生体情報ナノマテリアルの開発

医療基盤研究グループ

兼任教授 吉田 陽一 (グループ長)、山口 明人
特任助教 (常勤) 西 毅 (平成20年7月15日まで)、近藤 孝文 (平成21年1月15日まで)、
西野 美都子 (平成20年9月1日から)

a) 概要

本グループでは、生体内での最初の放射線誘起反応を観察するフェムト秒パルスラジオリシスを開発し極限短パルス放射線による全く新しい効果の理論的に研究し、放射線治療の新しい可能性を探索している。そしてより安全で高機能な放射線がん治療のためにフォトカソード電子銃を用いた高度な空間・時間領域でのビーム制御技術を開発している。また、生体防御を担う異物排出輸送体発現制御機構と、生理活性脂質の細胞外への放出を担う膜輸送タンパク質の同定とその機能解析に基づいたトランスポーターオリエンテッドな創薬のための基盤技術開発を推進している。

b) 成果

・放射線がん治療の新しい可能性の探索とフェムト秒パルスラジオリシスによる水和電子の観測

放射線がん治療の新しい可能性を探索している。生体内での最初の放射線誘起反応である水和電子生成過程を観察するためにフェムト秒パルスラジオリシスを産研のレーザーフォトカソードRF電子銃LINACを用いて開発した。電子線による水和電子の生成過程の観測に初めて成功した。また、重粒子線など量子ビームの線種の違いによる放射線誘起効果を解明するために独自のイオンパルスラジオリシスシステムも開発している。加えて極限の短パルス放射線による集団励起効果を用いた全く新しい治療原理の理論的な研究を行った。

・デジタルマイクロミラーデバイスを用いた強度変調放射線治療のための電子ビームの高速光学変調

正常組織への線量を低減し、がん組織に線量を集中する強度変調と、呼吸などへの高速追従を実現するより安全な放射線がん治療を目指して、電子ビーム整形や強度変調の高精度化・高速化の研究を行った。フォトカソード電子銃と光変調素子にデジタルマイクロミラーデバイス(DMD)を用い、DMDでレーザー光を整形することにより、電子ビームの整形に成功した。DMDを用いて電子ビームの動きの高速制御に成功した。

・赤血球のS1P輸送体の酵素生化学的性質の解明と新規S1P輸送体の同定

我々は昨年度までにS1Pの血小板及び赤血球からの放出に輸送体が関与することを見だし、赤血球の反転膜を用いてATP存在下で時間依存的なS1Pの取り込みを測定できる系を構築した。そこで本年度は赤血球のS1P輸送体の酵素生化学的性質を詳細に検討した。赤血球のS1P輸送体はS1PとATPの濃度依存的に活性が上昇し、その K_m はそれぞれ $21\mu\text{M}$ と $130\mu\text{M}$ であった。この輸送体の活性はABCA輸送体の阻害剤であるGlyburideとV型ATPaseの阻害剤であるBafilomycin A1およびATPaseの阻害剤であるvanadateによって阻害された。しかし、他のABC輸送体やATPaseの阻害剤及び各種イオノフォアやキレーターによって活性は阻害されなかった。さらにS1Pの輸送は他のスフィンゴリン脂質によって阻害を受けなかったことから、この輸送体は高い基質特異性を持つことが示唆された。一方、この輸送体はATPの非加水分解アナログであるAMP-PMPによってもS1Pの輸送活性を示したことから、輸送にはATPの加水分解エネルギーを必要としていないことを明らかにした。これらの結果は赤血球に存在するS1P輸送体はこれまで明らかになっていない新しい種類の輸送体である可能性を示唆している。また同時に、我々は機能未知のオーファン輸送体の機能解析を進めることで、S1P輸送活性を持つ輸送体を同定することに成功した。この輸送体の機能欠損によりゼブラフィッシュにおける心臓前駆細胞の移動を阻害し、二股心臓になることが見いだされた。この表現型はS1P受容体で見られるものと同じであり、その輸送体の配列がバクテリアのMFS型輸送体と相同性を示したことから、S1P輸送体である可能性が考えられた。そこで、この輸送体をS1Pを高濃度蓄積している細胞に発現させると時間依存的なS1P輸送活性を示した。これは個体での生理機能を持つS1P輸送体としては世界最初の同定であり、今後の創薬への展開が期待できる。

・電子線トモグラフィーによる神経終末内膜系の3D解析

ダイナミン1KOマウスを作成し、神経細胞を電子顕微鏡により解析した。その結果、KOマウスのシナプス終末には多数のクラスリン被覆構造体が蓄積していることを見出した。さらに電子線トモグラフィー法を用いてこの構造体の高解像度の情報を得た。さらにシナプス終末のほぼ全体のトモグラムを得

ることに成功し、解析した結果、生体内においてダイナミン1がクラスリン被覆小胞を細胞から切断するのに重要であることを明らかにした。

[原著論文]

Dynamic Optical Modulation of an Electron Beam on a Photocathode RF Gun: Toward Intensity-Modulated Radiation Therapy (IMRT), T. Kondoh, H. Kashima, J. Yang, Y. Yoshida, S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1142–1147.

Effects of emittance and space-charge in femtosecond bunch compression, K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: Nucl. Instrum. Methods A, 597 (2008) 126–131.

Reactions of Solvated Electrons with Imidazolium Cations in Ionic Liquids, K. Takahashi, T. Sato, Y. Katsumura, J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, R. Katoh: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1239–1243.

Molar Absorption Coefficient and Radiolytic Yield of Solvated Electrons in Diethylmethyl(2-methoxy)ammonium bis (trifluoromethanesulfonyl)imide Ionic Liquid, A. Asano, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, R. Nagaishi, K. Takahashi, Y. Yoshida: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1244–1247.

Picosecond Pulse Radiolysis: Dynamics of Solvated Electrons in Ionic Liquid and Geminate Ion Recombination in Liquid Alkanes, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, R. Nagaishi, M. Taguchi, K. Takahashi, R. Katoh, S. V. Anishchik, Y. Yoshida, S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1233–1238.

Study on the Reaction of Chlorophenols in Room Temperature Ionic Liquids with Ionizing Radiation, A. Kimura, M. Taguchi, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, K. Hirota: Radiat. Phys. Chem., 77 (2008) 1253–1257.

Extension of the Heavy Ion Beam Pulse Radiolysis Using Scintillators, T. Kondoh, J. Yang, K. Kan, Y. Yoshida, H. Shibata, S. Kurashima, M. Taguchi and K. Hirota: JAEA-Review, 55 (2008) 158.

Secreted indole serves as a signal for expression of type III secretion system translocators in enterohaemorrhagic *Escherichia coli* O157:H7, H. Hirakawa, T. Kodama, A. Takumi-Kobayashi, T. Honda and A. Yamaguchi: Microbiology, 155 (pt2) (2009) 541-550.

The Sphingolipid Transporter Spns2 Functions in Migration of Zebrafish Myocardial Precursors, A. Kawahara, T. Nishi, Y. Hisano, H. Fukui, A. Yamaguchi and N. Mochizuki: Science, 323 (5913) (2008) 524-527.

An Atg4B mutant hampers the lipidation of LC3 paralogues and causes defects in autophagosome closure, N. Fujita, M. Hayashi-Nishino, H. Fukumoto, H. Omori, A. Yamamoto, T. Noda and Y. Tamotsu: Mol Biol Cell, 19 (11) (2008) 6451-6459.

Physiological functions of drug efflux systems in Gram-negative bacteria: Their roles in bacterial drug resistance and virulence, K. Nishino and A. Yamaguchi: Jpn. J. Chemother., 56 (4) (2008) 443-452.

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Pumps in *Escherichia coli* and *Salmonella*, K. Nishino and A. Yamaguchi: Bioscience and Microflora, 27 (3) (2008) 75-85.

AcrS/EnvR Represses the Expression of the acrAB Multidrug Efflux Genes in *Escherichia coli*, H. Hirakawa, A. Takumi-Kobayashi, U. Theisen, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi: J. Bacteriol., 190 (18) (2008) 6276-6279.

AcrAB Multidrug Efflux Pump Regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium by RamA in Response to Environmental Signals, E. Nikaido, K. Nishino and A. Yamaguchi: J. Biol. Chem., 283 (35) (2008) 24245-24253.

Role of Xenobiotic Transporters in Bacterial Drug Resistance and Virulence, K. Nishino and A. Yamaguchi: IUBMB Life, 60 (9) (2008) 569-574.

Cell- and stimulus-dependent heterogeneity of synaptic vesicle endocytic recycling mechanisms revealed by studies of dynamin 1-null neurons., M. Hayashi, A. Raimondi, E. O'Toole, S. Paradise, C. Collesi, O. Cremona, S. M. Ferguson, P. De Camilli.: Proc. Natl. Acad. Sci. U S A, 105 (6) (2008) 2175-2180.

[解説、総説]

トランスポーターによる多剤認識の構造的基礎、山口明人、中島良介、遺伝子医学 MOOK12、12 (2009) 61-66

シナプス小胞再生経路におけるダイナミン 1 の選択的役割、西野一林美都子、Pietro De Camilli、蛋白質核酸酵素、53 [16] (2008) 2225-2230

グラム陰性菌における薬剤排出システムの役割、西野邦彦、山口明人、日本化学療法学会雑誌、56 (2008) 443-452

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Pumps in *Escherichia coli* and *Salmonella*, K. Nishino and A. Yamaguchi, Bioscience and Microflora, 27 (2008) 75-85

シナプス終末の内膜系を 3D で見る、西野一林美都子、山口明人、細胞工学、別冊 (2008) 107-113

多剤排出トランスポーターの構造と多剤認識・排出機構、山口明人 (分担執筆)、トランスポーター科学最前線、(2008) 305-320

[特許]

「スフィンゴシン 1-リン酸の新規トランスポーター分子」望月直樹、川原敦雄、西毅、山口明人、特願 2008-245177

[国際会議]

Spatial Resolution and Contrast of the Intensity Modulated Electron Beam by the Photocathode RF Gun for the Radiation Therapy (poster), T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, H. Kashima, K. Kan, K. Norizawa, A. Ogata, S. Tagawa: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Femtosecond Photocathode Electron Source (poster), J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, K. Tanimura, Y. Yoshida, J. Urakawa: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Collective Ionization by Attosecond Electron Bunches (poster), A. Ogata, T. Kondoh, K. Norizawa, J. Yang, Y. Yoshida: The 11th European Particle Accelerator Conference(EPAC'08), Genoa, Italy, June 23-27, 2008.

Pulse Radiolysis Study of Ion-Species Effects on the Solvated Electrons in Alkyl Ammonium Ionic Liquids, T. Kondoh, A. Asano, J. Yang, K. Norizawa, K. Takahashi, M. Taguchi, R. Nagaishi, R. Katoh, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Breaking Time-Resolution Limits in Pulse Radiolysis, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida, S. Tagawa: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Pulse Radiolysis Study of Trapped Electron in MgSO₄·7H₂O Single Crystal (poster), K. Norizawa, T. Kondoh, J. Yang, A. Ogata, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Observation of Optical Reflection Change due to Electron Pulse Irradiation in GaAs for Femtosecond Electron Pulse Measurement (poster), K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 2nd Asia Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Waseda, Tokyo, Japan, Aug. 29-Sep. 1, 2008.

Development of Heavy Ion Beam Pulse Radiolysis in a Single Ion Nano-track (poster), T. Kondoh, J. Yang, K. Kan, Y. Yoshida, K. Norizawa, H. Shibata, M. Taguchi, S. Kurashima, T. Kojima and K. Hirota: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Study of Electron-induced Ultrafast Phenomena in GaAs for Femtosecond Electron Measurement (poster), K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International

Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Femtosecond Pulse Radiolysis for Study of Nanofabrication Process (poster), J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Sep. 29-Oct. 1, 2008.

Femtosecond reaction analysis based on a femtosecond electron beam and a femtosecond laser light (poster), J. Yang, T. Kondoh, K. Norizawa, Y. Yoshida: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

Optical Modulation of Electron Beam by Digital Micromirror Device for Radiation Therapy based on Photocathode RF Gun (poster), T. Kondoh, H. Kashima, J. Yang, K. Kan, K. Norizawa, A. Ogata, Y. Yoshida, S. Tagawa: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

Optical Absorption Spectrum of Hydrated Electron in MgSO₄ Aqueous Solution (poster), K. Norizawa, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida: The 12th Sanken International Symposium, Jan. 22, 2009.

AcrAB multidrug efflux pump regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium in response to indole (poster), I. Shirosaka, E. Nikaïdo, K. Nishino and A. Yamaguchi: 12th Sanken International Symposium/7th nanotechnology center international symposium/2nd MSTEC international symposium/1st Sanken Alliance Symposium(22 Jan. 2009, Osaka).

Sphingosine-1-phosphate (S1P) Release From Erythrocytes Mediated By ATP-dependent Transporter (poster), N. Kobayashi, N. Kobayashi, T. Nishi and A. Yamaguchi: 12th Sanken International Symposium/7th nanotechnology center international symposium/2nd MSTEC international symposium/1st Sanken Alliance Symposium(22 Jan. 2009, Osaka).

Electron Tomography Revealed the Endoplasmic Reticulum as a Cradle for Autophagosome Formation (poster), M. Hayashi-Nishino, N. Fujita, T. Noda, A. Yamaguchi, T. Yoshimori and A. Yamamoto: The American Society for Cell Biology 48th Annual Meeting, San Francisco, 2008.13-17 December.

AcrAB multidrug efflux pump regulation in *Salmonella enterica* serovar Typhimurium by RamA in response to environmental signals, K. Nishino, E. Nikaïdo and A. Yamaguchi: The Awaji International Forum on Infection and Immunity, Awaji Island(10 Sep. 2008, Hyogo).

Regulatory network of multidrug efflux pumps reveals their physiological role in *Salmonella virulence* K. Nishino and A. Yamaguchi: Gordon Research Conference (6-11 Jul. 2008, MA, USA).

Molecular Design of the Carbenicillin Hyper-Resistance AcrB Multidrug Exporter in *Escherichia coli* (poster), A. Iwata, N. Kobayashi, S. Murakami and A. Yamaguchi: 22nd Annual Symposium of The Protein Society (July 19-23, 2008, San Diego, California USA).

Structure and Mechanism of the Tripartite Multidrug Exporter, A. Yamaguchi: The Joint 4th AOHUPO(Asian Oceania Human Proteome Organisation) and 2nd PRICPS(Pacific Rim International Conference on Protein Science) (22-26 Jun. 2008, Carins Convention Center, Australia).

Zebrafish *spinster2* involved in the migration of myocardial precursors is a novel regulator in sphingosine-1-phosphate (S1P) signaling (poster), A. Kawahara, T. Nishi, A. Yamaguchi and N. Mochizuki: 8th International Meeting on Zebrafish development & Genetics (Jun 25-29, 2008, Madison, USA).

Regulatory Network of Multidrug Transporters Reveals their Physiological Role in *Salmonella* Virulence, K. Nishino and A. Yamaguchi: American Society for Microbiology 108th General Meeting (1-5 Jun. 2008, Boston Convention and Exhibition Center, Boston, Massachusetts).

