OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	平成18年度年次報告書 ： 活動状況と課題
Author(s)	
Citation	年次報告書. 2007, p. 1-390
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/77427
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

平成１８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 ---------- ９
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---------- １２
６）広報活動 ---------- １６
７）受賞状況 ---------- １６

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---------- ２２
４）学部、共通教育担当授業一覧 ---------- ２２

４．国際交流
１）活動状況 ---------- ２４
２）国外との研究者往来---------- ２４

５．産業界との交流---------- ２６

６．まとめ（課題と展望)---------- ２８

[附１] 各研究部門の組織と活動 ---------- ３５
[附２] 各附属研究施設の組織と活動 ---------- ２２８
[附３] 共通施設、技術室、事務部の組織と活動---------- ３８１

本年次報告書は、平成１８年度（平成１８年（2006 年）４月１日から平成１９年（2007 年）３月３１日まで）を対象としたものである。
なお、解説、総説、著書、原著論文については、平成１８年（2006 年）中のみとした。

１．はじめに

“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を目指して

所長　川合知二

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。67 年の歴史を歩む間、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。

当時は僅か３部門で発足した産研は、現在 28 研究分野を含む 7 研究部門と、材料解析センター、放射線実験所と高次インターマテリアルセンターの改組拡充により発足した産業科学ナノテクノロジーセンター（平成 14 年設置)、新産業創造物質基盤技術研究センター(平成 17 年設置)の３附属研究施設を擁する、国内でも有数の総合理工学研究所となりました。新産業創造物質基盤技術研究センターは、東北大学多元物質科学研究所と連携を組み、対企業での個別的及び学内連合の壁を越えて新産業創造に貢献することを目指しています。また、産学連携を促進すべく、平成 18 年には産学連携室を設置するとともに、新産業創製研究部門を設置しました。さらに、法人を越えた研究推進を行うため、４大附置研究所を結ぶアライアンスを形成しました。

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ましたが、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、時代をリードする役割も担っています。平成 9 年度には文部科学省中核的研究拠点（COE）の 1 つに選ばれ、平成 14 年から 18 年は 21 世紀 COE の拠点に選ばれ、研究・教育を推進してきました。また、戦略的創造研究などの大型の競争的研究資金も獲得しています。

当研究所では、独自の先端的な研究を進めると同時に、分野間の共同研究を積極的に行い、有形・無形の新しい研究成果が次々と創出されていますが、未来を担う若者にこれらを伝承するのも研究者・教育者の使命です。産研では、研究の現場における大学院教育を重視し、理・工・基工・薬・生命機能・情報科学の研究科から大学院生を受け入れ、人材育成に努めています。特筆すべきは、教員として産業界の研究者の協力が得られている点で、異なる研究科の学生が同じ研究所に所属し、多様なバックグラウンドを持つ教員のもとで切磋琢磨しています。

21 世紀において多様化は目覚しく、科学においても夢が現実に、そして未来へ繋がる時代を迎えています。今後は、産業に繋がる未開拓・未挑戦の領域を切り拓き先導していく真の力が試されます。産研発の成果を、産業に還元するという「有言」に「実行」を繋げられるようスタッフ一同邁進する所存です。

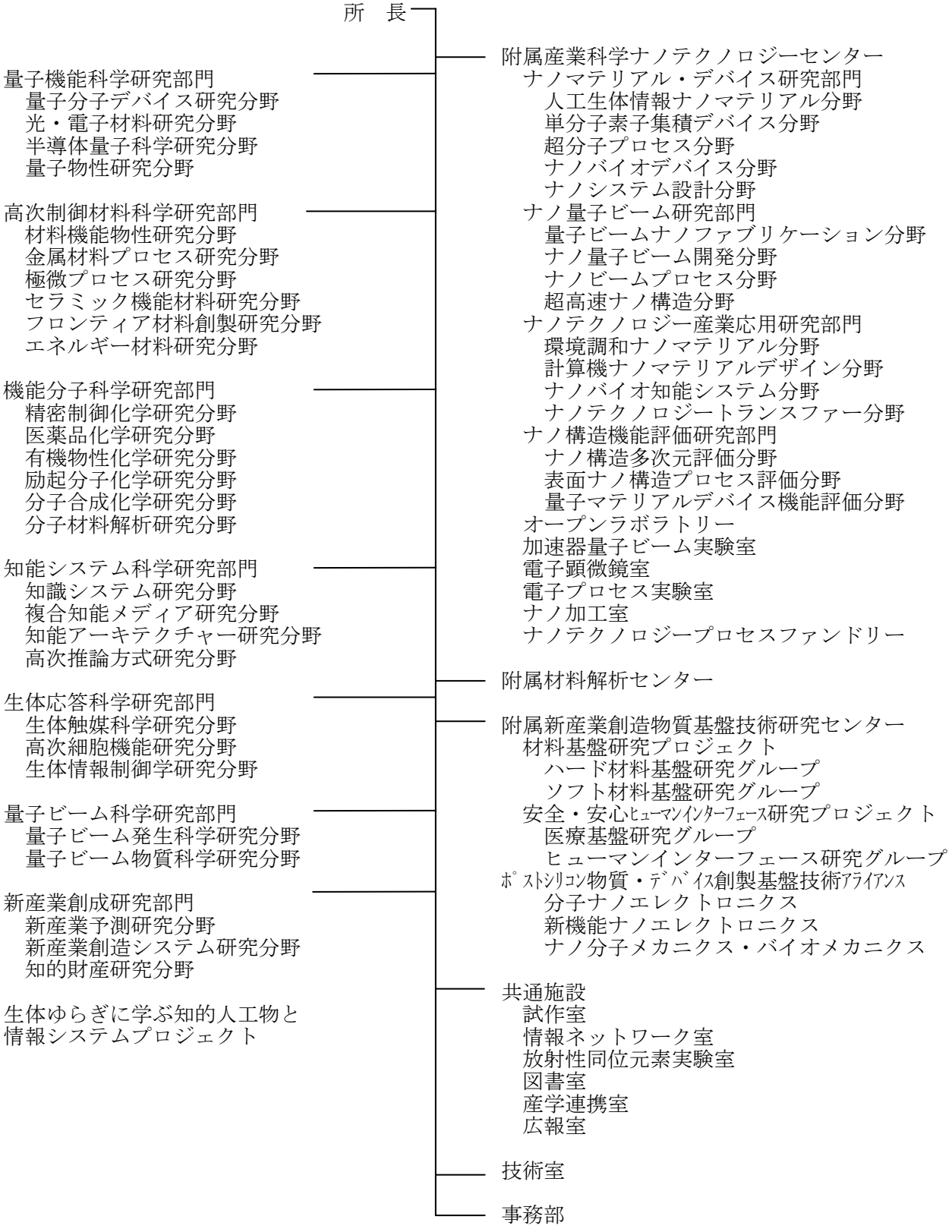
本報告書は、産研による平成 18 年度の研究・教育・社会貢献の成果の記録です。皆さまにご一読いただき、産研のより一層の発展のために、御叱正、御批判を頂ければ幸いです。今後とも皆様のご支援、ご鞭撻をよろしくお願いいたします。

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１９年３月３１日現在）



・教員組織　（平成１９年３月３０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	教授	工学博士	岩﨑　裕
	助教授	博士（工学）	須藤孝一
	特任助手（常勤）	博士（理学）	LIU Hongwen
	特任助手（常勤）	博士（工学）	中村　純
光・電子材料研究分野	教授	工学博士	朝日　一
	助教授	工学博士	長谷川繁彦
	助手	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
	助教授	理学博士	井上恒一
	助手	博士（工学）	前橋兼三
	助手	博士（工学）	大野恭秀
量子物性研究分野	教授	理学博士	吉田　博
	助教授	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	教授	工学博士	弘津禎彦
	助教授	博士（工学）	石丸　学
	助手	修士（工学）	佐藤和久
	助手	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
	助教授	博士（工学）	鈴木進補
	助手	博士（工学）	多根正和
	助手	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
	助教授	博士（理学）	田中秀和
	助手	博士（理学）	田中裕行
	助手	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
	助教授	理学博士	髙橋昌男
	助手	理学博士	延谷宏治
	助手	博士（理学）	松本健俊
フロンティア材料創製研究分野	助教授	博士（工学）	関野　徹
	助手	博士（工学）	楠瀬尚史
エネルギー材料研究分野	教授	工学博士	谷村克己
	助教授	理学博士	田中慎一郎
	特任助手（常勤）	修士（理学）	稲見栄一
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
	助手	博士（工学）	周　大揚
	助手	博士（ｴﾈﾙｷﾞｰ科学）	萩原正規
	助手	博士（工学）	堂野主税
医薬品化学研究分野	教授	理学博士	加藤修雄
	助教授	博士（工学）	大神田淳子
	助手	理学士	新田　孟

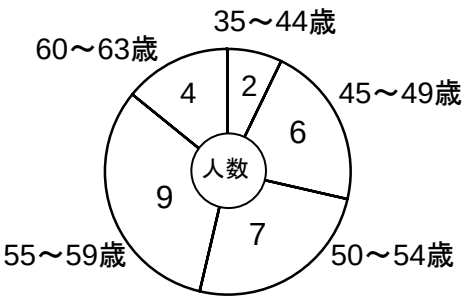
	助手	博士（理学）	河野富一
有機物性化学研究分野	教授	理学博士	安蘇芳雄
	助教授	理学博士	兼田隆弘
	助手	博士（工学）	家　裕隆
励起分子化学研究分野	教授	工学博士	真嶋哲朗
	助教授	博士（工学）	藤塚　守
	助手	工学修士	藤乗幸子
	特任助手（常勤）	博士（理学）	立川貴士
分子合成化学研究分野	教授	工学博士	笹井宏明
	助教授	博士（理学）	鬼塚清孝
	助手	理学博士	市原潤子
	助手	理学博士	山口俊郎
	助手	理学博士	Doss Jayaprakash
	特任助手（常勤）	博士（理学）	竹中和浩
分子材料解析研究分野	教授（兼）	理学博士	加藤修雄
	助手	博士（工学）	髙井嘉雄
	助手	博士（理学）	開發邦宏
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
	助教授	博士（工学）	來村徳信
	助手	博士（工学）	笹嶋宗彦
	特任助手（常勤）	博士（工学）	林　雄介
複合知能メディア研究分野	教授	博士（工学）	八木康史
	助教授	博士（工学）	向川康博
	助手	博士（工学）	佐川立昌
	助手	博士（工学）	槇原　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
	助教授	博士（工学）	栗原　聡
	助手	博士（工学）	森山甲一
高次推論方式研究分野	教授	工学博士	鷲尾　隆
	助手	博士（工学）	大原剛三
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
	助教授	博士（農学）	黒田俊一
	助手	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
	助教授	理学博士	和田　洋
	助手	博士（理学）	田端和仁
	助手	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
	助教授	博士（理学）	村上　聡
	助手	博士（薬学）	平田隆弘
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

	助教授	博士（理学）	加藤龍好
	助手	工学士	池田稔治
	助手	博士（理学）	柏木　茂
量子ビーム物質科学研究分野	教授	工学博士	田川精一
	助教授	博士（工学）	関　修平
	助手	工学博士	小林一雄
	助手	修士（工学）	佐伯昭紀
新産業創成研究部門			
新産業予測研究分野	教授（兼）	理学博士	吉田　博
新産業創造システム研究分野	特任教授（兼）	工学博士	千田一貴
知的財産研究分野	特任教授（常勤）(兼)	博士（工学）	清水裕一
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			
単分子素子集積デバイス分野	教授（兼）	理学博士	川合知二
	助教授	理学博士	松本卓也
	助手	博士（工学）	谷口正輝
超分子プロセス分野	教授（兼）	工学博士	真嶋哲朗
	助教授	博士（工学）	川井清彦
	助手	博士（薬学）	滝澤　忍
ナノバイオデバイス分野	教授（兼）	農学博士	谷澤克行
	助教授	博士（理学）	岡島俊英
	助手	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			
量子ﾋﾞｰﾑﾅﾉﾌｧﾌﾞﾘｹｰｼｮﾝ分野	教授	工学博士	吉田陽一
	助教授	博士（理学）	楊　金峰
ナノ量子ビーム開発分野	教授（兼）	理学博士	磯山悟朗
	助教授	工学博士	誉田義英
	助手	工学博士	木村徳雄
ナノビームプロセス分野	教授（兼）	工学博士	田川精一
	助教授	博士（工学）	古澤孝弘
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
	助教授	博士（工学）	奥　健夫
	助手	博士（工学）	井上雅博
計算機ﾅﾉﾏﾃﾘｱﾙﾃﾞｻﾞｲﾝ分野	教授（兼）	理学博士	吉田　博
	助教授	博士（工学）	白井光雲
	助手	博士（理学）	佐藤和則
ナノバイオ知能システム分野	教授（兼）	工学博士	溝口理一郎
	助手	博士（工学）	古崎晃司
ナノテクノロジートランスファー分野			

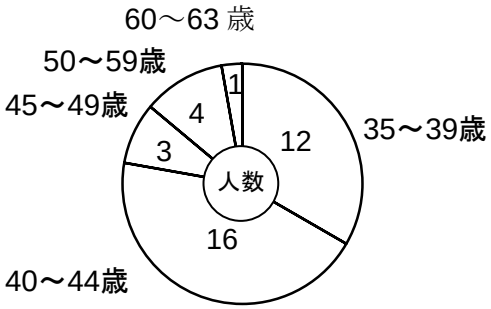
ナノ構造機能評価研究部門			
ナノ構造多次元評価分野	教授（兼）	工学博士	弘津禎彦
	助手	博士（工学）	内藤宗幸
表面ナノ構造プロセス評価分野	教授（兼）	工学博士	谷村克己
	助教授	博士（理学）	金﨑順一
量子ﾏﾃﾘｱﾙﾃﾞﾊﾞｲｽ機能評価分野	教授（兼）	工学博士	朝日　一
	助手	博士（工学）	周　逸凱
附属材料解析センター	センター長（併）		笹井宏明
	助教授	博士（薬学）	鈴木健之
附属新産業創造物質基盤技術研究センター	センター長（併）		真嶋哲朗
材料基盤研究プロジェクト			
ハード材料基盤研究グループ	教授（兼）	工学博士	中嶋英雄
	教授（兼）	工学博士	菅沼克昭
	特任助教授（常勤）	博士（工学）	玄　丞均
	特任助手（常勤）	博士（工学）	金　槿銖
	特任助手（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
	特任助教授（常勤）	博士（工学）	遠藤政幸
	特任助手（常勤）	博士（理学）	松井嘉津也
	特任助手（常勤）	博士（工学）	坂本雅典
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）	薬学博士	山口明人
	教授（兼）	工学博士	吉田陽一
	特任助手（常勤）	博士（理学）	西　毅
	特任助手（常勤）	修士（理学）	近藤孝文
	特任助手（常勤）	博士（薬学）	西野邦彦
ﾋｭｰﾏﾝｲﾝﾀｰﾌｪｰｽ研究グループ	教授（兼）	理学博士	吉田　博
	教授（兼）	工学博士	沼尾正行
	教授（兼）	工学博士	溝口理一郎
	特任教授（常勤）	学士（工学）	高藤　淳
	特任助教授（常勤）	博士（工学）	齋藤　敬
	特任助手（常勤）	博士（理学）	中沢　誠
	特任助手（常勤）	修士（学術）	福井健一
	特任助手（常勤）	博士（理学）	関　宗俊
産学連携室	特任教授（常勤）	博士（工学）	清水裕一
	特任教授	工学博士	千田一貴
生体ゆらぎに学ぶ知的人工物と情報	特任教授（常勤）	博士（理学）	河原敏男
システムプロジェクト	特任助教授（常勤）	博士（理学）	浅川直紀
	特任助手（常勤）	博士（理学）	神吉輝夫
	特任助手（常勤）	博士（理学）	堀田育志

・教員の年齢構成（平成１９年３月３０日現在。特任教員（常勤）含む。ただし、併任、兼任者は除く。）

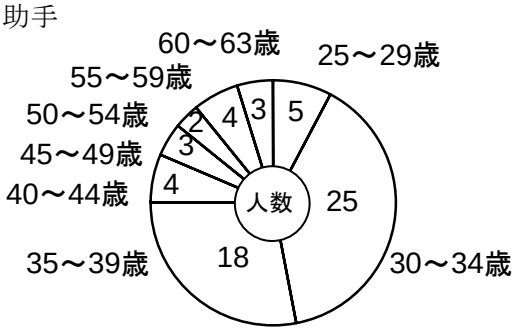
教授



助教授

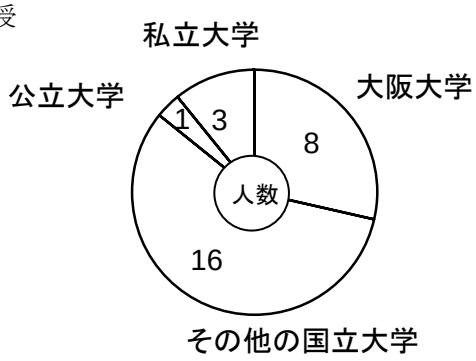


助手

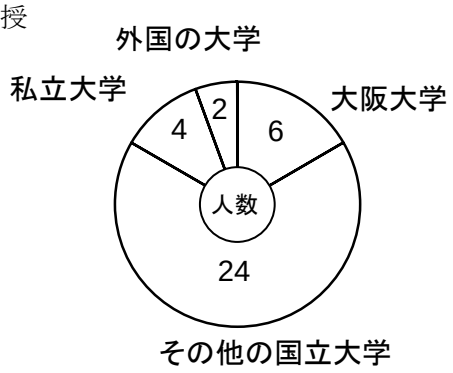


・教員の出身大学（平成１９年３月３０日現在。特任教員（常勤）含む。ただし、併任、兼任者は除く。）

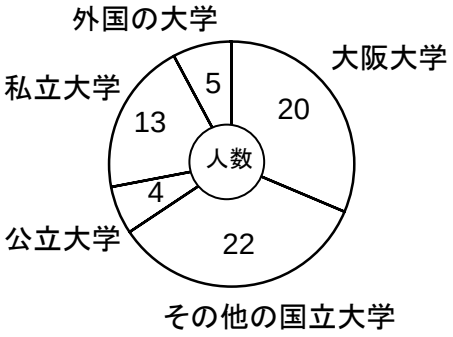
教授



助教授



助手



職員全体では、平成１９年３月３０日現在で教員１２８名、教務職員　２名、事務職員１６名、技術職員１３名、及び非常勤職員１６４名を含み、合計３２３名である。全職員のうち女子は８５名である。

平成１８年３月３１日から平成１９年３月３０日までの人事異動は次のとおりである。

異動事項　（　職　名　）	異動日	（　元　職　）	氏　　名
定年退職	18. 3.31	（高次推論方式・教授）	元田　浩
定年退職	18. 3.31	（量子分子デバイス・助手）	足立敏之
任命（産業科学研究所長）	18. 4. 1		川合知二
任命（産業科学ナノテクノロジーセンター長）	18. 4. 1		菅沼克昭
採用（複合知能メディア・助手）	18. 4. 1	（新産業創造物質基盤技術研究センター・特任助手（常勤））	槇原　靖
昇任（奈良工業高等専門学校会計課用度係・主任）	18. 4. 1	（研究助成係・係員）	中井孝幸
昇任（計測班・技術専門職員）	18. 4. 1	（計測班分析・データ処理係・係員）	相原千尋
配置換（大学院工学研究科・助手）	18. 4. 1	（セラミック機能材料・助手）	毎田　修
配置換（研究推進・国際部研究推進課研究推進企画係・係長）	18. 4. 1	（総務課・専門職員）	佐藤正子
配置換（財務部財務課財務第二係・係長）	18. 4. 1	（経理係・係長）	周防　孝
配置換（文学研究科・総合学術博物館庶務係・係員）	18. 4. 1	（庶務係・係員）	和崎英里
転入（総務課・専門職員）	18. 4. 1	（大阪外国語大学総務課人事部門・係長）	村尾眞理子
転入（経理係・係長）	18. 4. 1	（国際日本文化センター管理部財務課財務企画係・係長）	白井政行
転入（研究助成係・係員）	18. 4. 1	（国立民族学博物館管理部財務課調達係・係員）	山口　智
採用（量子分子デバイス・特任助手（常勤））	18. 4. 1		中村　純
任命（材料解析センター長）	18. 4. 2		笹井宏明
採用（金属材料プロセス・助手）	18. 5.16	（金属材料プロセス・特任助手（常勤））	仲村龍介
採用（高次細胞機能・助手）	18. 6. 1	（新産業創造物質基盤技術研究センター・特任助手（常勤））	飯野亮太
転籍出向（文部科学省）	18. 7. 1	（庶務係・係員）	林　史晃
昇任（高次推論方式・教授）	18. 8.16	（高次推論方式・助教授）	鷲尾　隆
採用（特任助手（常勤））	18. 8.16		神吉輝夫
採用（特任助手（常勤））	18.10. 1		堀田育志
昇任（量子ビームナノファブリケーション・助教授）	18.10.16	（量子ビームナノファブリケーション・助手）	楊　金峰
採用（経理課・事務職員）	18.10.16		日高由希
採用（特任助教授（常勤））	18.10.16		浅川直紀
採用（特任教授（常勤））	18.11.16		河原敏男
退職	18.11.30	（人工生体情報ナノマテリアル・教授）	田畑　仁
退職	18.11.30	（人工生体情報ナノマテリアル・助手）	佐伯洋昌
採用（セラミック機能材料・助手）	19. 1. 1		松本健俊
配置換（研究推進・国際部国際交流課国際交流企画係・係長）	19. 2. 1	（庶務係・係長）	松田健治
配置換（庶務係・係長）	19. 2. 1	（大阪外国語大学総務課総務部門・係長）	川添勝仁

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、教務職員、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年であり、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１９年（2007）３月３１日現在の所長は、川合知二教授が併任しており、任期は平成１８年（2006）４月１日から平成２０年（2008）３月３１日までである。

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、便宜上部門を下記のように２つずつまとめて３つの研究部としている。

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、次のようなものである。（　）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ｼﾞｰｾﾝﾀｰ長、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ｼﾞｰｾﾝﾀｰ長、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ｼﾞｰｾﾝﾀｰ長、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ｼﾞｰｾﾝﾀｰ長、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）

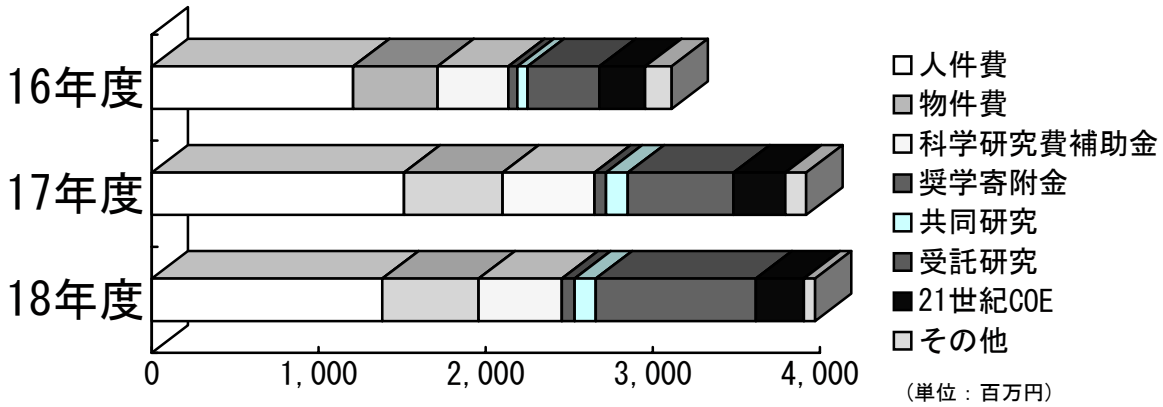
情報ネットワーク室運営委員会（教授若干名、情報ネットワーク室長など）

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１８年度は学内から４名の理科系の教授（奥山雅則（基礎工学研究科)、西嶋茂宏（工学研究科)、中村春木（蛋白質研究所)、山本雅彦（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１６年から３年間の推移を示す。



予算（平成１６～１８年度）

（単位：千円）

		１６年度	１７年度	１８年度
運営費交付金（校　費）	人件費	1,207,747	1,511,111	1,381,252
	物件費	505,304	586,629	577,474
科学研究費補助金（件数）		423,960(93)	550,601(91)	497,540(106)
奨学寄附金（件数）		55,658(77)	68,873(70)	77,391(62)
共同研究　（件数）		61,989(22)	131,709(44)	127,556(57)
受託研究　（件数）		429,474(44)	631,971(56)	957,672(63)
２１世紀ＣＯＥ（件数）		274,000(1)	309,100(1)	288,926(1)
その他（件数）		158,518(5)	126,257(7)	67,550(7)
合　　計		3,116,650	3,916,251	3,975,361

（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。

２１世紀ＣＯＥ

文部科学省の２１世紀 COE プログラム研究拠点形成費補助金（研究拠点形成費）に、次のプログラムが平成１４年度（2002）から採択されている。

学 問 分 野　　：学際、複合、新領域

拠点のプログラム名：新産業創造指向インターナノサイエンス

拠点のリーダー　　：川合知二教授

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	知能ｼｽﾃﾑ科学研究部門	生体応答科学研究部門	量子ﾋﾞｰﾑ科学研究部門	産業科学ナノテクノロジーセンター	その他	合　計
平成 16	1,111	30,811	3,950	4,352	3,833	1,111	9,010	1,480	55,658
	(2)	(23)	(7)	(8)	(5)	(2)	(12)	(18)	(77)
平成 17	2,200	12,440	10,830	13,930	1,833	0	25,690	1,950	68,873
	(3)	(16)	(14)	(10)	(3)	(0)	(18)	(6)	(70)
平成 18	4,500	13,141	16,400	10,100	9,250	0	10,700	13,300	77,391
	(3)	(17)	(13)	(8)	(7)	(0)	(9)	(5)	(62)

単位：千円　（ ）内は件数

４）国際研究プロジェクト

当研究所が当該年度において、公的機関の補助のもとに実施した国際研究プロジェクトは次のとおりである。

日本学術振興会　拠点大学方式による学術交流事業
「多機能型セラミックス複合材料の開発及び機能評価」
川合　知二（実施組織代表者）
関野　徹（コーディネーター）
相手側拠点大学：韓国漢陽大学 Kwang Bo Shim 准教授（コーディネーター）

溝口　理一郎　英国生物工学生物科学研究会議　日本提携助成金（ジャパン・パートナーシップ・アワード）ウェールズ大学　Ross D. King 教授
「生物情報学のための次世代科学的発見支援ツールに関する研究」

５）学術講演会・研究集会

①当研究所が当該年度において、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。

・第１回ポーラスマテリアル研究会　（平成１８年８月３１日）

・日韓拠点大学交流プログラム(CUP)第１４回国際セミナー
「新規の多機能調和型ナノ構造及びナノコンポジット材料」（平成１８年１０月１８日～２０日）

・第１６回マイクロエレクトロニクスシンポジウム大阪２００６（平成１８年１０月２６日～２７日）

・ユーリッヒ研究センター（独）－産業科学研究所合同ワークショップ
（学術交流協定６周年・継続記念）ユーリッヒ研究センター（独）（平成１８年１０月３０日）

・第６２回学術講演会
教職員、学生による材料・情報・生体に関する最新の研究成果をポスターセッションにより発表するとともに「高度産業科学と国際連携」と題するシンポジウムを開催し、７件の講演（うち１件は招待講演）を実施した。当研究所講堂（平成１８年１１月２４日）

・第５回２１世紀 COE プログラム「新産業創造指向インターナノサイエンス」国際シンポジウム
（平成１８年１２月８日～９日）

・第８回エコマテリアルのプロセシングと設計に関する国際シンポジウム（日韓拠点大学交流プログラム(CUP)第１５回国際セミナー）（平成１９年１月１１日～１３日）

・第２回産研―韓国忠南国立大学共同シンポジウム「ナノサイエンス・ナノテクノロジー」
（平成１９年１月２５日～２６日）

・大阪大学産業科学研究所－東北大学多元物質科学研究所間連携事業「新産業創造物質基盤技術研究センター」平成１８年度Ｇ２「ソフト材料基盤研究グループ」研究会（平成１９年１月２８日）

・新産業創造物質基盤技術研究センター（MSTeC）平成１８年度産業科学研究所研究成果発表会
（平成１９年１月３１日）

・第２回ポーラスマテリアル研究会（平成１９年２月８日）

・２１世紀 COE 韓国ワークショップ　韓国ソウル東国大学（平成１９年２月２５日）

・新産業創造物質基盤技術研究センター（MSTeC）平成１８年度成果報告会（平成１９年３月２日）

・第３回ポーラスマテリアル研究会（平成１９年３月２２日）

②研究所間交流プログラム

平成１８年度は以下のとおり研究所間交流が行われた。

・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「融合バイオ」（平成１９年３月１２日）

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４８件（うち外国人を講師に迎えてのものは３１件）であった。

（開催日）	（講　師）	（演　題）
４月１４日	Hermenegildo Garcia （University Politechnica of Valencia 教授）	Photocatalytic Activity of Structured Mesoporous TiO2 Materials
４月１７日	Heitz　D. Roth （Rutger University 教授）	Generation and Reactions of Organic Radical Cations in Zeolites
５月１５日	Ayyappanpillai Ajayaghosh （インド　Regional Research Laboratory Trivandrum　教授）	Soft Organic Materials with Sol-Gel Tunable Optical Properties
５月１７日	Tarun Kumar Sharma （インドラジラマンナ先端技術研究センター　研究官）	Physics and Applications of MOVPE grown Nanostructures
５月３１日	大下浄治 （広島大学大学院工学研究科　教授）	有機ハロシラン、アルコキシシランの簡便合成
６月　２日	大下浄治 （広島大学大学院工学研究科　教授）	オリゴチオフェンのケイ素置換による物性制御と EL・FET 材料への応用
６月１２日	Tamas Horvath （独国ボン大学・フラウンホーファー自律型インテリジェントシステム研究所　教授）	Frequent Subgraph Mining in Outerplanar Graphs
６月１２日	Gyorgy Turan （米国イリノイ大学シカゴ校，教授）	Nearest neighbor representations for Boolean functions
６月１９日	狩野　裕 （大阪大学基礎工学研究科　教授）	統計学者は因果推論をどのように考えるか
７月１３日	Michael E. Houle （情報・システム研究機構国立情報学研究所　客員教授）	A Generic Query-Based Model for Scalable Clustering
７月１４日	趙 大源 （韓国朝鮮大学　助教授）	Intramolecular Exciplex and Intermolecular Excimer Formation of 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine
７月１８日	Sing Bing Kang （Microsoft Corporation，上級研究員）	Animating Chinese Paintings through Stroke-Based Decomposition

８月１７日	干　強 （横浜国立大学大学院工学研究院　助教授）	CAE 技術を用いた電子機器実装信頼性評価
８月１８日	Hou Xue-Long （上海有機化学研究所　教授）	Towards Control of Selectivities in Asymmetric Catalysis
８月２４日	垣内　史敏 （慶應義塾大学理工学部　教授）	有機合成反応の新しい流れ　不活性炭素－水素結合を利用した触媒的合成反応
８月２４日	Hou Xue-Long （上海有機化学研究所　教授）	Transformations of Imines and Aziridines
８月２８日	J. Herfort （ドイツポールデゥルーデ研究所研究員）	Epitaxial Heusler alloys on GaAs substrates
８月２８日	Saso Dzeroski （スロベニア・ヨセフステファン研究所教授）	Inductive Queries on Global Models
９月　６日	David C.Dunand （Northwestern University, USA 教授）	Processing and Properties of Advanced Metallic Foams
９月　７日	Tapan Ganguly （Indian Association for the Cultivation of Science 教授）	Attempts for the productions of longer-lived charge separated species within model donor-acceptor systems. Compounds of Artificial Photosynthesis and Solar Energy Conversion
９月２２日	垣内　史敏 （慶應義塾大学理工学部　教授）	不活性炭素結合切断を経る炭素－炭素結合生成の新手法
９月２８日	Lian Gao （中国　中国科学院上海セラミックス研究所　教授）	Preparation and Properties of Carbon Nanotube Ceramic Composites
１０月１７日	山本　雅彦 （大阪大学工学研究科　教授）	磁性メモリ、磁性論理演算、そして微小磁性体磁化状態の新測定法
１０月２５日	Steven Kraines （東京大学領域創成学術統合化プロジェクト部門　助教授）	A web-based platform for scientific knowledge sharing, discovery, and integration
１０月３１日	松井　秀樹 （東北大学金属材料研究所　教授）	核融合炉材料の研究 －昨日、今日、そして明日―
１１月１１日	Dieter Enders （ドイツ　RWTH アーヘン工科大学教授）	Biomimetic Asymmetric Organocatalysis
１１月１３日	Peter Kündig （ジュネーブ大学　教授）	Advances in Transition Metal Lewis Acid – Mediated and – Catalyzed Reactions
１１月１３日	小野田　崇 （電力中央研究所　主任研究員）	サポートベクターマシンの基礎とその応用
１１月１６日	Matej Vesenjak （マリボル大学）	Computational modeling of cellular structures accounting for fluid fillers

１１月２２日	川越　毅 （大阪教育大学　助教授）	スピン偏極 STM/STS による３d 遷移金属薄膜の磁気イメージング
１１月２９日	Josef　Pola （Institute of Chemical Process Fundamentals (ICPF), Prague　リーダー）	CW CO_2 laser-induced formation of nano-sized iron particles
１２月　７日	Laren Malcolm Tolbert （Georgia Institute of Technology 教授）	Molecular lithography
１２月１１日	Bo-Young, Hur （韓国　慶尚大学　教授）	Rheolgical characteristics of Molten Metal for Casting Design
１２月２５日	大下　浄治 （広島大学大学院工学研究科　教授）	新規なアシルポリシラン類からのシレン生成
１２月２７日	大下　浄治 （広島大学大学院工学研究科　教授）	π電子系へのケイ素基の置換効果と機能材料への展開
１月　５日	趙 大源 （韓国　朝鮮大学　助教授）	Photoinduced Electron Transfer Processes in 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads
１月２２日	小澤　純夫 （NEDO 機械システム技術開発部）	材料技術とその応用分野－材料を制するものが製造業を制する－
１月２４日	小岩　昌宏 （京都大学　名誉教授）	拡散研究の歩み
１月２４日	Wayne P. Hess （米国　パシフィック・ノースウエスト国立研究所　副所長）	機能性酸化物表面の構造と物性
２月１３日	Seung Joo LEE （韓国　東国大学　教授）	Diluted Magnetic Semiconductors
２月１３日	Michael E. Houle （情報・システム研究機構 国立情報学研究所　客員教授）	SASH : Fast Approximate Similarity Search in Extremely High-Dimensional Data Sets
２月２６日	Albert S. C. Chan （香港理工大学　教授）	Catalytic asymmetric C-C bond formation
２月２８日	砂川　洵 （帝京平成大学薬学部　教授）	医薬品の開発研究Ⅰ
３月　５日	Zoran Ren （Zoran Ren　教授）	Computational and Experimental Verification of Roadside Safety Barrier in Europe
３月　６日	中田　芳幸 （いわき明星大学　教授）	Sb-Te 合金の電子顕微鏡観察
３月１９日	J. Kumar （インド　アンナ大学　教授）	Semiconductor Nanostructures
３月１９日	砂川　洵 （帝京平成大学薬学部　教授）	医薬品の開発研究Ⅱ
３月２２日	安藤　香織 （琉球大学教育学部　教授）	理論計算の有機合成への活用（の試み）

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）(2006)
・Memoirs of the Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University　Vol.６３（2006）
・年次報告書（平成１７年度版）
・産研ニュースレター　（年３回発行）
・産研テクノサロン　講演録・資料（平成１８年度版）

「産研ホームページ」も開設しており、産研ニュースレター等をみることができる。
（URL:http://www.sanken.osaka-u.ac.jp）

７）受賞状況　（平成１８年１月２日～平成１９年１月１日）

周　逸凱	最優秀論文賞（IUMRS-ICA-2006）
弘津　禎彦	金属組織写真賞 A 部門奨励賞（社団法人日本金属学会）
石丸　学	金属組織写真賞 A 部門奨励賞（社団法人日本金属学会）
内藤　宗幸	金属組織写真賞 A 部門奨励賞（社団法人日本金属学会）
石丸　学	本多記念研究奨励賞（財団法人本多記念会）
平田　秋彦	ベストポスター賞（第５回バルク金属ガラス国際会議）
多根　正和	奨励賞（社団法人日本金属学会）
ﾌﾛﾝﾃｨｱ材料創製研究分野	ポスター賞（第２回アジアオセアニアセラミック学協会連合）
ﾌﾛﾝﾃｨｱ材料創製研究分野	優秀発表賞（第８回エコマテリアルのプロセシングと設計に関する国際シンポジウム）
笹井　宏明	日本化学会学術賞（日本化学会）
笹井　宏明	市村学術賞貢献賞（財団法人新技術開発財団）
溝口　理一郎	論文賞（人工知能学会）
溝口　理一郎	研究会優秀賞（人工知能学会）
林　雄介	ICCE2006 Best paper award（コンピュータの教育利用に関する国際会議）
溝口　理一郎	ICCE2006 Best paper award（コンピュータの教育利用に関する国際会議）
磯谷　セイジ	ICCE2006 Best student paper award（コンピュータの教育利用に関する国際会議）
溝口　理一郎	ICCE2006 Best student paper award（コンピュータの教育利用に関する国際会議）
磯谷　セイジ	Second Place Award of the ACM Student Research Competition at SIGCSE（the Association for Computing Machinery）
八木　康史	Distinguished Poster（5th International Conference on Capsule Endoscopy）
八木　康史	Finalist for T.J.Tarn Best Paper in Robotics（IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics）
関　修平	日立化成賞（高分子学会）
佃　諭志	優秀ポスター賞（放射線化学会）
山本　洋揮	ポスター賞（Microprocess and Nanotechnology Conference 2006）

３．教育への関与　（平成１８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		教授　谷村克己		
		教授　松本和彦		
		教授　田畑　仁		
		教授　弘津禎彦		
	物理学	教授　磯山悟朗	助教授　加藤龍好	
		教授　朝日　一	助教授　長谷川繁彦	
			助教授　井上恒一	
		教授　吉田　博	助教授　森川良忠	
			助教授　白井光雲	
	化　学	教授　川合知二	助教授　松本卓也	
		教授　小林　光	助教授　髙橋昌男	
		教授　中谷和彦		
		教授　加藤修雄	助教授　大神田淳子	
		教授　笹井宏明	助教授　鬼塚清孝	
			助教授　鈴木健之	
	生物科学	教授　谷澤克行	助教授　黒田俊一	
			助教授　岡島俊英	
工　　学	知能･機能創成工学	教授　菅沼克昭	助教授　奥　健夫	
	マテリアル生産科学	教授　弘津禎彦	助教授　石丸　学	
		教授　中嶋英雄	助教授　鈴木進補	
	応用化学	教授　安蘇芳雄	助教授　兼田隆弘	
		教授　真嶋哲朗	助教授　藤塚　守	
			助教授　川井清彦	
			助教授　関野　徹	
		教授　田川精一	助教授　関　修平	
			助教授　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	教授　岩﨑　裕	助教授　須藤孝一	
	電気電子情報工学	教授　朝日　一	助教授　長谷川繁彦	
		教授　鷲尾　隆		
		教授　溝口理一郎	助教授　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	助教授　誉田義英
		教授　吉田陽一	助教授　楊　金峰
基礎工学	物質創成	教授　松本和彦	助教授　井上恒一
		教授　吉田　博	助教授　森川良忠
			助教授　白井光雲
		教授　川合知二	助教授　田中秀和
		教授　谷村克己	助教授　金崎順一
		教授　田畑　仁	助教授　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	助教授　村上　聡
情報科学	情報数理学	教授　沼尾正行	助教授　栗原　聡
		教授　溝口理一郎	
	ｺﾝﾋﾟｭｰﾀｻｲｴﾝｽ	教授　八木康史	助教授　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	

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、谷村克己、松本和彦、朝日　一、田畑　仁
	超分子ナノバイオプロセス学	真嶋哲朗
	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
	固体電子論Ⅱ	吉田　博、森川良忠
	物性理論セミナーⅠ	森川良忠
	物性理論セミナーⅡ	吉田　博、白井光雲
	物性理論特別セミナー	吉田　博、森川良忠、白井光雲
	計算機ﾅﾉﾏﾃﾘｱﾙﾃﾞｻﾞｲﾝﾁｭｰﾄﾘｱﾙ	吉田　博、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
	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
	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、髙橋昌男
	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
	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、兼田隆弘
	励起反応化学特論	真嶋哲朗、藤塚　守
	分子創成化学ゼミナール	真嶋哲朗、安蘇芳雄、兼田隆弘、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、兼田隆弘、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、兼田隆弘、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、鷲尾　隆、長谷川繁彦、
	電気電子情報工学演習・実習	朝日　一、鷲尾　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ﾃﾞﾊﾞｲｽ工学特論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
	複合材料工学特論	関野　徹
	物質化学ゼミナール	田川精一、関野　徹
	物質化学研究課題企画ゼミナール	田川精一、関野　徹、関　修平、古澤孝弘
	物質化学先端研究情報ゼミナール	田川精一、関野　徹、関　修平、

		古澤孝弘
	生体応答科学	野地博行
	応用生物工学ゼミナール１，２	野地博行
	ナノバイオロジー特論	野地博行
	応用生物工学実験Ｖ	野地博行
	量子分子デバイス	岩﨑　裕、須藤孝一
	応用物理学演習１，２	岩﨑　裕、須藤孝一
	応用物理学実験	岩﨑　裕、須藤孝一
	応用物理学特別ゼミナール１，２	岩﨑　裕
	応用物理学ゼミナール	岩﨑　裕、須藤孝一
	表面・界面工学	奥　健夫
	創成工学演習	菅沼克昭
	創成工学ゼミナール	菅沼克昭
	材料設計・デバイス工学特論	菅沼克昭
	創成工学ゼミナール（Ｄｒ）	菅沼克昭
	材料設計論	中嶋英雄、鈴木進補
	極微構造解析学	弘津禎彦、石丸　学
	マテリアル科学実験	弘津禎彦、中嶋英雄、石丸　学
	放射線・量子ビーム工学	吉田陽一、誉田義英
	量子ビーム化学	吉田陽一
	情報通信システム工学論	鷲尾　隆
	データマイニング工学	鷲尾　隆
	知識工学論	溝口理一郎、來村徳信
	電子工学セミナー	溝口理一郎、來村徳信
	電子工学実験	溝口理一郎、來村徳信
	電子工学演習	溝口理一郎、來村徳信
	知識処理工学特論	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
	放射光物理学	磯山悟朗
	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	吉田　博、白井光雲、森川良忠
	強相関電子機能特論	田畑　仁
	ゼミナールⅠ、Ⅱ	川合知二、吉田　博、松本和彦、井上恒一
	先端物質機能科学特論	田畑　仁、谷村克己

	物理系研究Ⅰ、Ⅱ	川合知二、吉田　博、松本和彦、 井上恒一、森川良忠
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、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
	ｺﾝﾋﾟｭｰﾀｻｲｴﾝｽｲﾝﾀｰﾝｼｯﾌﾟ	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究Ⅰa	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究Ⅰb	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究Ⅱa	八木康史、向川康博
	コンピュータサイエンス研究Ⅱb	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ⅡF	谷澤克行
	理工医学セミナーⅡF	谷澤克行
	理工医学特別セミナーF	谷澤克行

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	8	2	10
	化　学	26	16	42
	生物科学	1	1	2
（小　計）		35	19	54
工　　学	生命先端工学	3		3
	応用化学	19	14	33
	精密科学・応用物理学	1	3	4
	知能・機能創成工学	3	9	12
	マテリアル生産科学	9	10	19
	電気電子情報工学	13	7	20
	環境・エネルギー工学	5	2	7
（小　計）		53	45	98
基礎工学	物質創成	14	8	22
（小　計）		14	8	22
薬　　学	分子薬科学	5	4	9
（小　計）		5	4	9
情報科学	情報数理学	8	4	12
	コンピュータサイエンス	5	4	9
（小　計）		13	8	21
生命機能		8		8
（小　計）		8		8
合　　計		128	84	212

４）学部、共通教育担当授業一覧（平成１８年度）

理　　学	放射光物理学	磯山悟朗
	固体化学	川合知二
工　　学	セラミックス材料学	菅沼克昭
	コンピュータ工学演習	沼尾正行、栗原　聡
基礎工学	固体電子論Ｂ	吉田　博
	知識工学	八木康史、向川康博
	計算機援用工学Ｂ	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	佐川立昌
	情報科学実験Ｃ	佐川立昌

	先端科学技術セミナー	物性物理工学の最前線	田畑　仁、吉田　博
	セラミックス物性		川合知二
薬　　学	薬学特論Ⅴ		山口明人
	薬学概論		山口明人
共通教育	基礎教育セミナー	生活の中の有機化学	加藤修雄、真嶋哲朗、安蘇芳雄 笹井宏明、中谷和彦、 大神田淳子、藤塚　守、 鬼塚清孝、川井清彦、遠藤政幸、 鈴木健之
		ﾅﾉｻｲｴﾝｽと量子機能	朝日　一、岩崎　裕、吉田　博、 松本和彦、井上恒一、白井光雲、 長谷川繁彦
		分子と生命	野地博行
		知能とコンピュータ	溝口理一郎、元田　浩、 八木康史、沼尾正行、鷲尾　隆、 來村徳信、向川康博、栗原　聡
	特別科目	新しい物質の科学	川合知二、松本和彦、弘津禎彦
	基礎教育科目	物理学概論Ⅰ	谷村克己、田中慎一郎
		物理学概論Ⅱ	朝日　一
		熱学・統計力学要論	磯山悟朗、加藤龍好、白井光雲
		化学要論	加藤修雄、大神田淳子
		基礎有機化学	笹井宏明、鈴木健之
		電磁気学要論	吉田　博
		化学概論	真嶋哲朗、安蘇芳雄、藤塚　守 川井清彦
		分子化学Ａ	田川精一、関　修平
		物理学２	森川良忠

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って、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。

平成１８年度は、協定締結機関は合計１５機関となった。

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)～

当研究所に所属する外国人は、平成１９年３月３０日現在で合計６７名であり、その内訳は助教授（特任助教授（常勤）含む）２名、助手（特任助手（常勤）含む）５名、外国人研究員１名、非常勤職員３２名、大学院博士後期課程１９名、博士前期課程８名である。

国別では次のとおりである。

韓国（２７）、中国（１７）、インド（９）、ベトナム（４）、イギリス（２）、ブラジル（２）、バングラデシュ（１）、台湾（１）、インドネシア（１）フィリピン（１）、カナダ（１）、ベネズエラ（１）、

２）国外との研究者往来（平成１８年度）

教員の海外出張は、合計２１８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。経費面では、科学研究費補助金によるものが８３件で、奨学寄附金が２１件、その他によるものが１１４件であった。

国外から当研究所を訪問した研究者は合計４５名であり、内訳は次のとおりである。

米国（１６）、韓国（8）、イギリス（3）、イタリア（2）、ドイツ（2）、オーストリア（2）、フランス（2）、スペイン（1）、中国（1）、タイ（1）、オランダ（1）、オーストラリア（1）、カナダ（1）、ウクライナ（1）、香港（1）、スウェーデン（1）、インド（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１８年度は４回の会合をもった。

・第１回　平成１８年７月２６日（水）

「産業科学研究所の現状と目指す方向」　所長　川合　知二

「Global Technology Outlook 2006 IBM のテクノロジーーロード・マップー」

日本 IBM 東京基礎研究所　武田　浩一

「材料分野から見た未来産業」　教授　小林　光

「量子機能・情報分野から見た未来産業」　教授　朝日　一

「バイオ分野から見た未来産業」　教授　山口　明人

「産業・技術・研究開発に関連するマクロ経済的視点の紹介」

日本総合研究所関西経済研究センター所長　吉本　澄司

「ナノテクから見た未来産業」　教授　菅沼　克昭

・第２回　平成１８年９月２８日（木）

「カーボンナノチューブデバイスとバイオセンサー応用」　教授　松本　和彦

「ユビキタス情報社会を支えるナノテクノロジー」

日本電気株式会社基礎・環境研究所所長　曽根　純一

「酸化チタンナノチューブの創製と高次機能化」　助教授　関野　徹

「時代は変わった。投資と回収の時代」　ホークマテリアル株式会社代表取締役社長　山田　眞三

「生体に学ぶボトムアップナノテクノロジーと未来のエレクトロニクス」　教授　田畑　仁

「有機エレクトロニクスに向けた未来材料の開発動向」　教授　安蘇　芳雄

「私の考える未来産業」

株式会社三菱総合研究所産業・市場戦略研究本部産業戦略グループ主席研究員　奥田　章順

・第３回　平成１８年１２月１３日（水）

「先端電子顕微鏡によるナノ構造評価技術」　助手　平田　秋彦

「超微小チャンバーを用いた生体反応の高感度検出」　助手　飯野　亮太

「印刷ナノテク現場の“手応え感”を支える動的計測技術への挑戦」

ーナノレベルからマクロ機能への構造発展の解明に向けてー

大日本印刷株式会社技術開発センター　黒田　孝二

「超短パルス電子線の発生技術とナノ空間内反応の計測技術」　助教授　楊　金峰

「ビジネスとしてのナノテクノロジー」　野村総合研究所　池澤　直樹

「新産業創造システム研究分野の紹介」　特任教授　千田　一貴

・第４回　平成１９年２月２１日（水）

「材料設計からみた新産業」　教授　吉田　博

「バイオベンチャー“ジェノラック BL”の事業モデル」

株式会社ジェノラック BL 代表取締役社長　瀬脇　智満

「ベンチャー企業の知財戦略」　みずほ情報総研株式会社コンサルタント　野口　博貴

「相補性ペプチド設計技術による活性制御ペプチドの創生」

株式会社蛋白科学研究所代表取締役会長　岡田　秀親

「ロータスアロイ株式会社」－ロータス金属の開発と実用化を目指した取組み－

教授　中嶋　英雄

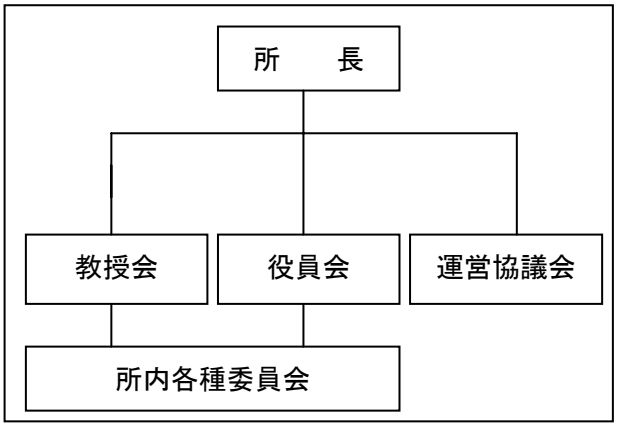
平成１２年度より当研究所の技術シーズを公開して関心のある企業の参加で研究会を組織して事業化を目指す目的で「新産業創造研究会」を設置した。１８年度は、排出トランスポーターから創薬を考える研究会、半導体新規化学プロセス研究会、ポーラスマテリアル研究会、新しい光触媒を考える研究会、未来の治療薬の概念創成を議論する会の５研究会で各３回、総計１５回開催した。

６．まとめ (課題と展望)

まとめ

１）組織・運営

当研究所は、平成 19 年 3 月 31 日現在、28 研究分野を含む 7 研究部門と材料解析センター、ナノテクノロジーセンター、新産業創造物質基盤技術研究センターの 3 付属研究施設を擁し、研究を進めている。



教員は、理、工、農、薬、基工とバラエティーに富んだ構成で、更にはほとんどが他大学の経験者であるのが特徴である。選考においては、研究業績を最も重要視しており、教授選考については原則として公募で、選考委員会には他部局の専門家が加わるなど厳正な選考によって行っている。平成 13 年度から、人事の流動化とより良い競争力の促進を目指し、助手の任期制度を導入している。

運営については、全教授が研究所の運営に関与しているが、迅速な意志決定や将来戦略の円滑化を図るため、所長の下に役員会を置き、外部の意見を取り入れる形の運営協議会を設置している。

また、平成 17 年度に産学連携室を設置、平成 18 年度には広報室を設置し、産学連携体制及び広報体制の強化を図っている。

２）研究（予算・設備・活動）

「材料」､「情報」､「生体」をキーワードに、産業に繋がる研究を目指して、産研スタッフは各専門分野および分野の壁を越えた融合的な研究を推進している。所員各々のアビリティーの高さは年々底上げされており、中核的研究拠点（COE)、戦略創造研究事業などに採用されるなど、大きなスケールの研究を進行している。全国に先駆けて取り組んでいる、ナノサイエンスとナノテクノロジーの研究においても、21 世紀 COE 拠点「新産業創造指向インターナノサイエンス」としてリードする役割を担っている。

平成 17 年度から、特別教育研究経費により、東北大学多元物質科学研究所と連携を組み、新産業創造物質基盤技術研究センターを新たに発足した。さらに、法人を超えた研究推進を行うため、４大学附置研究所を結ぶアライアンスを形成した。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も決まっている。

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共通教育機構の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､21 世紀 COE プログラムに基づく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。

４）社会との連携・社会貢献

研究成果は社会に還元してこそ価値が生まれる。学会での発表や役員就任など所員による学界活動は積極的に行なわれているものの、産業界との連携は一般的に個人的な接触が多いというのも現状であるが、当研究所では、新産業の芽となる原理的な研究を推進するとともに、産業界より客員教授を招き、産業界との一層の連携を推進している。また、産学交流の場として平成 10 年度から会員制の産研テクノサロンを、平成 12 年度からは当研究所で生まれた科学技術のシーズを公開し、関心のある企業が参加して事業化を目指す「新産業創造研究会」を開催し、研究会の中から企業化へという方向も出てきている。平成 17 年度には産学連携室を設置し、さらなる産学連携の強化を目指している。

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わっており、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おり、平成 18 年度も 3 回開催した。更には、21COE プログラムにおいて、平成 18 年までに韓国、フランス、アメリカに海外ブランチを設置し、産研発のグローバルスタンダードを目指している。

６）将来計画

設立当初から掲げている、産業に繋がる研究と、成果の社会還元化を目指す基本方針は変わらず保持し、先に述べた産研の展望を目指して課題を達成できるよう努めるとともに、時代に応じて改善を重ね切磋琢磨する。将来像については、将来計画委員会において検討を行い、理想論に終わることがないよう、年度ごとに明確な将来計画を策定し、中期目標と中期計画にも反映している。

産研の課題と展望

１）組織・運営

・研究成果還元の効率化

多種多様なバックグラウンドを持つ多彩な人事構成を生かし、各分野が行う研究はもちろん、異分野間／異部門間の融合研究の成果を効率よく推進できる運営体制を構築する。

・独創性と先導性

社会的インパクトが強く、産研の目玉となるような基礎・応用研究を一定の年限で行うプロジェクトを設け、人、予算、研究スペース等において全所的にバックアップする。また、研究成果を大いに評価することはもちろんだが、未開拓領域における研究計画の独創性と先導性を積極的に推進する。

・若手研究者の育成

プロジェクト研究分野の特任教員には任期を設け、また、ポストドクトラルフェローを増員し、レベルの高い研究者の養成に努める。

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

何事に関しても進歩が著しい 21 世紀は、科学においても分析的な個別科学のみならず統合的な科学の予測が必要不可欠で、新しい科学が常に求められる。各研究分野が、国内外に類例のない研究を推進すると同時に、あらゆる分野を融合させた科学領域を積極的に開拓し続ける。また、４大附置研究所を結ぶアライアンスを活性化させ、叡智を集結し、ニーズに沿った科学技術の創出に努める。

・融合型研究による独創性の強化と、情報の開放

産研の特徴は、多様な分野のエキスパートが 1 つの研究所で研究を進めていることである。この多彩な人事構成を生かし、産研の目玉となる独自の研究を積極的に行う必要である。また、他部局、国内外の他大学、他研究機関、外国の研究機関等との共同研究を推進し、産業界との目的指向型の共同研究にも参画する。

・研究成果の社会への還元

研究成果を産業・社会に還元してこそ、当研究所の存在意義がある。自己満足な研究に終わることなく、世界をリードする産研発の研究成果を積極的に発信し、産業・社会に還元するよう努める

３）教育

・アカデミックとプロフェッショナルの育成

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ショナル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、若手研究者に各分野の研究と異分野融合プロジェクトへの参画や、産研独自の教育プログラムにより、未来を担う研究者を国内外の大学研究機関・産業界に送り出す。

・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

21 世紀を担う研究者育成のため、研究の現場における教育を重視している。毎年、異分野融合プロジェクトの参画や、共同研究・学会発表等で海外に派遣し、また、21 世紀 COE プログラムに基づく国際学会の出席援助や著名外国人の招待セミナー、シンポジウムなどを開催し、一流の研究者の卵を育てる。

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、材料解析センター等を、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。

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。

・海外ブランチの活性化

21COE プログラムにおいて、平成 18 年までに韓国、フランス、アメリカにブランチを設置し、産研の研究は海を渡り推進されている。今後も国際ワークショップや、国際共同研究等を活発化し、日本と世界を結ぶ研究活動を行っていく。

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、産研発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。

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）	山　口　明　人
委　員	（教　　授）	中　嶋　英　雄
	（教　　授）	谷　村　克　己
	（教　　授）	松　本　和　彦
	（教　　授）	※中　谷　和　彦
	（助 教 授）	※白　井　光　雲
	（助 教 授）	田　中　秀　和
	（助 教 授）	※金　﨑　順　一
	（助 教 授）	黒　田　俊　一
	（助　　手）	※家　　裕　隆
	（助　　手）	森　山　甲　一
	（技術専門職員）	相　原　千　尋
	（総務課長）	水　口　　修

※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１８年度に在籍した者を全て収録した。
なお、年度途中の異動者については（　）書きで、その異動日を表した。

〔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、電気伝導などの電気的評価、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

・シリコン表面トレンチ・金属酸化物表面ナノ構造の熱緩和、ステップダイナミクス、タンパク質結晶成
長
・結晶成長や固体中での相分離など非平衡状態における表面・界面構造の挙動に関する研究
・走査トンネル顕微鏡誘起発光分光による有機発光材料薄膜などの構造と物性
・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創製
・半導体−半金属混晶 Tl 系新半導体の成長と温度安定波長半導体レーザ作製
・窒化物半導体ナノロッドの自己形成と低電界しきい値電子放射特性
・短チャネル MOSFET のナノ観察とナノ評価
・カーボンナノチューブの物性制御とボルタノメトリック／アンペロメトリック集積バイオセンサー応用
・II-VI 族半導体 CdSe 量子構造の形成と評価
・第一原理計算による半導体や酸化物を母体とした遷移金属や f 電子系化合物等の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

教授	岩崎　裕
助教授	須藤　孝一
特任助手	Liu Hongwen、中村　純
博士研究員	Kumaran Shanmugam, Han Tiezhu
大学院学生	栗林　均、阿南　憲法、堀　信康、山本　真人
学部学生	中村　紀之、藤井　啓文、福井　信孝
事務補佐員	岡田　八重、平沢　清美

a) 概要

２１世紀を迎え、より人にやさしくまた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る。本研究分野は、このようなデバイスを実現するために、一つは、ナノスケールからメソスコピックスケールでの、物のかたちについての科学と、二つめは、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を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、シリコンや金属酸化物結晶表面上のナノ構造を制御するための原子ステップの研究、次世代 LSI にとって重要な水素アニールによるシリコントレンチの熱緩和とそれに伴う表面ナノ構造の形成の研究、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、および走査トンネル顕微鏡(STM)－発光分光法による有機発光素子に関する研究、AFM 陽極酸化を用いたシリコン表面への生体分子の微細パターニングの研究を行っている。これらの系に共通するナノ～メソスコピックスケールにおける自己組織的な振る舞いに関しても系統的な研究を行っている。

b) 成果

・結晶表面におけるナノスケール構造の熱緩和に関する研究

走査トンネル顕微鏡(STM)を用いて、$SrTiO_3$(001)表面におけるナノスケール構造の熱緩和のダイナミクスについて調べた。STM ナノ加工技術を応用して、$SrTiO_3$(001)表面にナノ構造を形成し、加熱中のナノ構造の緩和過程を STM によりリアルタイムで観察した。ナノスケール構造において特徴的な振る舞いを明らかにし、構造変化を引き起こす物質輸送のメカニズムを解明した。また、シリコン基板上にリソグラフィーで形成した微細パターンの加熱による構造変化のメカニズムについても調べ、微細構造の変形過程において、表面上のステップの運動が重要な役割を果たしていることを明らかにした。

・タンパク質結晶成長に関する研究

タンパク質結晶成長における成長条件と結晶の成長形態の関係を解明することを目的として、原子間力顕微鏡(AFM)を用いてタンパク質結晶成長のメカニズムを調べた。リゾチーム斜方晶の針状結晶が成長する過程でのステップフローの様子を観察し、成長条件に依存したステップの挙動の変化を明らかにした。また、タウマチン正方晶の(110)表面における分子配列の様子を AFM で観察し、タンパク質分子間の相互作用について調べた。

・走査トンネル顕微鏡誘起発光分光（STML）による有機発光材料薄膜の構造と物性の研究

STML による有機発光材料の HOMO-LUMO 準位間遷移発光のスペクトルを測定し、基板の貴金属のプラズモン誘起電磁場による分子発光の増強が顕著であることを明らかにした。有機発光材料としては、ポリフィリン分子を安蘇研究室と、共役高分子の MEH-PPV を中国の研究者と、それぞれ共同で研究を行った。

・AFM 陽極酸化を用いたシリコン表面への生体分子の微細パターニング

AFM 探針によるシリコン表面の陽極酸化プロセスを用いて作製したシリコン酸化物パターンをテン

プレートとして、タンパク質分子の微細パターニングを行うプロセスを開発した。タンパク質としては、フェリティン及び細胞固定化のためにファイブロネクティンについてナノスケールパターニングを実現した。

[原著論文]

Decay of Two-Dimensional Holes on $SrTiO_3$(001), H. Goto, K. Sudoh, H. Iwasaki, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 4 (2006) 307-310.

Topography Dependence of Tunneling-Induced Fluorescence from Porphyrin Film, R. Nishitani, M. Tobaru, A. Kasuya, H. Liu, H. Iwasaki, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L627-L629.

Molecular Fluorescence from H2TBP Porphyrin Film on Ag Substrate Excited by Tunneling Electrons, H. Liu, R. Nishitani, Y. Ie, K. Sudoh, M. Nowicki, T. Yoshinobu, Y. Aso and H. Iwasaki, Ultramicroscopy 106 (2006) 785-788.

Plasmon-Enhanced Molecular Fluorescence from an Organic Film in a Tunnel Junction, H. Liu, Y. Ie, T. Yoshinobu, Y. Aso, H. Iwasaki, R. Nishitani, Appl. Phys. Lett. 88 (2006) 061901-1- 061901-3.

Micropatterning of Si Surface with Protein Molecules by the AFM Anodic Oxidation Method, J. Suzuki, T. Yoshinobu, W. Moon, K. Shanmugam, H. Iwasaki, Electrochem. 74 (2006) 131-134.

Step Dynamics in Relaxation of Sharp Corners on Crystal Surfaces, K. Sudoh, H. Iwasaki, H. Kuribayashi, R. Hiruta, R. Shimizu, Surf. Sci. 600 (2006) L67-L70.

Alternating Current of Scanning Tunneling Microscope for Organic Molecules Adsorbed on Metal in Terms of Equivalent Circuit of Scanning Tunneling Microscope, R. Nishitani, F. Begum, H. Iwasaki, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) 1962-1965.

Flattening of Micro-Structured Si Surfaces by Hydrogen Annealing, R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu, K. Sudoh, H. Iwasaki, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 5279-5283.

Observation of Si(100) Surfaces Annealed in Hydrogen Gas Ambient by Scanning Tunneling Microscopy, H. Kuribayashi, M. Gotoh, R. Hiruta, R. Shimizu, K. Sudoh, H. Iwasaki, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 5275-5278.

[解説、総説]

メゾ構造のアニールによる変形と制御、岩崎　裕、須藤孝一 、生産と技術、58[4](2006)13-18.

[著書]

「めっき最新技術～メカニズムの考察と品質向上～（分筆)」、岩崎裕、情報機構、(2006) 618-628.

[特許]

「ナノ構造の形成方法」岩崎裕、李楠 特許 3888775 号 登録

「半導体空乏層容量測定方法及びその装置」岩崎裕、アブ　バカル　イスマイル、特許 3816296 号　登録

[国際会議]

Cavity Effect on Molecular Fluorescence of a Porphyrin Film Induced by Tunneling Electrons (Oral), *H.W. Liu, Y. Ie, R. Nishitani, T.Z. Han, Y. Aso and H. Iwasaki, International Conference on Nanoscience and Technology, China 2007 (ChinaNANO 2007), Beijing, China, June 4-6, 2007.

STM-excited Luminescence of Porphyrin and MEHPPV Thin Films (invited), *H. Iwasaki, H. Liu, Y. Ie, Y. Aso, R. Nishitani and L. Yan, The 94th Indian Science Congress (94th ISC), Annamalai Univ., Tamil Nadu, India, Jan. 3-7, 2007.

Nano-scale Morphology and Hydrogenation of Si Surfaces in the Early Phase of Hydrogen Annealing (Oral), *R. Shimizu, H. Kuribayashi, R. Hiruta, K. Sudoh and H. Iwasaki, IVC-17/ICSS-13 and ICN+T2007, Stockholm, Sweden, July 2-6, 2007.

Molecular Fluorescence excited by STM from a PhTPP Film, *H. Liu, Y. Ie, T. Yoshinobu, Y. Aso, K. Sudoh, H. Iwasaki, R. Nishitani, M. Nowicki, 9th Sanken International Symposium 2006 on Advanced Science and Technologh for Materials, Biologh, and Information by Quantum Beams, Feb.8-9, 2006.

Nanoscale Low Energy Electron Stimulated Reaction and Luminescence by STM, *H. Iwasaki, H. Liu, R. Nishitani, Y. Ie, T. Yoshinobu, K. Sudoh, Y. Aso, 9th SANKEN International Symposium on Advanced Science and Technology for Materials, Biology, and Information by Quantum Beams, Osaka, Japan, Feb. 8-9, 2006.

Plasmon-enhanced Molecular Fluorescence from Organic Films by Tunneling Electrons (invited), *H. Liu, H. Iwasaki, R. Nishitani, Chinese Vacuum Society 2006 (CVS2006), Xi'an, China, Oct.21-24, 2006.

Kinetics of Decay of Two-dimensional Holes on SrTiO 3(001) Studied by STM (Oral), H. Goto, K. Sudoh, and *H. Iwasaki, 2006 Scanning Probe Microscopy, Sensors and Nanostructures, Montpellier 3-6 June 2006.

STM-Induced Luminescence from Various Porphyrin Films (Oral), *H. Liu, Y. Ie, Y. Aso, K. Sudoh, H. Iwasaki, R. Nishitani, 2006 Scanning Probe Microscopy, Sensors and Nanostructures, Montpellier 3-6 June 2006.

Positive Patterning of Ferritin and Fibronectin Molecules on Silicon, K. Shanmugam, T. Yoshinobu, and *H. Iwasaki, 2006 Scanning Probe Microscopy, Sensors and Nanostructures, Montpellier 3-6 June 2006.

Mechanism and Control Technology of Trench Corner Rounding by Hydrogen Annealingfor Highly Reliable Trench MOSFET, *R. Shimizu, H. Kuribayashi, R. Hiruta, K. Sudoh and H. Iwasaki, 18th International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs, Napoli, Italy, June 6th, 2006.

Plasmon-enhanced Luminescence from Molecules by Tunneling Electrons(invited), *H. Liu, H.

Iwasaki, R. Nishitani, 9th Chinese National Conference on Scanning Tunneling Microscopy (STM'09), Dalian, China, Aug.21-23, 2006.

Thermal Relaxation of Surface Mesostructures (Oral), H. Iwasaki, Joint meeting between ISIR SANKEN, Osaka University and the FZ Juelich, Forschungszentrum, Julich Oct.30, 2006.

Relaxation of Nanoscale Pits on $SrTiO_3$(001), *M. Yamamoto, H. Goto, K. Sudoh, and H. Iwasaki, The University of Tokyo International Symposium 2006, Nanoscience at Surfaces, ISSP-10, Kashiwa Campus, University of Tokyo, Japan, Oct. 9-13, 2006.

Study on Plasmon Enhancement of Tunneling-Induced Fluorescence from Porphyrin Film, *R. Nishitani, H. Liu, A. Kasuya, H. Iwasaki, International Conference on Nanoscience and Technology 2006 and STM06, Basel Jul.30-Aug.4, 2006.

Cavity Effect on STM-Induced Light Emission (Oral), *H. Liu, Y. Ie, Y. Aso, H. Iwasaki, R. Nishitani, The 7th International Conference on Nano-Molecular Electronics, Kobe, Japan, Dec. 13-15, 2006.

STM Tip-Enhanced Photoluminescence from Porphyrin Film, *R. Nishitani, H. Liu, H. Iwasaki, The 7th International Conference on Nano-Molecular Electronics, Kobe, Japan, Dec. 13-15, 2006.

Cavity Effect of STM-Induced Molecular Fluorescence, *H. Liu, Y. Ie, Y. Aso, R. Nishitani, H. Iwasaki, 5th 21st COE International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Nano-Patterning and Crystal Growth of Proteins and Fluorescence of Organic Films Studied by Using Scanning Probe Microscopes, K. Sudoh, K. Shanmugam, T. Yoshinobu, H. Liu, Y. Ie, Y. Aso and *H. Iwasaki, 5th 21st COE International Symposium, Awaji, Japan, Dec.8-9, 2006.

Relaxation Dynamics of Nanoscale Structures on $SrTiO_3$(001), *K. Sudoh, M. Yamamoto, H. Goto, and H. Iwasaki, 5th 21st COE International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Dependence Analysis of the Shape Transformation of Silicon Microstructure by Annealing, *J. Nakamura, K. Sudoh and H. Iwasaki, ISIR, 5th 21st COE International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Molecular Fluorescence of Conjugated Polymer on Metal Substrates Induced by STM, *H. Liu, L. Yan, H. Iwasaki, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, Sep. 19-20, 2006.

Bias Dependence of STM-excited Molecular Fluorescence from PhTPP Film on Noble Metal Substrates, *H. Liu, Y. Ie, T. Yoshinobu, Y. Aso, K. Sudoh, H. Iwasaki, R. Nishitani, M. Nowicki, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Jan. 30 - Feb. 1, 2006.

How Plasmons affect STM-induced luminescence (Oral), *H. Liu, Y. Ie, Y. Aso, H. Iwasaki, R. Nishitani, 21 Century COE Nanobio Group Symposium, Osaka, Japan, Oct.13, 2006.

Time Evolution of Nano-scale Morphology of Silicon Microstructure Surfaces in the Early Phase of

Hydrogen Annealing, *R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu, K. Sudoh and H. Iwasaki, MRS Fall Meeting, Boston, USA, Dec.30, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

岩崎　裕	Scanning Probe Microscopy, Sensors and Nanostructures June 3-6, 2006, Palais des Congrès, La Grande Motte, France（組織委員）

[国内学会]

日本物理学会	4 件
応用物理学会	2 件
表面科学会	1 件
結晶成長学会	1 件

[取得学位]

修士（工学）	
阿南　憲法	リゾチーム針状結晶の成長機構に関する研究
博士（工学）	
栗林　均	水素雰囲気アニールによるシリコントレンチの構造制御

[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）		
須藤　孝一	原子ステップの運動による３次元結晶構造物のマクロスケール変形機構の解明	800

[受託研究]

岩崎　裕	先端医療振興財団	細胞の 2, 3-D ディスプレイとその次世代分析システムへの展開	3,850

[奨学寄附金]

岩崎　裕	富士電機アドバンストテクノロジー（株）	1,000

光・電子材料研究分野

教授	朝日　一
助教授	長谷川　繁彦
助手	江村　修一
博士研究員	Shanthi SUBASHCHANDRAN
研究支援推進員	Daivasigamani KRISHNAMURTHY
大学院学生	藤原　淳志、崔　誠佑、木村　重哉、徐 鍾旭、寺山　正敏、船越　政行
	山内　祥晃、荒木　啓輔、小笹　茂生、丹保　浩行、早川　智子、廣村　友紀
研究生	劉　金強
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、これにその働きの場を与える物質･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気的評価、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た。その後、希土類原子を添加した GaGdN においても室温強磁性を見出した。平成１７年度には、GaCrN/AlN/GaCrN の強磁性半導体／非磁性半導体／強磁性半導体３層構造デバイスを作製しトンネル磁気抵抗効果を観測した。平成 18 年度には、希土類添加強磁性半導体 GaGdN を 300℃という低温で成長するが可能であり、それに従い Gd の添加濃度を 12%まで増加することができ、磁気特性を大幅に向上できることが明らかとなった。さらに、GaGdN/GaN 超格子構造においてキャリア誘起強磁性と考えられる磁気特性の向上が観測された。GaCrN/AlN 多重量子井戸構造の作製に成功し、強磁性の向上、PL 発光のブルーシフトを実現した。

・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（発光波長）が温度によって変化しない新しい材料として Tl 系材料 TlInGaP, TlInGaAs を平成７年に当研究室が提案し、分子線結晶成長法による結晶成長検討から始めて、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 のバンドギャップ、屈折率の温度依存性を測定し、予想どおり温度安定化することを確認した。しきい値電流、発振波長共に温度安定な LD 用材料として TlInGaAs(N)/(Al)GaAs ヘテロ構造も提案している。平成 17 年度には、TlInGaAs/TlInP/InP SCH レーザを作製し、比較的広い温度領域で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。TlInGaAs/InGaP/GaAs ヘテロ構造でも室温電流注入レーザ発振を実現している。平成 18 年度には、さらに温度安定性を向上するための成長条件を詳細に調べ、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。これに伴い、発光波長の温度安定性

が改善されることも確認した。

・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。また、GaN/AlN 超格子構造により、ナノロッドの自己形成プロセスを検討し、電子放出特性に対する最適成長層厚を明らかとしている。平成 18 年度は、更なる特性向上ならびに高精細表示素子への展開のために、凹凸構造を表面に施した Si 基板上への GaN ナノロッドの形成条件と電子放出特性の関係を調べ、特性向上を確認した。

・短チャンネル MOSFET のナノ観察と評価

量子ナノデバイス評価法開発として短チャンネル MOSFET 構造断面のナノ構造・特性評価を走査型トンネル顕微鏡(STM)により様々な角度から行っている。平成 17 年度は、従来まで行ってきた短チャンネル MOSFET 横断面（チャンネル長方向）評価に加えて、縦断面（チャンネル幅方向）の評価を行い、ソース/ドレイン形状やゲート側面形状のチャンネル幅方向の揺らぎをナノスケールで評価出来ることを示した。平成 18 年度には、デバイスを切り出すことの影響を調べるため、ポテンシャル分布の 3 次元シミュレーションを行って、デバイスの内部と断面とのポテンシャル分布の違いを調べ、実験結果との比較を行った。チャンネルに垂直に切り出した断面ではその差は小さく、切り出したことの影響は少ないことが明らかとなった。一方、チャンネルに対して斜め(45º)で切り出した断面では、そのポテンシャル分布に大きな違いが現れ、これまでの実験結果を支持する結果が得られた。

・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、分光法を使っ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たが、最近、GaCrN 中の Cr の周りは Jahn-Teller 変形を起こしている可能性がある事をみいだしつつある。Cr を δ ドープした試料についても成長条件によってはドープの一様性を確認した。

［ 原著論文 ］

Formation of local ferromagnetic area on GaAs by focused Mn ion beam implantation, M. Kasai, J. Yanagisawa, H. Tanaka, S. Hasegawa, H. Asahi, K. Gamo, and Y. Akasaka, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 242 (2006) 240-243.

Emission spectra from AlN and GaN doped with rare earth elements, S.W. Choi, S. Emura, S. Kimura, M.S. Kim, Y.K. Zhou, N. Teraguchi, A. Suzuki, A. Yanase, and H. Asahi, J. Alloys and Compounds 408-412 (2006) 717-720.

Electronic Configurations of Ce and Gd in $Ce_xGd_{1-x}N$ Evaluated by XENES and Magnetization Measurements. Hiroaki Nitani, Takashi Nakagawa, T. Onuki,, Y. Suzuki, M. Yamanouchi, Takao A. Yamamoto, and Shuichi Emura, J. Alloys and Compounds 408-412 (2006) 717-720.

Epitaxial growth of ferromagnetic cubic GaCrN on MgO substrate, S. Kimura, S. Shanthi, Y. K. Zhou, M. S. Kim, S. Kobayashi, S. Emura, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, S. Hasegawa, and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (1A) (2006)

76-78.

Tailoring a Pt-Ru catalyst for Enhanced Methanol electro-Oxidation. R.K. Raman, A. K. Shukla, A. Gayen, M. S. Hegde, K. R. Priolkar, P. R. Sarode and Shuichi Emura, Power Sources, 157 (2006) 45 – 55.

Evaluation of Device Configurations through Cross-Sectional Planes along Gates of 0.1um Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors by Scanning Tunneling Microscopy/Scanning Tunneling Spectroscopy, S. Hasegawa, W. Doi, A. Yabuuchi and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (3B) (2006) 2033-2036.

Magnetic, optical and electrical properties of GaN and AlN doped with rare-earth element Gd, S. W. Choi, Y. K. Zhou, S. Emura, N. Teraguchi, A. Suzuki and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (c) 3(6) (2006) 2250-2253.