Regulation of the AcrAB Multidrug Efflux Pump in *Salmonella enterica* by RamA in Response to Environmental Signals, E. Nikaïdo, K. Nishino and A. Yamaguchi: American Society for Microbiology 108th General Meeting (1-5 Jun. 2008, Boston Convention and Exhibition Center, Boston, Massachusetts).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

[国内学会]

日本加速器学会	4件
高崎量子応用研究シンポジウム	1件
日本放射線化学会	4件
高周波電子銃研究会	4件
日本化学会	1件
第 82 回日本細菌学会総会	4 件
第 31 回日本分子生物学会年会・第 81 回日本生化学会大会 合同大会	7 件
第 56 回日本化学療法学会西日本支部総会	1 件
第 46 回生物物理学会年会	1 件
第 61 回日本細菌学会関西支部総会	1 件
第 12 回 SPring-8 シンポジウム	1 件
第 30 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	7 件
第 60 回日本細胞生物学会大会	1 件
第 56 回日本化学療法学会総会	1 件
第 82 回日本感染症学会総会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

基盤研究 (S)

山口 明人 異物排出トランスポーターの構造・機能・制御と生理的役割 21,580

基盤研究 (A)

吉田 陽一 サブフェムト秒・アト秒パルスラジオリシス等価速度分光法の研究 10,790

[受託研究]

山口 明人 医薬基盤研究所 多剤耐性菌感染症を克服する新規治療薬の開発 93,000
保健医療分野における基礎研究推進事業

[その他の競争的研究資金]

山口 明人 武田科学振興財団 分泌輸送介在型情報伝達の解明 10,000
生命科学研究助成

[共同研究]

吉田 陽一 放射線医学総合研究所 粒子線がん治療のためのビーム制御に関する研究
吉田 陽一 住友重機械工業株式会社 フォトカソードRF電子銃と高品質電子ビームの開発
技術開発センター
吉田 陽一 日本原子力研究開発機構 イオンパルスラジオリシス法による中間活性種の挙
構・高崎研 動の解明
吉田 陽一 日本原子力研究開発機構 レーザー駆動フェムト秒電子ビームの応用に向けた
関西光科学研究所 基礎研究

ヒューマンインターフェース研究グループ

教授（兼任）	沼尾 正行（グループ長）、溝口 理一郎、 田中 秀和（平成 20 年 4 月 1 日より）
特任教授（常勤）	高藤 淳
特任助教（常勤）	福井 健一、中沢 誠、車 南燐（平成 20 年 9 月 1 日着任）

a) 概要

人に優しい安全安心技術へのパラダイムシフトに合わせた戦略的な新産業予測を行い、環境・情報・エネルギー技術の融合研究を行った。安全・安心・創造的もの作り支援のための知識共有技術、安心・安全な次世代電池のためのデータマイニング技術、最先端の集積回路形成技術として注目されているナノインプリント・リソグラフィ技術、および新産業予測に関する研究を行った。

b) 成果

・次世代固体型電池の機械特性評価のためのデータマイニング技術に関する研究(福井・沼尾)

- 1) 近年、パターン識別や機械学習で発展したカーネル法をSOM(自己組織化マップ)に適用し、損傷計測信号であるAE(Acoustic Emission)波形の分類精度の向上を図った。
- 2) 複数の損傷からなるAE波の重なりパターンを複雑ネットワークの観点から分析する方法を検討した。また、損傷の進展に伴い、AEのネットワーク構造も変化することを明らかにした。

・安全・安心・創造的ものづくり支援のための知識共有技術に関する研究(高藤・溝口)

- 1) 機能的知識外化ツール「OntoGear」の高機能化を図ると共に、標準的な方式知識コンテンツを装備することで、実用水準のソフトウェアを確立した。
- 2) 失敗知識管理やサービス・サイエンスへの応用など多角的な適用可能性を検証し、成果の一部に関して企業からの良評価を得た。

・産業構造の変化に伴う戦略的な新産業予測に関する研究（中沢）

- 1) 知財マップの応用例として、リチウムイオン二次電池に関する特許明細書を解析した。
- 2) 将来の市場を予測したシナリオ・ペーパーを解析することにより、将来の流れに乗るための研究マネジメントが可能になる。その手法について考察した。

・ナノインプリント・リソグラフィ(NIL)を用いたナノ金箔の成型（車・田中）

- 1) NILにより、10nmのナノパターンを低価格で作成できる。これにより、実際に、400nm立方の3次元の金の箱を一つの基板上に800万個以上集積した。

[原著論文]

自己組織化ネットワークによる動的クラスタの可視化編纂, 福井 健一, 斉藤 和巳, 木村 昌弘, 沼尾 正行: 人工知能学会論文誌, 23 (5) (2008) 319-329.

オントロジー工学と XML 技術に基づく技術知識統合管理プラットフォームの構築, 高藤 淳, 來村 徳信, 溝口 理一郎: 人工知能学会論文誌, 23 (6) (2008) 424-436.

[国際会議]

Sequence-based SOM: Visualizing Transition of Dynamic Clusters, Ken-ichi Fukui, Kazumi Saito, Masahiro

Kimura, Masayuki Numao: IEEE 8th International Conference on Computer and Information Technology (CIT), Sydney, Australia, July 8-11, 2008.

[国内学会]

人工知能学会	5 件
固体イオニクス学会	1 件
日本機械学会	1 件
日本デザイン学会	1 件
東北大学多元研先進融合研究若手講演会	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円
萌芽研究	
中沢 誠	産業構造変化に伴う戦略的な新産業予測に関する研究 800

[共同研究]

高藤 淳	株式会社ジャストシステム	オントロジー工学と自然言語処理を融合した知識共有に関する研究	6,500
------	--------------	--------------------------------	-------

ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス

概要

ポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術アライアンス（略称：ポストシリコンアライアンス）は、附置研究所間連携事業の新産業創造物質基盤技術のテーマの中で新たな物質創製に拡大するために、平成18年度よりポストシリコン物質・デバイス創製基盤技術研究の戦略的展開を図る目的で発足したものである。21世紀の高度情報・高齢化社会においては、安全安心・大容量・高速・省エネルギーが要求され、20世紀を支えてきたシリコン技術に相補的な基盤を与え、飛躍的な発展を促す、ポストシリコン技術の研究開発が急務となっている。この研究開発においては、物質創製からデバイス創製に至る一貫した研究体制が必要であり、個々の研究所での従来型の研究では対応し切れない。すなわち、これらの研究の効果的進展のためには、広い分野をカバーできる異分野の研究者間連携、各種の研究装置・設備の有機的使用の学際融合研究が必要である。

産研、東北大学多元物質科学研究所（多元研）、北海道大学電子科学研究所（電子研）、東京工業大学資源化学研究所（資源研）がアライアンスを組むことにより、新物質創製、加工、計測・評価、デバイス創製と一貫した研究を進めることができ、研究の格段の進展が期待できる。本事業では、各研究所が得意の分野で相互に連携を組み、相補的・協力的な附置研究所間連携によるネットワーク型研究による戦略的基盤技術開発研究の推進を図るものであり、連携のシステムに重きを置いたプロジェクトである。本アライアンスは、下記の3つの研究グループを各研究所に編成し、新物質創製、加工、計測・評価、デバイス創製と縦の繋がりを特徴とした連携研究を進めている。

本アライアンスは、4研究所からなる運営委員会により運営されているおり、産研からの運営委員は、朝日一教授（代表世話人）、山口明人教授、川合知二教授、安蘇芳雄教授である。産研のグループ長、副グループ長、兼任教授は次の通りである。

（1）「分子ナノエレクトロニクス」研究グループ

安蘇芳雄教授（グループ長）、川合知二教授、田川精一教授

（2）「新機能ナノエレクトロニクス」研究グループ

松本和彦教授（グループ長）、朝日一教授、谷村克己教授、小林光教授

（3）「ナノ分子メカニクス・バイオメカニクス」研究グループ

加藤修雄教授（グループ長）、野地博行教授、中谷和彦教授、鷲尾隆教授

成果

- ・被覆やアンカー導入による機能化分子ワイヤおよび塗布成膜有機半導体材料の開発
- ・STMによる1分子DNAの塩基識別の達成とゲーティングナノポアシステムの開発
- ・ドナー、アクセプターを含有する π 共役高分子薄膜の電荷キャリアナノダイナミクス
- ・カーボンナノチューブのコヒーレント伝導と単一正孔伝導の制御に成功
- ・強磁性GaGdNナノロッドの径制御成長と強磁性半導体GaDyNの磁気光学特性の解明
- ・グラファイトのフェムト秒光パルス励起による sp^3 結合型新規カーボンナノ構造相の創出
- ・低濃度HCN水溶液を用いてSiC上の金属汚染を完全に除去する方法を開発
- ・ジテルペン配糖体・コチレニンと14-3-3たんぱく質の結晶構造を解明
- ・蛍光エネルギー移動法に基づいた細胞内ATP計測プローブタンパク質の開発
- ・光応答性DNAの分子糊を提案し、金表面上での自在なDNA二重鎖形成を達成
- ・量子実験におけるデータ推定のための行列補完推定手法の開発

分子ナノエレクトロニクス研究グループ

教授（兼） 安蘇 芳雄（グループ長）、田川 精一、川合 知二

a) 概要

有機・分子エレクトロニクス素子に適したナノスケール分子材料の開発を目的として、 π 電子共役系の化学修飾による高いキャリア移動度を示す有機半導体材料の開発と、機能化分子ワイヤおよび金属電極接合ユニットの開発と評価を進めている。（安蘇）

電極レスで半導体の伝導度測定が可能な時間分解マイクロ波伝導度法を用い、様々な有機・無機エレクトロニクス材料の電気特性を測定し、さらに光過渡吸収分光と組み合わせて移動度の定量やキャリアのダイナミクスを研究した。本年度はドナー・アクセプターを含有する π 共役高分子薄膜の電荷生成・減衰に関するダイナミクスの研究に本手法を適用した。（田川）

オーダーメイド医療や素早い診断を実現する次世代ナノデバイスとして、シリコン基板に数十 nm 以下の穴を開けた固体ナノポア構造とナノ電極が融合したゲーティングナノポアの開発を行っている。ゲーティングナノポアは、細胞膜に存在する生体ナノポアを模倣したナノ構造であり、ナノポアを流れるイオン電流を測定することでナノポアを通過する物資の数と種類の情報を与える。本年度は、ゲーティングナノポアの作製プロセスの確立と、ナノ電極間を流れる物質の電氣的検出を実証した。（川合）

b) 成果

・有機エレクトロニクス材料の開発

n型有機電界効果トランジスタ材料の開発として、強い電子求引効果とオリゴマーにおける共役平面性保持の観点から、フッ素化およびカルボニル化シクロペンテンを縮環させた各種芳香族系をユニットとするオリゴマーを遷移金属触媒カップリング反応で合成した。幾つかのオリゴマーは最高レベルの電子移動度を有し、大気下でも安定に動作する n 型 FET 材料や塗布法に適用可能な材料となることが明らかとなった。また、分岐型オリゴチオフェンにアクセプターとしてペリレンビスイミドを連結することで高効率の光誘起分子内電子移動が起こることを明らかとし、スピコート法で作製した薄膜は光電変換特性を示した。さらに、アクセプターとしてナフタレンビスイミドを連結した化合物も光電変換材料として機能することを明らかとした。

・分子エレクトロニクス材料の開発

単分子導電性計測に適した分子ワイヤの構築を目指して、被覆型オリゴチオフェン分子ワイヤの合成を行った。酸化状態の電子吸収スペクトル解析から、通常のオリゴチオフェンと異なり、被覆によって π ダイマー形成が完全に阻害されることが分かった。分子ワイヤのナノギャップ電極への接合を目的として、両末端にチオール官能基を導入した被覆型オリゴチオフェン 6 量体の開発に成功した。また、確実な金属電極接合と効率的な電子注入の実現を目的として、セレン官能基を有するテトラフェニルメタン骨格の三脚型アンカーを開発した。金電極上での単分子膜の生成と接合状態を評価した結果、セレン官能基と三脚構造の有用性が明らかとなった。

・ドナー、アクセプターを含有する π 共役高分子薄膜の電荷キャリアナノダイナミクス

立体規則性ポリチオフェン (Reg-PT) の有機薄膜トランジスタ (OTFT) では高いホール移動度が報告されており、また他の共役高分子においても多くのデバイス作製技術や基礎物性・性能向上に関する研究が盛んである。今回、ペリレンカルボキシジイミド (PDI) を高分子フィルムに添加してドナー・アクセプターシステムを利用したキャリア生成効率を増加させると共に、生成した PDI アニオンラジカルを過渡吸収分光 (TAS) することでキャリア濃度を見積もることを試みた。電荷キャリア発生メカニズムやアクセプター添加による移動度の変化、立体規則性の違いによる移動度への影響について、励起波長を変えた実験、基礎吸収スペクトル、発光クエンチング、XRD、AFM による表面観察から明らかにした。

・ゲーティングナノポアの作製プロセスの確立

19 ステップの微細加工プロセスを組み合わせ、Si₃N₄ 基板上に最小直径 40nm を持つゲーティングナノポアの作製プロセスを確立した。ゲーティングナノポアと PDMS マイクロ流路を組み合わせたシステムを用いて、直径 40nm の金ナノ粒子を流した際のナノ電極間の電流トレースを測定したところ、溶液のみでは得られなかったパルス状の電気シグナル得られ、金ナノ粒子の検出に成功した。

・単一金ナノ粒子の電氣的検出

機械的破断接合により作製したギャップ幅 2nm のナノギャップ電極と、マイクロ流路が融合したシステムを用いて、直径 2nm の金ナノ粒子を電気泳動法により流路に沿ってフローさせた際のギャップ電極間の電流トレースを測定した。その結果、溶液のみでは特徴的な電気シグナルは得られなかったが、金ナノ粒子をフローさせた際には低頻度ながら電流値がパルスの的に増大する現象が観察された。一方、電極ギャップ幅が 2nm より小さい場合には、電流値が不可逆的な増大傾向を示した。従って、得られた電流シグナルは、ナノ電極間にトラップされた金ナノ粒子を介した電流に起因すると考えられる。

[原著論文]

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b":7,8-b":10,9-b":11,12-b"]hexathiophene, M. Endou, Y. Ie, and Y. Aso, *Heterocycles*, 76[2] (2008) 1043-1048.

Dendritic Oligothiophene Bearing Perylene Bis(dicarboximide) Groups as an Active Material for Photovoltaic Device, Y. Ie, T. Uto, N. Yamamoto, and Y. Aso, *Chem. Commun.*, [10] (2009) 1213-1215.

Electrodeless Determination of Charge Carrier Mobility in Poly(3-hexylthiophene) Films Incorporating Perylenediimide as Photoconductivity Sensitizer and Spectroscopic Probe, A. Saeki, S. Ohsaki, S. Seki, and S. Tagawa, *J. Phys. Chem. C* 112 (2008) 16643-16650.

Long-Lived Hole Stabilized at a Triphenylamine Core and Shielded by Rigid Phenylazomethine Dendrons: A Pulse Radiolysis Study, A. Saeki, S. Seki, N. Satoh, K. Yamamoto, and S. Tagawa, *J. Phys. Chem. B* 112 (2008) 15540-15545.

Prominent Electron Transport Property Observed for Triply Fused Metalloporphyrin Dimer: Directed Columnar Liquid Crystalline Assembly by Amphiphilic Molecular Design, T. Sakurai, K. Shi, H. Sato, K. Tashiro, A. Osuka, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, S. Sasaki, H. Masunaga, K. Osaka, M. Takata, and T. Aida, *J. Am. Chem. Soc.* 130 (2008) 13812-13813.

Mobility and Dynamics of Charge Carriers in Rubrene Single Crystals Studied by Flash-Photolysis Microwave Conductivity and Optical Spectroscopy, A. Saeki, S. Seki, T. Takenobu, Y. Iwasa, and S. Tagawa, *Adv. Mater.* 20 (2008) 920-923.

Intra-Molecular Mobility of Charge Carriers Along Oligogermane Backbones Studied by Flash Photolysis Time-Resolved Microwave Conductivity and Transient Optical Spectroscopy Techniques, S. Seki, A. Saeki, A. Acharya, Y. Koizumi, S. Tagawa, and K. Mochida, *Radiat. Phys. Chem.* 77 (2008) 1323-1327.

Electrode-Less Measurement of Conductivity Transients in Poly(n-alkylthiophene)s Induced by 193nm Photoexcitation, A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa, *J. Photopolym. Sci. Technol.* 21 (2008) 559-562.