Photoemission and x-ray absorption studies of the electronic structure of GaN-based diluted magnetic semiconductors, J.I. Hwang, Y. Ishida, M. Kobayashi, Y. Osafune, T. Mizokawa, A. Fujimori, Y. Takeda, K. Terai, S. Fujimori, Y. Saito, Y. Muramatsu, A. Tanaka, T. Kondo, H. Munekata, M. Hashimoto, H. Tanaka, S. Hasegawa and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (b) 243 (7) (2006) 1696-1700.

Nature of deep level defects in GaCrN diluted magnetic semiconductor, S. Shanthi, S. Kimura, M.S. Kim, S. Kobayashi, Y.K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (4B) (2006) 3522-3525.

Structural Analysis of Nano-Sized-Pd/ZrO2 Composite after H(D) absorption. Yoshinori Arachi, Shuichi Emura, Akira Omura, Masanobu Nunogaki, Takeshi Asai, Shunichi Yamaura, Akihisa Inoue and Yoshiaki Arata. Solid State Ionics 177 (2006) 1861-1864.

MBE growth of TlInGaAs/TlInP/InP SCH LDs and their laser operation, A. Fujiwara, T. Matsumoto, D. Krishnamurthy, S. Hasegawa and H. Asahi, Proc. 18th Int. Conf. on InP and Related Materials (Princeton, USA, 2006) pp.426-428.

Ferromagnetism in short-period GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, S.W. Choi, Y. K. Zhou, M. S. Kim, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (a) 203 (11) (2006) 2774-2777.

Gas source molecular-beam epitaxial growth of TlInGaAsN double quantum well light emitting diode structures and thallium incorporation characteristics, T. Matsumoto, D. Krishnamurthy, A. Fujiwara, S. Hasegawa and H. Asahi, J. Cryst. Growth 295 (2006) 133-136.

Optical properties of TlInGaAs/TlInP/InP laser diodes, A. Fujiwara, T. Matsumoto, D. Krishnamurthy, S. Hasegawa and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (a) 203 (11) (2006) 2662-2665.

Local crystal structure and local electronic structure around Cr in low-temperature-grown GaCrN layers, M. Hashimoto, S. Emura, H. Tanaka, T. Honma, N. Umesaki, S. Hasegawa and H. Asahi, J. Appl. Phys. 100 (2006) 103907-1 - 103907-6.

Tunnel magnetoresistance in GaCrN/AlN/GaCrN ferromagnetic semiconductor tunnel junctions, M.S. Kim, Y.K. Zhou, M. Funakoshi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 232511-1 – 232511-3

［ 解説、総説 ］

半導体ナノスピントロニクス・デバイス、周逸凱、朝日一、真空 49(12)(2006)722-727.

走査型トンネル顕微鏡による微細デバイス構造のナノ評価、長谷川 繁彦、日本信頼性学会誌 26(3) (2006)

144-154.

［ 著書 ］

III-V 族化合物半導体プロセス、朝日一:「電子材料ハンドブック」木村忠正他編（朝倉書店,2006）183-186.

［ 特許 ］

「強磁性材料」周逸凱、朝日一、特願 2006-294577

「磁性制御方法」江村修一、朝日一、周逸凱、特願 2006-319153

［ 国際会議 ］

Growth and fabrication of spintronics/quantum materials and devices by atomic and molecular beams (Invited), H. Asahi, Sanken International Symposium 2006 on Advanced Science and Technology for Materials, Biology, and Information by Quantum Beams, Osaka, Japan, February 8-9, 2006.

ECR-MBE Growth of Pentanary TlGaInNAs-based DQW Structures and Fabrication of LEDs, D. Krishnamurthy, T. Matsumoto, A. Fujiwara, S. Hasegawa and H. Asahi, Sanken International Symposium 2006 on Advanced Science and Technology for Materials, Biology, and Information by Quantum Beams, Osaka, Japan, February 8-9, 2006.

MBE growth of TlInGaAs/TlInP/InP SCH LDs and their laser operation, A. Fujiwara, T. Matsumoto, D. Krishnamurthy, S. Hasegawa and H. Asahi, Sanken International Symposium 2006 on Advanced Science and Technology for Materials, Biology, and Information by Quantum Beams, Osaka, Japan, February 8-9, 2006.

Formation process of sharp tip-like structures on GaN nanorods during RF-MBE and their field emission characteristics, M. Terayama, K. Uchida, S. Hasegawa, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, and H. Asahi, Sanken International Symposium 2006 on Advanced Science and Technology for Materials, Biology, and Information by Quantum Beams, Osaka, Japan, February 8-9, 2006.

Growth of GaCrN/AlGaN/GaCrN Trilayer Structures and Observation of Tunnel Magneto-Resistance Effect (Invited), H. Asahi, M.S. Kim, S. Matsuno, Y.K. Zhou, S. Emura and S. Hasegawa, International Symposium on Hybrid Nano Materials Toward Future Industries, Nagaoka, Japan, February 3-5, 2006.

Optical properties of TlInGaAs/TlInP/InP, A. Fujiwara, T. Matsumoto, S. Hasegawa, H. Asahi, 15th International Conference on Ternary and Multinary Compounds, Kyoto, Japan, March 6-10, 2006.

Ferromagnetism in short-period GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, Y.K. Zhou, S.W. Choi, M. S. Kim, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, 15th International Conference on Ternary and Multinary Compounds, Kyoto, Japan, March 6-10, 2006.

MBE growth of TlInGaAs/TlInP/InP SCH LDs and their laser operation, A. Fujiwara, T. Matsumoto, D. Krishnamurthy, S. Hasegawa and H. Asahi, 18th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials, Princeton, USA, May 7-11, 2006.

Crystal and Electronic Structures of the $LiNi1_{1/2}Mn1_{1/2}O_2$ Related Materials, H. Kobayashi, Y. Arachi, Shuichi Emura, K. Itoh, K. Handa, A. Okamoto, M. Shikano, and K.Tatsumi, ILMB2006 Biarritz, France, June 18 – 23, 2006.

Cr atom alignment in Cr-delta-doped GaN, S. Kimura, S. Emura, H. Ofuchi, Y. Nakata, Y.K. Zhou, C.W. Choi, Y. Yamauchi, S. Hasegawa and H. Asahi, The XIII International Conference on XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

Observation of Valence State Change in Layered $Li_{1-y}Ni_{1/3}Mn_{1/3}Co_{1/3}O_{2.}$ H. Kobayashi, Y. Arachi, S. Emura, K. Handa, K. Tatsumi, The XIII International Conference of XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

Alternation of the Pd Lattice in Nano-Sized-Pd/ZrO_2 Composite during Hydrogen Absorption. Y. Arachi, S. Emura, A. Omura, M. Nunogaki, T. Asai, S. Yamaura, A. Inoue, Y. Arata, The XIII International Conference of XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

Site- and Valence-selective Structural Analysis around Monovalent Copper-Ion Exchanged in MFI by Synchrotron-light-induced XEOL Detection Method, Atsushi Itadani, Yasushige Kuroda, Shuichi Emura, and Mahiko Nagao, The XIII International Conference of XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

Magnetic properties of GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, S. W. Choi, Y. K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa, and H. Asahi, International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors, Sendai, Japan, August 15-18, 2006.

Electronic State and Local Structure Analysis of GaGdN by HX-PES and XAFS, S. Emura, S.W. Choi, J.J. Kim, S. Kimura, S. Kobayashi, Y.K. Zhou, K. Kobayashi, H. Asahi, N. Teraguchi and A. Suzuki, International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors, Sendai, Japan, August 15-18, 2006.

MBE growth of TlInGaAs/TlInP/InP SCH LD structures and their laser operation with low temperature variation of lasing wavelength, A. Fujiwara, D. Krishnamurthy, T. Matsumoto, S. Hasegawa and H. Asahi, 14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Tokyo, Japan, September 3-8, 2006.

Growth and Characterization of Ferromagnetic Cubic GaCrN, S. Kimura, S. Kabayashi, Y. Zhou, S. Choi, S. Subashcandran, H. Ofuchi, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, 14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Tokyo, Japan, September 3-8, 2006.

TlGaInNAs/GaAs Double Quantum Well Structures: Effect of Barrier Layers and Substrate Orientation, D. Krishnamurthy, T. Matsumoto, A. Fujiwara, S. Hasegawa and H. Asahi, 14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Tokyo, Japan, September 3-8, 2006.

Evolution of Cr-doped and Gd-doped GaN layers grown at low temperatures (Best Paper Awards), Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Magnetic properties of Gd-doped GaN single layer and GaGdN short period superlattices grown by RF-MBE, S.W. Choi, Y.K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, IUMRS

International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Electronic structure of ferromagnetic element Cr in DMS GaCrN observed in X-ray absorption spectra, S. Emura, S. Kimura, M. Hashimoto, S. Kobayashi, S.W. Choi, M.S. Kim, Y.K. Zhou and H. Asahi, IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Unique Lattice Alignment around Cr Atoms Doped in GaN under Some Growth Condition, S. Emura, S. Kobayashi, S. Kimura, Y. Yamauchi, S.W. Choi, Y.K. Zhou, H. Ofuchi, S. Hasegawa, H. Asahi, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, September 19-20, 2006.

Growth and characterization of ferromagnetic cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, H. Ofuchi, S. Shanthi, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, Y. K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, September 19-20, 2006.

Growth of flat AlN layer for GaCrN/AlN/GaCrN trilayer structure, Y. Yamauchi, S. Matsuno, M. Funakoshi, M.S. Kim, S. Hasegawa, and H. Asahi, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, September 19-20, 2006.

Surface Modification of a Metal into a Thick Ceramic Layer and a Model for Analyzing the Increased Hardness. Shuichi Emura, Masanobu Nunogaki and Yoshiyuki Nakata, The Second Asia-Oceania Ceramic Federation [AOCF] Conference, Daegu South Korea, Oct. 18 – 20, 2006.

Design of a New Type of Plasma Processing Device Installed with Sputtering Ion Source. Masanobu Nunogaki, Satoshi Sugimoto and Shuichi Emura, Asia-Oceania Ceramic Federation [AOCF] Conference, Daegu South Korea, Oct. 18 – 20, 2006.

Formation process of sharp-pointed structures on GaN nanorods during RF-MBE growth and their field emission characteristics, M. Terayama, S. Hasegawa, K. Uchida, M. Ishimaru, Y. Hirotsu and H. Asahi, International Workshop on Nitride Semiconductors 2006, Kyoto, Japan, October 22-27, 2006.

Growth and characterization of GaN-based diluted magnetic semiconductors for semiconductor spintronics (Invited), S. Hasegawa, M. Funakoshi, Y. Yamauchi, Y.K. Zhou, S. Emura and H. Asahi, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006, Osaka, November 20-22, 2006.

GaN-based diluted magnetic semiconductors for nano-spintronics, H. Asahi, S. Hasegawa, S. Emura and Y.K. Zhou, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Growth and characterization of cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, Y.K. Zhou, S. Shanthi, Y. Yamauchi, Y. Hiromura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Defect analysis on MBE grown ferromagnetic GaCrN epitaxial layers, S. Shanthi, S. Kimura, Y.K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Epitaxial growth and magnetic properties of GaGdN/GaN superlattice structures, S.W. Choi, Y.K. Zhou, S. Kimura, M. Funakoshi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Low temperature growth of GaCrN and GaGdN layers and their properties, Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

[国際会議の組織委員、国際雑誌の編集委員]

朝日　一	14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy（組織委員会副委員長、プログラム委員長）
朝日　一	15th International Conference on Ternary and Multinary Compounds（プログラム委員）
朝日　一	2006 International Conference on Solid State Devices and Materials（プログラム委員）
朝日　一	14th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques（出版委員）
朝日　一	18th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials（国際諮問委員、プログラム委員）
朝日　一	2007 International Conference on Solid State Devices and Materials（プログラム委員）
朝日　一	19th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials（組織委員、国際諮問委員）
朝日　一	International Symposium on Compound Semiconductors 2007（組織委員、プログラム委員）
朝日　一	Journal of Crystal Growth（編集委員）
朝日　一	Current Applied Physics（編集委員）
朝日　一	J. of Materials Science: Materials in Electronics（編集委員）
朝日　一	e-Journal of Surface Science and Nanotechnology（Advisary Board 委員）
長谷川繁彦	14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy（プログラム委員、財務委員）
長谷川繁彦	18th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials（現地実行委員）
長谷川繁彦	19th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials（現地実行委員）
長谷川繁彦	9th International Conference on Polycrystalline Semiconductors（国際諮問委員）

[国内学会]

応用物理学会	15 件
日本表面科学会	2 件
電子材料シンポジウム	2 件
電子情報通信学会	1 件

[取得学位]

修士（工学）

寺山　正敏	Si 基板上 GaN ナノロッドエミッタの形成と電界放出特性に関する研究
船越　政行	GaCrN の結晶成長とデバイス応用に関する研究

修士（理学）

山内　祥晃　　GaCrN/AlN 多重量子井戸構造の作製と評価に関する研究

博士（工学）

藤原　淳志　　タリウム系 III-V 族半導体の成長と温度安定発振波長半導体レーザに関する研究

崔　誠佑　　Study on Properties of Rare-Earth Doped III-Nitride Magnetic Semiconductors(希土類添加 III-族窒化物磁性半導体の性質に関する研究)

[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（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	7,500

[その他の競争的研究資金]

長谷川繁彦	池谷科学技術振興財団	窒化物半導体を用いた面放射型電界放射電子源形成の基礎研究	1,500
崔　誠佑	丸文研究交流財団	希土類添加新希薄磁性半導体の作製及びその物性に関する研究	1,500

半導体量子科学研究分野

教授	松本　和彦
助教授	井上　恒一
助手	前橋　兼三、大野　恭秀
博士研究員	生野 孝、上村　崇史
大学院学生	奥野　潤、浅井　芳啓、桂　大侍、西口　浩平
学部学生	辻田　雄一、永曽　悟史
事務補佐員	高野　早織

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、評価する技術を確立する。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

・酸素イオン注入したカーボンナノチューブの共鳴ラマン分光

通常カーボンナノチューブは大気の酸素に触れることにより、p 型伝導を示すことが知られている。n 型伝導特性を持つカーボンナノチューブを得るため、グラフェンシートの炭素の置換エネルギーに相当する 25eV という超低エネルギーでカーボンナノチューブへ酸素イオンを注入した。得られたカーボンナノチューブを共鳴ラマン測定により評価し、ラマン散乱の共鳴位置が変化するという知見を得た。酸素不純物がランダムに置換したカーボンナノチューブのバンド構造と光学遷移を理論的に計算し、ラマンの共鳴位置の変化を説明した。

・Si_3N_4 保護膜を形成したカーボンナノチューブ電界効果トランジスタ(CNT-FET)の作製

低温において形成可能な Cat-CVD 法を用いて、カーボンナノチューブチャネル電界効果型トランジスタ(CNT-FET)上への絶縁性保護膜作製を行った。その結果、３００℃以下で SiN 膜を形成するとカーボンナノチューブチャネルは破壊されず、SiN 膜の作製温度により、n、および、p 型 CNT-FET 作製が可能となった。さらに、SiN 膜上にトップゲート電極を形成することで、大気安定なトップゲート構造を有する CNT-FET の作製に成功した。

・Aptamer で修飾したカーボンナノチューブ電界効果トランジスタの作製

高感度のタンパク質センサーの開発を目指し、ターゲットと強く選択的に結合する能力を持った核酸分子である Aptamer で修飾した CNT-FET を作製した。その素子で、リン酸バッファー中にわずか 0.25nM 以下含まれる免疫グロブリン E（I g E）をソースドレイン電流 I_{DS} の変化として検出することができた。

［原著論文］

Electrical transport characteristic of carbon nanotube after mass-separated ultra-low-energy oxygen ion beams irradiation, Kazuhiro Yamamoto, Takafumi Kamimura, and Kazuhiko Matsumoto, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 5579-5582.

Large magnetoresistance in single-walled carbon nanotubes contacted different ferromagnetic metal electrodes, Yasuhide Ohno, Kazuki Narumi, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue and Kazuhiko Matsumoto, J. Physics: Conf. Series 38 (2006) 57?60.

Coherent Transport of Hole and Coulomb Blockade Phenomenon in Long p-Type Semiconductor Carbon Nanotube, Takafumi Kamimura and Kazuhiko Matsumoto, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) 338-340.

High-Sensitive Label-Free Biosensors Based on Single-Walled Carbon Nanotubes, Kenzo Maehashi, and Kazuhiko Matsumoto, Proc. SPIE 6127 (2006) 612715/1-4.

［特許］

「カーボンナノチューブ電極及び当該電極を用いたセンサー」

松本和彦、前橋兼三、奥野潤、民谷栄一、高村禅　出願番号：2006-246073

［国際会議］

Label-free protein biosensor based on aptamer-modified carbon nanotube field-effect transistors. *K. Maehashi, T. Katsura, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya, The 9th World Congress on Biosensors, Toronto, Canada, May 10 - 12, 2006

High-sensitive label-free amperometric protein biosensors based on single-walled carbon nanotubes array modified microelectrodes. *J. Okuno, K. Maehashi, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya The 9th World Congress on Biosensors, Toronto, Canada, May 10 - 12, 2006.

Label-Free Amperometric Biosensors Based on Single-Walled Carbon Nanotube Modified Microelectrodes. *Kenzo Maehaashi, Jun Okuno, Kazuhiko Matsumoto, Kagan Kerman, Yuzuru Takamura and Eiichi Tamiya, 64th Device Research Conference Pennsylvania State University, USA, June 26-28, 2006.

Carbon Nanotube Single-Electron Transistors Fabricated with Focused-Ion-Beam Technique. *Kenzo Maehashi, Hirokazu Ozaki, Yasuhide Ohno, Koichi Inoue, Kazuhiko Matsumoto, Shu Seki, Seiichi Tagawa, TMS 2006 Electronic Materials Conference, Pennsylvania State University, USA June 28-30, 2006.

Precise Control of Number of Carbon Nanotube Growth by Digital Growth Process. *Masatoshi Maeda, Takafumi Kamimura and Kazuhiko Matsumoto, TMS 2006 Electronic Materials Conference, Pennsylvania State University, USA June 28-30, 2006.

High-Sensitive Detection of Immunoglobulin E Using Atamer-Modified Carbon Nanotube Field-Effect Transistor. *Taiji Katsura, Kenzo Maehashi, Kazuhiko Matsumoto, Kagan Kerman, Yuzuru Takamura and Eiichi Tamiya, TMS 2006 Electronic Materials Conference, Pennsylvania State University, USA June 28-30, 2006.

Real-Time Sensing of Proteins by Using a Top-Gate CNT-FET Biosensor. *Masuhiro Abe, Katsuyuki Murata, Atsuhiko Kojima, Yasuo Ifuku, Mitsuaki Shimizu, Tatsuaki Ataka and Kazuhiko Matsumoto, TMS 2006 Electronic Materials Conference, Pennsylvania State University, USA June 28-30, 2006.

Electronic states of Single-walled carbon nanotubes with substitutional impurities. *Koichi Inoue, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi and Kazuhiko Matsumoto, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, Vienna, Austria, July 24 - 28, 2006.

Spin injection to single-walled carbon nanotubes through thin tunnel barriers. *Yasuhide Ohno, Kazuki Narumi, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue and Kazuhiko Matsumoto, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, Vienna, Austria, July 24 - 28, 2006.

Edge-Contact Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with No Hysteresis Characteristics. *Kohei Nishiguchi, Yasuhide Ohno, Kenzo Maehashi, Koichi Inoue and Kazuhiko Matsumoto, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, Vienna, Austria, July 24 - 28, 2006.

High-Sensitive Protein Biosensors Using Single-Walled Carbon Nanotubes. *K. Maehashi, J. Okuno, T. Katsura, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya, International Conference on Nanoscience and Technology, NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July 30 - August 4, 2006.

Selective Detection of Proteins by Using Top-Gate Carbon Nanotube Field Effect Transistor. *M. Abe, K. Murata, A. Kojima, Y. Ifuku, M. Shimizu, T. Ataka and K. Matsumoto, International Conference on Nanoscience and Technology, NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July 30 - August 4, 2006.

Growth of Suspended Single-Walled Carbon Nanotubes by Laser-Irradiated Chemical Vapor Deposition. *Y. Asai, Y. Fujiwara, K. Maehashi, Y. Ohno, K. Inoue, K. Matsumoto, International Conference on Nanoscience and Technology, NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July 30 - August 4, 2006.

Ideal Control of Carbon Nanotube Field Effect Transistor Characteristics. K. Matsumoto, International Conference on Nanoscience and Technology, NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July 30 - August 4, 2006.

High-Sensitive and Label-Free Detection of Biomolecules Using Single-Walled Carbon Nanotube Modified Microelectrodes. *J. Okuno, K. Maehashi, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya, 2006 International Conference on Solid State Device and Materials, Kanagawa, Japan, September 13 - 15, 2006.

DNA Aptamer-Based Biosensing of Immunoglobulin E Using Carbon Nanotube Field-Effect Transistors. *T. Katsura, K. Maehashi, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya, 2006 International Conference on Solid State Device and Materials, Kanagawa, Japan, September

13 - 15, 2006.

First Selective Detection of Proteins Using Top-Gate Carbon Nanotube Field Effect Transistor. *M. Abe, K. Murata, A. Kojima, Y. Ifuku, M. Shimizu, T. Ataka and K. Matsumoto, 2006 International Conference on Solid State Device and Materials, Kanagawa, Japan, September 13 - 15, 2006.

Formation of Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Low Hysteresis Characteristics. *K. Nishiguchi, Y. Ohno, K. Maehashi, K. Inoue and K. Matsumoto, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 -Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology- Osaka, Japan, September 19 - 20, 2006.

Growth of Single-Walled Carbon Nanotubes by Laser-Irradiated Chemical Vapor Deposition. *Y. Asai, Y. Fujiwara, K. Maehashi, Y. Ohno, K. Inoue and K. Matsumoto, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 -Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology- Osaka, Japan, September 19 - 20, 2006.

Label-Free Protein Biosensors Using DNA-Aptamer-Modified Carbon Nanotube Field-Effect Transistors. *T. Katsura, K. Maehashi, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E. Tamiya, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium Awaji, Japan, December 8 - 9, 2006.

Fabrication of Label-Free High-Sensitive Biosensors Using Direct-Grown Carbon Nanotube Arrayed Electrode. *J. Okuno, K. Maehashi, K. Matsumoto, K. Kerman, Y. Takamura and E.Tamiya 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8 - 9, 2006.

Single-Walled Carbon Nanotube Field-Effect Transistors with Oxidized Metal Insulator, *Y. Ohno, Y. Asai, K. Maehashi, K. Inoue and K. Matsumoto, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium Awaji, Japan, December 8 - 9, 2006.

Carbon Nanotubes Grown by Thermal CVD Method and their Applications to Some Devices, *K. Inoue, K. Maehashi, Y. Ohno and K. Matsumoto, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium Awaji, Japan, December 8 - 9, 2006.

［国内学会］

応用物理学会　14 件
日本物理学会　1 件

［取得学位］

修士（工学）
奥野　潤　　カーボンナノチューブ・アンペロメトリックバイオセンサー

[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）

井上　恒一	二重励起法によるカーボンナノチューブの研究	2,100

[その他の競争的研究資金]

単位：千円

松本　和彦	科学技術振興機構	カーボンナノチューブ単一電子・スピン計測システムの確立	129,000
松本　和彦	新エネルギー・産業技術総合開発機構	パーソナルＱＯＬシステムのための CNT 超高感度生体分子センサーの研究開発	19,550

量子物性研究分野

教授	吉田　博
助教授	森川　良忠
研究支援推進員	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、李　揆浩、山内　邦彦
大学院学生	光田　直樹、松川　和人、木崎　栄年、豊田　雅之、福島　鉄也、林田　英樹、竹内　康祐、出倉　春彦、名兒耶　彰洋、平松　雅規、南井　仁、原田　邦彦、江藤　基比古、中野　洋輔、山口　宏信
学部学生	魚住　昭文、實宝　秀幸
研究生	Jon Bergmann Maronsson
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を用いて解明すると共に、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を経験的パラメータを用いないで、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

・電子励起原子移動を利用した新物質創製法のマテリアルデザイン

電子励起下での原子移動の機構解明とそれに立脚した制御を可能にするシミュレーション技術を開発し、電子励起原子移動による準安定状態を利用した新物質の創製と設計に応用できるようにした。ダイヤモンド、グラファイト、アモルファスシリコンの電子励起原子移動に適用し、原子移動の微視的機構を第一原理計算から明らかにした。また、内殻励起により価電子帯に正孔をドープすると基底状態とは逆に、グラファイトよりもダイヤモンドの方が安定化し、常温・定圧でダイヤモンドを創製するためのプロセスのデザインを行った。これらは、最近になって、電子線、放射線、X線励起に伴う内殻励起や価電子帯のレーザー励起により実験的に実証された。さらには、シリコン中不純物の選択的励起による拡散機構をデザインするため、水素（H）、ボロン（B）、燐（P）や酸素（O）の電子励起による拡散促進についても第一原理分子動力学シミュレーションを行った。

・半導体ナノスピントロニクスのためのマテリアルデザインとスピン制御法の予測

第一原理計算に基づいて、磁性不純物を含む II-VI 族半導体、III-V 族半導体、ZnO、$CuAlO_2$ などの透明酸化物の価電子制御法とスピン間相互作用に関する電子状態の第一原理計算を行い、二重交換相互作用やｐ－ｄ交換相互作用による長距離のキャリア誘起強磁性機構と、短距離の強磁性及び反強磁性超交換相互作用との競合による強磁性発現機構を解明した。これらの計算結果に基づいて透明強磁性体のマテリアルデザインを行った。さらに高い強磁性転移温度を持つ物質のデザインを行った。第一原理計算により磁気力定理から交換相互作用の距離依存性を計算し、その結果に基づいてモンテカルロ計算により、精密に強磁性転移温度を予測し、デザインする方法論を開発した。II-VI 族半導体や III-V 族半導体ベースの希薄強磁性半導体ついて強磁性転移温度(T_C)を第一原理からデザインし、不純物が一様に分布する系では理論的予測と実験的検証が良い一致を示した。また、非一様なナノスケールの析出機構を予

測した。

透明な酸化物である $CuAlO_2$ をベースとした強磁性透明ハーフメタリックマテリアルデザインをおこなった。Cu 位置と Al 位置を遷移金属不純物で置換することにより完全スピン分極強磁性体をデザインし、その強磁性機構が二重交換相互作用と超交換相互作用との競合で決まる一般則を発見した。高スピン状態と低スピン状態について３ｄ遷移金属不純物の入る結晶学的位置を制御した強磁性安定化エネルギーの計算と強磁性転移温度の予測、およびアクセプターやドナーによる磁性のドーピング依存性の予測を行った。

・ナノスケールのスピノーダル分解を用いた高い強磁性転移温度を持つナノ超構造のマテリアルデザイン

透明なワイドバンドギャップ希薄強磁性半導体では、磁性イオン間に強い引力が働き非平衡結晶成長法によりナノスケールのスピノーダル分解が生じることがシミュレーションにより明らかになり、これらを制御・利用することにより、高い強磁性転移温度を持ち、擬一次元ナノ超構造を持つテラビット密度のナノ強磁性体を自己組織化によるボトムアップ・ナノテクノロジーで、しかも、高速に創製する非平衡結晶成長手法を発見し、デバイス応用に必要なデバイス・プロセスデザインを行った。今までの強磁性体の概念になかったようなエキゾチックなナノ強磁性体をデザインし、実験グループに検証を依頼した。その結果、(Ga,Cr)N や(Ga,Mn)N などで、このようなナノ強磁性体の存在が明らかになった。

・磁性不純物（遷移金属や希土類金属）を含まないハーフメタル室温強磁性半導体のマテリアルデザイン

第一原理計算に基づいて、磁性不純物（遷移金属や希土類金属）を含まないハーフメタル強磁性半導体のマテリアルデザインをおこなった。ダイヤモンドに同時ドープした B と H, P と H, もしくは SiO_2 にドープした N, CaO, BaO, SrO, MgO などのイオン結晶中にドープした B, C, N などの深い不純物バンドのバンド幅は狭く、電子相関エネルギーとの競合により、磁性状態が実現し、さらに、不純物状態による二重交換相互作用や強磁性的超交換相互作用を不純物濃度によってバンド幅を制御することにより強磁性状態を安定化させるためのマテリアルデザインを行った。また、自己相互作用補正の効果を取り入れて、モンテカルロ法により強磁性転移温度を正確に予測した。

・ワイドギャップ透明半導体の価電子制御と新機能性のマテリアルデザイン

ワイドバンドギャップ半導体、$CuAlO_2$ やダイヤモンドにおいて、第一原理計算からアクセプター不純物、原子空孔、侵入型原子の形成エネルギーや不純物準位を予測し、価電子制御のためのアクセプターやドナーの補償機構を解明し、低抵抗化のためのアクセプターとドナーの同時ドーピング法による不純物バンドを利用した新しい価電子制御法のマテリアルデザインを行った。これらの系についての同時ドーピング法による価電子制御法の予言はその後、実験的に検証された。また、これらの価電子制御に基づいたｐ型透明酸化物伝導体や透明超伝導体、また高効率熱電機能のマテリアルデザインをおこなった。

・シリコン中の遷移金属不純物のゲッタリングの機構とゲッタリングセンターのマテリアルデザイン

第一原理計算に基づいて、シリコン中の遷移金属不純物、C, N, O, B, P などの不純物の電子状態とエネルギーおよび拡散の第一原理分子動力学シミュレーションを計算し、これらが不純物対やクラスターなどの不純物複合体を形成した時のエネルギーの利得（不純物複合体形成エネルギー）計算を行った。その結果、有効なゲッタリングセンターをデザインした。

・シリコン半導体の欠陥制御のマテリアルデザイン

シリコン太陽電池や MOS 構造を持つデバイスの半導体/酸化膜界面の格子欠陥に起因するダングリングボンドを効率的に消滅させる効果があると報告されているＣＮ処理法について、その機構解明を行った。特に、これまで不明であった、シリコン中のＣＮ拡散機構を明らかにした。その結果、ＣＮ結合の一重結合、および、二重結合、の組み換えにより、低い活性化障壁で拡散可能であり、結晶中の欠陥

まで効率的に拡散し得ることが明らかとなった。

・有機/金属界面の電子構造

最近、有機発光素子をはじめ、有機太陽電池、有機電界効果トランジスタなど、有機分子材料を電子・光デバイスに応用する研究が非常に注目を集めている。有機デバイスはフレキシブルで軽量、大面積化や薄型化が可能など、無機材料で作るデバイスにはない特徴を持っており、これまでにない幅広い応用が可能になると期待されている。有機 EL 素子の代表的発光材料 Alq_3 は、種々の界面現象を示す点でも興味深い。Al との界面の構造や電子構造を *mer, fac* の両異性体について計算し、分子の双極子モーメントが大きな役割を演じることを示した。

・Ga_xNa_{1-x} 合金中への窒素溶解度

GaN は青色発光ダイオードや青色レーザーの材料として幅広く利用されてきている。現在のところ、GaN はサファイヤ基板上を用いて結晶育成が行われているが、サファイヤと GaN は 16%も格子定数の違いがあるために、結晶中に転位が入ってしまい、高品質な結晶を育成させることが難しい。高品質な GaN 基板上に GaN の結晶をホモエピタキシャルさせることが理想的であるが、高品質な GaN 基板を得る方法として Na フラックス法が注目されている。Na フラックス法では Ga と Na の合金液体中に窒素ガスを溶解することにより GaN 基板を成長させる。Ga も Na も単体では N 溶解度が高くないことが知られているが、Ga と Na を合金化することにより飛躍的に窒素溶解度が上がり、GaN の結晶成長が促進される。この機構を明らかにするために、第一原理分子動力学法を用いて Ga_xNa_{1-x} 合金液体中への窒素溶解状態について研究を行った。その結果、合金液体中への窒素溶解度は実験値を非常に良く再現し、さらに、合金液体中の窒素の微視的な構造を明らかにし、合金化による窒素溶解促進の機構を明らかにした。

・TiO_2 表面上での触媒反応過程の研究

TiO_2 は光触媒として、あるいは、様々な触媒の担体として幅広く用いられており、この表面上での化学反応過程を明らかにすることは、より効率的な触媒を設計する指針を得る上で重要である。本研究では、酸化物触媒の反応として基本的な水素の吸着およびその酸素欠陥との関連について研究を行った。その結果、TiO_2 表面上での水素同士の相互作用は大きく、水素の吸着エネルギーは被覆率に大きく依存することがわかった。水素の吸着量が増えるにしたがって伝導体での電子数が増えるが、それは酸化物表面に吸着した水酸基の反結合性軌道に入るためであることが明らかとなった。また、水素同士の相互作用で拡散過程、反応過程も大きく影響を受けることが明らかとなり、酸化物表面上での化学反応を調べる上で重要な指摘を行った。

・電気化学反応の第一原理シミュレーション

最近、高効率なエネルギー変換機器として燃料電池が注目されているが、それに伴い、水と金属との界面での反応シミュレーションの重要性も増している。しかしながら、その複雑さのために、金属表面との界面の構造のシミュレーションはあまり行われていない。特に、溶媒である水の影響は大きく、また、電極界面での電場の影響も取り入れる必要があり、両者の効果を適切に取り入れたシミュレーションはまだ行われていない。Pt(111)表面と水との界面での水素発生反応過程について研究を進めた。界面では水側が正、Pt 側が負の強電場がかかっており、界面での水は水素を金属側に向けて分極する。強電場によって界面付近の水の構造は大きく変化し、密度が高まることが明らかとなった。また、水中のヒドロニウムイオンからプロトンがひとつ取れて吸着水素になる過程がシミュレーションより明らかになった。

[原著論文]

Spinodal Decomposition under Layer by Layer Growth Condition and High Curie Temperature Quasi-One-Dimensional Nano-Structure in Dilute Magnetic Semiconductors, T. Fukushima, K. Sato,

H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L416-418.

Crystal Stability of α- and β-boron, A. Masago, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Phys. Rev.B 73 (2006) 104102.

Curie Temperatures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+U Electronics Structure Calculations, K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 639.

Electronic Structure of (Zn, V)O and (Zn, Co)O in the Self-Interaction-Corrected Calculation, M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 647.

Ab-Initio Calculations of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor, H. Kizaki, K. Sato, A. Yanase and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 812.

First-Principles Study of the Effect of the Superexchange Interaction in (Ga, Mn)V, V=N, P. As and Sb, Y. H. Chang, C. H. Park, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, J. Korean Phys. Soc., 49 (2006) 203.

Exchange Interaction and T_c in Alkaline-Earth-Metal-Oxide-Based DMS without Magnetic Impurities: First Principle Pseudo-SIC and Monte Carlo Calculation, V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, J. Phys. Soc. Japan, 75 (2006) 093705.

Instability of Graphite Structure Induced by Excited Holes, H. Nakayama, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 296-299.

Ab Initio Materials Design of CN for Control of DB in α-Si, N. Mitsuda, K. Shirai, Y. Morikawa and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 204-244.

Gettering Mechanism of Transition Metals in Silicon Calculated from First Principles, K. Matsukawa, N. Hattori, S. Maegawa, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 224-226.

First-Principles Calculation of Exchange Interactions in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors with Carrier Doping, H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 2771-2774.

Vibration Problem of H in Silicon, K. Shirai, I. Hamada and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 41-44.

Energetics of Native Defects in $CuAlO_2$, I. Hamada and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376-377 (2006) 808-811

Pseudo-SIC Study on the Ferromagnetism Induced by Carbon in AO-Based DMS (A=Mg, Ca, Ba, Sr), V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4131-4134.

Carrier Concentration Dependence of Curie Temperature in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor by First Principles Calculation, H. Kizaki, K. Sato and H, Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4135-4138.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4139-4142.

Local Environment Effects on Exchange Interactions in Dilute Magnetic Semiconductors, K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4143-4146.

Curie Temperature of GaMnN and GaMnAs from LDA-SIC Electronic Structure Calculations, M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4155-4159.

Ab Initio Study of Spinodal Decomposition in (Zn,Cr)Te, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Phys. stat. sol. (a) 203 (2006) 2751-2755.

Why is Formate Synthesis Insensitive to Copper Surface Structures?, G. C. Wang, Y. Morikawa, T. Matsumoto and J. Nakamura, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 9-11.

Theoretical Investigation on the Electronic Structure of the Alq_3/Al Interface, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 413-416.

Structure and Binding Energies of Unsaturated Hydrocarbons on Si(001) and Ge(001), J. H. Cho, K.S. Kim and Y. Morikawa, J. Chem. Phys., 124 (2006) 024716-1-4.

Important Role of Molecular Permanent Dipoles of Alq_3/Al Interface Studied from First-Principles, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, Chem. Phys. Lett., 420 (2006) 523-528.

Density Functional Theoretical Calculations for a Co_2/α-Al_2O_3 Model Catalyst: Structures of the

α-Al_2O_3 Bulk and Surface and Attachment Sites for Co^{2+} Ions, T. Taniike, M. Tada, Y. Morikawa,

T. Sasaki and Y. Iwasawa, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 4929-4936.

Study of Interaction between Au and TiO_2(110) at Low Coverage, K. Okazaki-Maeda, Y. Maeda, Y. Morikawa, S. Tanaka and M. Kohyama, Mater. Trans., 47 (2006) 2663-2668.

Electronic Structures of Ag and Au adsorbed on TiO_2(110) Surfaces by First-Principles Calculations, K. Okazaki-Maeda, Y. Morikawa, S. Ichikawa, S. Tanaka and M. Kohyama, Mater. Trans., 47 (2006) 2669-2673.

First-principles stabilization of an unconventional collinear magnetic ordering in distorted manganites, S. Picozzi, K. Yamauchi, G. Bihlmayer and S. Blügel, Phys. Rev. B, 74 (2006) 094402.

[解説、総説]

基礎講座＜分子シミュレーションの基礎と応用>第一原理計算法 II—計算機ナノマテリアルデザイン—, 佐藤和則, 吉田博, 応用物理 75 (2006) 1371-1376.

基礎講座＜分子シミュレーションの基礎と応用>第一原理計算法 III—界面と欠陥のナノダイナミクス—, 柳澤将, 白井光雲, 吉田博, 応用物理 75 (2006) 1493 - 1497.

第一原理計算による触媒研究の動向, 森川良忠, 表面科学、27 (6) (2006) 354-359.

[著書]

「ZnO 系の最新技術と応用（分担執筆）」（八百隆文編集）佐藤和則、豊田雅之、吉田博、CMC 出版（2007）193−213

[特許]

「Transparent ferromgnetic alkali/Chalcogenide compound comprising solid solution of transition metal or rare earth metal and method of regulating ferromagnetism thereof」吉田博, 清家聖嘉, 佐藤和則, 柳瀬章、欧州連合特許登録番号 EP1634979A1

「Magnetic Random Acess Memory Device」吉田博、佐藤和則、大韓民国特許登録番号 第 0557387 号

「磁気抵抗ランダムアクセスメモリー装置（磁阻隋機存取存儲器装置）」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I262593 号

「強磁性 VI 族系半導体、 強磁性 III-V 族系化合物半導体、または強磁性 II-VI 族系化合物半導体とその強磁性特性の調整方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 252521 号

「磁性半導体を用いた円偏光スピン半導体レーザーおよびレーザー光の発生方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、日本特許登録番号　第 3797936 号

「Circular polarized light-generating spin-based semiconductor lazer source using magnetic semiconductor and method of generating laser light」吉田博, 佐藤和則、大韓民国特許登録番号　第 10-0603057 号

「シリコン結晶中の遷移金属不純物のゲッタリング方法」吉田博、大韓民国特許登録番号　第 10-0596701 号

「Ⅱ-Ⅳ族またはⅢ-Ⅴ族系単結晶強磁性化合物及びその強磁性の調整方法」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 254088 号

「Ferromagnetic p-type single crystal zinc oxide and method for preparation threof」吉田博, 佐藤和則、米国特許登録番号　US7022182B1 号

「Verfahren zur herstellung von diamanten des n-type mit niedrigem widerstand (Method for synthesizing n-type diamond having low resistance)」吉田博、ドイツ連邦特許登録番号 DE69926985T2

「Ferromagnetic ZnO-type compound including transition metallic element and method for adjusting ferromagnetic characteristics thereof」吉田博, 佐藤和則、米国特許登録番号 US7115213B2

［ 国際会議 ］

Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces, *Y. Morikawa, CREST Workshop on Physics of Single Molecules: Transport properties of single molecules, atomic wires and DNA, Shonan International Village, Kanagawa, Japan, May 16-18, 2006.

Important Role of Molecular Permanent Dipoles of the Alq_3/Al Interface Studied from First-Principles, *S. Yanagisawa, Y. Morikawa, The XIIth International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), Kyoto TERRSA, Kyoto, Japan, May 21-26,2006.

Ab Initio Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Evolution Reaction at Metal-Water Interfaces, *I. Hamada, Y. Morikawa, M. Otani, O. Sugino, Y. Okamoto, T. Ikeshoji, The XIIth International Congress of Quantum Chemistry (ICQC), Kyoto TERRSA, Kyoto, Japan, May 21-26,2006.

First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Chemical Reactions at Electrode Surfaces (Invited), *Y. Morikawa, I. Hamada, M. Otani, O. Sugino, Y. Okamoto and T. Ikeshoji, 11th International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, Berlin, Germany, June 11-14, 2006.

First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Chemical Reactions at Electrode Surfaces (Invited), *Y. Morikawa, I. Hamada, M. Otani, O. Sugino, Y. Okamoto and T. Ikeshoji, Workshop on "Predicting catalysis: from ammonia production to the hydrogen economy", Liden, Netherland, June 21-23, 2006.

Materials Design and Realization for Semiconductor Nano-Spintronics (Invited), *K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 25th Electronic Materials Symposium (EMS-25), Hotel Sanvalley Fujimi, Izu-no-kuni, Japan, July 5-7, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Effects of Spinodal Decomposition on Ferromagnetism in Dilute Magnetic Semiconductors, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

First-Principles Calculation under Carrier Doping Treatment in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Atom Relaxation of H in Silicon, *K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Gettering Mechanism of 3d Transition Metals Studied by First Principles Calculation, *K. Matsukawa, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Microscopic Mechanism of Phosphorus Diffusion in Silicon, *H. Nakayama, K. Shirai and H.

Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Important Role of Molecular Permanent Dipoles of the Alq_3/Al Interface Studied from First-Principles, *S. Yanagisawa and Y. Morikawa, The 6th International Conference on Electroluminescence of Molecular Materials and Related Phenomena (ICEL-6), City University of Hong Kong, Hong Kong SAR, August 6-10, 2006

Carrier Concentration Dependence of Ferromagnetic States in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor by First-Principles Calculation, *H. Kizaki, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Theoretical Investigation of Spinodal Decomposition in Dilute Magnetic Semiconductor, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, P. H. Dederichs, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

First-Principles Study of Half-Heusler Compound Type Dilute Magnetic Semiconductor, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, P. H. Dederichs, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

First-Principles Studies of Dilute Magnetic Semiconductors using SIC-LDA Approach, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Pseudo-SIC Calculation for AO - based DMS without Transition Metals (A = Mg, Ca, Ba, Sr), *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Computational Nano-Materials Design for High T_c Ferromagnetism in Wide-Gap Magnetic Semiconductors (Invited), *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, P. H. Dederichs, International Conference on Magnetism (ICM2006), Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, Aug. 20-25, 2006.

Theory of Ferromagnetic Semiconductors (Invited), *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, P. H. Dederichs, E-MRS 2006 FALL MEETING, Warsaw, Poland, Sep. 4-8, 2006.

Room Temperature DMS –A Perspective from CMD-, *H. Katayama-Yoshida (Invited), E-MRS

2006 FALL MEETING, Warsaw, Poland, Sep. 4-8, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

First-Principles Studies of Dilute Magnetic Semiconductors using SIC-LDA Approach, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

First-Principles Calculations under Carrier Doping Treatment in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition (Oral), *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Nitride Semiconductors (Oral), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Nano-Scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor (Oral), *H. Kizaki, K Sato and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Theory, New Materials Design and Nano-Process Design of Ferromagnetic Semiconductors, *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, V. A. Dinh and P. H. Dederichs, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Pseudo-SIC and Monte Carlo Study of the Ferromagnetism in C (N)-doped Alkaline Earth Metal Oxides, *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Nano-Scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral),

*M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, The 4th International Workshop on ZnO and Related Materials, Univ. of Giessen, Germany, Oct. 3-6, 2006.

First-Principles Theoretical Study of Metal/Organic Interfaces (Invited), *Y. Morikawa, The University of Tokyo International Symposium and The 10th ISSP International Symposium (ISSP-10) on Nanoscience at Surfaces, Kashiwa, Chiba, Japan, Oct. 9-13, 2006.

First-Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions at Surfaces and Interfaces (Invited), *Y. Morikawa, I. Hamada, S. Yanagisawa, K. Lee, M. Hiramatsu, A. Nagoya, T. Takeuchi, M. Otani, O. Sugino, Y. Okamoto and T. Ikeshoji, International 21st Century COE Symposium on Atomistic Fabrication Technology, Osaka, Japan, Oct. 19-20, 2006.

First-Principles Theoretical Study of Adsorption of Hydrogen on TiO_2(110), *M. Hiramatsu, Y. Morikawa, International 21st Century COE Symposium on Atomistic Fabrication Technology, Osaka, Japan, Oct. 19-20, 2006.

First-Principles Theoretical Study of Thiols adsorbed on Au(111), *A. Nagoya, I. Hamada and Y. Morikawa, International 21st Century COE Symposium on Atomistic Fabrication Technology, Osaka, Japan, Oct. 19-20, 2006.

First-Principles Theoretical Study on the Atomic and Electronic Structures of Al/Alq_3 Interfaces, *K. Takeuchi, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, International 21st Century COE Symposium on Atomistic Fabrication Technology, Osaka, Japan, Oct. 19-20, 2006.

Ab Initio Materials Design for TCO-based New Functional Materials (Invited), H. Katayama-Yoshida, *K. Sato, H. Kizaki, H. Funashima, I. Hamada, T. Fukushima and M. Toyoda, 1st International Symposium on Transparent Conducting Oxides, Crete, Greece, Oct. 23-25, 2006.

Electronic Structures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+SIC Calculations (Oral), *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, KKR-Workshop: new developments, applications and collaborations, University of Bristol, Bristol UK, Oct. 20-22, 2006.

Self-Consistent van der Waals Density Functional Calculation, *K. Lee and Y. Morikawa, the 9th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Seoul, Korea, Nov. 6-8, 2006

Computational Nano-Materials Design for Semiconductor Nano-Spintronics (Invited), *H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor Spintronics, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

LDA+SIC Calculations for ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures),

Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Theoretical Approach to Nanoscale Control of Impurity Diffusion in Silicon: Material Dynamics Design, *K. Shirai, K. Matsukawa and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Ferromagnetism in Oxide-based DMS without Transition Metal Impurities, *V. A. Dinh, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Comparison of Localized Basis and Plane-Wave Basis for Density-Functional Calculations of Organic Molecules on Metals, *K. Lee, J. Yu and Y. Morikawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

First-Principles Theoretical Study of Adsorption of Hydrogen on TiO_2(110), *M. Hiramatsu, Y. Morikawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

First Principles Theoretical Study of Thiols adsorbed on Au(111), *A. Nagoya, I. Hamada, Y. Morikawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Nitride Semiconductors (Invited), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Materials Design of Ferromagnetic Diamond (Oral), *H. Katayama-Yoshida, K. Kenmochi, K. Sato and A. Yanase, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Nano-scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition (Oral), *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 2006 MRS Fall

Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

First-Principles Study of Alq_3/Al Interfaces: Origin of the Interfacial Dipole (Oral), *S. Yanagisawa and Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Vacancy-Induced Magnetism in HfO_2, *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Theoretical Study of Atomic Geometries and the Effect of Electric Field on Thiolats on Au(111), *A. Nagoya, I. Hamada and Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Valence Control of α-Rhombohedral Boron by Electronic Doping, *H. Dekura, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Self-Consistent van der Waals Density Functional Calculation, *K. Lee and Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures of Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

First-Principles Design of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

First-Principles Theoretical Study of Adsorption of Hydrogen on TiO_2(110), *M. Hiramatsu, Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Control of Impurity Diffusion on Silicon by IR Laser Excitation, *K. Shirai, H. Yamaguchi and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

First-Principles Theoretical Study on the Atomic and Electronic Structures of Al/Alq_3 Interfaces, *K. Takeuchi, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ Based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor Spintronics, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Electronic Structures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+SIC Calculations, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Ab Initio Study of Water/Transition Metal Interfaces, *I. Hamada and Y. Morikawa, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 5^{th} 21^{st} Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Computational Nano-Materials Design for Semiconductor Spintronics, *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, H. Kizaki, M. Toyoda, V. A. Dinh, 5^{th} 21^{st} Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

First-Principles Study of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 5^{th} 21^{st} Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

First-Principles Design of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 5^{th} 21^{st} Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2007.

First-Principles Theoretical Study of Metal/Organic Interfaces: Origin and Roles of Interface Dipole (Invited), *Y. Morikawa, S. Yanagisawa, K. Lee, A. Nagoya, K. Takeuchi and I. Hamada, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

First-Principles Study of Alq_3/Al interfaces: Origin of the Interfacial Dipole (Oral), *S. Yanagisawa and Y. Morikawa, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

First-Principles Theoretical Study of Thiols adsorbed on Au(111), *A. Nagoya, I. Hamada, Y. Morikawa, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

First-Principles Theoretical Study on the Atomic and Electronic Structures of Al/Alq_3 Interfaces, *K. Takeuchi, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

Application of van der Waals Density Functional to the Physisorption of n-butane on Cu(111) and

Au(111), *K. Lee and Y. Morikawa, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI 2007), Icho-Kaikan, Osaka University, Suita, (Osaka), Jan. 15-17, 2007.

First-Principles Theoretical Study of Adsorption of Hydrogen on TiO_2(110), *M. Hiramatsu and Y. Morikawa, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

Single-Molecular Spectroscopy of Purine Base Molecule using STM/STS, *N. Kubo, A. Nagoya, Y. Morikawa, H. Tanaka and T. Kawai, International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Univ., Osaka, Japan, Jan.15-17, 2007.

First-Principles Theoretical Simulations for Surfaces and Interfaces (Invited), *Y. Morikawa, I. Hamada, S. Yanagisawa, K. Lee, M. Hiramatsu, A. Nagoya, T. Takeuchi, M. Otani, O. Sugino, Y. Okamoto and T. Ikeshoji, JSPS-DST Asia Academic Seminar on Molecular and Supramolecular Materials with Designed Functions, Feb. 23-28, 2007, Pune, India

First-Principles Study of Al/Alq_3 and Al/LiF/Alq_3 Interfaces (Oral), *S. Yanagisawa, K. Takeuchi and Y. Morikawa, Fourth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE4), Takeda Hall, Hongo Campus, The University of Tokyo, Tokyo, Japan, Mar. 14-16, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

吉田　博	第 24 回半導体中の欠陥国際会議(ICDS-24)（国際運営委員）
吉田　博	International conference on Quantum Simulators and Design（組織委員）
吉田　博	第 4 回半導体中のスピンに関連する物理と応用国際会議（PASPS-VI）（国際諮問委員及びプログラム委員）
吉田　博	磁性国際会議(ICM2006)（組織委員）
森川　良忠	CREST Workshop on Physics of Single Molecules: Transport properties of single molecules, atomic wires and DNA（組織委員）
森川　良忠	International Symposium on Theories of Organic/Metal Interfaces 2007 (ISTOMI07) （組織委員長）

[国内学会]

日本物理学会	19 件
応用物理学会	7 件
電気化学会	1 件

[取得学位]

修士（工学）

名兒耶　彰洋	金表面上チオール系分子の吸着に関する第一原理シミュレーション
竹内　康祐	第一原理分子動力学シミュレーションによる Al/Alq_3　界面の構造と電子状態に関する研究
平松　雅規	ルチル型 TiO_2(110)面に吸着した水素に関する第一原理計算

修士（理学）

出倉　春彦	固体ホウ素の不純物添加による金属化とその電子状態

南井　仁	第一原理計算による希薄磁性半導体の強磁性発現機構と磁気励起の研究
博士（工学）	
松川　和人	シリコン中における 3ｄ遷移金属の拡散挙動解明とゲッタリングマテリアル・デザイン
博士（理学）	
光田　直樹	結晶シリコンにおける CN 分子の結合状態と拡散についての第一原理的研究

[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		
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・応用	2,300
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	14,500
（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
学術創成研究		
森川　良忠	有機デバイス間連界面の解明と制御	

[受託研究]

吉田　博	日本学術振興会 先端研究拠点事業拠点形成型	計算機ナノマテリアルデザイン	16,000
森川　良忠	科学技術振興機構 戦略的基礎研究(CREST)	単一分子伝導・接合シミュレーション	11,500
森川　良忠	科学技術振興機構 戦略的基礎研究(CREST)	電極二相界面のナノ領域シミュレーション	10,300

[奨学寄附金]

[共同研究]

吉田　博	科学技術振興機構	先端計測・分析技術に関する調査研究	1,960
吉田　博	日本原子力研究機構	グリッド環境における物性解析・材料設計シミュレーション	
吉田　博	東北大学金属材料研究所	透明室温強磁性半導体スピントロニクスマテリアルのデザイン・創製・デバイス応用	
森川　良忠	日本ガイシ	フラックス法による窒化物単結晶成長のシミュレーションに関する研究	1,000
森川　良忠	豊田中央研究所	排気浄化触媒シミュレーションに関する研究	1,800

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、Pd 基バルク金属ガラス相の安定化機構に関する研究
- 方位配向強磁性合金ナノ粒子分散膜の低温合成と構造、磁性に関する研究
- イオンビーム技術による新機能性材料の開発
- ロータス型ポーラス金属を量産化するための連続鋳造法の開発
- ロータス型ポーラス金属および金属間化合物の制振性・超弾性・疲労特性の解明
- ナノ中空金属球の創製
- レーザープロセスによる機能調和人工格子、ヘテロ構造スピンデバイスの創成
- ＳＰＭによるＤＮＡ等のバイオ分子の観察とマニピュレーション
- 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
- 低次元ナノ構造制御による多機能型セラミックス及びポリマーナノコンポジットの創製と応用
- 酸化物ナノチューブ系材料の高次機能化ならびに環境エネルギーシステムへの応用
- 光誘起相転移による新物質構造相の創製と評価
- 光励起による半導体表面構造不安定性の原理の確立
- 半導体表面における超高速キャリヤー動力学の研究

材料機能物性研究分野

教授	弘津　禎彦
助教授	石丸　学
助手	佐藤　和久、平田　秋彦
博士研究員	Andras Kovács
大学院学生	元　鍾漢、柳　韓尉、窪谷　悟、蓮井　隼人、川原直人、木村洋介
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ている。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る研究や、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

・バルク金属ガラスの局所構造と結晶化挙動

本年度は、高いガラス形成能を有する Pd 及び Zr 基バルク金属ガラスの中範囲規則構造及び熱処理による結晶化挙動の特徴について、透過型電子顕微鏡法を用いて研究を行い、以下の成果を得た。(1)$Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ バルク金属ガラスの過冷却液体温度域での結晶化前段階において、ガラス中の中範囲規則構造が単純な fcc-(Pd,Ni)的な構造から初期析出相である P 化合物的な構造へと大きく変化することを見出した。このような複雑な挙動はガラス形成能の低い金属ガラスには見られなかったもので、結晶化の抑制に寄与すると考えられる。(2)$Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$ バルク金属ガラスの結晶化初期過程の特徴を調べた結果、単斜晶の構造未知相が大きな組成変動を伴うことなく出現することが明らかとなった。これまでの報告では、結晶化初期の X 線回折曲線が複数相の出現として説明されていたが、今回見出した準安定相である単斜晶構造のみでほぼ全てのピークが矛盾無く説明可能となった。

・方位配向強磁性合金ナノ粒子分散膜の構造と磁性

NaCl 単結晶基板上での金属ナノ粒子のエピタキシャル成長を利用し、方位配向 $L1_0$ 型 FePt、FePd 規則合金ナノ粒子分散膜を作製し、その極微構造と硬質磁性について研究を行っている。本年度は、(1)電子回折図形の加熱その場観察ならびにナノビーム電子回折による FePt 及び FePtCu ナノ粒子の規則化過程の観察、(2) 垂直磁気異方性を示す $L1_0$ 型 FePdCo 規則合金ナノ粒子の創製と極微構造解析、(3)RF マグネトロンスパッタリング法を用いた方位配向 FePtCu ナノ粒子高密度 2 次元分散組織の合成温度依存性と極微構造解析、の 3 点について研究を行った。(1)では、粒径約 10nm サイズの FePt ナノ粒子において規則合金化が約 723K 以上で進行することが、電子回折強度プロファイルの解析から明らかとなった。また、低温合成 FePtCu ナノ粒子について、ナノビーム電子回折の結果、規則格子反射と基本格子反射との強度比に粒径依存性が存在することが明らかとなった。(2)では、Co 濃度が 5-18at%の $L1_0$ 型 FePdCo ナノ粒子分散膜において、著しい垂直磁気異方性が発現すること、及び Co 濃度増加に伴い飽和磁化が上昇することが明らかとなった。垂直磁気異方性の起源は、$L1_0$ 構造の c 軸の膜面垂直方向への優先配向によるものである。強磁性元素である Co を添加することにより、磁化容易軸の配向制御と飽和磁化の増加の 2 点を同時に達成することが可能であることを示した。(3)では、10nm サイズの<100>配向・高密度分散 $L1_0$ 型 FePtCu ナノ粒子を 563-673K にて合成し、基板温度上昇による微細組織及び規

則構造の変化を高分解能電子顕微鏡観察ならびにナノビーム電子回折にて明らかにした。

・イオンビーム技術による新規機能性材料の開発

Si 単結晶基板に高ドーズ Fe イオン注入を施し、環境調和型材料として注目されている鉄シリサイドの創製を試みた。エネルギー120keV、照射量 $4x10^{17}cm^{-2}$、照射温度 350°C の条件で得られた試料では、ε-FeSi と β-$FeSi_2$ から成る層状構造が形成されることが確認された。この試料に熱処理を施すと、β-$FeSi_2$ の領域が広がり、600°C、２時間熱処理でε相は全てβ相に変化した。ε-β相変態に伴い発生した余剰の Fe 原子は粒界拡散により基板側に移動し、Si と反応してシリサイドを形成すると共に照射より導入された欠陥の消滅に寄与することが明らかとなった。更に高温で熱処理を施すとβ-$FeSi_2$/Si 界面のラフネスは改善され、Si 基板表面に厚さ 150nm 程度の多結晶β-$FeSi_2$ 連続膜が形成された。得られた多結晶β-$FeSi_2$ は X 線極点図より優先方位を有することが確認された。

[原著論文]

Local Atomic Ordering and Nanoscale Phase Separation in a Pd-Ni-P Bulk Metallic Glass, Y. Hirotsu, T. G. Nieh, A. Hirata, T. Ohkubo and N. Tanaka, Phys. Rev. B 73 (2006) 012205(1)-012205(4).

Local Atomic Structure of Pd-Ni-P Bulk Metallic Glass Examined by High-Resolution Electron Microscopy and Electron Diffraction, A. Hirata, Y. Hirotsu, T. Ohkubo, T. G. Nieh and N. Tanaka, Intermetallics 14 (2006) 903-907.

Voronoi Analysis of the Structure of Cu-Zr and Ni-Zr Metallic Glasses, T. Fukunaga, K. Itoh, T. Otomo, K. Mori, M. Sugiyama, H. Kato, M. Hasegawa, A. Hirata, Y. Hirotsu and A.C. Hannon, Intermetallics 14 (2006) 893-897.

Mechanism of Nanocrystalline Microstructure Formation in Amorphous Fe-Nb-B Alloys, A. Hirata, Y. Hirotsu, E. Matsubara, T. Ohkubo and K. Hono, Phys. Rev. B 74 (2006) 184204(1)-184204(6).

Local Structure Studies of Fe-Nb-B Metallic Glasses using Electron Diffraction, A. Hirata, Y. Hirotsu, T. Ohkubo, E. Matsubara and A. Makino, J. Microsc. 223 (2006) 191-194.

Characteristic Features of the Fe_7Mo_6-Type Structure in a Transition-Metal Alloy Examined using Transmission Electron Microscopy, A. Hirata, A. Iwai and Y. Koyama, Phys. Rev. B 74 (2006) 054204(1)-054204(4).

Topological Characterization of Metallic Glasses by Neutron Diffraction and RMC Modeling, T. Fukunaga, K. Itoh, T. Otomo, K. Mori, M. Sugiyama, H. Kato, M. Hasegawa, A. Hirata, Y. Hirotsu and K. Aoki, Physica B 385-386 (2006) 259-262.

Application of Energy Filtering TEM to Nanocrystallization Process in Amorphous $Fe_{84}Nb_7B_9$ alloy, A. Hirata and Y. Hirotsu, J. Mater. Sci. (2006) 2597-2600.

Compositional Dependence of Local Atomic Structures in Amorphous $Fe_{100-x}B_x$ (x=14,17,20) Alloys Studied by Electron Diffraction and High-Resolution Electron Microscopy, A. Hirata, Y. Hirotsu, T. Ohkubo, T. Hanada and V. Bengus, Phys. Rev. B 74 (2006) 214206(1)- 214206(9).

Structural Characterization of Iron Silicides Nanoparticles Grown on Si Substrate: Annealing Rate

Dependence, J. H. Won, K. Sato, M. Ishimaru and Y. Hirotsu, J. Mater. Sci. 41 (2006) 2611-2614.

Structural Investigation of Ge-Sb-Sn Thin Film using Transmission Electron Microscopy, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, M. Takashima and H. Matsumoto, J. Mater. Sci. 41 (2006) 2615-2616.

Order-Disorder Transformation in $L1_0$-FePd Nanoparticles Studied by Electron Diffraction, K. Sato and Y. Hirotsu, Mater. Trans. 47 (2006) 59-62.

Fabrication of Oriented $L1_0$-FeCuPd and Composite bcc-Fe/$L1_0$-FeCuPd Nanoparticles: Alloy Composition Dependence of Magnetic Properties, H. Naganuma, K. Sato and Y. Hirotsu, J. Appl. Phys. 99 (2006) 08N706(1)-08N706(3).

Direct Synthesis of Oriented High-Density Islands of $L1_0$-FePtCu Alloy at 613K, W. H. Ryu, H. Naganuma, K. Sato and Y. Hirotsu, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L608-L610.

Perpendicular Magnetic Anisotropy of Epitaxially Grown $L1_0$-FePdCu Nanoparticles with Preferential c-Axis Orientation, H. Naganuma, K. Sato and Y. Hirotsu, J. Appl. Phys. 100 (2006) 074914(1)-074914(7).

Transmission Electron Microscopy Study on $FeSi_2$ Nanoparticles Synthesized by Electron-Beam Evaporation, J. H. Won, K. Sato, M. Ishimaru, and Y. Hirotsu, J. Appl. Phys. 100 (2006) 014307(1)-014307(6).

Chemical Short-Range Order in Ion-Beam-Induced Amorphous SiC: Irradiation Temperature Dependence, M. Ishimaru, I.-T. Bae, A. Hirata, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Nucl. Instrum. Meth. B 242 (2006) 473-475.

Epitaxial Growth of Ferromagnetic Cubic GaCrN on MgO Substrate, S. Kimura, S. Subashchandran, Y. K. Zhou, M. S. Kim, S. Kobayashi, S. Emura, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, S. Hasegawa and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) 76-78.

Formation Process of beta-$FeSi_2$/Si Heterostructure in High-Dose Fe Ion Implanted Si, M. Ishimaru, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, J. Appl. Phys. 99 (2006) 113527(1)-113527(7).

Solid Phase Crystallization of Amorphous Fe-Si Layer Synthesized by Ion Implantation, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Appl. Phys. Lett. 88 (2006) 251904(1)-251904(3).

Structure Analysis of Ion-Beam Synthesized Amorphous Fe-Si Layers using Transmission Electron Microscopy, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 283-286.

Structural Evolution in Fe Ion Implanted Si upon Thermal Annealing, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 300-302.

Electron-Beam Radial Distribution Analysis of Ion-Beam-Induced Amorphous SiC (Invited), M.

Ishimaru, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 309-314.

Structural Changes of SiC under Electron-Beam Irradiation: Temperature Dependence, I.-T. Bae, M. Ishimaru and Y. Hirotsu, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 315-319.

Annealing Effect on Structural Defects in Low-Dose Separation-by-Implanted-Oxygen Wafers, M. Tamura, M. Ishimaru, K. Hinode, K. Tokiguchi, H. Seki and H. Mori, Jpn. J. Appl. Phys. 45, 7592-7599 (2006).

Low-Temperature Crystallization Caused by Ultrasound in $Pd_{42.5}Ni_{7.5}Cu_{30}P_{20}$ and $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ Bulk Metallic Glasses, T. Ichitsubo, E. Matsubara, K. Anazawa, N. Nishiyama, M. Naito and Y. Hirotsu, Mater. Sci. Eng. A 442 (2006) 273-277.

HRTEM analysis of anti-phase boundary formation in $L1_0$-FePd phase, A. Kovacs, K. Sato and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1520.

Characterization of 2D-dispersed FeCuPd Alloy Nanoparticles, H. Naganuma, K. Sato and Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1545.

Low Temperature Synthesis of High-Density FePtCu Nanoparticles Fabricated by Rf-magnetron Sputtering, H. W. Ryu, H. Naganuma, K. Sato and Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1548.

Nanobeam Electron Diffraction Analysis of Medium Range Order Structures in Zr-Based Metallic Glasses, A. Hirata, T. Morino and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1606.

Amorphous Structure of Ion-Beam-Synthesized Fe-Si Thin Layer, M. Naito, M. Ishimaru and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1771.

High-Dose Fe Ion Implanted Si: Ion-Beam-Induced and Annealing-Induced Microstructures, M. Ishimaru, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1856.

[解説、総説]

イオン照射誘起非晶質 SiC の化学的短範囲規則性、石丸　学、弘津禎彦、顕微鏡 41 (2006) 156-159.

Cs コレクター電顕による金属ガラスの局所構造観察、平田秋彦、弘津禎彦、大久保忠勝、田中信夫、T. G. Nieh、まてりあ 45 (2006) 848.

[著書]

「金属ナノ組織解析法」宝野和博、弘津禎彦、アグネ技術センター、(2006)

「材料開発のための顕微鏡法と応用写真集（分筆）」（日本金属学会編集）、佐藤和久, 柳韓蔚, 弘津禎彦、日本金属学会、(2006) 233

「材料開発のための顕微鏡法と応用写真集（分筆）」（日本金属学会編集）、牧野彰宏, 尾藤輝夫, 弘津禎

彦, 佐藤和久、日本金属学会、(2006) 234

「材料開発のための顕微鏡法と応用写真集（分筆)」(日本金属学会編集)、平田秋彦、小山泰正、日本金属学会、(2006) 247

[特許]

「磁性体粒子及びその製造方法」弘津禎彦、András Kovács、佐藤和久、 特願 2006-220037

[国際会議]

Direct Synthesis of Isolated $L1_0$-FePtCu Nanoparticles by RF-Magnetron Sputtering (Oral), *H. W. Ryu, K. Sato and Y. Hirotsu, International Workshop on Designing of Interfacial Structures in Advanced Materials and Their Joints, Osaka (May18-20, 2006).

Exchange interactions in hydrogen-induced amorphous YFe_2 (Invited), *K. Suzuki, K. Ishikawa, K. Aoki, J. M. Cadogan, M. Ishimaru and Y. Hirotsu, 8th International Workshop on Non-Crystalline Solids, Gijón, Spain (June 20-23, 2006).

Change of Nanostructure in $(Fe_{0.5}Co_{0.5})_{72}B_{20}Si_4Nb_4$ Metallic Glass on Annealing (Invited), *Y. Hirotsu, A. Hirata, K. Amiya, N. Nishiyama and A. Inoue, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC' 2006), Vancouver, Canada (July 4-8, 2006).

Formation process of beta-$FeSi_2$/Si heterostructure in high-dose Fe ion implanted Si (Invited), *M. Ishimaru, 19th International Conference on the Application of Accelerators in Research and Industry, Fort Worth, Texas, USA (August 20-25, 2006)

Magnetic Properties and Microstructure of FePt-M-B (M=Zr, Nb, La) Films, *H. Okumura, S. Nishinakagawa, T. Bitoh, A. Makino, K. Sato and Y. Hirotsu, The 17th International Conference on Magnetism, Kyoto (August 20-25, 2006).

Particle Size Dependence of Atomic Ordering and Magnetic Properties of $L1_0$-FePd Nanoparticles, *H. Naganuma, K. Sato and Y. Hirotsu, The 17th International Conference on Magnetism, Kyoto (August 20-25, 2006).

Effects of Additive Elements on Atomic Ordering and Hard Magnetic Properties of $L1_0$-Type FePt and FePd Alloy Nanoparticles (Invited), *Y. Hirotsu, K. Sato, H. W. Ryu and A. Kovács, 48th IUVSTA Workshop, Innovatial Training Course on “Influence of Trace Elements on the Nucleation and Growth of Thin Films”, Budapest, Hungary (August 26-31, 2006).

Improvement of Structural and Magnetic Properties of Fe-Pd Nanoparticles by Co Addition (Oral), *A. Kovács, K. Sato and Y. Hirotsu, 48th IUVSTA Workshop, Innovatial Training Course on “Influence of Trace Elements on the Nucleation and Growth of Thin Films”, Budapest, Hungary (August 26-31, 2006).

Nanobeam Electron Diffraction Analysis of Medium Range Order Structures in Zr-based Metallic Glasses (Oral), *A. Hirata, T. Morino and Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

High-dose Fe ion implanted Si: Ion-beam-induced and annealing induced microstructures, *M. Ishimaru, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito, and Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

Amorphous structure of ion-beam-synthesized Fe-Si thin layer (Oral), *M. Naito, M. Ishimaru, and Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

Low Temperature Synthesis of High-Density FePtCu Nanoparticles Fabricated by Rf-Magnetron Sputtering, *H. W. Ryu, H. Naganuma, K. Sato and Y. Hirotsu The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

Characterization of 2D-dispersed FeCuPd Alloy Nanoparticles, *H. Naganuma, K. Sato, Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

HRTEM Analysis of Anti-Phase Boundary Formation in $L1_0$-FePd Phase (Oral), *A. Kovács, K. Sato and Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

Atomic Ordering and Hard Magnetic Properties of $L1_0$-Type FePtCu Nanoparticles Studied by Transmission Electron Microscopy and Electron Diffraction (Invited), *Y. Hirotsu, H. W. Ryu and K. Sato, 6th Japanese-Polish Joint Seminar on Materials Analysis -New Developments and Analysis for Fabrication of Functional Nanostructures-, Toyama (September 10-13, 2006).

Structure and Magnetic Properties of Nanocrystalline Pd-Co and Pd-Co-Fe Layer, *A. Kovács, K. Sato and Y. Hirotsu, The IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea (September 10-14, 2006).

Low-Temperature Synthesis of Ordered $L1_0$-FePtCu Nanoparticles with High Coercivity, *H. W. Ryu, K. Sato, Y. Hirotsu, The IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea (September 10-14, 2006).

Formation process of beta-$FeSi_2$ from amorphous Fe-Si, *M. Naito, A. Hirata, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, 15th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Taormina, Italy (September 18-22, 2006).

Solid phase crystallization of an amorphous Fe-Si layer synthesized by ion implantation (Oral), *M. Ishimaru, M. Naito, and Y. Hirotsu, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Suita, Osaka (September 19-20, 2006).

Local Structure Studies of Fe-Based Metallic Glasses using Transmission Electron Microscopy (Invited), *A. Hirata, Y. Hirotsu amd E. Matsubara, The 5th International Conference on Bulk Metallic Glasses, Awaji (October 1-5, 2006).

Electron Diffraction and High-Resolution Electron Microscopy Study of Zr-Based Metallic Glasses, *A. Hirata, T. Morino and Y. Hirotsu, The 5th International Conference on Bulk Metallic Glasses, Awaji (October 1-5, 2006).

Amorphization of SiC under radiation environments (Plenary), *M. Ishimaru, Satellite Conference on Materials Behaviour: Far From Equilibrium, Mumbai, India (December 15-16, 2006).

Local Structure Studies of Metallic Glasses using HREM and Electron Diffraction (Invited), *Y. Hirotsu, A. Hirata and T. Ohkubo, International Workshop on Bulk Metallic Glasses: Sicence & Technology, Bangalore, India (January 12-17, 2007).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

弘津　禎彦	5^{th} International Bulk Metallic Galsses Conference（組織委員長）
弘津　禎彦	16^{th} International Congress on Electron Microscopy （組織委員）
弘津　禎彦	The IUMRS International Conference in Asia 2006（セッション委員）
弘津　禎彦	International Conference on Magnetism 2006（組織委員）
弘津　禎彦	6^{th} Japan-Polish Joint Seminar on Materials Analysis（組織委員）
石丸　学	Japanese Journal of Applied Physics （編集委員）
石丸　学	16^{th} International Congress on Electron Microscopy （セッション委員）

[国内学会]

日本金属学会	5 件
応用物理学会	1 件
その他	2 件

[取得学位]

博士（工学）

元　鍾漢	Fabrication and Structural Analysis of Environmental-Friendly Semiconducting beta-$FeSi_2$

修士（工学）

窪谷　悟	Pd-Ni-P バルク金属ガラスの局所構造変化と結晶化過程
蓮井　隼人	Zr-Cu-Al-Ni バルク金属ガラスの結晶化過程における準安定相形成

[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

特定領域研究(2)		
弘津　禎彦	融体・金属ガラスの局所原子構造のその場観察	8,400
基盤研究(S)(2)		
弘津　禎彦	気相急冷による硬質磁性合金ナノ粒子の形成と電子線構造解析ならびに磁性評価	11,100
若手研究(B)		
佐藤　和久	$L1_0$ 型 FePt、FePd ナノ粒子構造・磁気物性の透過電子顕微鏡による定量解析	700

[受託研究]

弘津　禎彦	NEDO（革新的部材産業創出プログラム）	高機能高精度省エネ加工型金属材料（金属ガラス）の成形加工技術	4,200

金属材料プロセス研究分野

教授	中嶋　英雄
助教授	鈴木　進補
助手	多根　正和、仲村　龍介
特任研究員	金　相烈
研究支援推進員	中居　由忠
大学院学生	久次米　利彦、朴　宰成、井手　拓哉、大西　洋史、 アルバレス ケリー、関　宏範、千葉　博、金　泰範 床桜　大輔、林　礼明、秋田　真吾、渡辺　一功、和田　剛優
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対応してさらなる耐熱強靭性、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ための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鋳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、金属合金、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、それらの材料の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。

代表的な研究として、金属を水素や窒素などの高圧ガス中で溶解し一方向凝固させて孔の向きのそろったロータス（レンコン）型ポーラス金属を作製している。孔のサイズは 1 μm から 10 mm の大きさで孔の空隙率は最大 80 %程度である。ロータス型ポーラス金属は機械加工や合金化により高強度化が可能であり、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。本年度は，新たに開発した連続鋳造法によるロータス型ポーラス金属の作製，ロータス銅に対する ECAE 加工、水分を利用したロータスアルミニウムの作製、ロータス銅の疲労特性の解明を行った。

また,新機能性材料の開発を目指して，ナノサイズの気孔を有するナノポーラス金属の創製研究も行っている．本年度は金属ナノ粒子の酸化を利用した金属ナノ粒子の中空化現象に対して研究を行った。

b) 成果

・連続鋳造法を用いたロータス型ポーラス金属の作製

加圧ガス雰囲気中での連続鋳造法によるロータス金属作製手法を開発した。本方法を用いて、銅、アルミニウムおよびその合金、マグネシウム、炭素鋼を用いたロータス型ポーラス金属の作製に成功し、作製因子が気孔形態、気孔率に与える影響を明らかにした。この方法によりロータス金属の低コスト化・大量生産が可能となり、スポーツ用品・航空機部品・ヒートシンク材・医療材料・工作機械などの応用分野への実用化に向けた基盤が築かれた。

・ロータス型ポーラス銅に対する ECAE 加工

ロータス型ポーラス銅の強度を高める目的で，強ひずみ加工の一種である ECAE(Equal-Channel Angular Extrusion)加工を行い，その変形挙動を明らかにした。金型のチャンネル角度，押出しのパス回数，パスルートなどの加工因子を選択することにより，ロータス型ポーラス銅の気孔形態を多様に変化させることが可能となり，また，気孔を維持したまま金属部分を加工硬化させる条件を見出した。

・水分を利用したロータス型ポーラスアルミニウムの作製

水分から解離した水素を利用して、ロータス型ポーラスアルミニウムの作製を行った。真空雰囲気中でアルミニウムを溶解し、微量な水分を含む鋳型中に流し込み、一方向凝固させることにより凝固方向に伸びた気孔を有するロータス型ポーラスアルミニウムを作製可能であることが明らかとなった。また、気孔形態は鋳込み時の溶融温度に大きく依存し、溶融温度を低下させることにより均質な気孔形態が得られる。

・ロータス型ポーラス銅の疲労特性の解明

ロータス型ポーラス銅の疲労特性に対して研究を行った。ロータス型ポーラス銅の疲労強度は気孔の方向に大きく依存し、気孔の成長方向に平行な方向の疲労強度は気孔の成長方向に垂直な方向の疲労強度よりも高くなることが明らかとなった。また、ロータス型ポーラス銅の疲労強度は、その最大引張強度と相関があり、疲労強度は気孔の方向によらず、最大引張強度に依存することを見い出した。

・金属ナノ粒子の酸化と中空状酸化物の形成

Cu, Al, Zn および Ni などの金属ナノ粒子を酸化させ，中空状酸化物ナノ粒子が形成される現象を TEM で調査し，その形成機構を明らかにした．これらの金属の酸化過程では酸化層を外方へ移動する金属イオンの拡散が速いため，内部に過剰な原子空孔が生成し，これらが集合化することによりナノ孔が形成される．今年度の研究から，酸化によって金属ナノ粒子が中空化するための条件が見出された

[原著論文]

Influence of Ultrasonic Agitation on Pore Formation and Growth during Unidirectional Solidification of Water-carbon Dioxide Solution, M. Tane and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2183-2187.