Amphiphilic Molecular Design as a Rational Strategy for Tailoring Bicontinuous Electron Donor and Acceptor Arrays: Photoconductive Liquid Crystalline Oligothiophene-C₆₀ Dyads, W.-S. Li, Y. Yamamoto, T. Fukushima, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, H. Masunaga, S. Sasaki, M. Takata, and T. Aida, *J. Am. Chem. Soc.* 130 (2008) 8886-8887.

Superstructure-Dependent Optical and Electrical Properties of an Unusual Face-to-Face, π -Stacked, One-Dimensional Assembly of Dehydrobenzo[12]annulene in the Crystalline State, I. Hisaki, Y. Sakamoto, H. Shigemitsu, N. Tohnai, M. Miyata, S. Seki, A. Saeki, and S. Tagawa, *Chem. Eur. J.* 14 (2008) 4178-4187.

Visualization of the Detailed Structure of Plasmid DNA, Hiro. Tanaka, S. P. Mielke, C. J. Benham, and T. Kawai, *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*, 112[51] (2008) 16788-16792.

Enhancement of Oxide VLS Growth by Carbon on Substrate Surface, T. Yanagida, A. Marcu, H. Matsui, K. Nagashima, K. Oka, K. Yokota, M. Taniguchi, and T. Kawai, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 112[48] (2008) 18923-18926.

Electrical resistivity of individual molecular-assembly nanowires of amphiphilic bis-tetrathiafulvalene macrocycle/2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyano-p-quinodimethane charge transfer complex characterized by point-contact current-imaging atomic force microscopy, R. Tsunashima, Y. Noda, Y. Tatewaki, S. Noro, T. Akutagawa, T. Nakamura, T. Matsumoto, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 93[17] (2008) 173102(1-3).

Fabrication of 0.5 nm electrode gaps using self-breaking technique, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 93[16] (2008) 163115(1-3).

Mechanism and control of sidewall growth and catalyst diffusion on oxide nanowire vapor-liquid-solid growth, K. Nagashima, T. Yanagida, K. Oka, Hide. Tanaka, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 93[15] (2008) 153103(1-3).

Measurement Environment Dependency of Single Molecule Conductance, M. Taniguchi, K. Morimoto, M. Tsutsui, and T. Kawai, CHEMISTRY LETTERS, 37[9] (2008) 990-991.

Self-organized functional lipid vesicle array for sensitive immunoassay chip, H. Y. Lee, B. K. Lee, J. W. Park, H. S. Jung, J. M. Kim, and T. Kawai, ULTRAMICROSCOPY, 108[10] (2008) 1325-1327.

Local Heating in Metal-Molecule-Metal Junctions, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai, NANO LETTERS, 8[10] (2008) 3293-3297.

Control of device characteristics of ambipolar organic field-effect transistors using the hydroxyl in organic insulator, H. Kawaguchi, M. Taniguchi, and T. Kawai, SYNTHETIC METALS, 158[8-9] (2008) 355-358.

Growth atmosphere dependence of transport properties of NiO epitaxial thin films, K. Oka, T. Yanagida, K. Nagashima, Hide. Tanaka, and T. Kawai, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 104[1] (2008) 013711(1-4).

Mechanism of critical catalyst size effect on MgO nanowire growth by pulsed laser deposition, T. Yanagida, K. Nagashima, Hide. Tanaka, and T. Kawai, JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, 104[1] (2008) 016101(1-3).

Thermodynamic stability of single molecule junctions, M. Tsutsui, K. Shoji, K. Morimoto, M. Taniguchi, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 92[22] (2008) 223110(1-3).

Metallic nature of metal-molecule interface formed by Au-Se bonds, K. Yokota, M. Taniguchi, Hiro. Tanaka, and T. Kawai, PHYSICAL REVIEW B, 77[16] (2008) 165416(1-5).

Crucial role of interdiffusion on magnetic properties of in situ formed MgO/Fe₃-delta O₄ heterostructured nanowires, A. Marcu, T. Yanagida, K. Nagashima, K. Oka, Hide. Tanaka, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 92[17] (2008) 173119(1-3).

Effect of the heterointerface on transport properties of in situ formed MgO/titanate heterostructured nanowires, K. Nagashima, T. Yanagida, Hide. Tanaka, S. Seki, A. Saeki, S. Tagawa, and T. Kawai, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 130[15] (2008) 5378-5382.

Transverse Field Effects on DNA-Sized Particle Dynamics, M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai, NANO LETTERS, 9[4] (2009) 1659-1662.

Nonvolatile Bipolar Resistive Memory Switching in Single Crystalline NiO Heterostructured Nanowires, K. Oka, T. Yanagida, K. Nagashima, Hide. Tanaka, and T. Kawai, JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 131[10] (2009) 3434-3435.

Control of threshold voltage and hysteresis in organic field-effect transistors, H. Kawaguchi, M. Taniguchi, and T. Kawai, APPLIED PHYSICS LETTERS, 94[9] (2009) 093305(1-3).

Nanoarrays of tethered lipid bilayer rafts on poly(vinyl alcohol) hydrogels, B. K. Lee, H. Y. Lee, P. Kim, K. Y. Suh, and T. Kawai, LAB ON A CHIP, 9[1] (2009) 132-139.

[解説、総説]

フッ素化反応を基盤とする電子輸送性共役オリゴマーの開発と有機電界効果トランジスタへの応用、家裕隆、安蘇芳雄、有機合成化学協会誌、66[5] (2008) 504-514.

フルオロアルキル基縮環に基づく新しい有機 n 型半導体の開発、安蘇芳雄、家裕隆、生産と技術、60[3] (2008) 73-76.

Nanometer-Scale Dynamics of Charges Generated by Radiations in Condensed Matter, A. Saeki and S. Tagawa, Pure Appl. Chem. 81 (2009) 45-60.

絶縁体表面における吸着ナノ物質の静電気力イメージングバイオ分子への応用一、松本卓也、山田郁彦、佐藤一美、江利子、高木昭彦、川合知二、表面科学 29, (2008) 246-252.

走査プローブ顕微鏡を用いた表面電荷のナノスケール画像化、松本卓也、川合知二、粘土科学 47 (1), (2008) 1-8.

走査プローブ顕微鏡を用いた時間分解静電気力検出法の開発、松本卓也、川合知二、顕微鏡 43 (2), (2008) 149-151.

[著書]

「分子エレクトロニクスの基盤技術と将来展望 (分筆)」 (松重和美/田中一義/和田恭雄監修) “分子ワイヤ”、安蘇芳雄、家裕隆、シーエムシー出版、(2009) 151-158.

「次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能 (分筆)」 (赤木和夫監修) “電荷輸送制御のための多分岐共役系階層構造構築と機能”、安蘇芳雄、家裕隆、シーエムシー出版、(2009) 51-56.

バイオナノプロセス—溶液中でナノ構造を作るウェット・ナノテクノロジーの薦め—、「第 23 章、プログラム自己組織化によるナノ材料・デバイスの創製」、鈴木直毅、安立京一、李奉局、川合知二、CMC 出版社、(2008) ISBN978-4-88231-995-5.

分子エレクトロニクスの基盤技術と将来展望、谷口正輝、川合知二、シーエムシー出版、(2009) 214-227.

[特許]

「含窒素縮合環化合物，含窒素縮合環重合体，有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、二谷真司、安蘇芳雄、上田将人、特願 2008-220031

「分岐型化合物，これを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、宇都俊彦、安蘇芳雄、上田将人、特願 2008-221779、PCT/JP2009/050083

「共役系化合物，並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家裕隆、安蘇芳雄、岡部 誠、上田将人、特願 2008-290027

「共役系化合物，含窒素縮合環化合物，含窒素縮合環重合体，有機薄膜及び有機薄膜素子」、安蘇芳雄、家裕隆、岡部 誠、二谷真司、上田将人、PCT/JP2008/071520

「重合体，これを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」辛川 誠、安蘇芳雄、上田将人、PCT/JP2009/052156

「重合体、この重合体を用いた有機薄膜及びこれを備える有機薄膜素子」家 裕隆、吉村篤軌、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058656

「分岐型化合物、並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家 裕隆、岡部 誠、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058664

「共役化合物、並びにこれを用いた有機薄膜及び有機薄膜素子」家 裕隆、岡部 誠、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058737

「含フッ素重合体及びこれを用いた有機薄膜」家 裕隆、二谷真司、安蘇芳雄、上田将人、特願 2009-058739

「低屈折率を有する dendritic 化合物、その製造方法、およびその合成原料化合物」田中義人、永井隆文、安蘇芳雄、家 裕隆、特願 2009-059936

ナノインプリントリソグラフィ用の高耐久性レプリカモールドおよびその作製方法、川合知二、李恵りょん、李奉局、Lan-Young Hong, Dong-Pyo Kim, (出願日：2008年9月18日) 特願 2008-239827

PROBE APPARATUS FOR MEASURING AN ELECTRON STATE ON A SAMPLE SURFACE, Takuya Matsumoto and Tomoji Kawai, (Feb. 10, 2009) US 7,487,667 B2.

Highly Durable Replica Mold for Nanoimprint Lithography and Fabrication Method, Tomoji Kawai, Hea Yeon Lee, Bong Kuk Lee, Dong-Pyo Kim, and Lan-Young Hong, Korean, (Jan.29, 2009) , 10-2009-0006902.

[国際会議]

Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances of Difluorodioxocyclopentene-annelated Oligothiophenes, (Oral) Y. Ie, Y. Umemoto, M. Okabe, and Y. Aso, The 8th International Symposium on Functional pi-Electron Systems (Fpi8), Austria, July 21-25, 2008.

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b":7,8-b":10,9-b":11,12-b""]hexathiophene, M. Endou, Y. Ie, and Y. Aso, LXII Yamada Conference 2008 "Topological Molecules", Hyogo, Japan, September 1-4, 2008

Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances of Difluorodioxocyclopentene-annelated Oligomers, Y. Ie, M. Okabe, Y. Umemoto, and Y. Aso, LXII Yamada Conference 2008 "Topological Molecules", Hyogo, Japan, September 1-4, 2008

Synthesis and Photovoltaic Performance of Branched Oligothiophenes Having Perylene Bis(dicarboximide), T. Uto, Y. Ie, and Y. Aso, The Fifth International Symposium on Integrated Synthesis (ISIS-5), Kobe, Japan, September 5-6, 2008.

Synthesis and Properties of Tripodal Anchor Units Bearing Selenium Functional Groups, T. Hirose, Y. Ie, and Y. Aso, 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, September 29 – October 1, 2008.

Synthesis, Properties, and Photovoltaic Performances of Branched Oligothiophenes Bearing Perylene Bis(dicarboximide) Groups, Y. Ie, T. Uto, and Y. Aso, 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka University, September 29 – October 1, 2008.

Difluorodioxocyclopentene-Annulated Thiophenes: Synthesis, Properties, and n-Type FET Performances, Y. Ie, M. Okabe, Y. Umemoto, and Y. Aso, 18th Iketani Conference, International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers, Hyogo, Japan, October 21-23, 2008.

Synthesis and Properties of Branched Oligothiophenes Having Perylene Bisimide Groups as an Electron-Accepting Unit, T. Uto, Y. Ie, and Y. Aso, 18th Iketani Conference, International Conference on Control of

Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers, Hyogo, Japan, October 21-23, 2008.

Synthesis of Anchor Compounds Bearing Selenium Functional Groups and Characterization of Their Monolayers, T. Hirose, Y. Ie, and Y. Aso, The International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan, November 10-12, 2008.

Synthesis, Structure, and Properties of 2,5,8,11,14,17-Hexamethyltriphenylene [2,1-b:3,4-b':6,5-b":7,8-b"":10,9-b"":11,12-b"""]hexathiophene, M. Endou, Y. Ie, and Y. Aso, The International Workshop on Molecular Information and Dynamics 2008, Taipei, Taiwan, November 10-12, 2008.

Synthesis, Properties, and Field-Effect Transistor Characteristics of Conjugated Oligomer Containing Carbonyl-Bridged Bithiazole Unit, M. Nitani, Y. Ie, and Y. Aso, Osaka University Forum 2008: Bio-Environmental Chemistry, San Francisco, December 8-9, 2008.

Synthesis, Properties, and Photovoltaic Performances of Branched Oligothiophenes Bearing Naphthalene Bis(dicarboximide) Groups, Y. Ie, T. Uto, Y. Honsho, S. Seki, M. Karakawa, and Y. Aso, Fifth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE5), Miyazaki, Japan, March 15-18, 2009.

Electrode-less measurement of conductivity transients in poly(n-alkylthiophene)s induced by 193nm photoexcitation, A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa, Conference of Photopolymer Science and Technology, Chiba, Japan, June 2008.

Charge dynamics in organic crystals, supermolecules, and dendrimers, (invited) A. Saeki, S. Seki, and S. Tagawa, PULS'2008 (8th International Conference on Pulse Investigations in Chemistry, Biology and Physics), Krakow, Poland, September 2008.

Impact of Side-Chain Length on Alternating Current Mobility of Charge Carrier in Regioregular Poly(3-alkylthiophene) Films, A. Saeki, S. Ohsaki, Y. Koizumi, S. Seki, and S. Tagawa, 18th Iketani Conference (International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-Generation Conjugated Polymers), Hyogo, Japan, October 2008.

Electrodeless Determination of Charge Carrier Mobility in Poly(3-hexylthiophene) Films Incorporating Perylenediimide as Photoconductivity Sensitizer and Spectroscopic Probe, A. Saeki, S. Ohsaki, S. Seki, S. Tagawa, Japan-Korea Polymer Young Scientist Symposium, Niigata, Japan, October 2008.

Metal Oxide Nano Physics, T. Kawai, Department of Physics Bangladesh University of Engineering & Technology Seminar, Bangladesh, May16, 2008.

Physical method for characterizing a single molecule, especially for DNA, T. Kawai, Workshop in Bangkok, Bangkok, May 27, 2008.

NanoWell Array-based Digital BioChip Platform, T. Kawai, 9th WSEAS Int. Conf. On MATHEMATICS AND COMPUTERS IN BIOLOGY AND CHEMISTRY(MCBC'08), Romania, June 24-26, 2008.

DNA Nanotechnology, T. Kawai, Special Symposium on Emerging Science and Technology, Korea, June 30, 2008.

Single-molecule sequencing of deoxyribonucleic acid using scanning tunneling microscopy, T. Kawai, Seeing at the Nanoscale VI, Germany, July 9-11, 2008.

Single-molecule sequencing of deoxyribonucleic acid using scanning tunneling microscopy, T. Kawai, 2008 International Conference on Nanoscience + Technology, USA, July 20-25, 2008.

Nano-Biochips Integrated through Soft Lithography and Programmed Self-organization toward Single Molecular Analysis, T. Kawai, The 2nd Thailand Nanotechnology Conference 2008 (Plenary Lecture), Thailand, August 13-15, 2008.

Metal-molecule interface for molecular electronics, K. Yokota, Fall 2008 National Meeting & Exposition, USA, August 17-21, 2008.

Thermodynamic stability of atomic and molecular junctions, M. Tsutsui, Fall 2008 National Meeting & Exposition, USA, August 17-21, 2008.

Nano-fabrication and Nano-properties in Transition Metal Oxide Semiconductors, T. Kawai, The 14th International Symposium on the Physics of Semiconductors and Applications, Korea, August 26-29, 2008.

Heterostructured Nano-Oxides and Their Functionalities, T. Kawai, 15th International Workshop on Oxide Electronics, USA, September 14-17, 2008

Single molecule identification, M. Taniguchi, M. Tsutsui, and T. Kawai, 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, 2008.09.29-10.01

Convergence of bio semiconductor technology, T. Kawai, BIOTronics 2008 (International Conference on Biosensors, Biochips, and Bioelectronic Devices), Korea, October 8, 2008.

Single Molecular Analysis of DNA and Protein, T. Kawai, POSTEC Special Invite Seminar, Korea, October 10, 2008.

Biological processes on a membrane observed by atomic force microscopy, Tomoji Kawai, AFM BioMed Conference, USA, October 15-18, 2008

AFM Lithography for the Functional Metal Oxide Devices, T. Kawai, 2008 International Workshop on Tip-Based Nanofabrication (Plenary Lecture), Taiwan, October 19-21, 2008.

Metallic Nature of the Interface in the Self-assembled Monolayer Formed by gold-selenium bonds, K. Yokota, International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, November 9-13, 2008.

High Resolution STM Imaging and Manipulation of Molecular Bearing of Porphyrin Complexes, Hiro. Tanaka, International Symposium on Surface Science and Nanotechnology, Tokyo, Japan, November 9-13, 2008.

Transport Properties of Heterostructured Titanate Nanowires, K. Nagashima, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008.

Fabrication of Gating Nano-Pore Device, T. Yanagida, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008

Minute Signaling Recognition for Smart Bio-Device Systems, H. Y. Lee, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008

Specific Pathogen Recognition on Single-Step Modified Carbohydrate Nanodevice, H. Y. Lee, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008

Electrochemical Aptamer Nanoarray for High Specific Small Chemical Assay, H. Y. Lee, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008

Ferroelectric Control of Carrier Mediated Ferromagnetism in $(\text{Fe,Zn})_3\text{O}_4$ with High Curie Temperature in Field Effect Transistor Structure, T. Kawai, MRS 2008 Fall Meeting, USA, December 1-5, 2008

Heterointerface effect on transport and magnetic properties of heterostructured nanowires using transition metal oxides toward ultimate non-volatile memory devices, T. Yanagida, 8th Japan-Korea Symposium on Materials & Interfaces- International Symposium on Frontiers in Chemical Engineering -, Sapporo, Japan, December 5-7, 2008.

Minute Signaling Recognition for Smart Bio-Device Systems, T. Kawai, BMMP-9, Nagoya Japan, January 20-23, 2009.

DNA Nanotechnology toward Single Molecular Sequencing, T. Kawai, INDO-JAPAN WORKSHOP ON "NANOBIOTECHNOLOGY & NANODEVICES", India, January 23-24, 2009.

Strained Oxide Nanowires and the Non-volatile memory applications, T. Yanagida, SAKURA Meeting - March, 4th 2009 Interdisciplinary Study on Dynamic Strain Effects in Transition Metal Oxides, France, March 4, 2009.

Metal Oxide Nanowires: Synthesis, Nano-properties and Non-volatile Memory Applications, T. Yanagida, PLANNING PREVISIONNEL ACTUEL 2009 DES SEMINAIRES INL, France, March 5, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

田川 精一 Conference of Photopolymer Science and Technology 2008, organizing committee

[国内学会]

日本化学会	5 件
有機典型元素化学討論会	1 件
有機 π 電子系シンポジウム	2 件
基礎有機化学討論会	2 件
フッ素化学討論会	1 件
日本高分子学会	1 件
日本放射線化学会	1 件
応用物理学会	26 件
日本物理学会	6 件
分子化学会	4 件
生物物理学会	1 件
ナノ学会	2 件
その他	1 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)	単位：千円	
基盤研究 (S)		
田川 精一	フェムト秒パルスラジオリシス法によるナノ時空間反応プロセスの解明	20,900
基盤研究 (A)		
川合知二	DNA ナノ構造体の創成と物性の研究	10,140
新学術領域研究 (研究領域提案型)		
安蘇 芳雄	(計画研究) 拡張 π 電子共役系の創製に基づく高次 π 空間の機能とエレクトロニクス応用	4,420
川合知二	(総括班) 分子ナノシステムの創発化学	9,880
川合知二	(川合班) 遷移金属酸化物ナノ構造体における階層を越えたプログラム自己創発化学	19,890
特定領域研究		
安蘇 芳雄	(公募研究) 電子構造に段差を有するナノ共役系の構築と階層制御	1,500

[その他の競争的研究資金]

安蘇 芳雄	科学技術振興機構 (シーズ発掘試験)	安定動作 n 型半導体を指向した新規共役オリゴマーの開発と応用	4,999
田川 精一	JST CREST	極微細加工用レジスト研究とプロセスシミュレーターの開発	166,270
田川 精一	技術研究組合超先端電子技術開発機構	化学増幅レジストの反応機構の研究	1,000
川合 知二	科学技術振興費	阪大複合機能ナノファウンダリ	147,000

(分担者として配分されたもの)

川合 知二	NEDO バイオ診断ツール実用化開発 (東レ株)	前処理装置を搭載した高感度遺伝子多型検出バイオチップシステムの開発	6,600
川合 知二	科学技術振興費「バイオテクノロジー研究拠点の形成」	生命分子の集合原理に基づく分子情報の科学研究ネットワーク拠点	6,470
川合 知二	科学技術振興調整費「先端融合イノベーション創出拠点の形成」	生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報システム「ナノ材料領域」	97,600

新機能ナノエレクトロニクスグループ

教授（兼） 松本 和彦（グループ長） 朝日 一、谷村 克己、小林 光

a) 概要

新機能ナノエレクトロニクスグループでは、下記に示すように半導体を主な素材とし、その材料評価、物性評価、デバイス特性評価の研究を中心に行った。

窒化物半導体をベースとした室温透明発光強磁性半導体を創製・開発し、新規半導体ナノスピントロニクスデバイスの創製を目指した研究を行っている。（朝日）

熱 CVD 成長法、ラマン分光法、原子間力顕微鏡、フォトルミネセンス法を中心技術として、カーボンナノチューブの基本特性制御、カーボンナノチューブデバイスの特性・プロセス制御、電子デバイス応用、量子デバイス応用、そしてカーボンナノチューブのセンサー応用の研究を進めている。（松本）

種々の励起手法を駆使し、電子励起状態を介した物質構造変化の制御・組織化による新規ナノエレクトロニクス材料・構造の創製を目指した研究を展開している。（谷村）

SiC は化学的に安定であるため、従来の RCA 洗浄法では表面の酸化とエッチングが起こらず、金属汚染物を完全に除去できないことがわかった。一方、HCN 水溶液では、シアン化物イオンが金属と錯イオンを形成することによって、SiC 表面上の金属汚染物を除去できることを見出した。（小林）

b) 成果

・強磁性半導体 GaDyN の磁気光学特性の解明

遷移金属および希土類添加 GaN は室温で強磁性を示し、しかも、発光性を示すことから、半導体スピントロニクス新材料として非常に注目されている。希土類原子 Dy を添加した GaDyN を成長し、室温で強磁性を示すことを確認してきた。本年度は、磁気光学特性を明らかにするために、磁気円二色性(MCD)測定を行った。Dy 添加により MCD 信号が増大すること、また、磁場依存性にヒステリシスが観測され、真の強磁性半導体特性を有することが明らかとなった。

・強磁性 GaGdN ナノロッドの径制御成長

昨年度までに、磁性半導体デバイスのナノ構造化として、GaGdN ナノロッドの作製を試み、形成条件を明らかとした。本年度は、ナノ構造スピントロニクスデバイス創製のための重要なステップとして、直径を成長方向に変化させた GaGdN ナノロッドの形成法を検討した。成長温度を変化させることによりロッド径を制御できることが明らかとした。

・カーボンナノチューブを用いたバイオセンサー

12 の CNT 電極と 6 つの空気駆動型マイクロポンプを搭載した分析システムを組み合わせ、一つのチップ上で溶液を自動的に交換し、前立腺特異抗原と、人絨毛ゴナドトロピンの癌マーカーを検出することに成功した。

・レーザー励起による半導体表面上での局所的ボンド切断機構の解明

トップダウン方式による固体表面ナノ構造創製手法の展開を目指して、可視領域のレーザー光による半導体表面における局所的ボンド切断・構造変化機構の研究を展開した。代表的な再構成表面である Si(111)-(7x7) に対して、レーザー励起によって発生する電子系の動力学と格子系の熱揺らぎの相乗効果を調べ、基盤温度上昇に伴うボンド切断効率の著しい増加効果を発見した。この機構は、確率共鳴効果として把握できるとともに、半導体表面の原子レベルでのナノ加工手法の基礎を提供する。

・フェムト秒パルスレーザー励起による Graphite-Diamond 相転移

グラファイト表面をフェムト秒レーザーで励起する事によって、数ナノメートルを典型的な半径と

する新奇な sp^3 結合で特徴づけられるナノ構造相が発生する。走査型トンネル顕微鏡によるこの誘起構造相の解明を進め、グラファイトと hexagonal ダイヤモンドの中間構造である “Diaphite” 相を発見した。第一原理理論計算による全エネルギー計算を行い、Diaphite 相が準安定構造として生成される事を確認した。

・ 欠陥消滅型半導体洗浄法による SiC 洗浄法

SiC は化学的に非常に安定であるため、酸化やエッチングが容易に起こらない。したがって、従来の酸化とエッチングを用いる半導体洗浄法 (RCA 洗浄法) では、表面上の金属汚染を完全には除去できなく、 $10^{11} \sim 10^{12}$ 原子/cm² の金属が残留することがわかった。一方、HCN 水溶液は表面に存在する Cu, Ni などの金属と反応してシアン化物-金属錯イオンを形成することによってエッチングなしで金属を除去できる。HCN 水溶液の金属除去能力は非常に高く、室温でしかも極低濃度の溶液でも金属汚染を除去できることがわかった。しかし、SiC 表面は Si 表面に比較して非常にラフであり細孔等に存在する金属汚染を除去するには、RCA 洗浄と HCN 洗浄を組み合わせる必要があることがわかった。

[原著論文]

Low temperature molecular-beam epitaxy growth of cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, Y. Yamauchi, Y. K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, *J. Cryst. Growth* 310 (2008) 40-46.

Large magnetization in high Gd concentration GaGdN and Si-doped GaGdN grown at low temperatures, Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, *Appl. Phys. Lett.* 92 (2008) 6062505-1 - 6062505-3.

Growth and characterization of InCrN and (In,Ga,Cr)N, S. Kimura, S. Emura, K. Tokuda, Y. Hiromura, S. Hayakawa, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, *Phys. Stat. Sol. (c)*5 (2008) 1532-1535.

Electronic structure of Ga_{1-x}Cr_xN and Si-doping effects studied by photoemission and X-ray absorption spectroscopy, G. S. Song, M. Kobayashi, J. I. Hwang, T. Kataoka, M. Takizawa, A. Fujimori, T. Ohkouchi, Y. Takeda, T. Okane, Y. Saitoh, H. Yamagami, F.-H. Chang, L. Lee, H.-J. Lin, D. J. Huang, C. T. Chen, S. Kimura, M. Funakoshi, S. Hasegawa, and H. Asahi, *Phys. Rev. B*78 (2008) 033304-1 – 033304-4.

Carbon Nanotube Amperometric Chips with Pneumatic Micropumps, Yuichi Tsujita, Kenzo Maehashi, Kazuhiko Matsumoto, Miyuki Chikae, Soichiro Torai, Yuzuru Takamura and Eiichi Tamiya, *Jpn. J. Appl. Phys.* 47 (2008) 2064-2067.

Room temperature Coulomb Oscillations of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Oxidized Insulators, Yasuhide Ohno, Yoshihiro Asai, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, and Kazuhiko Matsumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* 47 (2008) 2056-2059.

High-Performance Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Local Electrolyte Gates, Taiji Katsura, Yasuki Yamamoto, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno and Kazuhiko Matsumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* 47 (2008) 2060-2063.

Room-Temperature Carbon Nanotube Single-Electron Transistors Fabricated Using Defect-Induced Plasma process, Shin Iwasaki, Masatoshi Maeda, Takafumi Kamimura, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi and Kazuhiko Matsumoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* 47 (2008) 2036-2039.

Electrical characterization of carbon nanotube field-effect transistors with SiN_x passivation films deposited by catalytic chemical vapor deposition, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, Koichi Inoue, Kazuhiko Matsumoto, Toshikazu Niki, and Hideki Matsumura, *Appl. Phys. Lett.* 92 (2008) 183111/1-3.

Excitation-induced atomic desorption and structural instability of III-V compound semiconductor surfaces, K. Tanimura and J. Kanasaki, *Surf. Sci.* 602 (2008) 3162–3171.

Electronic properties and electron dynamics on the Si(001)-(2x1) surface with C-defects, S. Tanaka and K. Tanimura, Phys. Rev. B 77 (2008) 195323-1-8.

Local bond rupture of Si atoms on Si(111)-(2x1) induced by the surface π - π^* excitation, E. Inami and K. Tanimura, Surf. Sci. 603 (2009) L63-L65.

Formation of sp^3 -bonded carbon nanostructures by femtosecond laser excitation of graphite, J. Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, H. Ohnishi, and K. Nasu, Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 087402-1-4.

Ultrafast carrier relaxation in Si studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy: Intravalley scattering and energy relaxation of hot electrons, T. Ichibayashi and K. Tanimura, Phys. Rev. Lett., 102 (2009) 087403-1-4.

Dynamics of bulk-to-surface electron transitions on Si(001)-(2x1) studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy, S. Tanaka, T. Ichibayashi, and K. Tanimura, Phys. Rev. B 79 (2009) 155313-1-8.

SiC cleaning method by use of dilute HCN aqueous solutions, M. Madani, Y.-L. Liu, M. Takahashi, H. Iwasa, and H. Kobayashi, J. Electrochem. Soc. 155(11) H895-H898 (2008).

Ultrathin SiO₂ layer with an extremely low leakage current density formed in high concentration nitric acid, W.-B. Kim, T. Matsumoto, and H. Kobayashi, J. Appl. Phys. 105, 103709-1-6 (2009).

Band alignment of SiO₂/Si structure formed with nitric acid vapor below 500°C, K. Imamura, M. Takahashi, S. Imai, and H. Kobayashi, Surf. Sci. 603(7), 968-972 (2009).

Ultrathin SiO₂ layer on atomically flat Si(111) surfaces with excellent electrical characteristics formed by nitric acid oxidation method, W.-B. Kim, Asuha, T. Matsumoto, and H. Kobayashi, Appl. Phys. Lett. 93, 072101-1-3 (2008).

Complete prevention of reaction at HfO₂/Si interfaces by 1 nm silicon nitride layer, H. Kobayashi, K. Imamura, K. Fukayama, S.-S. Im, O. Maida, Y.-B. Kim, H.-C. Kim, and D.-K. Choi, Surf. Sci. 602, 1948-1953 (2008).

[解説、総説]

半導体ヘテロエピタキシーの現状と展望、朝日一、応用物理、第 77 巻、第 5 号 (2008) 489-499.

シリコン材料表面の金属除去用新洗浄溶液、高橋昌男、小林光、クリーンテクノロジー、18 (2008) 42-46.

酸化薄膜の低温形成と酸化膜の電気特性評価、松本健俊、アスハ、今村健太郎、小林光、29 (2008) 498-502.

[著書]

次世代エネルギー研究最前線、アドスリー、pp. 83-109, 2008.

[特許]

半導体素子ならびに半導体素子製造法、長澤弘幸、八田直紀、河原孝光、小林光、PCT/jp2008/070458.

半導体基板、半導体装置およびその製造方法、小林 光、特願 2008-208398.

半導体への絶縁性被膜の形成方法および半導体装置の製造方法、小林 光、柳瀬 隆、特願 2008-224467.

絶縁性被膜の形成方法および半導体装置の製造方法、小林 光、柳瀬 隆、特願 2009-025764.

アルミニウム表面の酸化層形成方法及び半導体装置の製造方法、小林 光、特願 2009-025813.

絶縁膜の形成方法、半導体装置の製造方法および半導体装置の製造装置、小林 光、特願 2009-77984.

半導体基板の処理方法および半導体装置の製造方法、小林 光、特願 2009-77985.

[国際会議]

Formation of aligned CrN nano-clusters in Cr-delta-doped GaN, Y. K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Conference on Quantum Simulators and Design 2008, Tokyo, May 31-June 3, 2008.

Crystal growth and characterization of GaCrN nanorods on Si substrate, H. Tambo, S. Kimura, Y. Yamauchi, Y. Hiromura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, The 2nd International Symposium on Growth of III-Nitrides, Izu, Japan, July 6-9, 2008.