Size Effects on Tensile Strength of Lotus-type Porous Copper, H. Sueno, M. Tane, J. S. Park, S. K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2203-2207.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni_3Al with and without Boron, T. Ide, M. Tane, S. K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2116-2119.

Effect of Pore Morphology on Compressive Yield Strength of Lotus-type Porous Copper with Various Specimen Sizes, J. S. Park, S. K. Hyun, H. Sueno, M. Tane, H. Nakajima, Y. S. Um, B. Y. Hur, and F. Ono, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2208-2212.

Effect of Silica Additive on the Formation of Lotus-type Porous Alumina under Unidirectional Solidification, S. Ueno, L.M. Lin, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2167-2171.

Effect of Hydrogen Pressure on Moisture-Based Fabrication of Lotus-Type Porous Nickel, H. Onishi, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2120-2124.

Development of an Electrophoretic Sol-Gel Coating Process for Porous Metals, M. Inoue, S.K. Hyun, K. Suganuma, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2161-2166.

Laser Welding of Lotus-type Porous Iron, H. Yanagino, T. Tsumura, H. Nakajima, S.K. Hyun, and K. Nakata, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2254-2258.

Electrochemical Behaviour of Lotus-Type Porous SUS304L and SUS316L Stainless Steels, M. Fuseya, T. Nakahata, S.K. Hyun, S. Fujimoto, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2229-2232.

Evaluation of Bone Quality near Metallic Implants with and without Lotus-type Pores for Optimal Biomaterial Design, T. Nakano, T. Kan, T. Ishimoto, Y. Ohashi, W. Fujitani, Y. Umakoshi, T. Hattori, Y. Higuchi, M. Tane, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2233-2239.

Development of Lotus-type Porous Copper Heat Sink, T. Ogushi, H. Chiba, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2240-2247.

Tribological Behavior of Lotus-type Porous Cast Iron, T. Kato, T. Nakahata, and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2259-2263.

Numerical Simulation of Laser Fusion Zone Profile of Lotus-type Porous Metals, T. Tsumura, T. Murakami, H. Nakajima, and K. Nakata, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2248-2253.

Prediction of the Thermal Properties of Lotus-type and Quasi-isotropic Porous Metals: Numerical and Analytical Methods, A. Ochsner, M. Tane, and H. Nakajima, Mater. Lett., 60 (2006) 2690-2694.

Vibration-damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium, Z. K. Xie, M. Tane, S. K. Hyun, Y. Okuda, and H. Nakajima, Mater. Sci. Eng. A, 417 (2006) 129-133.

Vibration-damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium at Room Temperature, Z. K. Xie, T. Banno, Y. Yamada, M. Tane, S. K. Hyun, Y. Okuda, and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 510-511 (2006) 694-697.

Effect of Porosity on Fatigue Strength of Lotus-type Porous Copper, H. Seki, S. Yamazaki, M. Otsuka, M. Tane, S. K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 510-511 (2006) 966-969.

Fabrication and Properties of Porous Materials with Directional Elongated Pores, H. Nakajima, S. K. Hyun, M. Tane, and T. Nakahata, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 295-300.

Fabrication and Tensile Properties of Lotus-type Porous Iron and SUS304L Stainless Steel, S. K. Hyun, T. Ikeda, M. Tane, and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 337-341.

Extended Effective-mean-field Analysis for Electrical Conductivity of Lotus-type Porous Nickel, M. Tane, S. K. Hyun, and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 331-336.

Measurement and Analysis of Vibration Damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium, Z.K. Xie, S.K. Hyun, Y. Okuda, and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 325-330.

Evaluation of Elastic and Thermoelastic Properties of Lotus-type Porous Metals via Effective-mean-field Theory, M. Tane, S. K. Hyun, and H. Nakajima, Scr. Mater., 54[4] (2006) 545-552.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Unidirectional Solidification in Nitrogen Atmosphere, M. Kashihara, S.K. Hyun, H. Yonetani, T. Kobi, and H. Nakajima, Scr. Mater., 54[4]

(2006) 509-512.

Mechanical Properties of Lotus-type Porous Carbon Steel Fabricated by Continuous Zone Melting Method, T. Kujime, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Metal. Mater. Trans. A, 37 (2006) 393-398.

Compressive Properties of Lotus-type Porous Stainless Steel, T. Ide, M. Tane, T. Ikeda, S. K. Hyun, and H. Nakajima, J. Mater. Res., 21[1] (2006) 185-193.

A New Fabrication Method of Porous Ceramics Using Unidirectional Solidification, S. Ueno, L.M. Lin ,and H. Nakajima, Adv. Sci. Tech., 45 (2006) 799-802.

Biocompatibility of Lotus-type Stainless Steel and Titanium in Alveolar Bone, Y. Higuchi, Y. Ohashi, and H. Nakajima, Adv. Eng. Mater., 8[9] (2006) 907-912.

Impurity Diffusion in g-TiAl Single Crystals, Y. Nose, T. Terashita, T. Ikeda, and H. Nakajima, Acta Mater., 54 (2006) 2511-2519.

Casting and Mechanical Properties of Lotus-type Porous Hastelloy X, K.Taguchi, M. Sato, A. Mizuda, Y. Matsuzaki, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 219-222.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni_3Al by Unidirectional Solidification, T. Ide, M. Tane, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 229-232.

Effect of Applied-stress Direction on Compressive Properties of Lotus-type Porous Stainless Steel, T. Ide, T. Ikeda, M. Tane, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 551-554.

Fabrication of Lotus-type Porous Silicon by Unidirectional Solidification in Mixture Gas of Hydrogen and Argon, T. Nakahata, S.K. Hyun, and H. Nakajima,, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 223-228.

Fabrication of Lotus-type Porous Silver by Unidirectional Solidification in Oxygen Atmosphere, T. Nakahata, S.K. Hyun, and H. Nakajima,, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 247-250.

Fabrication of Lotus-type Porous NiTi Shape Memory Alloys, M. Sugiyama, S.K. Hyun, M. Tane, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 233-236.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Unidirectional Solidification in Nitrogen Atmosphere, M. Kashihara, H. Yonetani, T. Kobi, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 215-218.

Measurement of Pore Length of Lotus-type Porous Nickel, H. Onishi, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 423-426.

Effect of Dissolved Hydrogen on Corrosion Behavior of Lotus-type Porous Stainless Steel, M. Fuseya, T. Nakahata, S.K. Hyun, S. Fujimoto, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 623-626.

Tensile Properties of Lotus-type Porous Copper: Effect of Specimen Dimensions, H. Sueno, M. Tane, J.S. Park, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 529-532.

Electrical Conductivity of Lotus-type Porous Nickel: Measurements and Effective-mean-field Theory, M. Tane, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 597-600.

Yield Strength of Lotus-type Porous Iron Fabricated in Hydrogen or Nitrogen Atmosphere, M. Tane, T. Ichitsubo, S.K. Hyun, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 463-466.

Relationship between Specimen Size and Compressive Yield Strength of Lotus-type Porous Copper, J.S. Park, H. Sueno, S.K. Hyun, M. Tane, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 555-558.

Tribological Behaviour of Lotus-type Porous Metal, T. Kato, T. Nakahata, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 615-618.

Sound Absorption of Lotus-type Porous Magnesium, Z.-K. Xie, T. Banno, Y. Yamada, M. Tane, S.K. Hyun, Y. Okuda, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 607-610.

Vibration-damping of Lotus-type Porous Magnesium, Z.-K. Xie, T. Banno, Y. Yamada, M. Tane, S.K. Hyun, Y. Okuda, and Nakajima H., Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 611-614.

Numerical Simulation of Laser Fusion Zone Profile of Lotus-type Porous Metals, T. Tsumura, T. Murakami, H. Nakajima, and K. Nakata, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 647-650.

Laser Welding of Lotus-type Porous Iron, H. Yanagino, T. Tsumura, H. Nakajima, and K. Nakata, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 651-654.

Biocompatibility of Lotus-type Metals in Alveolar Bone, Y. Higuchi, Y. Oohashi, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 47-50.

Effects of Extended Pore Direction and Stress Shielding on Biological Apatite Texture as Bone Quality after Metallic Implants with and without Pores, T. Nakano, T. Kan, T. Ishimoto, Y. Umakoshi, T. Hattori, Y. Ohashi, Y. Higuchi, M. Tane, and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 51-54.

Development of Lotus-Type Porous Copper Heat Sink, T. Ogushi, H. Chiba, and H. Nakajima,, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 27-34.

Fatigue Behavior of Lotus-type Porous Copper, S. Sasaki, H. Seki, S. Yamazaki, T. Yasuno, M. Otsuka, M. Murakami, S. K. Hyun, M. Tane, H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, edited by H. Nakajima and N. Kanetake (The Japan Institute of Metals, Sendai, Japan), (2006) 585-588.

[解説、総説]

一方向凝固ポーラス金属の作製と特性，中嶋英雄，日本材料科学会, 43 (2006) 8-13.

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，大串哲朗、千葉博、中嶋英雄，まてりあ, 45[3] (2006) 228-230.

連続帯溶融法によるロータス型ポーラス金属の作製，中嶋英雄，素形材, 47[6] (2006) 45.

[特許]

「多孔質体の量産製造方法」中嶋英雄，特願 2006-213837

「ポーラス銀の製造方法」中嶋英雄，登録番号 3868546

「ポーラス金属の製造方法」中嶋英雄，登録番号 10-0659247（韓国）

「ポーラス金属の製造方法」中嶋英雄，登録番号 7073558（アメリカ）

「ポーラス金属の製造方法」中嶋英雄，登録番号 1231287（オーストリア）

「ポーラス金属の製造方法」中嶋英雄，登録番号 1231287（ドイツ）

「金属ポーラス体の作製方法」中嶋英雄，登録番号 76323（ウクライナ）

「金属ポーラス体の作製方法」中嶋英雄，登録番号 2281980（ロシア）

「金属ポーラス体の作製方法」中嶋英雄，登録番号 2828219.1（中国）

「ポーラス金属の気孔形態制御方法」中嶋英雄，玄丞均，田口弘毅，水田明能，松崎祐司，永留世一，石田克彦，国際出願番号 PCT/JP2006/303167

「ヒートシンクおよびその製造方法」千葉博，大串哲朗，中嶋英雄，国際出願番号 PCT/JP2005/014731

「ポーラス・ロータス材料およびその製造方法」，田中俊一郎，田中宏幸，中嶋英雄，上野俊吉，特願 2007-48816

「皮膜形成用組成物及びその利用」，中嶋英雄，上野俊吉，葛西栄輝，林直人，特願 2007-077132

[国際会議]

Lotus-type Porous Metals: Properties and Applications (Invited), S.K. Hyun and *H. Nakajima, 2nd International Conference on Ultra-Speed liner/rotary/motors-driven Feeder/rotors for Mechanical parts and Materials R6D, , Jinju, Korea, May 18-20, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Ceramics using Unidirectional Solidification Method (Oral), *S. Ueno, S.K. Hyun and H. Nakajima, 11th International Ceramics Congress, Hotel IONICA, Acireale, Italy, Jun. 4-9, 2006.

Lotus-type Porous Copper Alloys Fabricated by Unidirectional Solidification in Hydrogen Atmosphere, *S.K. Hyun, T. Awadu, T. Ikeda, and H. Nakajima, International Symposium on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2006), Fairmont Hotel, Vancouver, Canada, July 4-8, 2006.

Lotus-Type Porous Nickel-free Stainless Steel with High Temperature Nitriding , *K. Alvarez, S.K. Hyun, and H. Nakajima, International Symposium on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2006), Fairmont Hotel, Vancouver, Canada, July 4-8, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals by Continuous Zone Melting and Continuous Casting techniques (Keynote Lecture), *H. Nakajima, S.K. Hyun, J.S.Park and M. Tane, International Symposium on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2006), Fairmont Hotel, Vancouver, Canada, July 4-8, 2006.

Pore Morphology of Lotus-type Porous Copper Fabricated by Continuous Casting Technique (Oral), *J.S. Park, S.K. Hyun, M. Tane, and H. Nakajima, The IUMRS International Conference in Asia 2006 (IUMRS-ICA2006), Hotel Shilla, Cheju,South Korea, Sep. 10-14, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous NiAl and Ni_3Al Intermetallic Compounds (Oral), *T. Ide, M. Tane, S.K. Hyun, and H. Nakajima, The IUMRS International Conference in Asia 2006 (IUMRS-ICA2006), Hotel Shilla, Cheju,South Korea, Sep. 10-14, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals by Continuous Zone Melting and Continuous Casting techniques (Invited), *H. Nakajima, S.K. Hyun, J.S. Park, and M. Tane, International Symposium on Synergistic Effects of Materials and Processing, Kumamoto, Japan, Sep. 19, 2006.

Formation of Hollow Oxides through Oxidation of Metal Nanoparticles, *R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Ichokaikan, Suita, Japan, Sep. 19-20, 2006.

Formation Mechanism of Hollow Cu_2O via Oxidation of Cu Nanoparticles, *D. Tokozakura, R. Nakamura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006,

Ichokaikan, Suita, Japan, Sep. 19-20, 2006.

Formation of Hollow Oxide Nano-particles Using Metal Oxidation Reaction, *R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima, 2nd Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Nakanoshima Center, Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

TEM Study on Hollow Oxide Formation through Oxidation of Metal Nanoparticles, *R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji Japan, Dec. 8-9 , 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Alumina by Unidirectional Solidification, *S. Ueno and H. Nakajima, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec. 4-6, 2006.

Effect of Silica and Calcia Additives on Formation of Porous Alumina during Unidirectional Solidification, *L.M. Lin, S. Ueno and H. Nakajima, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec. 4-6, 2006.

Moisture-based Fabrication of Lotus-type Porous Aluminum, *M. Tane, and H. Nakajima, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Awaji Japan, Dec. 8-9 , 2006.

Fabrication of Porous Materials with Micro and Nano Pores (Invited), *H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan. 11-13, 2007.

Hollow Amorphous Formation via Oxidation of Al Nanoparticles at Low Temperatures (Oral), *R. Nakamura, J.-G. Lee, D. Tokozakura, H. Mori, and H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan. 11-13, 2007.

Fabrication of Lotus-type Porous Nickel Using Moisture Reaction between Casting Mould and Metal (Oral), *H. Onishi, Y. Suematsu, S.K. Hyun, and H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan. 11-13, 2007.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni-(15, 28 and 31) at.% Al Alloys by Unidirectional Solidification in Hydrogen Atmosphere, *S.K. Hyun, T. Ikeda, and H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan. 11-13, 2007.

Formation of Nano-scaled Hollow Oxide Particles Using Oxidation Reaction (Oral), *R. Nakamura, D. Tokozakura, J.-G. Lee, H. Mori, and H. Nakajima, 136th TMS Annual Meeting, Walt Disney Swan and Dolphin Hotel, Orland, FA, USA, Feb.25-Mar.1, 2007

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

中嶋　英雄　　Materials Letters (主席編集長)
中嶋　英雄　　Scripta Materialia (ゲストエディター)

中嶋　英雄	Fifth International Conference on Porous Metals and Metal Foaming Technology (MetFoam2007) (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	High Temperature Materials and Processes (ゲストエディター)
中嶋　英雄	Advanced Engineering Materials (ゲストエディター)
中嶋　英雄	Materials Transactions (ゲストエディター)
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	Fifth Pacific Rim International Conference on Materials (PRICM-5) （組織委員会委員）
中嶋　英雄	International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2006) (組織委員会委員)
中嶋　英雄	2nd International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (国際顧問)
中嶋　英雄	International Conference on Eco-Materials Processing and Design VIII (国際顧問)
中嶋　英雄	International Symposium on Synergistic Effects of Materials and Processing (ISSEMP2006) (国際顧問)

[国内学会]

日本金属学会	29 件
銅および銅合金技術研究会	2 件
軽金属学会	1 件
高温学会	1 件

[取得学位]

修士（工学）

床桜　大輔	酸化による Cu ナノ粒子の中空化
林　礼明	一方向凝固法によるポーラスアルミナの作製に関する研究

[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	32,110

若手研究（B）

仲村　龍介	ナノ金属中空多面体の創製および中空化機構の解明	2,500

[受託研究]

中嶋　英雄	高度機械加工システム開発事業	軽量高剛性構造材料と評価技術の開発	4,685

[共同研究]

中嶋　英雄	株式会社村山製作所	静圧軸受けの開発の応用	1,000

[その他の競争的研究資金]

中嶋　英雄	日本鉄鋼協会	ポーラス金属データベース構築研究会	491
中嶋　英雄	軽金属奨学金	軽金属の物性解明	250
中嶋　英雄	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	高熱伝達性ポーラスシリコンヒートシンクの開発	3,107
仲村　龍介	(財)池谷科学技術振興財団	金属超微粒子におけるナノ孔の形成と機構解明	1,500

極微プロセス研究分野

教授	川合　知二
助教授	田中　秀和
客員助教授	李　恵りょん
助手	田中　裕行、柳田　剛
博士研究員	佐藤　一成、Kota Sreenivasa Rao、Aurelian Marcu、小嶋　薫、安立　京一、鈴木　直毅、李　奉局、松浦　寛、高見　知秀、宇野　毅、金井　真樹、美甘　江利子、鉾之原　瞳、筒井　真楠
技術補佐員	玉井　千恵美、神崎　佳美
大学院学生	鈴木　光治、中村　昌文、大西　正敏、山本　斉、山田　郁彦、李　尚恩、柳沢　吉彦、高橋　拓也、仲里　卓、小林　匠、横田　一道、久保　典弘、長島　一樹、川口　英幸、鷹尾伏　純一、坂本　広明
学部学生	山中　理、庄司　昴平、岡本　和起
事務補佐員	藤林　乃理子、永井　由美

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ます。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ます。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ます。
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等のバイオ分子の観察とマニピュレーション、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の創成

新規強相関電子系強磁性酸化物(Fe,M)3O4 (M=Zn, Mn)を設計し、室温における外場応答（磁場・電場）を示す、酸化物スピンデバイス（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 ナノマスクーAFM ナノリソグラフィー法、Mo マスクー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。更に、自己集合的に形成される 10nm 以下の酸化物ナノワイヤの作製に成功した。

・ＳＰＭによるＤＮＡ等のバイオ分子の観察とマニピュレーション

走査型トンネル顕微鏡(STM)をもちいて、DNA の高分解能可視化をおこない、シトシンとチミンの識別に成功した。シトシンとチミンはどちらもピリミジン塩基分子で、分子構造が小さく似ているため、STM 画像のサイズより識別することは困難と考えられていたが、分解能が高い場合は、チミンの方が大きく観察されることが明らかになった。一方、チャンネルタンパクとリガンド分子との結合解離を実空間観察し、チャンネルタンパクの動作原理を明らかにするために、原子間力顕微鏡（AFM）を用いて、単純組成の脂質膜について、真空中で表面電位測定をおこない、脂質の構造と表面電位の関係を明らかにした。さらに、作成した脂質膜上にバインドしたライセニン分子を液中で観察することに成功した。

・ナノバイオチップの開発

DNA や蛋白質のような生体分子が金電極上で配合性を持った配列させる技術を確立した。特に、微細加工技術を利用して、ナノ構造体を作成することにより、生体分子の破壊や凝集体の生成を防ぐことが可能になった。また人工的な生体膜である脂質二重層の表面に機能部位を修飾したバイオセンサーを実現した。今後、様々な微細加工技術を用いたナノ構造体の作製や生体分子の自己組織化による固定化、配列制御を行い、高性能化を目指す。

・Poly-L-Lysine のナノパターニングを、ナノインプリント技術を用いて行うことで、モールドパターンに従った様々な DNA ナノパターンを自己組織化により得ることに初めて成功した。また、DNA をテンプレートに用いた金パーティクルの一次元配列を作製することも可能となった。これを、作製に成功したナノトランスファープリンティングを用いた金ナノ電極と組み合わせることで、バイオ分子デバイスの開発を行っている。さらに、IS-FET を用いた一塩基多型(SNPs)検出や塩基に特異的に結合する錯体の開発にも成功した。

[原著論文]

Dependence of Ionic Strength for Immobilization of Probing Oligonucleotides onto Streptavidine modified Surface, R.Yamasaki, J.M.Kim, H.S.Jung, H.Y.Lee and T.Kawai: Biochemical Engineering Journal, 29 (2006) 125-128.

Soft lithographic patterning of supported lipid bilayers onto a surface and insideb microfluidic channels, P.N.Kim, S.E.Lee, H.S.Jung, H.Y.Lee, T.Kawai, and K.Y. Suh: Lab on a chip, 6 (2006) 54-59.

Creation of nano-scale materials and devices by programmed self-organization, K.Ojima, K.Adachi, BK Lee, H.Y. Lee, M.Taniguchi, T.Matsumoto, T.Kawai, Japan Journal of Surface Science, 27(2006) 151-156.

Atomic Force Microscopy Observation of Highly Arrayed Phospholipid Bilayer Vesicle on a Gold Surface, H.S.Jung, J.M.Kim, J.W.Park, S.E.Lee, H.Y.Lee, R.Kuboi, and T.Kawai: J.Biosci.Bioeng., 102 (2006) 28-33. (Fig.2; A Cover of JBB vol.102, No.1)

A novel route for immobilization of oligonucleotides onto modified silica nanoparticles, K.S.Rao, S.U.Rani, D.K.Charyulu, K.N.Kumar, B.K.Lee, H.Y.Lee,,T.Kawai: Analytica Chimica Acta ,576 (2006), 177-183.

Well-Oriented NanoWell Arrays Metrics for an Integrated Digital Nanobiosensor,
H.Y.Lee, J.W.Park, J.M.Kim, H.S.Jung, and T.Kawai: Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 113901-113903.: Selected for the September 25, 2006 issue of Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology

A review of DNA functionalized/Grafted Carbon Nanotubes and their characterization, S.Daniel, T.P.Rao, Kota S. Rao, S.U.Rani, G.R.K.Naidu, H.Y.Lee, T.Kawai: Sensors and actuator: B.Chemical, In press (2007).

Artificial Electric-Taster Sensor Integrated with Functional Lipid Vesicles, H.S.Jung, Hide.Tanaka, H.Y.Lee, and T.Kawai, Mol. Cryst. and Liq. Cryst., In press (2007).

Electrochemical detection of 17β-estradiol using a DNA aptamer immobilized gold electrode chip,Y.S.Kim, H.S.Jung, T.Matsura, H.Y.Lee, T.Kawai, and M.B.Gu: Biosensor and Bioelectronics, In press (2007).

High-resolution scanning tunneling microscopy and *dI/dV* map studies of peptidenucleic acid and fluorescein isothiocyanate, Hiroyuki Tanaka and Tomoji Kawai: Applied Surface Science, 252, (2006) 5474-5476.

Tunneling spectra for single molecules of HEX-fluorescent dye attached to DNA adsorbed on Cu(1 1 1) surfaces, Toshio Kawahara, Takuya Takahashi, Hiroyuki Tanaka and Tomoji Kawai: Applied Surface Science, 252 (2006) 5495-5498.

Links Single molecular observation of penta- and hexagonic assembly of bisporphyrin on a gold surface, Satake A, Tanaka H, Hajjaj F, Kawai T, Kobuke Y: Chem Commun (Camb) 24 (2006) 2542-4.

Construction of segregated arrays of multiple donor and acceptor units using a dendritic scaffold: remarkable dendrimer effects on photoinduced charge separation, Li WS, Kim KS, Jiang DL, Tanaka H, Kawai T, Kwon JH, Kim D, Aida T: J Am Chem Soc. 128(32) (2006) 10527-32.

Structural and Magnetic Properties of $Nd_{0.7}Ce_{0.3}MnO_3$ Thin Films, Yanagida, T., T.Kanki, B.Vilquin, H.Tanaka and T.Kawai, J. Appl. Phys., 99 (2006) 053908

Investigation on Ce-doped $LnMnO_3$ (Ln=La, Nd) Thin Films Fabricated by Laser MBE Method, Yanagida, T., T.Kanki, B.Vilquin, H.Tanaka and T.Kawai, Vacuum, 80 (2006) 780-782

Magnetism, Microstructure and Photoelectron Spectroscopy of $Nd_{0.7}Ce_{0.3}MnO_3$ Thin Films, Yanagida, T., H.Tanaka, T.Kawai, E.Ikenaga, M.Kobata, J.Kim and K.Kobayashi, Phys. Rev. B, 73 (2006) 132503

Influence of Ambient Atmosphere on Metal-Insulator Transition of Strained Vanadium Dioxides Ultra Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, J. Appl. Phys., 100 (2006) 063714

Stress Relaxation Effects on Transport Properties of Strained Vanadium Dioxides Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Phys. Rev. B, 74 (2006) 172106

Interface Effect on Metal-Insulator Transition of Strained Vanadium Dioxides Ultra Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, J. Appl. Phys., 101 (2007) 026103

Thickness Dependence of Structure and Magnetization of BiFeO3 Films on $(LaAlO_3)_{0.3}(Sr_2AlTaO_6)_{0.7}$ (001) Substrate, Rana, D.S., K.Takahashi, K.R.Mavani, I.Kawayama, H.Murakami, M.Tonouchi, T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Phys. Rev. B, 75 (2007) 060405

Electronic structure of strained $(La_{0.85}Ba_{0.15})MnO_3$ thin films with room-temperature ferromagnetism investigated by hard x-ray photoemission spectroscopy, Hide. Tanaka, Y. Takata, K.

Horiba, M. Taguchi, A. Chainani, S. Shin, D. Miwa, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, E. Ikenaga, M. Awaji, A. Takeuchi, T. Kawai, K. Kobayashi, Phys. Rev. B, 73 (2006) 094403.

Ferromagnetism in Transparent Thin Films of Fe-Doped Indium Tin Oxide, T. Ohno, T. Kawahara, Hide. Tanaka, T. Kawai, M. Oku, K. Okada and S. Kohiki, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L957-L959.

Electronic structure and photoinduced effect of $LaMnO_3$ film , K. Murakami, T. Yamauchi, A. Nakamura, Y. Moritomo, Hide. Tanaka, and T. Kawai, Phys. Rev. B 73 (2006) 180403.

Fabrication of sub-50 nm $(La,Ba)MnO_3$ ferromagnetic nanochannels by atomic force microscopy lithography and their electrical properties, M. Hirooka, Y. Yanagisawa, T. Kanki, Hide. Tanaka, and T. Kawai, Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 163113.

$(Fe,Mn)_3O_4$ Nanochannels Fabricated by AFM Local-Oxidation Nanolithography using Mo/Poly(methyl methacrylate) Nanomasks, L. Pellegrino, Y. Yanagisawa, M. Ishikawa, T. Matsumoto, Hide. Tanaka, T. Kawai, Adv. Materials, 18 (2006) 3099-3104.

$Fe_{3-x}Zn_xO_4$ thin film as tunable high Curie temperature ferromagnetic semiconductor, J. Takaobushi, Hide. Tanaka, T. Kawai, S. Ueda, J-J Kim, M. Kobata, E. Ikenaga, M. Yabashi, K. Kobayashi, Y. Nishino, D. Miwa, K. Tamasaku, and T. Ishikawa, Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 242507.

Digitalized magnetoresistance observed in $(La,Pr,Ca)MnO_3$ nanochannel structures, Y. Yanagisawa, Hide. Tanaka, and T. Kawai, L. Pellegrino, Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 253121.

Electric control of room temperature ferromagnetism in a $Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3/La_{0.85}Ba_{0.15}MnO_3$ field-effect transistor, T. Kanki, Hide. Tanaka, T. Kawai, Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 242506.

Nano-scale patterning of $(La,Pr,Ca)MnO_3$ thin film using atomic force microscopy lithography and their electrical properties, Y. Yanagisawa, L. Pellegrino, Hide. Tanaka, T. Kawai, J. Appl. Phys., 100 (2006) 124316.

Characteristics of Electrochemical Transistors, M. Taniguchi, T. Kawai, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 444, (2006), 61-66.

Time-Resolved Electrical Conductance Spectroscopy of Chemical Reactions on Nano-Space,K. Yokota, M. Taniguchi, T. Kawai,Chem. Phys., 330, (2006), 184-189.

Effect of a-Cyclodextrin on Electronic Properties of Molecular Wires, M. Taniguchi, T. Kawai, Chem. Phys. Lett., 431, (2006), 127-131.

Self-Organized Interconnect Method for Molecular Devices, M. Taniguchi, Y. Nojima, K. Yokota, J. Terao, K. Sato, N. Kambe, T. Kawai, J. Am. Chem. Soc. ,128 , (2006) , 15062-15063 (Commun).

12.Photoconductive Coaxial Nanotubes of Molecularly Connected Electron Donor and Acceptor Layers, Y. Yamamoto, T. Fukushima, Y. Suna, N. Ishii, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, M. Taniguchi, T. Kawai, T. Aida, Science, 314, (2006), 1761-1764.

電子構造計測から探るＤＮＡ分子内の電荷移動機構, 加藤浩之、古川雅士、初井宇紀、谷口正輝、川合知二、小杉信博、川合真紀, 表面科学、27- 8 , (2006), 469-474.

DNA electronics (Review Article), M. Taniguchi, T. Kawai, Physica E, 33, (2006), 1-12.

Electronic states of the DNA polynucleotides poly(dG)poly(dC) in the presence of iodine, M. Furukawa, H. S. Kato, M. Taniguchi, K. Kawai, T. Hatsui, N. Kosugi, T. Yoshida, M. Aida, M. Kawai, Phys. Rev. B 75 (2007) 045119-0451267.

Synthesis of Dendritic Oligothiophenes and Their Self-Association Properties by Intermolecular - Interactions, N. Negishi, Y. Ie, M. Taniguchi, T. Kawai, H. Tada, T. Kaneda, Y Aso, Org. Lett. 9 (2007) 829-832.

Creation of nano-scale materials and devices by programmed self-organization, K.Ojima, K.Adachi, BK Lee, H.Y. Lee, M.Taniguchi, T.Matsumoto, T.Kawai, Japan Journal of Surface Science, 27(2006) 151-156.

Optical Rotation Inversion of Porphyrin-DNA Complexes, Ch. Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, T. Shitoh, K. Takeda, Tetrahedron Lett. 47, (2006), 519-522.

Single Molecular Morphology of Porphyrin / DNA Complex, Ch.Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, T. Saitoh, K. Takeda, Chem. Lett. 35, (2006), 88-89.

Giant Porphrin Wheels With Large Electronic Coupling as Models of Light Harvesting Photosynthetic Antenna,T. Hori, N. Aratani, A. Takagi, T. Matsumoto, T. Kawai, Min-Chul Yoon, Zin Seok Yoon, Sung Cho, Dongho Kim, A. Osuka, Chem. Eur. J. 12, (2006), 1319-1327.

Atomic Force Microscopic Observation of Escherichia Coil Ribosomes in Solution, T. Matsuura, Hiro. Tanaka, T. Matsumoto, T. Kawai, Biosci. Biotechnol. Biochem., 70, (2006), 300-302.

A Directly Fused Tetrameric Porphyrin Sheet and Its Unique Electronic Properties That Arise from The Planar Ycllooctatetraene Core., Y. Nakamura, N. Aratani, H. Shinokubo, A. Takagi, T. Kawai, T. Matsumoto, Zin Seok Yoon, Deok Yun Kim, Tae Kyu Ahn, Dongho Kim, A. Muranaka, N. Kobayashi, A. Osuka, J. Am. Chem. Soc., 128, (2006), 4119-4127.

[解説、総説]

「酸化物ナノスピントロニクス」田中　秀和、川合　知二:『固体物性』, 8 Vol.41, No.486,（2006）35-45.

「プログラム自己組織化によるナノ材料・ナノデバイスの創成」小嶋薫、安立京一、李奉局、李恵りょん、谷口正輝、松本卓也、川合知二：表面科学, 27, (2006) 151-156.

[著書]

「第 4 節 薄膜成長」田中　秀和、(分担執筆):「生産現場・開発現場において役立つ薄膜作製技術」, リ

アライズ理工センター/リアライズ AT （2006）42-51

[特許]

「 ナノウェルアレイ電極を用いた電気的アミロイドセンサーの開発」 B.K.Lee, H.Y.Lee、川合 知二：特願 2006-206822, 2006 年 7 月 28 日出願.

「DIRECT IMMOBILIZATION METHOD OF CARBOHYDRATES ON SURFACE OF SOLID SUBSTRATE」H.J.Choa, J.H.Seo, B.K.Lee、安立 京一、H.Y.Lee, 川合 知二：
特願 2006-0105908（韓国）, 2006 年 11 月 20 日出願.

「糖類の広範囲な利用のための糖類の直接的な表面固定化方法の開発」B.K.Lee、安立 京一、H.Y.Lee、松浦 俊彦, H.J.Choa, J.H.Seo, 川合 知二：特願 2006-288952, 2006 年 11 月 29 日出願.

「パターニング方法、積層体、並びにアレイ基板および電子デバイス」鈴木直毅、田中秀和、川合知二：特願 2006-228382（平成 18 年 8 月 24 日）

[国際会議]

SPM Characterization and Nano-processes on the Surface of Bio-inspired Materials and Devices, T.Kawai: 8th International Conference on Advanced Surface Engineering (8th ICASE), Tokyo, Japan, April 25-26, 2006.

DNA Nanowires; Molecular Imaging, Transport Properties and Device Applicaion, T.Kawai（基調講演）: The Seventh International Symposium on Functional π-Electron Systems, Osaka, Japan, May 15-20, 2006.

DNA Based Nano-bioelectronics, T.Kawai: Winnipeg Symposium on Charge Migration in DNA, Winnipeg, Manitoba, Canada, June 6-9, 2006

Programmed Self-organization for Creation of Bio-inspired Nano-Devices（プログラム自己組織化による生体情報材料の創成）, T.Kawai: 名古屋大学エコトピア科学研究所設立記念国際シンポジウム, Nagoya, Aichi, June 13, 2006.

Advanded Bio Devices, T.Kawai: Workshop on Nanoscience and Nanotechnology between Sanken and CNRS Towards Creating New Industrius Based on Inter-Nanoscience, Orsay, France, July 17, 2006.

High Resolution STM Imaging of DNA and Related Bio-molecules; Recent Developments, T.Kawai: International Coference on Nanoscience and Technology, Basel, Switzerland, July 30 - August 4, 2006.

DNA Nanotechnology in Kawai Laboratory, T.Kawai: ナノエレクトロニクスと DNA ダイナミクス国際ワークショップ, Hawaii, U.S.A., August 20-22, 2006.

Phase Transition Control in Strained Vanadium Dioxides Thin Films, T.Kawai: XIII International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11, 2006.

Present Status of future Prospect of Nano-technology, T.Kawai: 第 24 回国際化粧品技術者会連盟大阪大会 24th International Federation of Societies of Cosmetic Chemists Congress, T.Kawai: Osaka, Japan, October 17, 2006.

DNA Nanowires; Molecular Imaging, Transport Properties and Device Application, T.Kawai（基調講演）: 2006 Joint International Meeting, ECS 210th Meeting, Cancun, Mexico, October 29 － November 3, 2006.

DNA Nanotechnology: Molecular Imaging, Self-Organization And Device Application, T.Kawai（基調講演）: The 2006 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology, Busan, Korea, November 1-4, 2006.

次世代の産業技術創出を担うマイクロ・ナノものづくり拠点の構築を目指して（パネルディスカッション，T.Kawai: 仙台国際フォーラム 2006「マイクロ・ナノ異分野システム融合国際フォーラム」「第２回フラウンホーファーシンポジウム in SENDAI」, Sendai, Iwate, November 6, 2006.

Programmed self-organization of nano-materials and nano-devices based on cluster science, T.Kawai: GRI Symposium I on Cluster Science, Nagoya, Aichi, November 7-9, 2006.

DNA NANOTECHNOLOGY: Molecular Imaging, Self-Organization and NanoBioDevices, T.Kawai: PNU Symposium on Material Chemistry 2006, Busan, Korea, November 17-18, 2006.

Spintronics sensor application using nanotechnology, T.Kawai（基調講演）: 1st IWOFM-3rd IWONN CONFERENCE, Ha Long city, Viet Nam, December 6-9, 2006.

DNA Nanotechnology, T.Kawai: Commemorative Workshop of Opening SANKEN USA Branch in San Francisco, San Francisco, U.S.A., December 15-16, 2006.

DNA Nano-Science, T.Kawai: The First JUNBA (Japanese University Network in the Bay Area) Symposium, San Francisco, U.S.A., January 12, 2007.

Current Status and Direction of Nanotechnology in Japan, T.Kawai: The 1st Meeting of NANOTEC International Advisory Board, Bangkok, Thailand, January 14-16, 2007.

High resolution imaging, manipulation and device formation using DNA and protein molecules on surfaces, T.Kawai: Gordon Research Conference, Ventura, CA, U.S.A., February 11-16, 2007.

Architecture Electronic-BioSensor Integrated with Nanofabrication (Invited), *H.Y.Lee and T. Kawai: National Center for Nanomaterials Technology(NCNT), POSTEC Consortum, 2006 年 2 月 3 日、Pohang, Korea, Februray3, 2006..

Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Integrtaed Digital Nanobiosensore. (Invited), *H.Y.Lee and T. Kawai: Center of Scientific Orsay, Paris University, Paris, France, June 26, 2006.

An Integrated Digital Nanobiosensor with Functional Vesicle onto a Surface and inside Microfluidic Channels using Oriented NanoWell Array (Invited): *H.Y.Lee and T. Kawai: The 6th International Symposium on Advanced Environmental Monitoring, Heidelberhg, Germany, June 29,2006.

Soft Nanolithographic Patterning based Electronic Biosensor (Invited), *H.Y.Lee and T. Kawai: The 2nd Nanoelectronics and Dynamics of DNA, Maui USA, October21, 2006..

Electrochemical Detection of Amyloid b-Protein by Amyloid Fibril Elongation, Bong-Kuk Lee, Hea-Yeon Lee, Tomoji Kawai: The 3rd International Workshop on Biochips and Environmental Monitoring, Osaka, Japan, August 17, 2006

High Selective Protein Nanoarray Integrated with Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Digital Nanobiosensors, HeaYeon Lee, BongKuk Lee and Tomoji Kawai: The 3rd International Workshop on Biochips and Environmental Monitoring, Osaka, Japan, August 17, 2006

Interaction of Pore Forming Protein Streptolysin O (SLO) with Supported Lipid Bilayers : Nanoscale pore formation and Enhanced electric signal, Kota Sreenivasa Rao, Bong-Kuk Lee, Hea-Yeon Lee, Tomoji Kawai The 3rd International Workshop on Biochips and Environmental Monitoring, Osaka, Japan, August 17, 2006

Self-Organized Nanopatterning of Poly-Vinyl Alcohol Hydrogel using Capillary Lithography, Bong-Kuk Lee, Hea-Yeon Lee, Tomoji Kawai: Sanken International Symposium 2006, Osaka, Japan, September19, 2006.

Electrochemical biochip using Well-Oriented NanoWell Array Metrics, HeaYeon Lee, BongKuk Lee, Pilnam Kim, Kahp Y. Suh, and Tomoji Kawai: Sanken International Symposium 2006, Osaka, Japan, September19, 2006.

Nanopatterning of Poly Ethylene Glycol-Self Assembled Monolayer by Combining Nanoimprint Lithography and Lift-Off Method, Bong-Kuk Lee, Hea-Yeon Lee, Tomoji Kawai: MRS2006-Fall meeting, Boston, USA, November 30, 2006.

Soft Lithographic Patterning of Functional Lipid Vesicles and inside microfluidic channels using Well-Oriented NanoWell Array Metrics for Integrated Digital Nanobiosensors, HeaYeon Lee, BonkKuk Lee, Pilnam Kim, Kahp Y. Suh, and Tomoji Kawai: MRS2006-Fall meeting, Boston, USA, November 30, 2006.

Fabrication of Nanometrics for High Selective Biosensor, HeaYeon Lee, BongKuk Lee, Kota Sreenivasa Rao and Tomoji Kawai: 21C COE International Symposium, Awajisima, Japan, December8,2006.

AFM observation shows gene-dependent translational process, *E. Mikamo, C. Takamori, H. Tanaka, T. Wada and T. Kawai, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto Japan, June 18-23, 2006.

Single-molecular spectroscopy of Guanine molecule using STM/STS, Norihiro Kubo, *Hiroyuki Tanaka and Tomoji Kawai, The International Conference on Nanoscience and Technology, Basel, Switzerland, June.30-Aug.4, 2006.

High Resolution STM Imaging and Spectroscopy of Supramolecules, *H. Tanaka and T. Kawai, The International Conference on Nanoscience and Technology, Basel, Switzerland, June.30-Aug.4, 2006.

High Resolution STM/STS of DNA, Hiro. Tanaka, T. Kawai: 2006 Osaka Univ./LANL International Workshop on "The 2nd Nanoelectronics and Dynamics of DNA", Maui, Hawaii, August 20-22, 2006.

Surface Potential Measurement of DNA, Protein, Lipid Membrane at Real Space Imaging, *E. Mikamo, F. Yamada, T. Matsumoto and T. Kawai, EABS & BSJ 2006 Fifth East Asian Biophysics Symposium and Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa Convention Center, Okinawa Japan, November 12-16, 2006.

Single-molecular Spectroscopy of Purine Base Molecule using STM/STS, *Norihiro Kubo, A. Nagoya, Y. Morikawa, H. Tanaka and T. Kawai, International Symposium on Theories of Organic-Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Japan, Jan 15-17, 2007.

High Resolution STM Imaging and Spectroscopy of Supramolecules, *Hiroyuki Tanaka and T. Kawai,

International Symposium on Theories of Organic-Metal Interfaces 2007 (ISTOMI'07), Osaka Japan, Jan 15-17, 2007.

Structural, Magnetic Properties and Photoelectron Spectroscopy of (Nd,Ce)MnO_3 Thin Films, Yanagida, T., H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, February 8-9 (2006)

Investigation on Ferromagnetism of (La,Ce)MnO_3 Thin Films, Yanagida, T., H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, February 8-9 (2006)

Influence of Ambient Atmosphere on Transport Properties and Phase Transition of Strained Vanadium Dioxides Ultra Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, February 8-9 (2006)

Functional Nano Oxides, Yanagida, T., H.Tanaka and T.Kawai, Workshop on Nanoscience and Nanotechnology between Sanken and CNRS, Paris, France, July 21 (2006) (Invited Talk)

Synthesis of Ultra Small MgO Nanowires, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, 13th International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11 (2006)

Can Ce-doped Manganites be Electron-doped Ferromagnet?, Yanagida, T., H.Tanaka, T.Kawai, Y.Saitoh, Y.Takeda and A.Fujimori, 13th International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11 (2006)

Phase Transition Control in Strained Vanadium Dioxides Thin Films, Kawai, T., K.Nagashima, T.Yanagida and H.Tanaka, 13th International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy (Invited Talk), October 8-11(2006)

Fabrication of Small MgO Nanowires by Pulsed Laser Deposition, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, Material Research Society Fall Meeting, Boston, USA, November 27-December 1 (2006)

Origin of Ferromagnetism in Ce-doped Manganites, Yanagida, T., H.Tanaka, T.Kawai, Y.Saitoh, Y.Takeda and A.Fujimori, Material Research Society Fall Meeting, Boston, USA, November 27-December 1 (2006)

Modulation of Metal-Insulator Transition in Strained Vanadium Dioxides Thin Films, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, Material Research Society Fall Meeting, Boston, USA, November 27-December 1 (2006)

Room Temperature Control of Phase Transition in Strained Vanadium Dioxide Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20 (2006)

Thickness Dependence of Stress Relaxation Effect on Transport Properties of Strained Vanadium Dioxide Epitaxial Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20 (2006)

Synthesis of Ultra Small MgO Nanowires by Laser MBE, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Sanken International Symposium on Scientific and Industrial Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20 (2006)

Strain Effects on Metal-Insulator Transition of VO_2 Thin Films, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, Kyoto Conference on Solid State Chemistry -Transition Metal Oxides: Past, Present and Future-, Kyoto,

Japan, November 14-18 (2006)

MgO Nanowires by Pulsed Laser Deposition, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, Kyoto Conference on Solid State Chemistry -Transition Metal Oxides: Past, Present and Future-, Kyoto, Japan, November 14-18 (2006)

Precise Modulation of Metal-Insulator Transition of Strained VO_2 Thin Films, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9 (2006)

Magnesium Oxide Nanowire Growth by Pulsed Laser Deposition, Yanagida, T., K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9 (2006)

Transport Properties of $ZnFe_2O_{4-d}$, Marcu, A., T.Yanagida, K.Nagashima, H.Tanaka and T.Kawai, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9 (2006)

Arbitrary Control of Magnesium Oxide Nanowire Growth and the Underlying Mechanism, Nagashima, K., T.Yanagida, H.Tanaka and T.Kawai, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, January 25-26 (2007)

Functional Nano Oxides, Yanagida, T., H.Tanaka and T.Kawai, Workshop on Nanoscience and Nanotechnology between Sanken and CNRS, Paris, France, February 19 (2007) (Invited Talk)

Highly Conductive $(Fe,Mn)_3O_4$ Thin Films with Spin Polarization at Room Temperature and Their Application to Nano Spintronic Devices by AFM Lithography(Invited), *Hide. Tanaka, T. Kawai, 2006 MRS (Materials Research Society) Spring Meeting, San Francisco, USA, April 17-22, 2006

Oxide Nano-Spintronics (Invited), *Hide. Tanaka, T. Kawai, Commemorative Workshop of Opening SANKEN USA Branch in San Francisco, San Francisco, USA, December 15-16, 2006

Electronic structures of electron doped ferromagnetic oxides, -Perovskite manganite and spinel ferrite-(Invited), *Hide. Tanaka, T. Kawai, The 2nd Indo-Japan Seminar "Novel Magnetic Materials and their Electronic Structures", Tokyo, Japan, February 27-March 1, 2007

Room-Temperature Spin-Polarized $(Fe,Mn)_3O_4$ Thin Films Grown on Nb:SrTiO3 Substrates by Pulsed-Laser Deposition Method, I. Satoh, Hide. Tanaka, and T. Kawai, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006

Electrical and magnetic properties of $(La,Pr,Ca)MnO_3$ manganite nano-channel fabricated by AFM lithography technique, Y. Yanagisawa, L. Pellegrino, Hide. Tanaka, M. Hirooka, T. Kawai, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006

Electronic Structure of Ferromagnetic Perovskite Manganite Thin Films Investigated by Hard X-ray Photoemission Spectroscopy, Hide. Tanaka, T. Yanagida, M. Ohnishi, T. Kawai, Y. Takata, K. Horiba, M. Taguchi, S. Shin, D. Miwa, K. Tamasaku, Y. Nishino, T. Ishikawa, E. Ikenaga, M. Kobata, J-J. Kim, S. Ueda, M. Awaji, A. Takeuchi, K. Kobayashi, The 2nd International Workshop on Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy, Hyogo, Japan, September 19- 20, 2006

Electronic Structure of $Fe_{3-x}M_xO_4$ (M=Zn, Mn) Spinel Oxide thin films as Tunable Ferromagnetic Semiconductor Investigated by Hard X-ray Photoemission Spectroscopy, J. Takaobushi, M. Ishikawa, I. Satoh, T. Yanagida, Hide. Tanaka, T. Kawai, S. Ueda, J-J. Kim, M. Kobata, E. Ikenaga, K. kobayashi, Y. Takeda, Y. Saitoh, The 2nd International Workshop on Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy, Hyogo, Japan, September 19- 20, 2006

Heterostructured Oxide Spin Devices using Tuneable Ferromagnetic Semiconductor of High TC Spinel Fe3-xMnxO4 Films, Hide. Tanaka, I. Satoh, M. Ishikawa, Y. Yanagisawa, L. Pellegrino, and T. Kawai, XIII International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11, 2006

Room-Temperature Spin-Polarized $(Fe,Mn)_3O_4$ Thin Films and Their Spin Polarization Properties Studied by $(Fe,Mn)_3O_4/Nb:SrTiO_3$ Schottky Contacts, I. Satoh, Hide. Tanaka, and T. Kawai, XIII International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11, 2006

Electrical and magnetic properties of perovskite manganite nano-channel fabricated by AFM lithography technique, Y. Yanagisawa, L. Pellegrino, M. Hirooka, Hide. Tanaka, and T. Kawai, XIII International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, October 8-11, 2006

Preparation of Transition Metal Oxides Nano-Array by Imprint Technique using MgO Nano-Mask, Hide. Tanaka, N. Suzuki, Y. Yanagisawa, S.Yamanaka, K. Ojima, B.K. Lee, J.H. Seo, H.Y. Lee , M. Kanai, T. Kawai, 2006 MRS (Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, USA, November 27 - December 1, 2006

Heterostructured Oxide Spin Devices using Tunable Ferromagnetic Semiconductor of High TC Spinel $Fe_{3-x}Mn_xO_4$ Films, T. Kawai, Hide. Tanaka, I. Satoh, M. Ishikawa, Y. Yanagisawa, L. Pellegrino, 2006 MRS (Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, USA, November 27 - December 1, 2006

Nano-patterning of epitaxial oxide films by molybdenum lift-off, N. Suzuki, Hide. Tanaka, S. Yamanaka, B. K. Lee, H. Y. Lee and T. Kawai, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Tunable Current-Voltage Characteristics of $(Fe,Mn)_3O_4/Nb:SrTiO_3$ Schottky Barrier Diode, I. Satoh, J. Takaobushi, Hide. Tanaka, and T. Kawai, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy of Heterojunction Interface Based on Halfmetal Oxide、I. Satoh, M. Ohnishi, Hide. Tanaka, and T. Kawai, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Design of Ferromagnetic Oxide Field Effect Transistor, J. Takaobushi, Hide. Tanaka, and T. Kawai, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Electronic Structure of $Fe_{3-x}M_xO_4$ (M=Zn, Mn) Spinel Oxide thin films as Tunable Ferromagnetic Semiconductor Investigated by Hard X-ray Photoemission Spectroscopy, J. Takaobushi, M. Ishikawa, I. Satoh, T. Yanagida, H. Tanaka, T. Kawai, S. Ueda, J.-J. Kim, M. Kobata, E. Ikenaga, K. Kobayashi, Y. Takeda, Y. Saitoh, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Functional Oxides in Nano-scale, Hide. Tanaka, and T. Kawai, 5th 21st COE International symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Nano-patterning of epitaxial oxide films by molybdenum lift-off, N. Suzuki, Hide. Tanaka, S. Yamanaka, B. K. Lee, H. Y. Lee and T. Kawai, nano tech 2007 ,Tokyo, Japan, February 21-23, 2007

$Fe_{3-x}M_xO_4$ (M=Zn, Mn) Spinel Oxide Thin Films as Ferromagnetic Semiconductor with Strongly Correlated Electron System, J. Takaobushi, M. Ishikawa, I. Satoh, Hide. Tanaka, T. Kawai, S. Ueda, K. Kobayashi, J.-J. Kim, M. Kobata, E. Ikenaga, Y. Nishino, D. Miwa, K. Tamasaku, M. Yabashi, T. Ishikawa, The 2nd Indo-Japan Seminar, "Novel Magnetic Materials and their Electronic Structures", Tokyo, Japan, February 27-March 1, 2007

Influence of Sequences and Salts on Electrical Conductivity, M. Taniguchi, T. Kawai, CREST workshop on Physics of single molecules; Transport properties of songle molecules, atomic wires and DNA,May 16-18, (2006), Shonan, Japan

Influence of Sequences and Salts on Electrical Conductivity, M. Taniguchi, T. Kawai, 2006 Osaka Univ. / LANL International Workshop on “The Nanoelectronics and Dynamics of DNA”, August 21-22, (2006), Hawaii, U.S.A.

[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)
川合　知二	Surface Science (編集委員)
川合　知二	The 2006 Asian Conference on Nanoscience and Nanotechnology（2006 年 11 月開催）
川合　知二	9th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, (Organizing Committee)
川合　知二	Interfaces and Nanostructures (ACSIN9 2007 年 11 月開催) (国際アドバイザリーコミッティーメンバー)
川合　知二	International Advisory Board of NANOTEC（2007 年 1 月開催）
田中　秀和	応用物理学会 8･1「磁性材料･デバイス分野」プログラム編集員(世話人)
田中　秀和	応用物理学会 合同セッション E「スピンエレクトニクス･ナノマグネティクス」プログラム編集員(世話人)
田中　裕行	The 2nd Nanoelectronics and Dynamics of DNA, Maui, Hawaii, August 20-22, 2006. Organizing member

[国内学会]

応用物理学会	25 件
日本分子生物学会	2 件
日本化学会	1 件
その他	7 件

[取得学位]

修士（理学）

横田　一道	単分子エレクトロニクスに向けた電子物性に関する研究 Studies on electronic physical properties for single molecular electronics

修士（基礎工学）

久保　典弘	走査トンネル顕微鏡・走査トンネル分光による Cu(111)表面上に吸着した DNA の電子状態の研究 Single-molecular spectroscopy of Guanine molecule using STM/STS

博士（理学）

柳澤　吉彦	強相関遷移金属酸化物におけるナノ領域の物性探索 Fabrication of transition metal oxide nano-structure using AFM lithography and its electrical property

[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

21 世紀 COE プログラム		
川合　知二	新産業創成指向インターナノサイエンス	255,000
基盤研究 （A）		
川合　知二	DNA ナノ構造体の創成と物性の研究	15,600
基盤研究（B）		
田中　秀和	強相関電子酸化物ナノ構造による室温スピントロニクスデバイスの創成	4,000
特定領域研究「分子スピン（ナノ磁石から生体スピン系まで)」		
田中　秀和	DNA プログラム自己組織化を用いたナノ粒子光磁気材料の創製	7,700
萌芽研究		
田中　秀和	ナノ粒子溶液輸送法による 3 次元エピタキシー技術の開発	2,200
若手研究（B）		
柳田　剛	構造制御された遷移金属酸化物ナノワイヤの創成と物性評価	2,100
特別研究員奨励費		
Marcu Aurelian	パルスレーザデポジション法による酸化物薄膜成長機構解明と機能性材料創成への展開	1,200
筒井　真楠	機械的破断接合法による単一有機分子の光スイッチング特性評価に関する研究	1,200
佐藤　一成	強相関系酸化物ナノ構造による室温動作スピントロニクスデバイスの創製	1,100
大西　正敏	強相関電子系酸化物強磁性体を用いた室温動作トランジスタの作製	900(受領後全額返金)
山田　郁彦	プログラム自己組織化を用いたナノ磁性体配列形成と新規磁気特性の探索	900

[受託研究]

川合　知二	ＮＥＤＯ バイオ診断ツール実用化開発プロジェクト	[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	直接経費 9,545
田中　秀和	先端計測分析技術・機器開発事業	[(独)科学技術振興機構]3 次元化学状態解析硬 X 線光電子分光装置の開発	受入額：8,010

[その他の競争的研究資金]

田中　秀和	(財)加藤科学振興会	スピネルフェライト薄膜の強磁性半導体化と電界制御型磁気メモリ素子への対用	2,000
田中　秀和	独）科学技術振興機構	[平成 18 年度シーズ発掘試験]新強	2,000

柳田　剛	平成18年度リーダーシップ支援経費	相関電子酸化物の探索と高効率電界制御型磁気メモリ素子への応用 機能性低次元ナノ構造作製システム	1,500
柳田　剛	21COE 若手分野間共同研究（A）	規則配列ナノポーラス材料の新規創成と機械的・電気輸送特性	2,000

セラミック機能材料研究分野

教授	小林　光
助教授	髙橋　昌男
助手	延谷　宏治、松本　健俊
客員教授	岩佐　仁雄、寺川　澄雄
研究支援推進員	正司　雅美
研究員	アスハ（長山）、劉　玥伶、山田　幹浩
大学院学生	石川　幸男、任　星淳、マダニ・モハマド
	成田　比呂晃、今村　健太郎、浦郷　将英、宍戸　豪
学部学生	柳瀬　隆
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の低温創製と TFT 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 SiO_2 膜を堆積する方法で製造されている。CVD 法で SiO_2 膜を堆積する理由は、硝子基板を用いるために良質の SiO_2 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 SiO_2 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 SiO_2 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 SiO_2 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 SiO_2 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 SiO_2 厚膜が形成できる。二段階硝酸酸化法で創製した SiO_2/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 SiO_2 膜が形成できた。硝酸酸化法で形成した SiO_2 膜は良質であることから、SiO_2 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 SiO_2 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、$32\times40cm^2$ のサイズの TFT 基板用の硝酸酸化装置を完成させ、これを用いて、多結晶シリコン薄膜の酸化を行った。SiO_2 膜厚は　12.5±0.5nm であり、膜厚分布は±7％と良好であった。X 線光電子ス

ペクトル（XPS）では、SiO_2膜によるピーク位置から、良好な特性を持つSiO_2膜が形成されたことが示された。また、32×40cm^2サイズの基板上にプラズマ CVD 法で形成されたSiO_2膜を共沸硝酸改質法を用いて改質し、その後 TFT 試作も行った。その結果、膜の剥離が起こらず、TFT 試作に成功した。さらに、新たに気相硝酸酸化法による Si-MOS 構造の低温創成も行った。従来の乾燥酸化や加湿酸化では、400°C の低温ではシリコンはあまり酸化されずSiO_2膜厚は最大 2.5nm である一方、気相硝酸酸化では酸化が進行して、4nm 以上の膜厚を持つSiO_2膜が形成できることがわかった。SiO_2よりも低いリーク電流や不純物の拡散を抑制することのできる高性能の絶縁材料としてシリコン窒化膜（SiON）やHfO_2膜の形成を試み、その特性の評価も行った。SiON は、通常 1000°C での化学反応を必要とするが、Si 表面を HCN 水溶液中で電気化学酸化することにより室温形成でき、膜質も良好であることが分かった。また、HfO_2を Si 上に形成させると、界面での Si-Hf 化合物の生成や界面準位の状態密度の増加に伴い、電気特性の低下を招くが、Si 上に SiN 層をあらかじめ形成させることにより、これらを抑制できることも証明した。

・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らずに、10^9 原子/cm^2 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。

そこで、SiO_2やシリコン上の種々の金属汚染物が新洗浄法によって除去できることを証明すると共に、銅汚染の除去のメカニズムを解明した。また、半導体中の欠陥準位の消滅の効果を、XPS による界面準位の測定や、実際に太陽電池に新規欠陥消滅処理を施した時の性能の改善により実証した。さらに、6 インチ及び 8 インチ用欠陥消滅型半導体洗浄装置を、32×40cm^2サイズの TFT 基板の欠陥消滅処理も可能となるよう改造した。

[原著論文]

Mechanism of Ni removal from Si materials using hydrogen cyanide aqueous solutions, Y.-L. Liu, M. Takahashi, H. Kobayashi, J. Electrochem. Soc. 154[1] (2006) H16-H19.

Low temperature formation of SiO_2/Si structure by nitric acid vapor, K. Imamura, O. Maida, K. Hattori, M. Takahashi and H. Kobayashi, J. Appl. Phys. 100 (2006) 114910−1-114910−4.

Interface states for HfO_2/Si structure observed by XPS measurements under bias, O. Maida, K. Fukayama, M. Takahashi, H. Kobayashi, Y.-B. Kim, H.-C. Kim and D.-K. Choi, Appl. Phys. Lett. 89[18] (2006) 122112−1-122112−3.

Room temperature formation of silicon oxynitride/silicon structure by use of electrochemical method, S.-S. Im, M. Takahashi and H. Kobayashi, J. Appl. Phys. 100 (2006) 044101−1-044101−5.

Formation of 10~30 nm SiO_2/Si structure with a uniform thickness at ~120 °C by nitric acid oxidation method, Asuha, S.-S. Im, M. Tanaka, S. Imai, M. Takahashi, H. Kobayashi, Surf. Sci. 600 (2006) 2523-2527.

Mechanism of copper removal from SiO_2 surfaces by hydrogen cyanide aqueous solutions, N. Fujiwara, Y.-L. Liu, M. Takahashi and H. Kobayashi, J. Electrochem. Soc. 153 [5] (2006)

G394-G398.

Reaction of cyanide ions with copper on Si surfaces and its use for Si cleaning, Y.-L. Liu, N. Fujiwara, H. Iwasa, M. Takahashi, S. Imai and H. Kobayashi, Surf. Sci. 600 (2006) 1165-1169.

Nitric acid oxidation of Si method for the formation of high quality Si/SiO_2 structure at ~120 °C, H. Kobayashi, Asuha, S.-S. Im, S. Imai and M. Takahashi, Algerian J. Adv. Mater. 3 (2006) 104-108.

Si Cleaning Method Having Defect Passivation Effect by Use of HCN Aqueous Solutions, M. Takahashi, Y.-L. Liu, H. Narita and H. Kobayashi, Algerian J. Adv. Mater. 3 (2006) 131-134.

Methods of observation and elimination of semiconductor defect states, H. Kobayashi, Y.-L. Liu, A. Asano, Y. Yamashita, J. Ivánčo and M. Takahashi, Solar Energy 80 (2006) 645-652.

A method of observation of low density interface states by means of X-ray photoelectron spectroscopy under bias and passivation by cyanide ions, H. Kobayashi, T. Sakurai, Y. Yamashita, T. Kubota, O. Maida and M. Takahashi, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 7700-7712.

Passivation of Si and a-Si:H surfaces by thin oxide and oxy-nitride layers, E. Pinčík, H. Kobayashi, J. Rusnák, M. Takahashi, R. Brunner, M. Jergel, A. Morales-Acevedo, L. Ortega and J. Kákoš, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 7713-7721.

On a presence of Si_mH_n clusters in a-Si:H/c-Si structures, M. Kopani, E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, N. Fujiwara, R. Brunner, M. Jergel and L. Ortega, Appl. Surf. Sci. 252 (2006) 7722-7725.

Formation of atomically smooth SiO_2/SiC interfaces at ~120 °C by use of nitric acid oxidation method, S. Imai, M. Fujimoto, Asuha, M. Takahashi, and H. Kobayashi, Surf. Sci. 600 (2006) 547-550.

Silicon cleaning and defect passivation effects of hydrogen cyanide aqueous solutions, M. Takahashi, Y.-L. Liu, N. Fujiwara, H. Iwasa, and H. Kobayashi, Solid State Commun. 137 (2006) 263-267.

[特許]

「絶縁膜形成方法、絶縁膜形成装置、半導体装置の製造方法、および半導体装置並びにシリコンカーバイドの基板の表面処理方法」小林　光、特願 2006-218012

「光半導体装置およびその製造方法」小林　光、清水　裕一、特願 2006-239646

「酸化膜の形成方法並びにその酸化膜を備えた半導体装置およびその製造方法」、発明者：小林　光、PCT/JP2006/314232（特願 2005-208133 の PCT 出願）

[国際会議]

New defect passivation method for solar cells, H. Kobayashi, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design, Kitakushu, Japan, Jan. 11-14, 2007.

Si defect passivation and cleaning method by use of new chemistry (Invited), M. Takahashi, International Congress on Materials Science and Engineering 2006 (CISGM4), Algeria, May. 2-4, 2006.

Two-step nitric acid oxidation of Si and SiC (NAOS) method for the formation of SiO_2/Si and SiO_2/SiC structures at 120 ºC (Invited), H. Kobayashi, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Semiconductor surface cleaning and passivation by the chemical treatment in solutions of hydrogen cyanide (Invited), *M. Takahashi, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Improvement of Si solar cell characteristics by new defect passivation method, H. Kobayashi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Low temperature fabrication of 3C-SiC/SiO_2 MOS structures by nitric acid oxidation, *M. Takahashi, S.-S. Im, Asuha, H. Kobayashi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Improved Cleaning Method of SiC Using HCN Aqueous Solutions and 100 % H_2 Treatment, *M. Madani, Y.-L. Liu, S.-S. Im, M. Takahashi, H. Kobayashi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Low Temperature Oxidation of 4H-SiC by Use of Nitric Acid Oxidation Method, *Y. Ishikawa, Asuha, S. Imai*, M. Takahashi, H. Kobayashi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

[外国雑誌の編集委員]

小林　光　　Applied Surface Science　(編集委員長)

[国内学会]

日本物理学会	2 件
応用物理学会	6 件
表面エレクトロニクス研究会/吸着分子の分光学的研究セミナー	1 件
真空に関する連合講演会	1 件
粉体粉末冶金協会	1 件
表面科学会	1 件
IMAGINE セミナー	1 件
関西半導体解析技術研究会	1 件

[取得学位]

修士（理学）
成田　比呂晃　　シリコン上への銅吸着と HCN 水溶液を用いた除去過程

博士（理学）

任　星淳	Low Temperature Formation of Insulating Layers for Si and SiC-based Metal-Insulator-Semiconductor Structure

[受託研究]

単位：千円

小林　光	科学技術振興機構	欠陥消滅機能を持つ半導体洗浄液の実用化研究	38,480
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	74,100
髙橋　昌男	科学技術振興機構	シアン処理による多結晶 Si 中のキャリア再結合の低減	1,170

フロンティア材料創製研究分野

助教授	関野　徹
助手	楠瀬　尚史
博士研究員	金　成浩
大学院学生	趙　明濟、韓　淵圭、橋本　英樹、文　淑英、板野　真也、坂柳　伸彰、林　明日香、清水 孝子、叶 興平
研究生	朴　動鎭(平成 18 年 10 月 1 日～平成 19 年 3 月 31 日)
学部学生	土方 勇人
事務補佐員	末廣　理恵

a) 概要

今日の高度に発展した科学技術や社会は様々な材料により強力にサポートされており、これら材料技術は今後の持続的発展やエネルギー環境問題、高齢化社会など様々な社会的課題の解決に必須であることはいうまでもない。本研究分野では、これまでの材料創製コンセプトとは全く異なり、セラミックスの結晶粒内部や粒界をナノメータースケールで制御したナノコンポジット材料技術をコアテクノロジーとして、無機・セラミックス材料のみならず、金属や有機材料なども対象とし、その構造を原子・分子レベルからナノ・ミクロスケールまでの各階層で等方的あるいは異方的に制御したバルク型材料やナノマテリアルに関する研究開発を行っている。この様な構造制御により複数機能を高次に機能調和させることで、構造−機能相関を利用した優れたパフォーマンスを発現する材料、即ち高次機能調和型材料の創製を目的とした基礎研究を行うと共に、これら新規材料の応用・実用化研究を行い、上述のような様々な課題の解決に資することの出来る材料・システムの創出を遂行しています。

b) 成果

・多機能調和型酸化物系セラミックスナノ複合材料の開発

酸化物セラミックスは、一般に高温構造材料となりうる優れた特性を持つが、・高温での強度低下が比較的低温から生じる、・高温でのクリープ特性に劣っている,・難加工性である、などの問題を抱えている。そのため、ナノサイズの第2相を分散させたナノ複合化による構造・組織制御を反応焼結法、In-situ 析出複合化法などを用いて効率よく行うことで、優れた室温・高温特性および制御された界面構造に由来して発現する機械加工性を兼ね備えたナノ複合材料の作製に成功した。

・３次元ナノ連続相形成によるセラミックスの高次機能化

セラミックスの結晶粒界や複合化における分散構造をナノレベルで３次元的に形成させることで、バルクセラミックス内部にナノネットワークを構築し、これを電気伝導経路などへ用いることで優れた力学的特性と機能性が共生した高次機能化セラミックスの創製を行った。粒界構造制御では母相として窒化アルミニウムやジルコニア等を用い、結晶粒界のみに導電性化合物やガラス相を配置することでナノネットワーク構築が可能なことを見出した。一方、CNT をジルコニア等へ均一分散して焼結させるプロセスを開発し、低次元異方ナノ構造の連続相による３Ｄナノネットワークの構築に成功した。こうした材料では任意の電気伝導性と優れた強靭性を兼ね備えると共に、金属のような放電加工が可能なことを見出し、新たなセラミックス材料の応用可能性を広げる結果を得た。

・金属分散セラミックス基ナノ複合材料の創製研究

セラミックスに新たな機能を導入することで優れた力学的性質と機能性（電気、磁気など）を兼ね備えたナノコンポジットの創製を目的とし、マトリックスに第２相分散相として種々の金属或いは金属間化合物を添加したセラミックス／金属ナノ複合材料の作製プロセスの検討と微細構造・界面構造の観察

および機械的性質の解明を行った。これらナノサイズ金属の持つ特異な機能性を有効に利用して力学的性質と機能性を調和した材料の創成を行い、両者を共に改善した形で積極的に調和させた、或いは機能共生した新規なナノ複合材料を開発した。

・耐環境性ナノコンポジットコーティング材料・システムの創製

バルク系セラミックスナノコンポジットのナノ複合化コンセプトを耐熱・耐食といった耐環境コーティング材料へ適用し、新規なナノコンポジットコーティング材料の創製を行った。1200℃以上の高温で使用可能なナノコンポジットセラミックスコーティングシステムとしてジルコニア系複合材料を新規に開発し、その基礎物性を精査すると共に、金属へのサーマルスプレーコーティングとして適用可能なことを見出した。また、低温プロセスで優れた耐環境コーティングを創製するナノコンポジットコーティングの創製プロセスを開発し、作製したコーティングの力学機能などを解明した。

・ナノ構造制御による機能性セラミックスの高次機能調和化

ナノ複合化などの構造制御手法を機能性セラミックス（半導体、誘電体、圧電体、バリスタ、イオン導電体など）に応用することで、力学的に弱いこれら材料の高強度、高靭性化を行った。選択する第２相分散粒子の種類・サイズ・分散量・形態を最適化することで、機械的性質のみならずその機能性（誘電率、イオン導電率など）をも同時に改善可能なことを示している。特に、誘電体セラミックス／金属複合材料では比較的容易な手法でバルク複合体を製造でき、これまでにない高誘電率・低損失でかつ温度特性に非常に優れた材料の作製に成功した。また、酸化物半導体材料において高性能熱電変換材料としてのナノポア構造や結晶・粒界構造の最適化を行い、高温で優れた特性を示す材料の創製に成功し、その機能発現メカニズムについて解明した。

・金属的な変形機構を有する高靭性セラミックスナノ複合材料の創製

セラミックスは代表的な脆性変形（破壊）材料であるが、ナノ複合化手法を応用することで金属のような塑性的変形挙動を付与することが可能であるとの材料設計コンセプトを提示し、これに基づいて窒化ケイ素/窒化ホウ素､アルミナ／窒化ホウ素､アルミナ／モナザイトナノコンポジットの作製を行った。力学的性質の評価、組織・界面構造の観察、また微視的変形過程の詳細な検討の結果、これら材料では金属のような塑性変形的な挙動を示すのにも関わらず、ナノコンポジット特有の非常に高い強度や優れた高温特性を示すことを明らかにし、これらがナノレベルのソフトな第２相の微視的破壊、或いは擬塑性的な変形挙動に由来していることを見いだした。

・ナノ複合化技術による高機能有機/無機ナノハイブリッドコンポジットの開発

ポリマー／セラミックス系のナノ複合材料作製手法の検討を行い、その微細組織、物理的および力学的特性について詳細に検討した。作製プロセスと第２相粒子の分散状態の制御の結果、熱的な安定性や磨耗特性、破壊強度、靭性、硬度といった種々の機械的特性が顕著に改善でき、ナノセラミックス粒子分散の有効性が確認された。また、ナノ複合化技術をエラストマー／ナノセラミックス系へより積極的に導入し、感圧センシング機能を有するナノハイブリッドマテリアルの創製に成功し、その微細組織やナノ異方構造とセンシング機能や力学的特性との相関関係について調べることで実用化に関する検討を行った。

・新規なナノチューブ及びそのハイブリッドマテリアルの創製・構造と機能化

これまでにテンプレートなどを一切使わずに、直径数 nm のチューブ構造を持つ酸化チタン（チタニア；TiO_2）が自己組織化的に合成出来ることを初めて報告している。本材料では、基礎となる結晶構造として３次元的に強固なアナターゼ型を持つにもかかわらず、内径が 5ー8nm の空洞を持つ典型的なナノチューブであることを確認し、その構造や生成機構を詳細に解明した。また、本材料が極めて優れた光触媒能を持つことを見出した。加えて、原子レベル固溶制御により光学特性の制御や耐熱性、電気

物性を制御し、様々な機能を応用した展開が可能であることを見出した。一方、こうした酸化物ナノチューブやカーボンナノチューブ材料を用い、金属や有機物とのナノ複合化プロセスに関する研究を行い、特異な低次元ナノ複合構造−機能相関を活かした高次機能化のための基礎的指針を得た。

[原著論文]

Fabrication, Structure, Mechanical and Thermal Properties of Zirconia-based Ceramic Nanocomposites, A. Hirvonen, R. Nowak, Y. Yamamoto, T. Sekino and K. Niihara, J. Eur. Ceram. Soc., 26[8] (2006) 1497-505.

Hydrolyses of Calcium Phosphates-Allografts Composite in Physiological Solutions, T. Nomoto, K. Haraguchi, S. Yamaguchi, N. Sugano, H. Nakayama, T. Sekino and K. Niihara, J. Mater. Sci.-Mater. in Medicine, 17[4] (2006) 379-85.

Photoinduced Charge Separation in Titania Nanotubes, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Sekino and T. Majima, J. Phys. Chem., B110[29] (2006) 14055-9.

Synthesis of Gold/Magnetic Iron Oxide Composite Nanoparticles for Biomedical Applications with Good Dispersibility, S. Seino, T. Kusunose, T. Sekino, T. Kinoshita, T. Nakagawa, Y. Kakimi, Y. Kawabe, J. Iida, T.A. Yamamoto and Y. Mizukoshi, J. Appl. Phys., 99[8] (2006) 8H101-1-3.

Specific Heat and Thermal Conductivity of HoN and ErN at Cryogenic Temperatures, S. Nishio, T, Nakagawa, T. Arakawa, N. Tomioka, T.A. Yamamoto, T. Kusunose, K. Niihara, T. Numazawa, K. Kamiya, J. Appl. Phys., 99[8] (2006) 8K901-1-3.

Fabrication of Boron Nitride Dispersed Nanocomposites by Chemical Processing and Their Mechanical Properties, T. Kusunose, J. Ceram. Soc. Jpn., 114[1326] (2006) 167-73.

Magnetocaloric Effects of Ferromagnetic Erbium Mononitride, T. Nakagawa, T. Arakawa, K. Sako, N. Tomioka, T.A. Yamamoto, T. Kusunose, K. Niihara, K. Kamiya and T. Numazawa, J. Alloys and Compounds, 408 (2006) 191-5.

Fabrication and Applications of Nano-metal Particle Composites by Ultrasonic Eco-process, Y. Hayashi, H. Takizawa, Y. Saijo, T. Sekino, K. Suganuma and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 231-4.

Percolation Analysis of Electrical Conductivity and Mechanical Properties for CNT-dispersed Y-TZP Nanocomposites, T. Sekino, T. Ukai, S. H.-Kim, T. Kusunose and K. Niihara, Advances in Science and Technology, 405 (2006) 1469-1474.

Fabrication and Characterization of Zirconia-based Composites Containing Dispersed Monazite Particles, A. Hirvonen, R. Ramaseshan, T. Kusunose, T. Sekino and K. Niihara, Ceram. Trans., 192 (2006) 23-31.

Electrical and Mechanical Properties of K, Ca Ionic-conductive Silicon Nitride Ceramics, Y.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, T. Nakayama, K. Niihara, and H. Kawaoka, Ceram. Trans., 165, (2006) 31-8.

Fabrication of Transparent Polycrystalline Silicon Nitride, R.-J. Sung, T. Kusunose, T. Nakayama, T. Sekino, S.-W. Lee, K. Niihara, Ceram. Trans., 165 (2006) 15-21.

Synthesis and Properties of Titania Nanotube Doped with Small Amount of Cations, T. Sekino, T. Okamoto, T. Kasuga, T. Nakayama and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 251-4.

From Niihara's Equation to Peculiar Nanoindentation Deformation of Ceramics and semiconductors, R. Nowac, A. Hirvonen and T. Sekino, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 293-6.

Mechanical Properties of Transparent Polycrystalline Silicon Nitride, R.-J. Sung, T. Kusunose, T. Nakayama, Y.-H. Kim, T. Sekino, S.-W. Lee and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 305-8.

Development of Low Machining Cost Materials by Using Aluminum Borate, H. Takano, T. Kusunose, T. Sekino, R. Ramaseshan and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 335-8.

Tribological Properties of TiN/DLC Nanocomposite Coatings, W.-J. Yang, T. Sekino, J.-W. Yoon, K.-B. Shim, K. Niihara and K.-H. Auh, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 385-8.

Fabrication and Characterization of Zzirconia-based New Ceramic Composites for Thermal Barrier Coatings, A. Hirvonen, Y. Yamamoto, T. Sekino, R. Nowak and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 597-600.

Properties and Microstructure of Mullite-based Iron Nanocomposite, H. Wang, T. Sekino, T. Kusunose, T. Nakayama and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 611-4.

Fabrication of Electronic Conductive Silicon Nitride Ceramics by Convenient Powder Metallurgical Process, Y.-H. Kim, T. Sekino, H. Kawaoka, R.-J. Sung, T. Kusunose, T. Nakayama and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 645-8.

Effect of Oxynitride Grain Boundary Phase on Toughening of Silicon Nitride Ceramics, T. Kusunose, T. Sekino, P.E.D. Morgan and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 649-52.

Preparation and Electrical Properties of Carbon Nanotubes Dispersed Zirconia Nanocomposites, T. Ukai, T. Sekino, A. Hirvonen, N. Tanaka, T. Kusunose, T. Nakayama and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 661-4.