Orbital ordering on dilute Cr³⁺ ions doped in GaN, S. Emura, S. Kimura, K. Tokuda, Yi-Kai Zhou, S. Hasegawa and H Asahi, 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil, July 27-August 1, 2008.

Third magnetic phase of GaGdN detected by SX-MCD, M. Takahashi, Y. Hiromura, S. Emura, T. Nakamura Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H Asahi, 29th International Conference on Physics of Semiconductors, Brazil, July 27-August 1, 2008.

Structural properties of AlCrN, GaCrN and InCrN, S. Kimura, K. Tokuda, Y. K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Vancouver, Canada, August 3-8, 2008.

Annealing effect in GaDyN on optical and magnetic properties, Y. K. Zhou, M. Takahashi, S. Emura, S. Hasegawa, H. Asahi, 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil, Augst 3-6, 2008.

Magnetic properties of GaGdN studied by SQUID and SX-MCD, M. Takahashi, Y.K. Zhou, S. Emura, T. Nakamura, S. Hasegawa, and H Asahi, 5th International Conference on Physics and Applications of Spin-Related Phenomena in Semiconductors, Foz do Iguacu, PR, Brazil, Augst 3-6, 2008.

Ferromagnetism and Luminescence of Diluted Magnetic Semiconductors GaGdN and AlGdN (INVITED), S. Emura, M. Takahashi, H. Tambo, T. Nakamura, Y.K Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, Materials Research Society Fall Meeting, Boston, MA, USA, December 1-5, 2008.

High-Performance Carbon Nanotube Field-Effect Transistors Using Low-Energy Ion Implantation, Kenzo Maehashi, Kohei Nishiguchi, Yasuhide Ohno, Koichi Inoue, Kazuhiro Yamamoto, and Kazuhiko Matsumoto, 2008 Device Research Conference (2008) Jun. 23 - 25, Santa Barbara, USA

High Sensitive Carbon Nanotube FET Biosensor with Micro Fluid System and AC Measurement System, Kazuhiko Matsumoto, Kenzo Maehashi, Yasuhide Ohno, and Yasuki Yamamoto, Ninth Int. Conf. on the Science and Application of Nanotubes (2008) June 29 - July 4, Montpellier, France

Room Temperature Operation of Carbon Nanotube Single-Hole Transistors Fabricated by Shadow Evaporation Methods, Yasuhide Ohno, Yoshihiro Asai, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, and Kazuhiko Matsumoto, 2008 Int. Conf. on Solid State Device and Materials (2008) Sept. 24 - 26, Tsukuba, Japan

Low-Energy Oxygen Ion Irradiation Effects on Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Passivation Films, Satoshi Nagaso, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue, Kazuhiro Yamamoto, and Kazuhiko Matsumoto, 2008 Int. Conf. on Solid State Device and Materials (2008) Sept. 24 - 26, Tsukuba, Japan

HIGH-PERFORMANCE CARBON NANOTUBE FIELD-EFFECT TRANSISTORS FOR HIGH-SENSITIVE BIOSENSORS, Kenzo Maehashi and Kazuhiko Matsumoto, The IASTED International Conference on Nanotechnology and Applications (2008) Sept. 29 – Oct. 1, Crete, Greece

CARBON NANOTUBE FIELD-EFFECT TRANSISTOR BIOSENSORS WITH HIGH SIGNAL-TO-NOISE RATIO USING ALTERNATING CURRENT MEASUREMENT, Yasuki Yamamoto, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi, and Kazuhiko Matsumoto, The IASTED International Conference on Nanotechnology and Applications (2008) Sept. 29 – Oct. 1, Crete, Greece

Ultrafast carrier dynamics on Si surfaces studied by time-resolved twophoton photoemission spectroscopy (Invited), K. Tanimura, 6th International Conference on Ultrafast Surface Dynamics, Kloster Banz, Germany, July 20-25, 2008

Ultrafast carrier dynamics in Si and on Si surfaces studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy (Invited), K. Tanimura, Ultrafast Phenomena in Semiconductors and Nanostructure Materials XIII, San Jose, USA, January 25-28, 2009

Local bond rupture on Si surfaces induced by low-energy electron-beam excitation, J. Kanasaki and K. Tanimura, International workshop on “Low-Energy Electron Molecule Interaction:LEEMI-EIPAM'08, Roscoff, France, May 7-11, 2008.

Interlayer bond formation of graphite crystals induced by femtosecond laser excitation, Kanasaki, E. Inami, K. Tanimura, and K. Nasu, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug.1, 2008.

Surface-carrier dynamics on Si(001)-(2x1): roles of electron transfer from bulk- to surface-electronic states, S. Tanaka and K. Tanimura, 25th European Conference on Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug.1, 2008.

Hot-hole and hot-electron dynamics at Si surfaces studied by time-resolved twophoton photoemission spectroscopy, T. Ichibayashi and K. Tanimura, 6th International Conference on Ultrafast Surface Dynamics, Kloster Banz, Germany, July 20-25, 2008.

Image-potential induced surface-resonance states at Si(100)-(2x1), T. Ichibayashi and K. Tanimura, 25th European Conference of Surface Science, Liverpool, UK, July 27-Aug.1, 2008..

Ultrafast carrier dynamics in Si studied by time-resolved two-photon photoemission spectroscopy, T. Ichibayashi and K. Tanimura, 3rd International Conference on Photo-Induced Phase Transitions and Cooperative Phenomena, Osaka, Japan, Nov. 11-13, 2008.

Nitric acid oxidation of Si at 120°C to fabricate MOS Structure with excellent electrical characteristics, H. Kobayashi, 1st International Conference on Thin Films and Porous Materials, May 19-22, 2008, Zeralda, Algiers.

Surface cleaning and defect passivation by the use of cyanide solutions, M. Takahashi, 1st International Conference on Thin Films and Porous Materials, May 19-22, 2008, Zeralda, Algiers.

Low temperature nitric acid oxidation of Si (NAOS) for fabrication of gate oxides in LSI and TFT, H. Kobayashi, The 1st International Symposium on Hybrid Materials and Processing, Oct. 27-29, 2008, Busan, Korea.

One-step and two-step NAOS methods for fabrication of SiO₂/Si structure with excellent electrical characteristics, H. Kobayashi, 6th Solid State Surfaces and Interfaces, Nov. 24-27, 2008, Smolenice, Slovakia.

Semiconductor defect passivation etch-less cleaning method using HCN solutions with ppm order concentration, H. Kobayashi, 10th International Symposium on Eco-materials Processing and Design, Jan. 13-15, 2009, Xi'an, China.

[国際会議の組織委員、国際雑誌の編集委員]

- 朝日 一 2008 International Conference on Solid State Devices and Materials (プログラム委員)
- 朝日 一 15th International Conference on Molecular Beam Epitaxy (国際諮問委員)

朝日 一	Second International Symposium on Growth of III-Nitrides (国際諮問委員)
朝日 一	International Conference on Functional Materials for Advanced Technology (国際組織委員)
朝日 一	Journal of Crystal Growth (編集委員)
朝日 一	J. Materials Science: Materials in Electronics (Editorial Board 委員)
松本和彦	International Conference on Solid State Device & Materials 2008 (プログラム委員会サブ コミッティーチェア)
松本和彦	MSS17 (プログラム委員)
松本和彦	IEEE Nanotechnology (Associate Editor)
松本和彦	Japanese Journal of Applied Physics (Editor)
小林光	Applied Surface Science (編集委員長)
小林光	2008 SSSI International Conference (顧問委員長)
小林光	0th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (実行委員)
小林光	4 th Vacuum and Surface Science Conference of Asia and Australia (編集委員)

[国内学会]

応用物理学会	27 件
PASPS シンポジウム	3 件
電子材料シンポジウム	1 件
International Conference on Solid State Device & Materials 2007	2 件
物理学会	10 件
表面科学会	1 件
表面・界面分光学会	2 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)

単位：千円

特別推進研究		
谷村克己	光誘起構造相転移動力学の研究	175,760
特定領域研究		
朝日 一	InN をベースとした長波長円偏光半導体レーザー創製に関する研究	3,900
松本和彦	カーボンナノチューブバイオセンサー	37,000
基盤研究 (A)		
小林 光	硝酸酸化法による表面ナノ細孔を用いる SiO ₂ /SiC 構造の低温創製	17,810
基盤研究 (B)		
朝日 一	室温強磁性窒化物半導体ナノ構造とナノスピントロニクスデバイス 応用に関する研究	2,300
(分担者として配分されたもの)		
学術創成研究		
朝日 一	希土類元素添加の精密制御による物性・機能性の開拓 (代表者：藤原 康文)	28,000

[その他の競争的研究資金]

松本 和彦	科学技術振興機構 戦	量子界面制御による量子ナノデバイスの開発 略的創造研究	10,000
小林 光	科学技術振興機構 戦	硝酸酸化法による TFT ゲート酸化膜の低温創	62,400

小林 光	略的創造研究 日本学術振興会 間交流事業	二国	製と低消費電力化 新規欠陥消滅法及び低温酸化法のメカニズム とシリコン太陽電池への応用	2,500
------	----------------------------	----	---	-------

ナノ分子メカニクス・バイオメカニクス研究グループ

教授（兼） 加藤 修雄（グループ長）、野地 博行（副グループ長）、中谷 和彦、鷺尾 隆

a) 概要

本研究グループでは、分子モーターのようなバイオメカニクスから DNA 等の関連分野まで、新物質創製、ナノ光加工、微小力計測・ナノ計測・微小空間ダイナミクス評価などの研究を行って自己組織化により機能するデバイス創製を目指し研究を進めている。加藤グループでは、天然物由来もしくはペプチドミメティクスなどの低分子による細胞内信号伝達経路の制御と光応答型ペプチド核酸を用いた遺伝子発現制御を目指し研究を進めた。野地グループでは北大電子研の永井グループおよび東工大資源研の吉田グループと共同して、1 分子計測技術とマイクロデバイスを用いた ATP 合成酵素のエネルギー変換メカニズムの解明について研究を進めた。さらに、ATP の蛍光プローブを開発し、細胞内における ATP 濃度のダイナミクスを計測した。中谷グループではアゾベンゼンを組込んだ光応答性「DNA の分子糊」の開発研究を進め、ピレンを組込んだ DNA の二本鎖形成の光制御による蛍光波長のスイッチングに成功した。鷺尾グループでは量子実験における種々の条件揺らぎや不確定性、欠測を含む実験結果から、行列推定手法を用いて尤度の高い推定結果を得る手法について研究を進めた。

b) 成果

・ジテルペン配糖体・コチレニンと 14-3-3 たんぱく質会合体の結晶構造解析

従来植物ホルモン様活性を有することが知られていたジテルペン配糖体・コチレニンは前骨髄性白血球細胞・HL-60 に対して分化誘導活性を持つことで注目されている。しかし、この活性は化学構造の類似した天然型フシコクシンには見られない。分化誘導活性が動物細胞中の 14-3-3 たんぱく質会合体の安定化に起因しているとの仮説に立ち、Max Planck Society の C. Ottmann 博士との共同研究により、標題結晶構造を明らかにし、コチレニンとフシコクシンの化学構造の差異が会合体形成に相違をもたらすことを明らかにした。

・「細胞内 ATP 可視化のための蛍光タンパク質」の開発

本研究では北大電子研の永井研究室と共同で ATP 濃度に応じて蛍光強度（正確には蛍光エネルギー移動効率）が変化する蛍光タンパク質を開発した。本年度は、これを用いて細胞中の小器官ごとの ATP 濃度の分布を計測した。その結果、細胞質や核内部と比較してミトコンドリア内部の ATP 濃度が顕著に低いことが明らかとなった。これは、細胞質とミトコンドリア間での ATP 輸送が非常に活発であることを示唆しており、ミトコンドリア中での ATP 合成反応にも有利であると考えられる。

・回転分子モーターのエネルギー変換メカニズムの研究

回転分子モーターである F_1 -ATPase は、ATP 加水分解によって分子内部の回転子を回転させる。この化学-力学エネルギー変換メカニズムを解明するために、ATP 加水分解反応を構成する個々の素反応がどのように回転運動と共役しているのかを研究している。本年度は、リン酸解離のタイミングに関して集中的に研究してきた。その結果、リン酸は ATP として結合してから回転子が 320 度回転したところで解離することが明らかとなった。この実験では、リン酸は低い確率ではあるが頻度で 200 度の位置でも解離することもわかった。その場合、高い確率で不活性状態に陥ることという興味深い現象が見られた。現在、この現象を、タンパク質中におけるエネルギー保存効率との関係で考察中である。

・光応答性 DNA の分子糊を使った DNA 蛍光スイッチの開発

光でシス-トランス異性化するアゾベンゼンを組み込んだ光応答性 DNA の分子糊を用いて、DNA 塩基対の代わりに蛍光色素ピレンを持つ DNA に二重鎖形成の光制御を検討した。ピレンはそれ自身が溶液中でスタックすることにより、モノマーの青色の蛍光から、励起錯体ダイマーの緑色の蛍光を発する。光応答性 DNA のアゾベンゼンの異性化に伴い、ピレン修飾 DNA の一本鎖から二本鎖もしくはその逆反応が進行し、その結果として DNA に組み込まれた蛍光波長のスイッチングを達成した。

・量子実験におけるデータ推定のための行列補完推定手法の開発

量子実験がもたらす実験結果は、その背後の物理的メカニズムによって半正定性という性質を満たすことが分かっている。本研究ではこの性質を利用して、量子実験における種々の条件揺らぎや不確定性、欠測を含む実験結果から、尤度の高い推定結果を得る手法及びアルゴリズムに関する研究を進めた。その結果、推定可能性について一定の見通しを得た。

[原著論文]

Identification of diterpene biosynthetic gene clusters and functional analysis of labdane-related diterpene cyclases in *Phomopsis amygdali*, T. Toyomasu, R. Niida, H. Kenmoku, Y. Kanno, S. Miura, C. Nakano, Y. Shiono, W. Mitsuhashi, H. Toshima, H. Oikawa, T. Hoshino, T. Dairi, N. Kato, and T. Sassa, *Biosci. Biotechnol. Biochem.* 72 (2008) 1038-1047.

Enhanced anti-influenza A virus activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives: Effect of alkyl chain length, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, N. Kato, and K. Kaihatsu, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 18 (2008) 4249-4252.

Enhanced antitumor activities of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives in vitro and in vivo, K. Matsumura, K. Kaihatsu, S. Mori, H. H. Cho, N. Kato, and S. H. Hyon, *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 377 (2008) 1118-1122.

Biosynthetic gene-based secondary metabolite screening: A new diterpene, methyl phomopsenonate, from the fungus *Phomopsis amygdali*, T. Toyomasu, A. Kaneko, T. Tokiwano, Y. Kanno, Y. Kanno, R. Niida, T. Kawano, H. Oikawa, N. Kato, and T. Sassa, *J. Org. Chem.* 74 (2009) 1541-1548.

Identification and functional analysis of brassicicene C biosynthetic gene cluster in *Alternaria brassicicola*, A. Minami, N. Tajima, Y. Higuchi, T. Toyomasu, T. Sassa, N. Kato, and T. Dairi, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 19 (2009) 870-874.

A structural rationale for selective stabilization of anti-tumor interactions of 14-3-3 proteins by cotylenin A, C. Ottmann, M. Wayand, T. Sassa, T. Inoue, N. Kato, A. Wittinghofer, and C. Oecking, *J. Mol. Biol.* 386 (2009) 913-919.

Correlation between the conformational states of F1-ATPase as determined from its crystal structure and single-molecule rotation, D. Okuno, R. Fujisawa, R. Iino, Y. Hirono-Hara, H. Imamura, and H. Noji, *Proc. Natl. Acad. Soc. U.S.A.* 105 (2008), 20722-20727.

Photo Gel-Sol/Sol-Gel Transition and Its Patterning of a Supramolecular Hydrogel as Stimuli-Responsive Biomaterials, S. Matsumoto, S. Yamaguchi, S. Ueno, H. Komatsu, M. Ikeda, K. Ishizuka, Y. Iko, K. V. Tabata, H. Aoki, S. Ito, H. Noji, and I. Hamachi, *Chemistry - A European Journal* 14 (2008), 3977-3986.

Loop-mediated isothermal amplification of a single DNA molecule in polyacrylamide gel-based microchamber, L. Lam, S. Sakakihara, K. Ishizuka, S. Takeuchi, H. F. Arata, H. Fujita, and H. Noji, *Biomed. Microdevices* 10 (2008) 539-546.

Genotyping by allele-specific L-DNA-tagged PCR, G. Hayashi, M. Hagihara, and K. Nakatani, *J. Biotechnol.* 135 (2008) 157-160.

Synthesis of Dimeric 2-Amino-1,8-naphthyridine and Related DNA-Binding Molecules, K. Nakatani, H. He, S. Uno, T. Yamamoto, and C. Dohno, *Current Protocols in Nucleic Acid Chemistry* 2 (2008) 1-21.

DNA Labeling by Ligand Inducible Secondary Structure, T. Peng, H. He, M. Hagihara, and K. Nakatani, *ChemBioChem* 9 (2008) 1893-1897.

Ligand Binding to Tandem G-quadruplex from Human Telomeric DNA, L.-P. Bai, M. Hagihara, Z.-H. Jiang, K. Nakatani, *ChemBioChem* 9 (2008) 2583-2587.

Site-specific binding of chelerythrine and sanguinarine to single pyrimidine bulges in hairpin DNA, L.-P. Bai, Z. Cai, Z.-Z. Zhao, K. Nakatani, and Z.-H. Jiang, *Anal. Bioanal. Chem.* 392 (2008) 709-716.

Dimer of 2,7-diamino-1,8-naphthyridine for the detection of mismatches formed by pyrimidine nucleotide bases, A. Kobori, and K. Nakatani, *Bioorg. Med. Chem.* 16 (2008), 10338-10344.

RNA Aptamers That Reversibly Bind Photoresponsive Azobenzene-Containing Peptides, G. Hayashi, M. Hagihara, and K. Nakatani, *Chem. Eur. J.* 15 (2009) 424-432.

The effect of linker length on binding affinity of a photoswitchable molecular glue for DNA, C. Dohno, S. Uno, S. Sakai, M. Oku, and K. Nakatani, *Bioorg. Med. Chem.* 17 (2009) 2536-2543.

Synthesis and Reaction of DNA Oligomers Containing Modified Cytosines Related to Bisulfite Sequencing, Y. Oka, T. Peng, F. Takei, and K. Nakatani, *Org. Lett.* 11 (2009) 1377-1379.

Modeling Dynamic Substate Chains among Massive States, N. V. Phuong and T. Washio, *Intelligent Data Analysis* 12 (2008) 271-291.

[国際会議]

Anti-influenza A virus activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid monoester derivatives, K. Kaihatsu, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, and N. Kato, 21st International Conference on Antiviral Research, Canada, April 13-17, 2008.

Diterpene Cyclase Responsible for Fusicoccin Biosynthesis, T. Toyomasu, T. Dairi, N. Kato, and T. Sassa, 7th US-Japan Seminar on the Biosynthesis of Natural Products Enzymology, Structural Biology, and Drug Discovery, La Jolla, California, USA, June 22-27, 2008.

Chemical ligation of epoxide-containing fusicoccins and peptide fragments induced by 14-3-3 protein surface, J. Ohkanda, T. Maki, A. Kawamura, and N. Kato, 9th Tetrahedron Symposium, San Francisco, USA, July 22-23, 2008.

Synthetic Method of 4-Carbamoylimidazolium 5-olate, C. Kondo, Y. Higuchi, M. Sunagawa, and N. Kato, The First International Symposium on Process Chemistry [ISPC 08], Kyoto, Japan, July 28-30, 2008.

Antitumor activity of (-)-epigallocatechin-3-O-gallate fatty acid derivatives, K. Kaihatsu, S. Sawada, and N. Kato, 11th Sanken International Symposium, Awaji, Japan, February 2-4, 2008.

Synthesis of Green Tea Catechin Derivatives and Evaluation of Their Anti-influenza Virus Activity, K. Kaihatsu, K. Matsumura, S. Mori, H. H. Cho, and S. H. Hyon, and N. Kato, The 8th International Conference of Anticancer Research, Greece, October 17-22, 2008.

Fusicoccin derivative (ISIR-005) suppression anchorage-independent growth of cancer cells through anoikis activation, Y. Honma, M. Akimoto, T. Sassa, and N. Kato, 20th EORTC-NCI-AACR Symposium on Molecular Targets and Cancer Therapeutics, Geneva, Switzerland, October 21-24, 2008.

Module assembly for protein surface recognition, *J. Ohkanda, The IUMRS International Conference in Asia 2008, Nagoya, Japan, December 9-11, 2008.

Mechanical modulation of ATP-binding and hydrolysis by single F1-ATPase molecule, *H. Noji, MPSA2008, Sapporo, Japan, August 29, 2008.

Single-molecule Imaging of the transport-vesicle formation mediated by COPII system reconstituted on a planar bilayer system, *H. Noji, The 17th CDB Meeting - Towards Synthesis of Cells, Kobe, Japan, October 14-15, 2008.

Single molecule studies on F1-ATPase molecular motor, *H. Noji, 16th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Izu-Atagawa, Japan, December, 13, 2008.

Femtoliter chamber for single-molecule and single-cell analysis, *H. Noji, 4th IEEE-NEMS09, Shinsen, China, January, 6, 2009.

Single molecule biophysics of F1-ATPase: Mechanical modulation of reaction rate constants and equilibrium constants by F1-ATPase, *H. Noji, 6th Asian Biophysics Association Symposium, HKUST, Hong Kong, January, 11, 2009.

Controlling Hybridization by Molecular Glue for DNA, K. Nakatani, International Conference in Organic Synthesis (ICOS-17), Daejeon Conference Center, Daejeon, Korea, June 23-27, 2008.

Synthesis and evaluation of photoresponsive molecular Glue for DNA, S. Uno, C. Dohno, M. Oku, S. Sakai, and K. Nakatani, International Conference in Organic Synthesis (ICOS-17), Daejeon Conference Center, Daejeon, Korea, June 23-27, 2008.

The fluorescent detection of single nucleotide difference using cytosine bulge hairpin primers, F. Takei, M. Hagihara, Y. Oka, and K. Nakatani, XXII IUPAC symposium on photochemistry, Kyoto, July 28-August 1, 2008.

Reversible control of DNA hybridization by a small synthetic ligand, C. Dohno, S. Uno, T. Yamamoto, S. Sakai, and K. Nakatani, International symposium on integrated synthesis, September 5-6, 2008.

Fluorescent Ligand as a molecular probe for the RNA structure, S. Umemoto, J. Zhang, C. Dohno, and K. Nakatani, Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, September 8-12, 2008.

The reaction of cytosine with bisulfite by base flipping from the duplex, Y. Oka, T. Peng, F. Takei, K. Nakatani, Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, September 8-12, 2008.

RNA aptamers that reversibly bind to photoresponsive peptide, G. Hayasi, M. Hagihara, and K. Nakatani, Joint Symposium of 18th International Roundtable on Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids (IRTXVIII) and 35th International Symposium on Nucleic Acids Chemistry, September 8-12, 2008.

Recognition of Mismatched Base Pairs by Small Synthetic Ligands, K. Nakatani, International Symposium of Molecular Recognition of DNA: Biological Application, Kyoto University, September 18, 2008.

DNA sensing and architecture, K. Nakatani, RIKEN conference 2008 on Chemical Biology, Radisson Hotel Narita, November 12-15, 2008.

A Range Query Approach for High Dimensional Euclidean Space Based on EDM Estimation, K. Kido, H. Kuwajima, and T. Washio, Proc. of the Eighth SIAM International Conference on Data Mining (SDM08), Edited by M. J. Zaki, K. Wang, C. Apte, and H. Park, (2008) 387-398.

A Fast Method to Mine Frequent Subsequences from Graph Sequence Data, A. Inokuchi and T. Washio, Proc. of 2008 Eighth IEEE International Conference on Data Mining, (2008) 303-312.

Feasibility of Graph Sequence Mining based on Admissibility Constraints, A. Inokuchi and T. Washio, Proc. of 3rd International Workshop on Data Mining and Statistical Science (DMSS2008), (2008) 1-4.

On Feasibility of Graph Spectrum-based Frequent Sub-graph Mining, K. Ohara, T. Washio, and D. V. Nguyen, Proc. of 3rd International Workshop on Data Mining and Statistical Science (DMSS2008), (2008) 9-11.

Isomorphism Identification by Using Graph Spectra and Its Application to Graph Mining, K. Ohara and T. Washio, Proc. of IASC2008: the Joint Meeting of 4th World Conference of the IASC and 6th Conference of the Asian Regional Section of the IASC on Computational Statistics & Data Analysis, (2008) 229 (Invited).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

加藤 修雄 27th Conference on Combinatorial Chemistry, Japan (組織委員)

[国内学会]

日本化学会春季年会

12 件

日本生物物理学会	11 件
日本生体エネルギー研究会	4 件
生体機能関連化学シンポジウム	3 件
日本ケミカルバイオロジー研究会年会	2 件
SORST ジョイントシンポジウム	2 件
サポーターッドメンブランワークショップ	2 件

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
特定領域研究		
野地 博行	FoF1-ATP 合成酵素の回転動作機構の解明	59,700
鷲尾 隆	大規模次元観測時系列からのダイナミクス知識体系化と理解支援手法の開発	3,000
基盤研究 (S)		
中谷 和彦	ミスマッチ塩基対安定化を基盤とした核酸構造制御による機能発現調節	17,940
基盤研究 (A)		
野地 博行	超微小溶液チャンバーを用いた生体分子 1 分子計測技術の開発	7,800
鷲尾 隆	大規模変数次元データの因果構造マイニング手法開発と遺伝子機能関係知識ベースの作成	12,350

[受託研究]

加藤 修雄	医薬基盤研究所 (保健医療分野における基礎研究推進事業)	ジテルペン配糖体をリードとした分化誘導型新規抗がん剤の開発	24,000
-------	------------------------------	-------------------------------	--------

量子情報フォトニクス研究分野（阪大産研・北大電子研アライアンスラボ）

教授	竹内 繁樹
客員教授	Jeremy O'Brien (平成 20 年 1 月 16 日から)
助教	岡本 亮
助教	藤原 正澄 (平成 21 年 1 月 1 日着任)
博士研究員	高島 秀聡
客員研究員	夏 立新 (平成 20 年 8 月 7 日まで)
大学院学生	永田 智久 (北大、連携推進員)、浅井 健志 (北大、連携推進員)、 谷田 真人 (北大、連携推進員)
研究生	桃原 清太
事務補佐員	笠置 水美 (平成 20 年 5 月 26 日着任)

a) 概要

本研究分野では、光子 1 粒 1 粒を発生させ、その状態間の量子相関を自在に制御することで、これまでの「光」を超える「新しい光」の実現と応用について実験的な研究を行っている。光子を自在に制御、検出するために、ナノスケールの微小光デバイスの研究と、その光量子デバイスや単一光子源の実現について研究している。また、応用としては、光子を操る量子コンピュータ・光量子回路のほか、通常の光の限界を超えた「光計測」、「光リソグラフィー」の研究に主に実験的に取り組んでいる。また、量子コンピュータや量子暗号通信の実現に向けて、量子力学的なもつれ合いをもつ光子対の発生や制御、高効率な光子検出装置の開発、光子情報処理システムのプロトタイプ of 構築に取り組んでいる。

b) 成果

・世界最大級の光量子回路「量子もつれ合いフィルタ」の実現

偏光フィルターは、光子を用いた量子情報処理の中で、光量子ビット状態の準備、精製、ならびに測定でなくてはならない素子である。この概念を 2 量子ビットに拡張し、2 つの光子が、双方とも水平あるいは垂直の偏光のときのみを、その状態間のコヒーレンスを維持したまま選択するのが「量子もつれ合いフィルタ」である。このフィルターは、もつれ合い状態の準備、精製および測定に用いることが可能であり、基礎から応用まで広く活用可能である。我々は、2002 年にこのような機能を実現する光量子回路を提案していた(Phys. Rev. Lett. 2002)。しかしその回路は、4 つの入力・アンシラ光子に対して、4 つの経路干渉と 4 つの光子間量子干渉を有し技術的にその実現が非常に困難な物であった。

我々は、「干渉計を不要の光量子ゲート(Phys. Rev. Lett. 2005)」で独自に発案した、部分偏光ビームスプリッター (PPBS)、ならびに 4 光子量子干渉計(Science2007)で用いた変型サニャック干渉計の 2 つの技術を融合することにより、この量子回路の実現に成功した。この回路は、これまでに実現されている光量子回路としてゲート数ならびに組み合わせた古典干渉の数において世界最大規模のものである。この成果は、Science の掲載号でも News of the week に取り上げられるとともに Nature Photonics でも紹介され、また主要国内一般紙等でも広く報道された。

・もつれ合い光子干渉による位相測定感度の理論解析と感度向上

光子数状態間の量子干渉と経路干渉をうまく組み合わせることで、途中に挿入される光路長差（位相差）に非常に敏感になりうる。たとえば、この 2 つの 2 光子状態間の干渉の場合、通常の位相差より、4 倍敏感に出力が変化する。このため、限られた光子リソースに対して、古典的な光（レーザー光など）に存在する標準量子限界を超えた測定感度を実現可能である。今回、不完全性を含む光子干渉に対して、その（1 でない）明瞭度と位相測定感度に関してより一般的な理論を構築し、位相測定感度と 1 光子あたりのフィッシャー情報量の関係を明らかにした。また、干渉縞（フリンジ）の傾きが最大の点が必ず

しも測定感度最大ではないという、興味深い結果も発見した。さらに、昨年度報告した4光子干渉実験について、特にイベントの検出効率を改良し、感度の向上に成功した。

・極低温における、テーパーファイバと微小球共振器の結合と制御

単一発光体のコヒーレンス時間を、量子位相ゲートに必要なだけ増大させるためには、一般に極低温(10K以下)環境が必要となる。しかし、テーパーファイバと微小球を光学的に結合させる実験を、極低温下で行った例は知る限りまだなく、そのための技術を新たに研究、確立しなければならなかった。今回我々は、知る限り世界で初めて、高いQ値を持つ微小球共振器とテーパーファイバの極低温下での結合実験に成功した。波長可変半導体レーザーからの光をテーパーファイバに導入し、その透過光強度をフォトダイオードで計測した実験により、微小球とテーパーファイバ間の距離が短くなるにつれ、共鳴によるディップが現れ、共鳴によるディップの線幅は40MHzとなった。これは、 5×10^6 のQ値に対応する。この系を利用した、量子情報デバイス実現に向けての大きなステップとなった。

・位相シフトスペクトルの新規測定方法の開発

テーパーファイバ微小球共振器における共鳴状態による位相シフトの観測方法を確立、微小球共振器の共鳴にともなう位相シフトスペクトラムの取得に初めて成功した。また、本手法により、結合状態からアンダー結合からオーバー結合に移る際にみられる、位相シフトスペクトルの突発的な遷移の観測にも初めて成功した。

今回新しく開発した、ストークスパラメータを用いた解析方法は、検出器を現在のフォトダイオードから光子検出器に変更するだけで、単一光子に対しても適用可能である点で非常に重要である。また、既存の実ディップ形状からクラマースクロニヒ関係を仮定し位相シフトを計算する方法等では、強度の強い光を用い周波数走査をしなければ位相シフトが測定できないのに対し、本方法は周波数が固定された単一光子についてもそのまま適用することができる。

[原著論文]

Beating the standard quantum limit: phase super-sensitivity of N-photon interferometers, R. Okamoto, H. F. Hofmann, T. Nagata, J. L. O'Brien, K. Sasaki and S. Takeuchi: *New Journal of Physics*, 10 (2008) 073033/1-073033/9.