Fabrication of Yttria Stabilized Tetragonal Zirconia Polycrystals Containing TiNi Intermetallic Compounds, N. Tanaka, T. Sekino, T. Kusunose, H. Wang, T. Nakayama and K. Niihara, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 673-6.

Preparation and Evaluation of Metal/Ceramic Nanocomposites for High Frequency Inductive Devices, J.-K. Yang, D.-J. Park, J. Kim, S.-Y. Chang, C.-H. Lee, T. Sekino, K. Niihara and Y.-H. Choa, Key Eng. Mater., 317-318 (2006) 869-72.

Fabrication and Magnetic Properties of Mullite Based Nanocomposites with Embedded FeCr Alloy Nanoparticles, H. Wang, W.M. Wang, Z.Y. Fu, T. Sekino and K. Niihara, Mater. Sci. Forum, 510-511 (2006) 286-9.

［ 解説、総説 ］

チタニア系ナノチューブの特徴・機能と応用の可能性、関野　徹、セラミックス、41[4] (2006) 267-71.

AlN セラミックス中に形成された導電性粒界相の三次元 STEM 観察、楠瀬尚史、黒澤浩一、中川美音、関野徹、新原晧一、材料開発のための顕微鏡法と応用写真集、（2006）215.

セラミックス系ナノコンポジット材料の現状と将来展望、新原浩一、中山忠親、末松久幸、関野徹、楠

瀬尚史、電気評論、12 (2006) 60-67.

[著書]

該当なし

[特許]

「導電性セラミックス及びその製造方法並びに半導体製造装置用部材」楠瀬尚史、関野徹、新原晧一、世登裕明、特願 2006-257527

「窒化アルミニウム・窒化ホウ素複合粉末およびその製造方法」楠瀬尚史、関野徹、坂柳伸彰、菊谷信悟、東正信、特願 2006-170508

「複合粉末および複合材料ならびにそれらの製造方法」楠瀬尚史、関野徹、特願 2007-063867

[国際会議]

Development and Properties of Electrically-functionalized Y-TZP-based Nanocomposites Dispersed with Small Amount of CNTs (Invited), *T. Sekino, T. Mizuguchi, N. Tanaka, T. Kusunose, The 11th International Conferences on Modern Materials and Technologies (CIMTEC2006), Acireale, Sicily, Italy, June 4 - 9, 2006.

Synthesis, Properties and Functionalization of Titanium Oxide Nanotubes for Advanced Energy and Environmental Applications (Invited), *T. Sekino, The 4th Eco-energy Material Science and Engineering Symposium (EMSES 2006), Kyoto University Clock Tower Centennial Hall, Kyoto, Japan, Aug.31-Sep.1, 2006.

Fabrication and Thermoelectric Properties of Oxide Ceramic Semiconductors (Invited), *T. Sekino, H. Hashimoto, Y. Saijo, T. Kusunose, T. Adachi, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Advanced Properties of Titania Nanotube and Its Multi-functionalization (Invited), *T. Sekino, The Second International Workshop for R&D Clustering among China, Japan, Korea in Eco-Materials Processing, Hyundai Hotel, Gyeongpodae, Korea, Nov. 19-23, 2006.

Fabrication and Thermoelectric Properties of Rare Earth Containing Cobalt Oxide Ceramics, T. Sekino, *H. Hashimoto, Y. Saijo, T. Kusunose, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Suita Campus, Osaka University, Japan, Sep.19-20, 2006.

Synthesis and Photocatalytic Properties of Titanium Oxide Nanotubes, *A. Hayashi, S. Itano, T. Kusunose, S. Seino, T. Sekino, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Suita Campus, Osaka University, Japan, Sep.19-20, 2006.

Thermoelectric Properties of $ReCoO_3$ Ceramic Semiconductors, *T. Sekino, H. Hashimoto, Y. Saijo, T. Kusunose, T. Nakayama, Symposium on Panoscopic Assembling and Highly Ordered Functions for Rare Earth Materials, Wakayama, Japan, Oct.4-6, 2006.

Percolation Control of CNT-Dispersed Y-TZP Nanocomposites and their Electrical and Mechanical Properties (Invited), *T. Sekino, X. P. Ye, S.-H. Kim, and T. Kusunose, The 2nd Asia-Oceania Ceramic Federation (AOCF) Conference, Hotel Inter-Burgo, Deagu, Korea, Oct.18-20, 2006.

Synthesis of AlN/BN Nanocomposite Powder by Carbothermal Reduction and Nitridation of Aluminum Borate, *N. Sakayanagi. T. Kusunose, T. Sekino, K. Niihara, The 2nd Asia-Oceania Ceramic Federation (AOCF) Conference, Hotel Inter-Burgo, Deagu, Korea, Oct.18-20, 2006.

Fabrication and Evaluation of the Novel Piezo-Sensitive Elastic Nanocomposites (Oral), *Y.-G. Han, T. Sekino, The 2nd Asia-Oceania Ceramic Federation (AOCF) Conference, Hotel Inter-Burgo, Deagu, Korea, Oct.18-20, 2006.

Thermal Properties of 3YSZ/Monazite-type $LaPO_4$ Composites, *S.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, A. Hirvonen, The 2nd Asia-Oceania Ceramic Federation (AOCF) Conference, Hotel Inter-Burgo, Deagu, Korea, Oct. 18-20, 2006.

Synergetic Combination of Absorption and Photocatalytic Properties for Titania Nanotubes, *T. Sekino, A. Hayashi, S. Itano, T. Kusunose, S. Seino, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Hyogo, Japan, Dec.8-9, 2006.

Fabrication, Structure, and Electric Properties of Two Type Rare Earth Containing Cobalt Oxide Semiconductor Ceramics, *H. Hashimoto, Y. Saijo, T. Kusunose, T. Sekino, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Hyogo, Japan, Dec.8-9, 2006.

H-BN Nano-particle Dispersed Silica-coating on Stainless Steel by Sol-gel Dip-coating Method, *M.-J. Cho, S. Kim, T. Kusunose, T. Nakayama, T. Sekino, K. Niihara, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Hyogo, Japan, Dec.8-9, 2006.

Fabrication and Characterization of 3Y-TZP/$LaPO_4$ Composites for Thermal Barrier Coating, *S.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, A. Hirvonen, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Hyogo, Japan, Dec.8-9, 2006.

Thermal and Mechanical Properties of Zirconia/Monazite-type $LaPO_4$ Nanocomposites Fabricated by PECS (Oral), *S.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, A. Hirvonen, 31st International Cocoa Beach Conference & Exposition on Advanced Ceramics & Composites, Hilton Daytona Beach Resort & Ocean Center, USA, Jan.21-26, 2007.

Synthesis and Photocatalytic Properties of Titanium Oxide Nanotubes (Oral), *T. Sekino, A. Hayashi, S. Itano, T. Kusunose, S. Seino, 31st International Cocoa Beach Conference & Exposition on Advanced Ceramics & Composites, Hilton Daytona Beach Resort & Ocean Center, USA, Jan.21-26, 2007.

h-BN Nano Particle Filled Silica Sol Coating on Stainless Steel by Dip-coating Method (Oral), M.-J. Cho, S.-H. Kim, T. Kusunose, T. Nakayama, *T. Sekino, K. Niihara, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Synthesis and Evaluation of the TiO_2NT/ZnS Nanocomposite, *S. Itano, T. Sekino, T. Kusunose, T. Nakayama, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu

International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Thermal properties and Microstructure of Zirconia/Monazite-type $LaPO_4$ Composites for Powder Preparation Methods, *S.-H. Kim, T. Sekino, T. Kusunose, A. Hirvonen, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Hot-pressed AlN/BN Composite with Excellent Mechanical and Thermal Properties, *T. Kusunose, M.-J. Cho, T. Sekino, K. Niihara, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Synthesis and Photocatalytic Properties of Titanium Oxide Nanotubes, *A. Hayashi, S. Itano, T. Kusunose, S. Seino, T. Sekino, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Fabrication and Evaluation of the Novel Elastomer Based Nanocomposite Film with Pressure Sensing Function, *Y.-G. Han, T. Shibata, T. Sekino, K. Niihara, The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

Residual Stress Measurement of Plasma Sprayed Coating Layers in ZrO_2, S.-W. Lee, *J. Zhang, H. Chen, J.-S. Song, J.-K. Seo, T. Sekino , The 8th International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (ISEPD 2007), Kitakyushu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-14, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

関野　徹	The International Symposium on Eco-Materials Processing and Design (学術委員)
関野　徹	11th International Conferences on Modern Materials and Technologies (CIMTEC 2006) (顧問委員)
関野　徹	International Symposium on Hybrid Nano Materials Toward Future Industries (HNM 2006)（副議長）
関野　徹	The 7th Pacific Rim Conference on Ceramics and Glass Technology （組織委員）
関野　徹	Nanostructured and Multifunctional Materials Symposium at the 7th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology（シンポジウム運営委員長）
関野　徹	The International Conference on Knowledge Management for Composite Materials, Nanotechnology and Alternate Energy (KMCM2007)（プログラム委員）
関野　徹	International Symposium on Advanced Ceramics and Technology for Sustainable Energy Applications (ACTSEA-2007).（国際アドバイザリー委員）
関野　徹	Key Engineering Materials （ゲスト編集委員）

[国内学会]

日本セラミックス協会	11 件
粉体粉末冶金協会	2 件

[取得学位]

学士（工学）

土方　勇人　　可視及び赤外光透過性 Si_3N_4 セラミックスの作製プロセス最適化とその特性

修士（工学）

板野　真也	ZnS ナノ粒子坦持型 TiO_2 ナノチューブの創製とその構造及び物性評価
坂柳　伸彰	複合酸化物の炭素還元窒化法による AlN/BN ナノ複合粉末の合成とその焼結体の作製

[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（公募）

関野　徹	強電子相関系希土類−遷移金属複合酸化物熱電変換材料の創製と機能解明	1,800

[受託研究]

関野　徹	NEDO(ナノテクノロジープログラム：ナノコーティング)	in-situ 構造制御によるナノコンポジットコーティング材料の研究開発	5,040

[奨学寄附金]

関野　徹	大塚化学株式会社	600
関野　徹	イナバゴム（株）	1,000
関野　徹	長峰製作所	300
関野　徹	㈱ニッカトー	1,000
関野　徹	アライドマテリアル	500
楠瀬　尚史	(株)日本タングステン	500
楠瀬　尚史	(株)東ソー	500

[共同研究]

関野　徹	巴製作所（株）	新規なナノコンポジットコーティングプロセス及び材料の開発	420
楠瀬　尚史	住友電気化学工業(株)	電子線または電界励起型蛍光体の開発	300
関野　徹	滋賀県工業技術センター	熱電変換材料の創製に関する研究	0
関野　徹	(株)トクヤマ	高靭性・高強度 AIN/BN ナノコンポジット材料の開発	0
楠瀬　尚史			

[その他の競争的研究資金]

関野　徹	NEDO（平成 16 年度産業技術研究助成事業）	酸化物ナノチューブの高次機能化ならびに環境調和型システムへの応用に関する研究	6,760
楠瀬　尚史	(財)泉科学技術振興財団研究助成	粒界相制御による高熱伝導性 AlN セラミックスへの電気伝導性付与	1,000
楠瀬　尚史	(財)金型技術振興財団	ホウ珪酸ガラスの炭素還元窒化法によるセラミックス金型用 SiC/BN ナノ複合材料の開発	1,000

エネルギー材料研究分野

教授	谷村　克己
助教授	田中　慎一郎
特任助手（常勤）	稲見　栄一
大学院学生	市林　拓、市橋数理、木村健太
学部学生	前野浩介
事務補佐員	野澤幸代
研究支援推進員	布垣昌伸

a） 概要

本研究分野では、固体の電子系が励起された場合に発生する原子過程（電子励起誘起原子過程）の機構を解明し、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、軌道放射光、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。主な研究内容は、固体表面における電子励起による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表面の超高速キャリヤー動力学の研究、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

I 半導体表面における光誘起構造変化現象の研究

(1)　化合物半導体 InP 表面における励起誘起表面原子ボンド切断機構の研究

レーザー光励起、および走査型トンネル顕微鏡短針からのトンネル電流励起により、InP 表面における励起誘起原子過程の機構を解明する研究を展開した。主な成果は、以下の通りである。

1）励起誘起で発生する表面原子のボンド切断効率と誘起される欠陥形態を、試料のフェルミ準位を系統的に変化させて測定し、n 型飼料では P -原子 vacancy の凝縮した vacancy クラスターが、p 型試料では孤立した P －原子空孔が形成されることを明らかにした。このフェルミ準位に著しく依存する欠陥形態の質的な変化は、表面上に形成された孤立 P 原子空孔の電荷状態と価電子系励起のキャリヤーの相互作用による。表面上の孤立 P 原子空孔が、フェルミ準位の位置に応じて、p（n）型では正（負）に帯電する事を考慮すれば、この結果は、ボンド切断を誘起するキャリヤーが価電子帯正孔である事を実証する結果である。

以上の事実に立脚し、帯電した表面 P 原子空孔の変調による表面キャリヤー密度変化を定式化し、「結晶の価電子帯に発生した正孔が表面原子サイトで 2 正孔局在を誘起して発生する」という 2 正孔局在モデルに立脚して理論化を行い、実験結果の定量的記述に成功した。

2）価電子帯正孔の表面構造変化機構に対する重要性を検証するため、STM のチップ先端から注入される電荷量と局所的ボンド切断量との相関を測定し、ボンド切断の収量が電子正孔量に非線形に依存する事、誘起される欠陥形態が、レーザー光励起の場合と同様なフェルミ準位効果を示す事も確認された。

これらの結果によって、化合物半導体表面における励起誘起構造変化機構のほぼ全貌が解明された。

(2)　Si(111)-(2x1)表面における光誘起表面構造変化現象の研究

半導体表面が示す 1 つの典型的事象としての光励起に対する敏感な構造的応答（励起誘起構造不安定性）の機構を、より一般的な見地から明らかにする為に、典型的な擬 1 次元再構成構造を有する Si(111)-(2x1)表面に対する表面構造変化の研究を行った。その意義は、①表面構造の次元性が励起誘起構造不安定性に与える影響を明らかにする事、②表面電子状態の光学遷移がバルクギャップ中に存在し、

結晶電子系の励起と表面状態の励起が明確に区分できる系である事、にある。今年度は、今までの研究を総括すべく、最低の価電子励起を与える 1064 nm 励起の場合の構造不安定性の機構、それによる表面構造変化の特徴を、詳細な理論的解析も含めて完全に解明した。その結果、
1）価電子帯正孔の表面固有原子サイトへの 2 正孔局在によって 3 配位 Si のボンド切断が発生する事、
2）ボンド切断効率は、励起強度に非線形的に依存する事、
3）欠陥サイト近傍でのボンド切断効率は、完全サイトに比べて 1000 倍以上大きく、1 次元的に配列した Si 原子鎖に沿う 1 次元的空格子ストリングがまず効果的に発生し、その後鎖間にも拡大して、2 次元的な空格子クラスターが成長する事、
4）平衡条件下でのバンドベンディングを反映し、表面への価電子帯正孔凝縮効果により、n 型試料表面でのボンド切断収量が p 型試料表面に比べて 10 倍以上大きくなること、
が明らかとなった。これらの結果は、価電子帯正孔の 2 正孔局在によるボンド切断機構によって、定性的かつ定量的に記述される。

II 高分解能低エネルギー電子ビーム励起による水素終端 Si (001)－(2x1) 表面の構造変化機構の研究

励起誘起表面構造変化現象を表面ナノ構造プロセシングに適応するための基礎研究として、10eV 程度のエネルギーを持つ高分解能低エネルギー電子ビーム励起による水素終端された Si(001)-(2x1)表面における Si-H のボンド切断機構の研究を展開した。この系は、ＳＴＭチップからのトンネル電流励起による表面ナノリソグラフィの典型例として研究されているが、その機構は、高密度電流効果、チップが誘起する局所電場効果など、複雑な要因が入り込んでおり、その機構解明は十分に成されていない。通常の電子ビーム励起とチップ誘起効果を定性的・定量的に比較する事によって、低エネルギー電子と固体表面との相互作用の基礎が解明される。本研究の結果、
1）3-10 eV のエネルギーを有する電子線励起によって、水素終端された Si(001)-(2 x 1)表面上の Si-H ボンドが、一電子励起過程によって切断されること、
2）その断面積はそのエネルギー範囲で一定であること、
が判明した。

本研究で得られたボンド切断の断面積の値は、ＳＴＭチップ励起の同様なエネルギー領域におけるボンド切断断面積よりも大きく、この比較から、チップによる Stark 効果などの局所電場効果は、ボンド切断過程において重要でないことが明らかとなった。

III 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． 特に、フェムト秒オプティカルパラメトリック発振器を 250kHz で動作させ、ポンプ光とプローブ光との独立な波長可変化を実現して研究を展開した。その成果は、以下の通りである。

(1)　2 光子光電子スペクトルにおける結晶伝導帯ピークの起源の解明

上記 2 種の Si 表面において、結晶内部の伝導帯底に対応するエネルギー位置に、明瞭な光電子放出ピークが観測される。仕事関数よりも小さな光子エネルギーをプローブ光に使った場合、対応する位置にはバルクの終電子状態は存在せず、伝統的な光電子機構では説明不可能である。この結晶内部の伝導帯底からの光電子放出機構については、不明のままであった。本研究では、プローブ光の偏光を自在に変化させ得る測定系を構築し、この放出機構が、表面近傍にのみ振幅を有する inverse LEED 状態へ、結晶ポテンシャルの表面での変化に起因する効果（surface photoelectric effect）によって遷移が引き起こされることを明らかにした。

(2)　Si(001)-(2x1)表面における研究

この表面は、約 200Ｋにおいて、構造相転移を誘起する。この変化に対応する表面キャリヤー動力学を研究した。その結果、
1）室温では結晶伝導帯を介した表面電子状態への散乱が主要であるのに対し、低温では、表面電子状態間の遷移が主要になる事、
2）低温での表面電子の緩和は、励起密度の自乗に依存する減衰特性を示すこと、
3）低温では、室温では観測されない新たな光電子ピーク（X）が出現するが、その起源は、表面固有の状態ではなく、c(4x2)構造上に解離吸着した水分子の非占有状態に起因するものである事、
を明らかにした。

低温で特徴的に出現する光電子ピーク（X）については、表面励起子の可能性が提案されていたが、本研究によって、固有な状態ではなく、外因性の理由によるものであることが判明した。

(3) Si(111)-(7x7)表面における研究

最も代表的な再構成表面である Si(111)-(7x7)に対して、系統的なフェムト秒時間領域の時間分解キャリヤー動力学の研究を行った。仕事関数以下の光子エネルギーを持つプローブ光を用いて、表面のバンドベンディングを完全に除去する手法、仕事関数を正確に測定する手法を開発し、この表面におけるギャップ中に存在するダングリングボンドバンドの非占有状態のキャリヤー動力学を明らかにした。その結果、

1）理論的に予測されている占有、非占有状態密度との定量的比較を可能にするため、フラットバンドの条件下で準フェルミ準位以下の占有状態に対する完全なスペクトル分布を測定した、

2）表面非占有状態の励起後 200 フェムト秒以降での時間変化が、基本的にフェルミディラック分布によって記述され、準フェルミ準位および有効電子温度の時間変化を正確に測定した、

3）表面状態への分布は、結晶価電子帯を介さず、表面状態間の光学遷移によって発生する事

が明らかとなった。これらの結果は、半導体表面におけるキャリヤー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。

Ⅳ 励起効果を用いた非平衡材料プロセシングの研究

・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。今年度は、そのプロセス化の為の真空条件化での複合工程を実現し、真空チャンバー内での稼動電極装置の試作と条件設定のための研究を展開した。更に、大容量の重イオン発生源を導入し、プロセス実用化への前進を図った。今後、装置の調整によって、特許化、実用化への展開を実現する。

［ 原著論文 ］

Formation and Clustering of Surface Vacancies under Electronic Excitation on Semiconductor Surfaces, J. Kanasaki, Physica, B376-377 (2006) 834-840.

Two-Hole Localization Mechanism for Electronic Bond Rupture of Surface Atoms by Laser-Induced Valence Excitation of Semiconductors, K. Tanimura, E. Inami, J. Kanasaki, and W. P. Hess, Physical Review, B 74[3] (2006) 035337-1-8.

Excitation-Induced Structural Instability of Semiconductor Surfaces, K. Tanimura and J. Kanasaki, J. Physics: Condensed Matter, 18 [30] (2006) 1479-1516.

［ 解説、総説 ］

半導体表面からのレーザー誘起脱離とその電子的機構、金崎順一、谷村克己、真空、49 [10] (2006) 581-587

［ 国際会議 ］

Excitation Wavelength and Density Dependent Carrier Dynamics on Si Surfaces (Invited), K. Tanimura, Dynamik von Elektronentransferprozessen an Grenzflächen, Berlin, Germany, September 24-26, 2006

Graphite-to-Diamond Phase Transformation Induced by Femtosecond-Laser Excitation (Oral), K. Tanimura, *J. Kanasaki, K. Nasu, The 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri, Japan, May21-26, 2006.

Density-Dependent Ultrafast Carrier Dynamics on Si surfaces (Oral), *T. Ichibayashi, K. Tanimura, The 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri, Japan, May21-26, 2006.

Femtosecond Laser-Induced Phase Transformation on Graphite Surface –Creation of a Novel Crystalline Phase of sp^3-Bonded Carbon－, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, K. Nasu, 24th European Conference on Surface Science, Paris, France, September 4-8, 2006.

Structural Instabilities Induced by Injected Tunneling Carriers on Cleaved InP(110)-(1x1) Surfaces, *J. Kanasaki, K. Ichihashi, J. Tsuruta, E. Inami, K. Tanimura, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Photo-Induced Phase Transformation on Graphite Surface, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Femtosecond Laser-Induced Phase Transformation on Graphite Surfaces, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Structural Instabilities Induced by Carrier Injection from Scanning Tunneling Microscope Tips on Cleaved InP(110)-(1x1) Surfaces, *E. Inami, J. Kanasaki, K. Tanimura, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Excitation-Induced Processing for Highly Functional Nano-Structured Materials, E. Inami, *J. Kanasaki, S. Tanaka, and K. Tanimura, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Structural Instabilities on InP(110)-(1x1) Surfaces Induced by Hole-Injection from the STM Tip, E. Inami, J. Tsuruta, and *J. Kanasaki, 11th International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions (DIET-XI), Berlin, Germany, March 11-15, 2007.

Excitation-Induced Atomic Desorption and Structural Instability of Semiconductor Surfaces (Invited), K. Tanimura, 11th International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions DIET-XI, Berlin, Germany, March 11-15, 2007.

Excitation-Wavelength dependent Ultrafast Carrier Dynamics on Si Surfaces (Oral), *T. Ichibayashi, K. Tanimura, 11th International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions DIET-XI, Berlin, Germany, March 11-15, 2007

[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	8 件
応用物理学会	1 件
日本表面科学会	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（A）

谷村　克己	半導体表面二次元凝縮相における励起物性の研究	13,700

基盤研究 (C)

金崎　順一	低エネルギー電子線励起による半導体表面の構造不安定性	500

[受託研究]

谷村克己	数物系科学分野に関する学術動向の調査・研究	3,500

[その他の競争的研究資金]

該当なし

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、分子材料解析研究分野（平成 16 年度発足）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 分子糊の開発
・光応答性ペプチドと in vitro セレクションを組み合わせた RNA-リガンド結合の光制御
・アレル特異的 PCR 法を用いた簡便、迅速、安価な SNP 検出法
・DNA リピート配列認識分子の開発
・フシコッカン型ジテルペン配糖体の誘導化による抗癌活性化合物の創製
・細胞内信号伝達経路に対するリバース・ケモゲノミクス
・生理活性を有するヘテロ芳香族化合物の合成
・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
・分子機械“分子筋肉”および“分子バルブ”の構築
・DNA のビーム化学
・マルチレーザー多段階光化学
・二酸化チタン光触媒反応
・タンパク機能の光化学的制御
・複数の配位子を構成要素とする不斉触媒の固定化
・イソオキサゾリン環とイソオキサゾール環を有するスピロ型不斉ハイブリッド配位子の創製と応用
・不斉触媒能を有する球状粒子の合成
・キラルなスピロ型イオン液体の創製

精密制御化学研究分野

教授	中谷　和彦
助手	周　大揚、萩原　正規、堂野　主税
教務職員	武井　史恵
博士研究員	Zhang Jinhua、He Hanping
大学院学生	林　剛介、劉　キョンイン
学部学生	宇野　真之介
研究補助員	奥　美華、瀬尾　晶子、久保田　有香
事務補佐員	大浜　美帆

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

・簡便な遺伝子変異検出法の開発

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。ジアミノナフチリジンの誘導体がシトシンバルジに結合すると、吸収波長と蛍光波長が 30 nm 長波長シフトすることを利用して、プローブとターゲットのハイブリダイゼーションによりシトシンバルジを形成させ、そこに加えたリガンドの結合による蛍光を指標として遺伝子変異の有無を見つける手法の開発に成功した。この手法の特徴は、標的 DNA に対して、プローブとなる DNA とジアミノナフチリジンを混ぜ、蛍光を測定するだけというきわめて簡便な手法で遺伝子変異が判定できることにある。

・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 二本鎖形成を誘起する分子「DNA 分子糊」の開発

DNA の持つさまざまな機能の多くは、相補的塩基対形成による二本鎖会合が引き金となって発現される。すなわち、DNA の二本鎖会合を自在に制御することができれば、その機能発現の精密制御が可能となる。これまでの当研究室で用いて来たミスマッチ結合リガンドの研究を基盤として、DNA の二本鎖形成を制御する分子（DNA 分子糊）の開発に成功した。ミスマッチ結合リガンドであるナフチリジンカーバメート（NC）は、GG ミスマッチを含む DNA と強く結合する。この際、ミスマッチを含む不安定な構造から安定な複合体へと変換されるため、NC はミスマッチ DNA の二本鎖形成を促進する。DNA の配列を適当に選択すれば、自発的に二本鎖を形成し得ない二本の一本鎖 DNA から二本鎖 DNA に変換することが可能であり、NC は二本の DNA を貼り合わせる、まさに「分子糊」として機能する。しかしながら、NC による二本鎖構造の誘起は本質的に一方向性のものであり、一旦生成した二本鎖構造を再び一本鎖構造に戻すことはできない。熱分解性の「分子糊」として開発された TD は、加熱処理によって「糊」が壊れ、一旦生成した二本鎖構造を一本鎖構造に戻すことができる。熱分解性分子糊 TD を用いて、金ナノ粒子の凝集・分散を制御することに成功した。このように精密にデザインされた小分子による、一本鎖 DNA/二本鎖 DNA の双方向構造制御を達成した。

・新規金属修飾 DNA の合成

機能性を持つ 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できる可能性を示しており、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を提供する。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。

[原著論文]

Evaluation of Mismatch-binding Ligands as Inhibitors for Rev-RRE interaction, Nakatani, K.; Horie, S.; Goto, Y.; Kobori, A.; Hagihara, S. Bioorg. Med. Chem. 14 (2006) 5384-5388.

Mismatch Binding Ligands Function as Molecular glue for DNA, Peng, T.; Dohno, C.; Nakatani, K. Angew. Chem. Int. Ed. 45 (2006) 5623-5626.

[特許]

「DNA 二本鎖形成制御」ペン　タオ、堂野主税、中谷和彦　特許出願 2006-162265

「核酸の増幅反応に用いるプライマーの５’末端に結合して用いる DNA 断片およびその利用」武井史恵、萩原正規、中谷和彦　特許出願 2006-238299

「核酸の増幅反応に用いる繰り返し配列結合プライマー及びその利用」中谷和彦、萩原正規、ペン　タオ 特許出願 2006-313659

[国際会議]

Fluorescent Determination of SNPs Using N,N-bis(3-aminopropyl)-2,7-diamino-1,8-naphthyridine, *Fumie Takei, Masaki Hagihara, Jinhua Zhang, Kazuhiko Nakatani, XVII International Roundtable on Nucleosides Nucleotides and Nucleic Acids,Bern, Switzerland, Sep3-7, 2006

Application of L-DNA as Molecular Tag, *Gosuke Hayashi, Kazuhiko Nakatani, XVII International

Roundtable on Nucleosides Nucleotides and Nucleic Acids,Bern, Switzerland, Sep3-7, 2006

Mismatch Binding Ligands Function as Molecular Glue of DNA, Tao Peng, Chikara Dohno, *Kazuhiko Nakatani, XVII International Roundtable on Nucleosides Nucleotides and Nucleic Acids,Bern, Switzerland, Sep3-7, 2006

Molecular Design and Applications of Mismatch Binding Ligands, *Kazuhiko Nakatani, The 11th Korea-Japan Joint Symposium on Drug Design and Development, Jedu Island, Korea, May10-12, 2006

Molecular Glue for DNA, *Kazuhiko Nakatani, 2006 Mini-Symposium on the Frontiers of Organic/Bioorganic Chemistry, POSTECH, Pohan, Korea, Nov30-Dec2, 2006

[国内学会]

日本化学会春季年会	4 件
核酸化学シンポジウム	3 件
産研･ナノテクノロジーセンター国際合同シンポジウム 2006	3 件
日本ケミカルバイオロジー研究会	1 件
光化学討論会	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）		
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	23,800
基盤研究（C）		
周　大揚	メタル触媒を活用する新規多環状性ヌクレオチドおよびオリゴライブラリーの創成	1,900
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ー塩基変異の蛍光検出法の開発	2,300
若手研究（B）		
堂野　主税	光感応性ミスマッチ安定化分子の開発	1,700

[受託研究]

中谷　和彦	科学技術振興機構	シトシンバルジ標識アレル特異的 PCR による遺伝子一塩基多型の蛍光検出	2,692
中谷　和彦	科学技術振興機構	タグ配列を持つアレル特異的 PCR プライマーによる実用的 SNP 検出	2,000
中谷　和彦	科学技術振興機構	担持されるバイオ材料と界面のシナジー効果に関する調査	3,900

[共同研究]

中谷　和彦	協和発酵工業株式会社	RNA に作用する低分子薬物の分子設計法の確立	3,000
中谷　和彦	日東化成株式会社	DNA 結合性分子の合成	420

[その他の競争的研究資金]

中谷　和彦	厚生労働科学研究費 萌芽的先端医療技術推進研究事業	ミスマッチ塩基対結合リガント固定化ＳＮＰ検出デバイスに関する研究	39,490

医薬品化学研究分野

教授	加藤　修雄
助教授	大神田　淳子
助手	新田　孟、河野　富一
博士研究員	森　修一（平成 18 年 11 月 30 日まで）
大学院学生	平岡　正光、井上　崇嗣、今田　一郎、榎本　太郎、平野　正人、町田　慎之介、原ノ園　祐、樋口　雄介、牧　俊央、三宅　真弥
学部学生	深井　雄太
事務補佐員	丹野　美鈴

a) 概要

当研究分野は、医薬品のシード・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開発・生体分子型人工超分子の創製についても研究を展開している。

b) 成果

・抗癌活性を有するフシコクシン（FC）誘導体の創製

ジテルペン配糖体コチレニン（CN）は急性骨髄性白血病細胞（HL-60）に対する分化誘導活性を示し、またインターフェロンαとの併用により、各種癌細胞に対して強力かつ良質の腫瘍増殖抑制効果を有する。一方、フシコクシン（FC）は、CN と酷似した構造を有するものの、HL-60 に対する分化誘導活性をほとんど持たない。前年度に引き続き、詳細な構造活性相関研究を展開した結果、FC の 12 位水酸基の除去が活性発現に決定的であることを突き止めた。また、FC の有する細胞毒性が糖鎖状 *t*-ペンテニル基に由来することを明らかにし、ISIR-005 とコードした分化誘導基盤とする新規抗がん剤リード化合物の創製に成功した。

・バクテリア個体間情報伝達物質 AI-2 アンタゴニストの創製

バクテリアの quorum sensing は、バイオフィルム形成・病原性発現に係わるとされ、その阻害剤は新しい医薬としての可能性もあり注目されている。Quorum sensing の情報伝達物質のうち、AI-2 は化学的に極めて不安定であるが、我々は既に、AI-2 の化学構造を合理的に簡略化し、化学的に安定でかつ AI-2 活性を保持したアゴニストを得ることに成功している。このアゴニストを評価系に用いることで、アンタゴニストの探索を行い、高活性を有する化合物の創出に成功した。AI-2 は異種バクテリア間の quorum sensing に係わるとされ、歯垢形成を促すとされている。今回見出したアンタゴニストによる歯垢形成阻害等応用面での展開も期待できる。

・たんぱく質内部・外部表面同時認識型 Geranylgeranyltransferase-I 阻害剤の開発

たんぱく質間相互作用を制御する低分子化合物には、バイオプローブとしての有用性に加え、新しい創薬へのリードとしての可能性が期待できる。しかし、バルクの水に晒された広い面積が関与するこうした相互作用に対して druglike な化合物に拮抗させることは非常に困難であり、たんぱく質表面は未だ創薬の標的として看做されていない。本研究ではがん細胞の転移に関わる酵素 GGTase-I に対し、たんぱく質外部表面をより位置選択的に認識して結合させるためのモジュール集積型ハイブリッド化合物の開発を行っている。前年度に引き続き、１分子中に GGTase-I の内部表面と外部表面に対するモジュ

ールを持つ化合物の合成を完了し、酵素阻害活性試験を行った。その結果、ハイブリッド化合物はモジュール類に比較して８倍以上の阻害能を示すなどの加算効果が認められ、本手法がたんぱく質外部表面志向型化合物の設計に有効であることが示唆された。

・金属イオンをモレキュラーグルーとする分子集合体のたんぱく質表面認識

たんぱく質外部表面上に非対称的に存在する疎水性、静電性、水素結合性官能基と相補的な相互作用を通じて高選択的に結合するためには、金属イオンをモレキュラーグルーとしてモジュールを集積した分子集合体を用いる方法が有効であると期待できる。2,2'-ビピリジンの 4,4'位に種々の置換基を導入したトリスビピリジンルテニウム錯体を合成し、キモトリプシンの活性部位近傍表面への特異的認識能を検討した。側鎖に酸性アミノ酸残基を持つ誘導体は高い酵素阻害活性を示す一方（73% at 50 μM)、塩基性残基含有錯体は 30 μM で阻害能を全く示さなかった。本年度は塩基性を帯びた酵素表面の認識には化合物の静電的性質が寄与すること、合成の比較的簡便なビピリジン金属錯体は、系統的な構造活性相関を検討するのに有用であることを明らかにした。

［ 原著論文 ］

Synthesis and Inclusion Properties of 6,6'-Bi(benzo[*b*]fluoren-5-ol) derivative by cycloaromatization, T. Kawano, M. Suehiro and I. Ueda, Chem. Lett., 35[1] (2006) 58-59.

Structure-Based Design of Imidazole-Containing Peptidomimetic Inhibitors of Protein Farnesyltransferase, J. Ohkanda, C. L. Strickland, M. A. Blaskovich, D. Carrico, J. W. Lockman, A. Vogt, C. J. Bucher, J. Sun, Y. Qian, D. Knowles, E. E. Pusateri, S. M. Sebti and A. D. Hamilton, Org. Biomol. Chem., 4[3], 482-492 (2006).

One-Pot Synthesis of 3-Bromoimidazo[1,2-*a*]pyridine Derivatives Accompanied by Dimethyl Sulfoxide Oxidation, T. Kawano and N. Kato, Chem. Lett., 35[3] (2006) 270-271.

Effect of Water Molecules on the Cycloaromatization of Non-Conjugated Aromatic Tetraynes, T. Kawano, H. Inai, K. Miyawaki and I. Ueda, Bull. Chem. Soc. Jpn., 79[6] (2006) 944-949.

［ 解説、総説 ］

Lipase-Catalyzed Synthesis of Novel Tea Catechin Derivatives and Their Application to Anti-Influenza Agents, K. Kaihatsu, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, S. D. Fuller and N. Kato, Yakugaku Zasshi, 126 (2006), 57-58.

［ 特許 ］

「12-デオキシフシコクシン誘導体およびこれを有効成分とする細胞分化誘導剤」加藤修雄、本間良夫、佐々武史、新田孟、吉野貴彦、井上崇嗣、特願 2006-197482

「12-デオキシフシコクシン誘導体およびこれを有効成分とする細胞分化誘導剤」加藤修雄、本間良夫、佐々武史、新田孟、吉野貴彦、井上崇嗣、国際出願 PCT/JP2007/051799

「オートインデューサー２受容体のモデュレーター」加藤修雄、平岡正光、大神田淳子、河野富一、山口明人、平田隆弘、西野邦彦、恵比須繁之、ボニー・エル・バスラー、特願 2007-056450

「フシコッカン合成キメラ型酵素およびその遺伝子」豊増知伸、佐々武史、大利徹、加藤修雄、特願 2007-094968

［ 国際会議 ］

Anti-Cancer Activity of Fusicoccane Diterpene Glycosides (Invited), *N. Kato, 22nd Conference on Combinatorial Chemistry, Japan, Osaka, Japan, Apr. 19-20, 2006.

Synthesis of Fusicoccin Derivative as a Differentiation Inducer, *T. Inoue, T. Yoshino, H. Nitta, T. Kasukabe, Y. Honma, T. Sassa and N. Kato, ICOB-5 & ISCNP-25 IUPAC, Kyoto, Japan, Jul 23-28, 2006.

Hybrid GGTase-I Inhibitors Targeting both Interior and Exterior Protein Surfaces, *J. Ohkanda, S. Machida, N. Kato, K. Harada, The 2nd International Symposium on Bimolecular Chemistry, Kobe, Japan, Aug 7-8, 2006.

Design, Synthesis and Biological Evaluation of Hybrid GGTase-I Inhibitors Targeting both Exterior and Interior Protein Surface, *S. Machida, N. Kato, J. Ohkanda, SANKEN International symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, Sep 19-20, 2006.

Regulation of DNA Transcription by Infrared Controllable Antigene Peptide Nucleic Acids, *I. Imada, K. Kaihatsu, X. Cai, M. Fujitsuka, T. Majima and N. Kato, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, Sep 19-20, 2006.

Synthesis of Monoester Derivatives of Epigallocatechin Gallate Using Pancreatic Esterase and Their Application to Antiviral Agents, *S. Mori, K. Kaihatsu, S. Miyake, T. Nakaya and N. Kato, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, Sep 19-20 2006.

A New Medicinal Chemical Approach to Target Protein-Protein Interactions, *J. Ohkanda, Japanese-German Frontiers of Science Symposium, Heidelberg, Germany, Nov 3-5, 2006.