Observing Quantum Correlation of Photons in Laguerre-Gauss Modes Using the Gouy Phase, D. Kawase, Y. Miyamoto, M. Takeda, K. Sasaki, and S. Takeuchi: *Physical Review Letters*, 101 (2008) 050501/1-050501/4.

An Entanglement Filter, R. Okamoto, J. L. O'Brien, H. F. Hofmann, T. Nagata, K. Sasaki and S. Takeuchi: *Science International*, 323 (2009) 483-485.

Effect of high-dimensional entanglement of Laguerre-Gaussian modes in parametric downconversion,, D. Kawase, Y. Miyamoto, M. Takeda, K. Sasaki and S. Takeuchi: *Journal of the Optical Society of America B*, 26 (4) (2009) 797-804.

[解説、総説]

ファイバー結合微小球共振器を用いた固体量子位相ゲートの実現に向けて、高島秀聡、藤原英樹、笹木敬司、竹内繁樹、*光学* 37[12] (2007) 686-691.

光子の量子状態を自在に操るー光量子ゲートと光量子回路ー、竹内繁樹、*レーザー研究* 36[8] (2008) 1-5.

光量子 IC の出現、竹内繁樹、*パリティ* 24[1] (2009) 11-12.

[特許]

「周期構造等を付加したテーパ光ファイバ」 竹内繁樹、特願 2009-028429

[国際会議]

Observing quantum correlation of photons in Laguerre-Gaussmodes using the Gouy phase (invited), *S.Takeuchi, D.Kawase, Y.Miyamoto, M.Takeda, and K.Sasaki: 17th International Laser Physics Workshop(2008) Trondheim, Norway, Jun.30-Jul.4,2008.

Photon juggling for quantum information processing and quantum metrology (invited), S.Takeuchi: International Nano-Optoelectronic Workshop 2008, Lake Saiko and Shonan Village, Japan, Aug.2-15,2008.

Controlling photonic qubits using geometrical phase (invited), *D.Kawase, Y.Miyamoto, M.Takeda, K.Sasaki and S.Takeuchi: SPIE Optics + Photonics2008, San Diego, U.S.A, Aug.10-14,2008.

Demonstration of a non-local quantum filter (poster), *R.Okamoto, J.L.O'Brien, H.F.Hofmann, T.Nagata, K.Sasaki, and S.Takeuchi: The Ninth International Conference on QCMC2008, Calgary, Canada, Aug.19-24,2008.

Analysis of errors in an optical Controlled-NOT gate (poster), *T.Nagata, R.Okamoto, H.F.Hofmann, K.Sasaki, and S.Takeuchi: The Ninth International Conference on QCMC2008, Calgary, Canada, Aug.19-24,2008.

Optical Phase Shift Observed in a Resonance Mode of a Tapered-Fiber Coupled with a Microsphere Resonator (poster), *T.Asai, H.Takashima, H.Fujiwara, K.Sasaki, and S.Takeuchi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep.29-Oct.1,2008.

Hong-Ou-Mandel Dip with Independence Heralding Single Photon Sources (poster), *M.Tanida, T.Nagata, R.Okamoto, K.Sasaki, and S.Takeuchi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep.29-Oct.1,2008.

Quantum information processing using photons (invited), S.Takeuchi: 4th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Sep.29-Oct.1,2008.

Analysis of input-output characteristic of fiber-coupled microsphere laser using rate equations (poster), *H.Takashima, H.Fujiwara, S.Takeuchi, K.Sasaki, and M.Takahashi: EOS Annual Meeting 2008, Paris, France, Sep.28-Oct.2,2008.

Photon juggling for quantum information processing and quantum metrology (invited), S.Takeuchi: International Workshop on Fundamentals of Light-Matter Interaction, Recife, Brazil, Oct.20-22,2008.

Realization of non-local quantum filter (poster), *R.Okamoto, J.L.O'Brien, H.F.Hofmann, T.Nagata, K.Sasaki, and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Beating standard quantum limit: The sensitivity of N photon interferometers (poster), *R.Okamoto, J.L.O'Brien, H.F.Hofmann, T.Nagata, K.Sasaki, and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Micro-sphere resonator coupled with a tapered fiber for quantum information processing (poster), *T.Asai, H.Takashima, H.Fujiwara, K.Sasaki and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Toward high-fidelity operation of linear-optics quantum gates (poster), *T.Nagata, R.Okamoto, H.F.Holger, K.Sasaki and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Highly-pure heralding single-photon sources for linear optics quantum computation (poster), *M.Tanida, T.Nagata, R.Okamoto, K.Sasaki, and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Toward large-scale optical quantum circuits-Activity of Hokkaido University Group, a sub-group of Imoto Team- (poster), S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Manipulation of optical qubits using geometrical phase (invited), *D.Kawase, Y.Miyamoto, M.Takeda, K.Sasaki and S.Takeuchi: International Symposium on Physics of quantum information processing, Nara, Japan, Nov.25-28,2008.

Photon juggling for quantum information processing and quantum metrology (poster), S.Takeuchi: Workshop on Information, Nano and Photonics Technology 2008, Kobe, Japan, Nov.27-28, 2008.

Optical quantum circuits and nano-photonic devices for quantum information and quantum metrology (invited), S.Takeuchi: The 10th RIES-Hokudai International Symposium on "綾" [aya] , Hokkaido, Japan, Dec.8-9,2008.

Evaluation of an entanglement filter (poster), *R.Okamoto, J.L.O'Brien, H.F.Hofmann, T.Nagata, K.Sasaki and S.Takeuchi: The 10th RIES-Hokudai International Symposium on "綾" [aya] , Hokkaido, Japan, Dec.8-9,2008.

Toward high-fidelity operation of linear-optics quantum gates (poster), *T.Nagata, R.Okamoto, H.F.Hofmann, K.Sasaki and S.Takeuchi: The 2nd International Symposium on Global COE Program of Center for Next-Generation Information Technology Based on Knowledge Discovery and Knowledge Federation(GCOE-NGIT2009), Hokkaido, Japan, Jan.20-21, 2009.

Toward high-fidelity operation of linear-optics quantum gates (poster), *T.Nagata, R.Okamoto, H.F.Hofmann, K.Sasaki and S.Takeuchi: The 12th SANKEN International Symposium Joint Meeting of The 7th SANKEN Nanotechnology Center Symposium The 2nd SANKEN MSTeC Symposium The 1st SANKEN Alliance Symposium, Osaka, Japan, Jan.22, 2009.

Quantum metrology using entangled photons (invited), *R.Okamoto, and S.Takeuchi: SPIE Photonics West (2009), San Jose, U.S.A, Jan.24-29, 2009.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

竹内 繁樹 SPIE Photonics+Optics, Quantum communications and Quantum Imaging (Program Committee member)

竹内 繁樹 学術雑誌 Nonlinear Optics Quantum Optics Editorial Board

[国内学会]

日本物理学会	1 件
応用物理学会	1 件
量子情報技術研究会	4 件
その他	3 件

[取得学位]

修士 (工学)	
浅井 健志	「テーパファイバ・微小球共振器間の結合状態制御と位相シフトスペクトルに関する研究」
谷田 真人	「伝令付き単一光子源の2光子干渉性に関する研究」

[科学研究費補助金]

(代表者として配分されたもの)		単位：千円
基盤研究(A)	群速度エンジニアリングによる、時空間単一モード光子源の実現と応用	17,100

[受託研究]

竹内 繁樹	総務省 戦略的情報通信研究開発推進制度(SCOPE) 「光子間の高効率固体量子位相ゲート素子の実現に関する研究」	13,187
竹内 繁樹	科学技術振興機構 創造的研究開発推進制度(CREST) 「多光子量子演算ゲートの研究」	13,500
竹内 繁樹	三菱電機	4,000

生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報システム

特任准教授（常勤） 浅川 直紀
特任助教（常勤） 堀田 育志

a) 概要

「生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報システム」（「生体ゆらぎ」）は「先端融合領域イノベーション創出拠点の形成」のプロジェクトとして、生体システムの機能発現の仕組みを「ゆらぎの利用」の視点から徹底的に追求して新しいコンセプトを創出し、その知見を取り入れた新しいナノ材料物質科学、情報システム科学、ロボット工学を構築することによって、生体特有の柔軟な機能を実現した新しい知的人工物及び情報システムの創成を目指す。協働機関として民間企業7社が本研究に参画する。以上のように、「ゆらぎの利用」に焦点を当てて、基礎科学から産業化・実用化技術に至る真のイノベーション創出を目指す。

本研究の推進方策として、頑強で柔軟な生命機能を実現している「ゆらぎ」を計測・解析し、生体のエネルギー変換・情報処理に触発された新しい原理に基づく物質機能の創成へと応用展開を図る。ゆらぎを効率的に活用する新しい原理がアトラクタ選択モデルである。このモデルでは、ゆらぎ存在下で、環境(activity)によりアトラクタを持つダイナミクスが変形する。すなわち、従来の材料工学では取り除くことが目的であったゆらぎ(物性値の不規則性)を有効に利用し、決定論的モデルを超えたゆらぎアトラクタ選択モデルを実現することで、頑強かつ柔軟なゆらぎ素子を創製するということになる。また、材料内の多谷ポテンシャルを有効に利用して、アトラクターを持つ制御構造を表現することも重要である。そこで、アトラクタ選択素子を構成する基本となるゆらぎ素子の構造を明らかにし、それらの特性を調べることにより物理パラメータの探求を行っている。そして、ゆらぎ素子化のためのゆらぎ材料の探索開発を行い、さらに、プロセス・機能開発を行っている。また、生体ゆらぎを計測するための評価技術の開発も行う。

b) 成果

・人工確率共振システムの協調的ダイナミクス

人工の確率共振システムであるニューロン型確率共振素子リングにおいてノイズを加えることにより擬周期的な発振現象が見られることを見いだした。システムに加えるノイズの強度を変化させると発振周期が変調することから、明らかにノイズ由来の発振であることが分かった。さらに、リングを複数個結合することにより、それぞれのリングで位相をずらしながら同期発振することを見いだした。発振と同期は自律システムの基本機能であり、ニューロン型確率共振素子リングでこれらの機能が実現できたことから、ノイズを有効利用した自律システムへの発展が期待できる。

・ノイズで駆動されるアトラクタスイッチングデバイス

人工のニューラルネットワークはその動作が決定論的に決定されることや予め学習が必要であることから、突発的な環境変化への適応性が低いことが問題となっているが、確率的に励起可能な閾値系を用いることにより、環境変化への適応性の向上が可能であることが明らかになった。この閾値系の興奮性/抑制性ネットワークは幾つかのアトラクタをもつ。ノイズは、アトラクタを安定化させるエネルギー源やアトラクタ間を遷移させる駆動力として働く。さらに、この人工ネットワークのダイナミクスは、ヒトの視覚野での立体視や両眼視野闘争に見られる履歴現象に似た現象が観測された。このような結果は、アナログ電子回路と数値シミュレーションを用いた単純閾値系ネットワークで観測されたが、クラス1ニューロンを用いた数値シミュレーションにおいても同様の現象が観測された。このように、系の内部状態のみならず環境からの情報も加味しつつ系の状態を決定するノイズ駆動のアトラクタ選択型デバイスの設計を行った。

[原著論文]

Cooperative Dynamics of an Artificial Stochastic Resonant System, Y. Hotta, T. Kanki, N. Asakawa, H. Tabata, and T. Kawai, Appl. Phys. Express 1 (2008) 088002.

Noise-driven attractor switching device, N. Asakawa, Y. Hotta, T. Kanki, T. Kawai, and H. Tabata, Phys. Rev. E 79 (2009) 021902.

[特許]

「ヒステリシスコンパレータ」堀田育志、神吉輝夫、浅川直紀、川合知二、特願 2008-223036

「制御信号発生方法、その装置、及び移動体駆動制御装置」堀田育志、神吉輝夫、浅川直紀、川合知二、特願 2008-243521

「コンパレータ、ノイズジェネレータ、確率共振素子」神吉輝夫、堀田育志、浅川直紀、川合知二、田中秀和、特願 2008-259480

「ゆらぎ発振器、ゆらぎ発振システム、観測装置、及び制御システム」堀田育志、神吉輝夫、浅川直紀、河原敏男、川合知二、田畑仁、PCT 出願 (PCT/JP2008/064932)

[国際会議]

"Brain-inspired stochastic resonant devices using poly(3-alkylthiophene)s", N. Asakawa, Y. Hotta, T. Kanki, and T. Kawai, 18th Iketani Conference: "International Conference on Control of Super-Hierarchical Structures and Innovative Functions of Next-generation Conjugated Polymers", October 21-23, 2008 Awaji Yumebutai International Conference Center, Hyogo, Japan

[国内学会]

応用物理学会	1 件
高分子学会	1 件

[受託研究]

川合 知二	文部科学省	生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報システム	98,100
-------	-------	----------------------	--------

〔附 3〕 共通施設、技術室、事務部の組織と活動

試作室

室長（兼）教授 沼尾 正行
技術職員（技術室所属） 金属工作室 角一 道明、大西 政義
ガラス工作室 松川 博昭、小川 紀之

a) 概要

試作室の前身である金木工場とガラス工場は、産業科学研究所が設立されると同時に付設された。後に統合されて試作工場となり、昭和 57 年（1982 年）に試作室となった。本研究所の研究分野は広範囲にわたるので、実験装置は多種多様かつ斬新な物が多い。金属工作室とガラス工作室からなる試作室は、これらの実験装置を製作して提供することにより本研究所の活動に重要な役割を果たしている。

金属工作室は、各種金属を用いる理工学実験装置の設計と試作および実験器具を製作している。近年は超高真空や極低温用実験装置等の依頼が多く、これらの要請に応じるために設計の段階から研究者と綿密な連携を保つことにより、実験目的に適応した装置を製作している。平成 13 年度には高精度門型マシニングセンタが、平成 20 年度には CNC 旋盤が導入され研究者からの高度な依頼にも対応できるようになった。さらにオープンショップと呼ばれる共同利用工作室も併設しており、適時研究者への技術指導も行なわれている。

ガラス工作室は、各種理化学ガラスを材料とする実験器具と装置の設計と試作を行なっている。研究者が必要とする実験目的に適応した装置を開発すると共に、従来の機器も機能を高め使いやすさと安全性を追求した装置を提供できるように研鑽し技術の確立を図っている。また近年、高品質石英ガラス製品や各種セラミックス材料の加工も要求されているので、そのための装置の充実も図っている。また、平成 20 年度には CNC 円筒研削盤が導入され研究者からの高度な依頼にも対応できるようになった。

b) 活動報告

試作室は、例年通りいちょう祭の施設一般公開を行った。金属工作室は、工作機械類を披露すると共に、展示コーナーでは実験装置類を公開した。ガラス工作室はガラス旋盤および実験器具類の他、科学にちなんだガラスのオブジェを展示した。また、8 月 6～8 日の 3 日間、技術室主催のものづくり教室において、金属工作室は「プレートをつくろう!」、ガラス工作室は「浮沈子をつくろう!」と題して、小中学生に物作りの楽しさ、科学の面白さを教えた。

設備の充実としては金属工作室の高周速グライNDERユニットを更新した。また、ガラス工作室の CNC 円筒研削盤、金属工作室の CNC 旋盤やマシニングセンタ用高周速スピンドルモーターユニット、ドリル研磨機やマシニングセンタの周辺装置と工具を整備した。

また、全国の技術職員が集う技術研究会に参加し、技術を研鑽している。さらに、神戸大学、大阪府立大学の職員の技術研修を受け入れ技術指導を行った。これにより広範囲に技術を伝承する事に努めている。その他、所内向けに個別の技術指導を行っている。

[年間依頼処理件数]

金属工作室 210 件（前年度 254 件） ガラス工作室 141 件（前年度 209 件）

[オープンショップ利用件数]

金属工作室 約 50 件 ガラス工作室 約 10 件

[いちょう祭見学者数]

金属工作室 約 20 名 ガラス工作室 約 30 名

[実技指導受講者数]

金属工作室 13 名 ガラス工作室 20 名（内 所外 2 名 10 件）

情報ネットワーク室

室長（兼任）	中谷 和彦
教授（兼任）	安藤 陽一
准教授（兼任）	來村 徳信
助手（兼任）	金 権銖
技術職員（兼任）	田中 高紀
技術職員	相原 千尋
技術職員	奥村 由香
技術補佐員	坂本 美夕

a) 概要

情報ネットワーク室は、近年の研究環境における情報ネットワークの急速な普及と重要性を鑑み、これまでのボランティアベースの所内情報ネットワークの運営を組織化する為に、1999年3月に発足した。所内情報ネットワークは、1980年代後半に知能システム科学大部門の研究室が共同で構築し、1994年のODINS(Osaka Daigaku Information Network System)の運用開始に伴い研究所全体規模で整備された。現在では、産業科学研究所に携わる人々に情報の発信・受信の場を提供している。情報ネットワーク室では室長のもと、技術室より派遣された技術職員により産業科学研究所ネットワークの安定運用はもとよりネットワークポリシーの策定、整備における技術的作業をはじめ、各種サーバーの構築・管理、各種システムの構築・管理、利用者・研究者のサポート・教育、ホームページの更新・作成による広報支援等を行っている。また、産業科学研究所の於ける各種シンポジウム、講演会等において全世界へ向けインターネットライブを提供し、レジストレーション、アブストラクト収集システム等を提供している。また、研究所入館管理システム、電子掲示板、監視カメラの運用・管理も行っている。また、業績評価システム、年次報告書編集システム、原著論文・国際会議データ収集システム等多数の所内向けシステムの開発・運用・管理を行っている。

b) 成果

[シンポジウム関連]

- ・ 第4回阪大ナノサイエンス・ナノテクノロジー国際シンポジウム「Nano-Advanced Materials and Devices - from Nano-fabrication to Nano-application -」(08年9月)
- ・ 産業科学研究所 第64回学術講演会「ネットワーク型先端学術科学を目指して」(08年12月)
- ・ 第12回産研/第7回ナノテクセンター/第2回MSTEC国際シンポジウム/第1回アライアンスシンポジウム「Frontiers of Science for Future Industries」(09年1月)

[システム関連]

- ・ 産業科学研究所監視カメラ導入
- ・ サーバーセキュリティ外部監査
- ・ PKIプロジェクト(国立情報学研究所)参加
- ・ ナノテク講義レポート提出システム制作
- ・ 入館管理システムのネットワーク化
- ・ 原著論文・国際会議データ収集システム制作

[ネットワーク関連]

- ・ 第1研究棟改修に伴うネットワーク設計・変更
- ・ ODINS無線LAN設置

- ・ 事務部ネットワーク設計・変更
- ・ 楠本会館ネットワーク設計・変更
- ・ リノベーションセンター吹田分室ネットワーク設計・変更
- ・

[委員会]

- ・ 広報委員会
- ・ 業績評価委員会
- ・ 全学無線LAN-WG

[ホームページ]

- ・ 産研改組に伴う産研公式HPリニューアル及び更新
- ・ HOT TOPICS、受賞者一覧、歴代所長、名誉教授一覧、留学生メール相談窓口、教授会議事要旨新設
- ・ 産研同窓会
- ・ 産業科学研究協会
- ・ 事務部

[その他]

- ・ 産研紹介VIDEO WEB版公開
- ・ いちよう祭一般公開VIDEO制作
- ・ ポスター印刷（488 件）

放射線同位元素実験室

室長（兼任）教授 山口 明人

概要

本実験室は、放射線同位元素のうち、非密封の ^3H , ^{14}C , ^{32}P , ^{33}P , ^{35}S を含む物質を取り扱う実験のために設置されたものである。本実験室には、液体シンチレーションカウンターやバイオイメージングアナライザー等の装置が設置されている。これらの設備を用い、化合物の同位元素による標識や、標識化合物を用いた生化学的、分子生物学的及び細胞生物学的実験が行われ、タンパク質や遺伝子の構造と機能の解明のために大きな役割を果たしている。教職員や学生（放射線同位元素取扱教育訓練受講者）が年間を通して利用しており、放射線障害予防規定に則した維持管理が行われている。

成果

放射線同位元素実験室を使用して得られた研究の成果は各研究室の頁にまとめられている。

図書室

室長（兼任）教授	加藤 修雄
事務職員	小野 泰子
事務補佐員	濱中 久仁子

本図書室は、専門的図書を所蔵し、現在、管理棟二階に開架図書室、図書作業室が設けられ、研究棟一階に第二書庫が設けられている。図書の発注、受入及び文献の所在調査や照会、複写の申し込みや受付業務、図書館間相互貸借を行っている。又、利用案内、受入れ図書などをホームページ（<http://www.sanken.osaka-u.ac.jp/labs/lib-web/>）に掲示している。

【蔵書数】	和文図書	10,071 冊	和雑誌	201 種	新聞	5 種
	欧文図書	35,709 冊	洋雑誌	755 種		

（平成 21 年 3 月 31 日現在）

産学連携室

室長 特任教授 清水 裕一

a) 概要

産学連携室は、産業科学研究所（産研）と産業界との連携活動を推進するオフィスで、産研の研究成果を社会に還元することを目的として活動を行っている。主な業務は、産研と産業界との緻密なネットワーク構築、産業界からの要望、要請に応じるような研究シーズの紹介、産研の研究成果であるシーズと産業界のニーズとの摺り合わせ等である。また、新産業の創出に向けて新しい分野の研究領域創出の提案、さらに、産業界からの要請による研究開発協力事業の推進活動を行う。

b) 成果

- ・ **研究成果および技術シーズの産業界への紹介**
 - ① 産研テクノサロン開催：4回（平成20年7月1日、平成20年8月29日、平成20年10月30日、平成21年1月28日）
 - ② Web 紹介：産学連携室のホームページにて、各研究室の内容や各種産学連携制度を紹介。さらに相談の窓口を設置し産業界からの問合せに対応。
 - ③ 外部 Web サイトでの紹介：技術シーズの紹介シートを作成し外部機関を通じて紹介。
 - ④ 特許紹介：産研テクノサロン（平成20年7月1日、平成20年8月29日）および国際ナノテクノロジー総合展（平成21年2月18～20日）で紹介。
- ・ **技術移転の推進支援**

新産業創造研究会開催：2研究会各3回
- ・ 新企画セミナー「新素材エレクトロニクスセミナー～次世代産業を探る～」開催：1回（平成20年12月19日）
- ・ 産学連携室セミナー開催：3回
 - ① 「EDA 開発事例からみる先端半導体設計の動向」（平成20年7月14日）
 - ② 「知財戦略・経営の考え方」（平成20年10月23日）
 - ③ 「研究評価の戦略的活用」（平成21年2月23日）
- ・ **公的支援事業のコーディネート**
 - ① JST 「シーズ発掘試験研究」：採択6件
 - ② NEDO 「エネルギー使用合理化技術戦略的開発事業（事前調査）」：採択1件
- ・ **見学会開催：4回**
 - ① 産研協会会員他（平成20年7月1日）
 - ② 産研協会会員他（平成20年10月30日）
 - ③ ドイツザクセン州企業（平成21年2月16日）
 - ④ 堺市企業（平成21年3月12日）
- ・ **産業界とのネットワークの構築**

企業訪問、産学官連携会議、各種展示会、学会・シンポジウム、産研協会行事に参加し産業界とのネットワークを構築

広報室

室長（兼任） 加藤 修雄
技術補佐員 松本 紀子

a) 概要

広報室は、広報委員会の企画・基本方針に沿って広報活動を積極的かつ効果的に行うため、平成 18 年 2 月に発足した。主な業務は、広報に関する基本計画案の作成に必要な資料収集、産研ニュースレター等の広報誌及び年次報告書等の編集及び発行の補助、ホームページ編集に係る資料収集、記者発表（庶務係所掌のものを除く）に関する事務、報道記事等の収集及び保管である。

b) 成果

- ・ いちよう祭一般公開広報
一般公開来場者 201 名
新聞等掲載 2 件(朝日新聞、千里タイムズ、サンケイリビング新聞)
テレビ取材 1 件(JCOM 吹田「日刊すいた情報局」)
- ・ ものづくり・ナノテク理科教室広報
参加者 95 名(ものづくり教室 63 名・ナノテク理科教室 32 名)
広報誌掲載 3 件(千里タイムズ 6 月 20 日号、市報すいた 7 月号、産経リビング新聞7月4日号)
テレビ取材 1 件(JCOM 吹田「日刊すいた情報局」(平成 20 年 8 月 8 日放映))
- ・ スーパーサイエンスハイスクール(SSH)との連携
武庫川女子高等学校への見学説明会実施と夏季体験実習受け入れ
- ・ 高校生の施設見学受け入れ(広報委員会確認分)
受け入れ件数 9 件(高等学校 9 校)
見学者数 289 名
- ・ 産研紹介パンフレット作成
- ・ 研究所内案内板更新
- ・ 歴史展示コーナー整備
- ・ 研究成果、報道情報の HP 掲載

技術室

	室 長	石橋 武
工作班	班 長	松川 博昭
・機械回路工作係	係 長	大西 政義
	係 員	榊原 昇一
・ガラス工作係	係 長	小川 紀之
・技術専門職員		谷畑 公昭
・特例嘱託技術職員		角一 道明
計測班	班 長	田中 高紀
・計測・情報システム係	係 長	相原 千尋
	係 員	奥村 由香
・分析・データ処理係	係 長 (兼)	田中 高紀
	係 員	松崎 剛
・技術専門職員		山本 保、馬場 久美子

a) 概要

・技術室は室長以下、工作班と計測班から成り、それぞれ 2 つの係を有する組織である。技術室長(石橋武)は技術室を統括すると共に、電子顕微鏡室で業務を行ってきた。

・工作班長(松川博昭)は工作班を統括すると共に、試作室のガラス工作室において業務を行ってきた。工作班所属技術専門職員(谷畑公昭)及び機械回路工作係所属技術職員(大西政義、榊原昇一)、特例嘱託技術職員(角一道明)は、産業科学ナノテクノロジーセンター(ナノ加工室)及び試作室の金属工作室において業務を行ってきた。

ガラス工作係所属技術職員(小川紀之)は、試作室のガラス工作室において業務を行ってきた。

・計測班長(田中高紀)は計測班を統括すると共に、材料解析センターにおいて業務を行ってきた。計測班所属技術専門職員(山本保・馬場久美子)及び分析・データ処理係所属技術職員(松崎剛)は、産業科学ナノテクノロジーセンター(量子ビーム実験施設)、技術室及び材料解析センターにおいて業務を行ってきた。計測・情報システム係所属技術職員(相原千尋・奥村由香)は、情報ネットワーク室において業務を行ってきた。

各技術職員は、上記のような派遣先において研究用装置や機器類の試作、運転、計測、ネットワークの保守及び研究用材料の各種分析、そのデータ処理などを効率よく遂行してきた。さらに、近年の研究の多様化に対応して班、係を越えた体制を構築し支援活動の範囲を拡大している。特に産研国際シンポジウムや国際会議などのインターネットライブとそれらの映像記録、ネットによるテレビ会議等の運営にも支援協力している。また技術・知識の向上のため、技術職員各人は相互に技術研修を行うと共に、技術研究会、研修会、各種学会等にも積極的に参加、発表している。

技術室独自で開催している技術室報告会は 21 回目を数え、「技術室報告」No. 21 (2008) を発刊した。これらにより得られた技術・知識は、教職員、研究生等に対してそれぞれの専門的技術指導等で成果を上げている。また本年も当研究所の新入学生を対象とした安全教育に取り組み技術室主催の安全講習会を 5 月に開催した。一方、ものづくり教室を子供たちの夏休みに 3 日間にわたり開催し、11 月には近隣の彩都西小学校においてサンデー・サイエンス 2008 にも科学実験屋台を出店し地域貢献事業の一端を担った。

b) 成果

技術室刊行物

- ・技術室報告 No.21 (2008)

技術室主催、所内講習会及び報告会等

- ・安全講習会 2008年 5月19日 開催 参加人数 約 50名
 - ・ものづくり教室 2008年 8月6日～8月8日開催 参加人数 63名
 - ・彩都サンデー・サイエンス (2008) 2008年11月30日 出動人員5名 参加人数 約 400名
 - ・第21回技術室報告会 2008年11月26日 開催
- 「産研技術室の安全管理への取り組み」 馬場 久美子 技術専門職員
「マシニングセンタを用いた加工事例」 大西 政義 係長
「分析装置のリユースによる効果と運用支援体制について」 田中 高紀 班長
「シリコンドライエッチングにおけるマスク材料の影響」 榊原 昇一 技術職員

技術研究会、学会等の参加、発表

- ・日本顕微鏡学会第64回学術講演会 京都 (08, 5月)
- ・情報システム統一研修 (九段合同庁舎) 東京 (08, 6月)
- ・リニアック技術研究会 東京 (08, 8月)
- ・平成20年度 機器・分析技術研究会 愛媛 (08, 9月)
- ・第29回有機微量分析ミニサロン 大阪 (08, 10月)
- ・日本放射線安全管理学会 (第7回学術大会) 金沢 (08, 12月) ポスター発表
- ・大阪大学技術職員研修 (第25回) 大阪 (08, 12月)
- ・国際ナノテクノロジー総合展 ナノテック2009 東京 (09, 2月) ポスター発表
- ・第2回 産研-多元研 合同技術シンポジウム 仙台 (09, 2月) 口頭発表
- ・京都大学総合技術研究会 京都 (09, 3月) ポスター発表

各種免許・資格取得の現状

- ・衛生工学衛生管理者 (2名)
- ・高圧ガス製造保安責任者免状 乙種化学 (1名)
- ・床上操作式クレーン運転 (1名)
- ・クレーンの玉がけ (1名)
- ・天井クレーン定期自主検査者 (1名)
- ・アーク溶接特別教育 (3名)
- ・研削砥石の取替、取り替え時の試運転の業務 (2名)
- ・第2種放射線取扱主任者免状 (1名)
- ・エックス線作業主任者 (1名)
- ・情報処理技術者試験 (初級システムアドミニストレーター) (2名)
- ・電気工事士免状 (1名)
- ・危険物取扱者 (乙種1類～6類免許) (1名)
- ・毒物劇物取扱者 (1名)
- ・第1種衛生管理者 (2名)

事務局 (平成21年3月31日現在)

	(事務部長)	仲田 昇
	企画室(特任事務職員)	西田 彩
総務課	(課長)	津村 和孝
	総務係(係長)	川添 勝仁
	(主任)	山咲 和久
	(事務補佐員)	小島 慶子
	(事務補佐員)	山田 由紀江
	人事係(係長)	鎌谷 明
	(事務補佐員)	光森 幸子
	(事務補佐員)	林 和美
研究連携課	(課長)	上殿 克巳
	研究協力係(係長)	柏倉 重雄
	(事務職員)	花岡 宏亮
	(事務補佐員)	山内 寛子
	財務係(係長)	森 哲也
	(主任)	反橋 雄二
	(事務職員)	岐田 明海
	(事務補佐員)	清水 実佐子
	(事務補佐員)	小西 まり
	(事務補佐員)	大杉 昌子
	(事務補佐員)	新出 民子
	契約係(主任)	山口 智
	(事務補佐員)	久保 美里
	(事務補佐員)	寺田 久美子
	(事務補佐員)	津田 真由子
	(事務補佐員)	前川 瑠里
	(事務補佐員)	長岡 重男

平成21年8月発行

編集・発行

大阪大学 産業科学研究所

評価委員会・広報委員会

〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘8-1