Synthesis of Autoinducer-2 Antagonists in Bacterial Quorum-Sensing, *M. Hiraoka, Y. Yano, T. Kawano, H. Hirakawa, A. Kobayashi, T. Hirata, A. Yamaguchi, J. Ohkanda and N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

Anti-Cancer Activities of Fusicoccane Diterpenoids: Differentiation Inducing Activity vs Cytotoxicity, T. Inoue, H. Nitta, J. Ohkanda, T. Kasukabe, Y. Honma, T. Sassa and *N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

Regulation of DNA Transcription by Infrared Controllable Antigene Peptide Nucleic Acids, *K. Kaihatsu, X. Cai, M. Fujitsuka, T. Majima and N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

Synthesis of Monoester Derivatives of Epigallocatechin Gallate Using Pancreatic Esterase and Their Application to Antiviral Agents, *S. Mori, K. Kaihatsu, S. Miyake, T. Nakaya and N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

加藤　修雄　　ICOB-5 & ISCNP-25 IUPAC（組織委員）
加藤　修雄　　23rd Conference on Combinatorial Chemistry, Japan（組織委員）

[国内学会]

日本化学会	6 件
日本薬学会	1 件
日本農芸化学会	1 件
植物化学調節学会	1 件
天然有機化合物討論会	1 件
日本ケミカルバイオロジー研究会	1 件
日本カテキン学会	1 件
その他	3 件

[取得学位]

修士（理学）

井上　崇嗣	分化誘導活性を示すジテルペン配糖体の創製と作用機序の解明
今田　一郎	赤外二光子応答型アゾベンゼン誘導体の合成と遺伝子発現制御への応用
榎本　太郎	抗真菌剤 Sordaricin 類縁体の合成研究
平野　正人	ポリリシン配列を認識する isoform 選択的 Ras 阻害剤の設計と合成
町田　慎之介	たんぱく質外部・内部表面を標的とするハイブリッド酵素阻害剤の設計と合成およびその機能

[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（C）

大神田　淳子	金属イオンをモレキュラーグルーとする分子集合体のたんぱく質表面認識	3,700

特定領域研究

加藤　修雄	ジテルペン配糖体をツールとする細胞内信号伝達経路の解析と制御	2,800

（分担者として配分されたもの）

基盤研究（A）

加藤　修雄	微生物・植物テルペノイド生合成遺伝子クラスター取得と利用による物質生産と開発	1,000

[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	15,000

［ その他の競争的研究資金 ］

大神田　淳子	医科学応用研究財団	モレキュラーグルーによる in vivo 生成型分子集合体とたんぱく質表面機能の制御	1,000
大神田　淳子	林女性自然科学者研究助成基金	タンパク質表面および内部同時認識能を持つハイブリッド阻害剤の開発	1,500

有機物性化学研究分野

教授	安蘇　芳雄
助教授	兼田　隆弘
助手	家　　裕隆
教務職員	朝野　芳織
博士研究員	韓　　愛鴻（平成 18 年 6 月 30 日まで）
	Muhammad Mizanur RAHMAN（平成 18 年 9 月 16 日ー平成 19 年 3 月 15 日）
大学院学生	根岸　伸和、梅本　欽一、
	石岡　節子、遠藤　克、馮　　柳
	二谷　真司、廣瀬　智哉
学部学生	岡部　　誠、山本　修央
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および分子エレクトロニクスへの応用を目的に、新規な拡張共役系を有する電子／光機能分子材料、本格的分子ワイヤを志向したナノスケールπ共役分子材料の設計・合成と物性化学の研究を行っている。また、超分子構造を主体とする有機化合物の新しい物性を構造物性相関の観点から理解を深め、さらなる新規物性を発現する有機超分子材料を設計および開発する研究を行っている。具体的には次のような研究課題に取り組んでいる。

（1）有機エレクトロニクスへの応用を指向して、高い移動度を示す有機半導体、および、高い薄膜発光特性を有する物質の開発と物性評価を行う。

（2）分子エレクトロニクス素子に適したナノスケール機能分子材料の開発を目的として、スイッチ機能や自己集合性を付与した拡張共役化合物の合成と物性評価を行う。また、次世代分子配線材料としての応用を目指して、電導性をもつオリゴチオフェンを絶縁性の嵩高い置換基で被覆した分子ワイヤを合成し、分子ワイヤ１本の電導性を評価する。

（3）ある制限域内で自由な可動性を保証する“機械的結合”によって構築される高次組織化超分子は、次世代分子デバイスへの応用が期待されている。そのような超分子あるいは超分子機械を目指して、シクロデキストリン骨格にアゾベンゼン、スチルベン、トラン誘導体を共有結合で連結した分子内１対１ホスト-ゲスト連結系の自己会合現象を研究する。

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有機材料の開発を進めている。オリゴチオフェンにフルオロアルキル基を導入することで n 型特性が向上する事が知られている。そこで、ヘキサフルオロシクロペンタン環を縮環させたチオフェン、および、ジフルオロメチレン架橋ビチオフェンをユニットとするオリゴチオフェンを遷移金属錯体による触媒反応で合成した。物性測定の結果、フルオロアルキル環縮環により隣り合うチオフェン間の平面性が保たれるだけでなく、n 型特性が向上する事が明らかとなった。

薄膜状態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その物性評価を行っている。複数の分岐点によって連結されたオリゴチオフェンは、分岐点の数の増加およびオリゴチオフェン鎖長の伸長による自己会合性の増大が明らかとなり、スピンコートで作製した薄膜電界効果トランジスタは、良好な p 型特性を示した。また、分岐型オリゴチオフェンの収斂部に[60]フラーレンを導入した化合物の薄膜は、ambipolar FET 特性を示した。

・分子エレクトロニクス材料の開発

スイッチ機能部位としてイミダゾリウム塩を組み込んだオリゴチオフェンの両末端にドナー・アクセプターを導入した３元系化合物を合成し、スイッチ機能の評価を行った。イミダゾリウム塩のカウンターアニオンの影響により蛍光強度が変化したことから、共役系の電子移動を外部刺激により制御可能であることが明らかとなった。

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位をプロピレン基でブロックし嵩高い置換基としてt-ブチルジフェニルシリル基を導入したモノマーユニットを開発して、被覆型オリゴチオフェン分子ワイヤの合成を行った。4 量体オリゴマーの X 線結晶構造解析から、期待通りの高い平面性とシリル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。また、オリゴチオフェン分子ワイヤのナノギャップ金電極への接合を目的として、溶解性の高いテトラヘキシル置換 6 量体オリゴチオフェンを基本骨格として、両末端チオールおよびエチニル置換チオフェン 24 量体（分子長約 10 nm）の合成に成功した。これを用いてナノギャップ電極により、単分子の導電特性を計測した。

・超分子機械の開発

プロトタイプの分子機械である“分子筋肉”と“分子バルブ”を構築することができた。

[原著論文]

Synthesis and Properties of Ethylenethiotetraselenagulvalene (ET-TSF) and Its Conductive Radical Cation Salts, K. Takimiya, M. Kodani, S. Murakami, T. Otsubo and Y. Aso, Heterocycles, 67[2] (2006) 655-663.

Plasmon-Enhanced Molecular Fluorescence from an Organic Film in Tunnel Junction, H. W. Liu, Y. Ie, T. Yoshinobu, Y. Aso, H. Iwasaki and R. Nishitani, Appl. Phys. Lett., 88[6] (2006) 061901(3).

Effects of Extension or Prevention of pi-Conjugation on Photoinduced Electron Transfer Processes of Ferrocene-Oligothiophene-Fullerene Triads, T. Nakamura, H. Kanato, Y. Araki, O. Ito, K. Takimiya, T. Otsubo and Y. Aso, J. Phys. Chem. A, 110[10] (2006) 3471-3479.

Intrachain Photoluminescence Properties of Conjugated Polymers as Revealed by Long Oligothiophenes and Polythiophenes Diluted in an Inactive Solid Matrix, K. Kanemoto, T. Sudo, I. Akai, H. Hashimoto, T. Karasawa, Y. Aso and T. Otsubo, Phys. Rev. B, 73[23] (2006) 235203(11).

Linear Oligomers Composed of a Photochromically Contractible and Extendable Janus [2]Rotaxane, S. Tsuda, Y. Aso and T. Kaneda, Chem. Commun., [29] (2006) 3072-3074.

Molecular Fluorescence from H2TBP Porphyrin Film on Ag Substrate Excited by Tunneling Electrons, H. W. Liu, Y. Ie, K. Sudoh, M. Nowicki, T. Yoshinobu, Y. Aso and H. Iwasaki, Ultramicroscopy, 106[8-9] (2006) 785-788.

Synthesis and Spectral Properties of Tris(terphenylylpyridine)iridium and Tris(tritylphenylpyridine)iridium Complexes as Novel Electrophosphorescent Materials, C. Honda, K. Takimiya, T. Otsubo and Y. Aso, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 455 (2006) 373-379.

Electronegative Oligothiophenes Based on a Hexafluorocyclolpentene-Annelated Thiophene Unit, Y. Ie, Y. Umemoto, T. Kaneda and Y. Aso, Org. Lett., 8[23] (2006) 5381-5384.

Thieno[3,4-d]imidazolium-Containing Molecular Wire: Switching Behavior of Photoinduced Intramolecular Electron Transfer, Y. Ie, T. Kawabata, T. Kaneda and Y. Aso, Chem. Lett., 35[12] (2006) 1366-1367.

Photoinduced Charge-Separation and Charge-Recombination Processes of Oligo(thienyleneethynyl)-Fullerene Dyad Molecules, M. Fujitsuka, T. Makinoshima, A. Takamizawa, Y. Araki, O. Ito, Y. Obara, Y. Aso and T. Otsubo, Bull. Chem. Soc. Jpn., 79[12] (2006) 1860-1869.

[解説、総説]

新規電界発光（EL）材料として嵩高いテルフェニルピリジン、トリチルフェニルピリジンおよびテルチエニルピリジンをリガンドとするイリジウム錯体、大坪徹夫、本田千恵、瀧宮和男、安蘇芳雄、高分子加工、55[5] (2006) 193-197.

[特許]

「フッ素化シクロペンタン環と芳香環との縮合したユニットを含む重合体、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、梅本欽一、上田将人、特願 2006-231171

「フッ素化シクロペンタン環と芳香環との縮合したユニットを含む重合体、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、梅本欽一、上田将人、国際出願 PCT/JP2006/316901

「含フッ素化合物及びその製造方法、含フッ素重合体、有機薄膜、並びに、有機薄膜素子」家　裕隆、安蘇芳雄、二谷真司、上田将人、特願 2006-274250

「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、安蘇芳雄、根岸伸和、上田将人、特願 2006-317652

「含フッ素化合物及びその製造方法、含フッ素重合体、有機薄膜、並びに、有機薄膜素子」家　裕隆，安蘇芳雄，二谷真司，上田将人、優先権主張　特願 2007-042517

「ジフルオロシクロペンタンジオン環と芳香環との縮合したユニットを含む重合体、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、梅本欽一、上田将人、特願 2007-057751

「含フッ素多環芳香族化合物、含フッ素重合体、有機薄膜及び有機薄膜素子」家　裕隆、安蘇芳雄、二谷真司、上田将人、特願 2007-060699

[国際会議]

Synthesis and Properties of Hexafluorocyclopenta[c]thiophene-based Oligomers towards n-Type Semiconductors (Poster), *Y. Ie, Y. Umemoto, T. Kaneda and Y. Aso, The 8th International Symposium on Organic Reactions, Awaji, Japan, April 23-26, 2006.

Hexafluorocyclopenta[c]thiohene-Based Oligothiophenes. Synthesis, Structure, and Properties, *Y. Ie, Y. Umemoto, T. Kaneda and Y. Aso, 22nd International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur, Saitama, Japan, August 20-25, 2006.

Hexafluorocyclopenta[c]thiophene-based Oligothiophenes: Synthesis, Structure, and Properties (Poster), *Y. Aso, Y. Umemoto, T. Kaneda and Y. Ie, JSPS Core-to-Core Program “Innovative Synthesis of Novel Main-Group Compounds and Its Application” Second Core-to-Core Symposium on Main Group Element Chemistry, Tokyo, Japan, August 26-28, 2006.

Synthesis and Properties of Perfluoroalkyl-annelated Oligothiophenes (Oral), *Y. Ie, Y. Umemoto, M. Nitani, T. Kaneda and Y. Aso, The Tenth International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, November 13-17, 2006.

Development of Molecular Electronic Materials and Molecular Machines (Poster), *Y. Aso, T. Kaneda and Y. Ie, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Sumposium, Awaji Yumebutai, Japan, December 8-9, 2006.

Electronegative Oligothiophenes Based on Hexafluorocyclopentene-annelated Thiophene towards n-type Organic Semiconductors (Poster), *Y. Umemoto, Y. Ie, T. Kaneda and Y. Aso, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Sumposium, Awaji Yumebutai, Japan, December 8-9, 2006.

Synthesis, Characteristics and Charge Transport Properties of the Dendritic Oligothiophene/[60]fullerene Linkage Molecules (Poster), *N. Neghishi, Y. Ie, T. Kaneda and Y. Aso, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Sumposium, Awaji Yumebutai, Japan, December 8-9, 2006.

Thieno[3,4-d]imidazolium-containing Molecular Wires: Switching Behavior of Photoinduced Intramolecular Electron Transfer (Poster), *Y. Ie, T. Kawabata, T. Kaneda and Y. Aso, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Sumposium, Awaji Yumebutai, Japan, December 8-9, 2006.

Synthesis and Self-association Properties of Dendritic Oligothiophenes and Their Electronics Application (Invited), *Y. Aso, Second SANKWN-CNU Joint symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, January 25-26, 2007.

Synthesis and Properties of Perfluoroalkyl-annelated Oligothiophenes (Poster), *Y. Umemoto, Y. Ie, T. Kaneda and Y. Aso, Second SANKWN-CNU Joint symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Osaka, Japan, January 25-26, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

安蘇　芳雄	22nd International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur（組織委員）
安蘇　芳雄	The Seventh International Symposium on Functional π-Electron Systems（組織委員）
安蘇　芳雄	12th International Symposium on Novel Aromatic Compounds（組織委員、財務委員長）

[国内学会]

日本化学会	6 件
応用物理学会	1 件
基礎有機化学連合討論会	3 件

典型元素化学討論会　1件
シクロファン研究会　6件
CD シンポジウム　1件

[取得学位]

修士（工学）

石岡　節子	トラン修飾完全メチル化シクロデキストリンの自己組織化を基盤とする分子機械の構築
遠藤　克	単一分子の導電特性計測を指向したオリゴチオフェン分子ワイヤの開発
馮　　柳	末端にトリエトキシシリル基を有する共役オリゴマーの合成、物性、および自己組織化膜の評価

博士（工学）

根岸　伸和	フラーレン修飾およびデンドリマー型オリゴチオフェンの合成と有機エレクトロニクスへの応用に関する研究

[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（B）

安蘇　芳雄	オリゴチオフェンを基盤とする機能集積拡張共役系の創製と新機能開拓	1,900

特定領域研究

安蘇　芳雄	拡張共役系を基盤とする電子移動系の構築と新機能開拓	1,900
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	1,400
家　　裕隆	電極接合多点アンカー部位を導入した被覆型オリゴチオフェン分子ワイヤの創製	1,900

若手研究（B）

家　裕隆	n 型有機半導体を指向したフルオロアルキル架橋型オリゴチオフェンの創製	2,000

[受託研究]

安蘇　芳雄	科学技術振興機構	被覆型分子ワイヤの構築	975
安蘇　芳雄	科学技術振興機構	電子輸送性を有する新規共役オリゴマーの開発とエレクトロニクス応用	2,000

[奨学寄附金]

安蘇　芳雄	ＪＳＲ㈱	1,000

[共同研究]

安蘇　芳雄 家　　裕隆	住友化学株式会社	有機エレクトロニクス材料の開発	4,070

[その他の競争的研究資金]

安蘇　芳雄	科学技術振興機構 戦略的創造推進事業	精密分子設計に基づくナノ電子デバイス構築	6,700
家　裕隆	21COE 若手研究者による分野間共同研究	有機ナノ発光素子を目指した材料開発と STM 分子発光解析	1,000
根岸　伸和	21COE 大学院後期課程学生個人研究	機能性材料合成法の確立を指向したオリゴチオフェン・フラーレン電子移動系の構築	500

励起分子化学研究分野

教授	真嶋　哲朗
助教授	藤塚　守
助手	藤乗　幸子
特任教授	金　成植
特任助教授	杉本　晃
特任助手	立川　貴士
特任研究員	高田　忠雄、中山　公志、田井中　一貴 (平成 18 年 10 月 1 日採用)
外国人招へい研究員	蔡　喜臣（平成 18 年 11 月 14 日まで）
学振特別研究員	木村　巧
大学院学生	大関　陽介、佐守　真悟、小阪田　泰子、内藤　一也、宮本　佳樹、麻野井祥明、岡田　みつ江、原田　憲、浦崎　宏美、林　春艶、Shi-Cong Cui
学部学生	武田 雄一郎、川畑　麻美
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、メゾ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、ナフタレン等の分子にレーザー照射またはパルスラジオリシスによって生じるダイマーラジカルカチオンに第二レーザーを照射することで、ダイマーラジカルカチオンの光解裂をはじめて見出した。また、ベンゾフェノン等の分子にレーザー照射することで生じるケチルラジカルを第二レーザー励起することで励起ケチルラジカルの物性を検討した。さらにその高い還元力を応用し、金属ナノ粒子の生成に成功した。さらに、高励起状態の化学に関連して、励起ラジカルカチオンより生じる蛍光寿命の直接観測や S2 励起アンチモンポルフィリンの電荷分離について検討を行った。

・TiO_2 光触媒反応機構の解明

TiO_2 光触媒反応における光機能界面上での種々の有機物の分解機構の解明を目的に、各種時間分解分光法および単一分子分光法により TiO2 表面に吸着した有機物の一電子酸化反応過程および酸素活性種の拡散過程について詳細に検討した。チタニアナノチューブによる有機化合物の一電子酸化反応過程をナノ秒時間分解拡散反射法によって観測した結果、通常のナノ粒子と比べ、電荷分離状態が 10 倍以上長寿命化することを見出した。また、チタニアナノチューブへの紫外光照射により生成した長寿命の捕捉電子によりハロゲン化合物を分解できることを明らかにした。さらに、全反射蛍光顕微鏡を用い、光触媒反応によって TiO_2 表面上に生成し、大気中に拡散した一重項酸素の単一分子検出を行なった。検出蛍光プローブには芳香族化合物であるテリレンジイミド（TDI）を用い、酸化チタンへの紫外光照射によって、一重項酸素の芳香環付加反応に起因する TDI の蛍光スペクトルの短波長シフトが単一分子レベルで観測した。この手法を用い酸化チタン表面から生成する一重項酸素の時間・空間的分布を明らかにした。

・DNA ナノブロックを利用した DNA 分子センサーの開発

DNA の酸化により DNA 中に生じた正電荷(ホール)が、DNA を長距離にわたり移動することが明らかになり、その生物学的影響、また DNA をセンサーとして応用する観点から注目を集めている。これまでに我々は、DNA 中の長距離ホール移動の観測に成功し、ホール移動速度から DNA 中に生じたミスマッチの検出が可能であることを報告した。本研究では、DNA 内電荷移動速度から SNPs（一塩基多型）を読み出す DNA センサーを開発するため、DNA ナノブロックを利用した DNA 中の電荷移動について検討した。診断を行う配列に直接煩雑な化学修飾を行わなくて良いように、診断したい配列を一つのブロックとして、これに電荷注入ブロック、電荷検出ブロックを混合することにより電荷移動速度を読み出すことを検討した。混合するだけでブロック同士が結合するためには、結合部位が熱力学的に安定であり、かつ電荷が速く移動する必要がある。そこで、CG 繰り返し中の電荷移動速度をもとめたところ高速に移動することがわかり、CG 繰り返し配列をもとに DNA ナノブロックの連結部位を設計した。その結果、診断ブロックを電荷注入ブロック、電荷検出ブロックと混合するだけで電荷移動速度から診断ブロックの情報を読み出すことに成功した。

・光増感 DNA 損傷機構の解明

これまでに我々は、光増感 DNA 酸化損傷において DNA 中の電荷移動による電荷分離状態の生成が DNA 損傷を促進することを明らかにした。今回、光増感剤として Naphthalimide および Naphthaldiimide を修飾した DNA を合成し、レーザーフラッシュフォトリシスを用いた電荷分離寿命の測定、および HPLC による DNA 損傷の定量を行い DNA 損傷機構について、速度論的に検討した。損傷効率を両光増感剤で比較すると、Naphthalimide の方がより効率よく DNA 損傷を引き起こすことがわかった。不可逆的な反応は、逆電子移動の前にラジカルアニオンと酸素の反応、あるいはグアニンラジカルカチオンと水、酸素の反応が起こることにより引き起こされる。電荷分離の際に生じる光増感剤ラジカルアニオンと酸素の反応速度をそれぞれ測定したところ、Naphthalimide のラジカルアニオンと酸素の反応速度が Naphthaldiimide のラジカルアニオンと酸素の反応速度に比べ倍速いことが判明し、光増感剤ラジカルアニオンと酸素の反応速度が DNA 損傷の効率の鍵を握っていることが明らかになった。また、光増感 DNA 酸化損傷において初期的にアデニンが酸化されることの重要性を調べるため、種々の光増感剤を合成し DNA 損傷効率を調べた。DNA の損傷効率は、光増感剤が光励起に伴いアデニンを酸化できる場合にのみ、アデニン連続配列選択的に高くなることが示された。レーザーフラッシュフォトリシスを用いた速度論的検討から、アデニン連続配列のアデニン酸化が DNA 内電荷移動を経て長寿命電荷分離状態を生成することにより DNA 損傷を促進することが明らかになった。

・機能性生体分子ナノスケール材料の創製

生体分子である DNA 及びタンパクの持つ分子集合と超分子形成の能力を活用し、構造の制御及び機能化、物性の検討を行った。ボトムアップ式のナノテクノロジーにおいて、人為的な情報にしたがって分子を並び替えるナノスケールの組み立て方法は必要不可欠である。明確な構造に組み上げることが可能

なタバコモザイクウィルス(TMV)をフレームとして、自己集合により光機能性分子ピレンの規則的な集積を行った。その構造を AFM によって解析すると、2 μm を超えるロッド構造を形成し、ピレンが超分子構造の伸長を促進することが明らかとなった。ピレン間の相互作用は定常状態及び時間分解蛍光スペクトルによって検討し、ピレン間は一部が重なり、ピレンが超分子形成の際に予めスタックした構造をとることが明らかとなった。また、光捕集能を有するポルフィリン誘導体を導入した TMV 超分子構造の構築を行った。超分子を形成させるとその内部で Zn-ポルフィリンからポルフィリンへエネルギー移動が観測され、ポルフィリンの発光強度が増加することが明らかとなった。このことから、TMV 超分子内へクロモフォアを集積することで光機能性材料を構築できることが明らかとなった。

・ナノマテリアル生成のための励起ラジカルに関する研究

2種類の波長の励起光を照射する2色2レーザー技術を用いて、樹脂等の媒体中に金属ナノ粒子を三次元位置特異的に非破壊的に作成する方法を研究している。具体的には、前駆体および金属イオンを含む媒体に、波長の異なる2つのレーザー光を照射することで、その交点に強い還元力をもつ活性ラジカル等の中間体を生成させ、金属イオンを還元して位置特異的に金属ナノ粒子を作成するものである。交点を動かすことによって三次元空間に自在に金属ナノ粒子アレイを作成し、微細配線を行うことができる。ポリビニルアルコール薄膜中に金ナノ粒子を作成し、2色2レーザー照射によってナノ粒子の生成効率が上昇することを確認した。これは、活性ラジカルが金イオンを効率的に還元するためである。同時に、単一波長（第1レーザー）のレーザー照射によっても、非効率的ながら金ナノ粒子が生成してしまうという問題点が生じているが、この問題はより提案に適した条件を選択することによって解決可能である。

[原著論文]

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T Majima, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 103[48] (2006) 18072-18076.

Temperature-Driven Oxygenation Rate Control by Polymeric Photosensitizer, H. Koizumi, Y. Shiraishi, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Majima, and T. Hirai, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[27] (2006) 8751-8753.

Rapid Long-Distance Hole Transfer through a Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[34] (2006) 11012-11013.

In Situ and Ex Situ Observations of the Growth Dynamics of Single Perylene Nanocrystals in Water, T. Tachikawa, H.-R. Chung, A. Masuhara, H. Kasai, H. Oikawa, H. Nakanishi, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[50] (2006) 15944-15945.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S.-C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[51] (2006) 16340-16341.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of the Intramolecular Dimer Radical Cation of Cyclophanes, M. Fujitsuka, D. W. Cho, S. Tojo, S. Yamashiro, T. Shinmyozu, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[17] (2006) 5735-5739.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash

Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[30] (2006) 9319-9324.

Properties and Reactivity of Xanthyl Radical in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[32] (2006) 9788-9792.

Solvent Effect on the Deactivation Processes of Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[42] (2006) 11800-11808.

S-S Bond Mesolysis in alpha,alpha'-Dinaphthyl Disulfide Radical Anion Generated during -Radiolysis and Pulse Radiolysis in Organic Solution, M. Yamaji, S. Tojo, K. Tahkehira, S. Tobita, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[50] (2006) 13487-13491.

Intramolecular Exciplex and Intermolecular Excimer Formation of1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, K. H. Choi, M. J. Park, U. C. Yoon, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[10] (2006) 4576-4582.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligand to S2-Excited Sb-Tetraphenylporphyrin, M. Fujitsuka, D. W. Cho, T. Shiragami, M. Yasuda, and T. Majima, J. Phys. Chem. B (Letter), 110[19] (2006) 9368-9370.

Photoinduced Electron Transfer Processes in 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, U. C. Yoon, P. S. Mriano, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[23] (2006) 11062-11068.

Singlet Energy Migration along Alternating Block Copolymer of Oligothiophene and Oligosilylene in Solution, M. Fujitsuka, D. W. Cho, J. Ohshita, A. Kunai, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[25] (2006) 12446-12450.

Visible Light-Induced Degradation of Ethylene Glycol on Nitrogen-doped TiO2 Powders, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, H. Irie, K. Hashimoto, and T. Majima, J. Phys. Chem.B, 110[26] (2006) 13158-13165.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[26] (2006) 13296-13303.

Photoinduced Charge Separation in Titania Nanotubes, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Sekino, and T. Majima, J. Phys. Chem. B (Letter), 110[29] (2006) 14055-14059.

Monitoring the DNA Binding and Dissociation Events by Observing the Local Structural and Environmental Changes in the Dimer Interface of BamHI Using a Solvatochromic Dansyl Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[42] (2006) 21311-21318.

Probing the Surface Adsorption and Photocatalytic Degradation of Catechols on the TiO2 by Solid-State NMR Spetroscopy, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir (Letter), 22[3] (2006) 893-896.

Acceleration of Laser Induced Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir, 22[14] (2006) 6361-6366.

Reactivity of Triaryphosphine Peroxyl Radical Cations Generated through the Reaction of Triaryphosphine Radical Cations with Oxygen, S. Tojo, S. Yasui, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Org. Chem., 71[21] (2006) 8227-8232.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of 9-Cyano-10-Phenylethynylanthracenes with Donor and Acceptor Substituents, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, H.-J. Liang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T.Majima, J. Org. Chem., 71[23] (2006) 8732-8739.

Detection of G-quadruplex-TMPyP4 Complex by 2-Aminopurine Modified Human Telomeric DNA, T. Kimura, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 401-402.

Probing of Microenvironments in the Grooves of Z-DNA using Dan-modified Oligonucleotides, T. Kimura, K. Kawai, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 1542-1544.

Thermodynamic Properties of Branched DNA Complexes with Full-Matched and Mismatched DNA Strand, M. Endo and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 2329-2331.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T Majima, Chem. Commun., (2006) 3918-3920.

Effects of Substituents on Aryl Groups during the Reaction of Triarylphosphine Radical Cation and Oxygen, S. Yasui, S. Tojo, and T. Majima, Org. Biomol. Chem., 4, (2006) 2969-2973.

Formation of Pyrene Dimer Radical Cation at the Minor Groove of DNA, K. Kawai, T. Kimura, H. Yoshida, A. Sugimoto, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T.Majima, Bull. Chem. Soc. Jpn., 79[2] (2006) 312-316.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Angew. Chem. Int. Ed., 45[1] (2006) 120-122.

Properties of Excited Ketyl Radicals of Benzophenone Analogues Depending on the Size and Electronic Character of Aromatic Rings, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[6] (2006) 1610-1617.

One-Electron Redox Processes during the Polyoxometalate-Mediated TiO2 Photocatalytic Reactions Studied by Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[11] (2006) 3124-3131.

Pyrene-Stacked Nanostructures Constructed in the Tabacco Mosaic Virus Rod Scaffold, M. Endo, H. Wang, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem Eur. J., 12[14] (2006) 3735-3740.

α-Carbonyl Substituent Effect on the Lifetimes of Triplet 1,4-Biradicals from Norrish Type II Reaction, X. Cai, P. Cygon, B. Goldfus, A. G. Griesbeck, H. Heckroth, M. Fujitsuka, and T. Majima,

Chem. Eur. J., 12[17] (2006) 4662-4667.

One-Electron Oxidation Pathways during beta-Cyclodextrin-Modified TiO2 Photocatalytic Reactions, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[29] (2006) 7585-7594.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 420[1-3] (2006) 90-94.

Photophysical and Photochemical Properties of Corannulenes Studied by Emission and Optoacoustic Measurements, Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis, M. Yamaji, K. Takehira, T. Mikoshiba, S. Tojo, M. Fujitsuka, Y. Okada, T. Majima, S. Tobita, and J. Nishimura, Chem. Phys. Lett., 425(1-3), 53-57 (2006).

Direct Fluorescence Measurement of Excited Radical Cations of 1,3,4-Trimethoxybenzene by ns-ps Two-color Two-laser Flash Photolysis, X. Cai, P. M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 432[4-6] (2006) 436-440.

Important Factors for the Formation of Radical Cations of Stilbene and Substituted Stilbenes during Resonant Two-Photon Ionization with a 266- or 355-nm Laser, S. Samori, M. Hara, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Photochem. Photobiol. A, 179[1-2] (2006) 115-124.

Emission from Charge Recombination between Radical Cations and Radical Anions of 9-Cycano-10-(p-substituted phenyl)anthracene Generated during Pulse Radiolysis, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-H. Lin, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Chinese Chem. Soc., 53[6] (2006) 1225-1234.

[解説、総説]

DNA 中の電荷移動と DNA ナノサイエンス、真嶋哲朗、現代化学、11 [11] (2006)25-29.

マルチレーザー励起で生じる高励起状態の化学、藤塚守、坂本雅典、真嶋哲朗、光化学、37 [3] (2006) 157-164.

[著書]

「電子線エネルギーの吸収と高励起状態」、「光応用技術・材料事典」（山岡亜夫編）、真嶋哲朗、㈱産業技術サービスセンター、(2006) 第 1 章光反応材料の基礎、 1 節励起状態からの反応、1.2.1 項、35-37 頁

[特許]

「金属ナノ粒子の形成方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-121694

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-142132

「DNA ナノブロックを利用した DNA ナノエレクトロニクス」真嶋哲朗、川井清彦、小阪田泰子、藤塚守、特願 2006-291734

「活性酸素種を単一分子レベルで検出する方法」真嶋哲朗、立川貴士、藤塚守、特願 2006-316047

「DNA 電荷移動を利用した DNA 一分子蛍光測定による一塩基多型の検出法」真嶋哲朗、高田忠雄、川井清彦、藤塚守、特願 2007-6829

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-28166

「修飾金属ナノ粒子およびその製造方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-095031

[国際会議]

Mechanism of Photosensitized DNA Damage: Hole Transfer in DNA and the Role of Oxygen (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Photochemistry of Amino Acid Derivatives: Stereoselective Synthesis of β-Lactames and Cyclobutanols (Invited), *A. G. Griesbeck, T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

TiO_2 Photocatalytic One-Electron Oxidation of Aromatic Compounds Studied by Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Rapid Energy Migration in Porphyrin Polypeptides, *M. Fujitsuka, D. W. Cho, N. Solladié, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Transient Radical Pair in the Photoinduced Electron Transfer Mediated by the Double Strand DNA (Invited), *K. Akiyama, K. Kawai, T. Takada, T. Ikoma, T. Majima, S. Tero-Kubota, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Energy and Charge Transfer in Porphyrin Supramolecular Systems (Invited), *T. Majima, 209th ECS Meeting at Denver (The Electrochemical Society) Symposium on “Porphyrins and Supramolecular Assemblies”, Adams Mark Denver Hotel, Denver, May 7-12, 2006.

Photosensitized One Electron Oxidation of DNA towards Photodynamic Therapy (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Transport in DNA, T. Takada, K. Kawai (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Photochemical Control of a Restriction Enzyme BamHI Activity Using Azobenzene-Bearing Amino Acids, K. Nakayama, M. Endo, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial

Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Monitoring the B-A Conformational Transition of Nucleic Acids by Dan-Modified DNA, T. Kimura, K. Kawai and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts, Seminar in Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC (Invited), *T. Majima, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, Oct 27, 2006.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, "CLUSTOXDNA Meeting on the Chemistry and Biochemistry of Oxidative DNA Damage," in Gandia, Valencia, Spain, Oct 28-Nov 1, 2006.

Pyrene-Assmbled Nanostructures Constructed in the Tobacco Mosaic Virus Scaffold (Invited), *M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer in DNA and Photosensitized DNA Damage: Importance of Adenine Oxidation (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Energy Migration along Photofunctional Polymers (Invited), *M. Fujitsuka, D. W. Cho, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Two-Color Two-Laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film (Invited), *M. Sakamoto, K. S. Sik, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences (Invited), * T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Invited), *K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

DNA Nano-Structures Controlled by Branched DNA Connectors (Invited), *M. Endo and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of Intramolecular Dimer Radical Cation of Cyclophanes, *M. Fujitsuka, T. Shinmyozu, T. Majima, K. Kawai, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer Rates in A-from DNA/2'-OMeRNA Hybrid, *K. Kawai, Y. Osakada, A. Sugimoto, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photochemical Regulation of BamHI Activity Using an Azobenzene Moiety Site-selectively Introduced into the Protein-Protein Interface, *K. Nakayama, M. Endo, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, *M. Sakamoto, K. S. Sik, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Kinetics of Transient End-to-End Contact of Single-Stranded DNAs, *A. Sugimoto, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Laser-induced Molecular Chemistry and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser

irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Laser Chemistry of Nanomaterials and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Beam-Induced Molecular Chemistry (Oral), *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

One-Electron Oxidation Pathways during β-Cyclodextrin-Modified TiO_2 Photocatalytic Reaction, Takashi Tachikawa, Sachiko Tojo, Mamoru Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Long-Distance Hole Transfer through Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, S. S. Kim, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9,

2006.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S. C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Charge Transfer in DNA (Oral), *T. Majima, Commemorative Workshop of Opening SANKEN USA Branch, San Francisco, Dec 15-16, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), *T. Majima, The 8th International Conference on ECOMATERIALS, Kitakyusyu International Conference Center, Jan 11-14, 2007.

Single Molecule Fluorescence Imaging of TiO_2 Photocatalytic Reaction (Oral), *T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, *K. Naito, T. Tachikawa, S. -C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Rapid Energy Migration along Photofunctional Polymers, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Charge Separation via Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, S. S. Kim, Takashi Tachikawa, Mamoru Fujitsuka, and *Tetsuro Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Single-Molecule Fluorescence Imaging of the Remote TiO_2; Photocatalytic Reaction, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

真嶋　哲朗	2006 International Symposium on Frontier Photoscience （組織委員長）
真嶋　哲朗	Langmuir, American Chemical Society（Senior Editor）

[国内学会]

光化学討論会	12 件
放射線化学討論会	3 件
日本化学会第 87 回春季年会	10 件

[取得学位]

修士（工学）

麻野井　祥明	TiO_2-DNA ナノ複合体における光化学
岡田　みつ江	アポトーシス誘導酵素の光化学的制御

博士（工学）

大関　陽介	芳香族化合物オリゴマーの高励起状態に関する研究

[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	19,240

特定領域研究		
真嶋　哲朗	光機能界面における有機物の反応機構の解明	10,200
萌芽研究		
真嶋　哲朗	ＤＮＡ自己組織化に基づくカーボンナノチューブアレイの構築	1,000
基盤研究（C）		
藤乗　幸子	新規ポリ酸修飾酸化チタン光触媒の開発とその多重励起効果	2,500
若手研究(ｽﾀｰﾄｱｯﾌﾟ)		
立川　貴士	光触媒治療への応用を目指した二酸化チタンーDNA ナノ複合体の創製	1,310
特別研究員奨励費		
木村　巧	動的ストークスシフトを利用した DNA 高次構造の水和過程に関する研究	900
特別研究員奨励費		
大関　陽介	高励起三重項状態からの分子内電荷分離と超高速光スイッチ分子デバイスへの応用	1,000
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	1,000
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	1,000

[受託研究]

真嶋　哲朗	IDEC 株式会社、株式会社サタケ	レーザー光を用いたプラスチックの種類判別方式の研究	4,510

[奨学寄附金]

真嶋　哲朗	旭硝子株式会社	1,000

[共同研究]

真嶋　哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノチューブを用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,155
真嶋　哲朗	三菱化学株式会社	高励起状態からの化学反応に関する基礎的研究	1,000

分子合成化学研究分野

教授	笹井　宏明
助教授	鬼塚　清孝
助手	市原　潤子、Doss Jayaprakash
特任助手	竹中　和浩
学振博士研究員	Mahesh L. Patil、Gan Bahadur Bajracharya
研究補助員	鈴木　薫
大学院学生	川瀬　敬啓、Cilamkoti Venkat Laxman Rao、Priti Sharad Koranne、辻原　哲也、Rashid Nabisaheb Nadaf、井上　直人、Naveen Kumar Mangu、奥田　治己、片山　智美、城本　隆之、堀井　厚志、板野　雄、亀山　千明、中司　修平、平田　修一、是枝　祐貴、Gabr Randa Kassem Mohamed
研究生	Doss Rajesh
学部学生	田中　薫理
事務補佐員	丹野　美鈴、大浜　美帆

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

・新規多機能不斉触媒の開発と反応機構の考察

二重活性化機構の概念に基づき 2-ナフトール誘導体の酸化的不斉ホモカップリング反応に有効な触媒を開発した。*R* 体のジホルミルビナフトールと *tert*-(*S*)-ロイシンから導かれるジイミン体に対し 4 当量のオキシ塩化バナジウム（$VOCl_3$）を添加することで新規二核バナジウム錯体を合成した。本触媒を空気雰囲気下 2-ナフトール類のカップリング反応に適用したところ、生成物を光学収率最高 95%で得ることに成功した。分光学的手法・磁化率測定・反応速度解析等を用い触媒活性種に関して詳細な検討を行い本反応における二重活性化機構の解明に一歩近づいた。

・新規多機能不斉有機分子触媒の開発

BINOL の 3 位にルイス塩基として機能するピリジルアミノメチルあるいはジフェニルホスフィノフェニル部位を導入した有機分子触媒の開発に成功した。α,β－不飽和カルボニル化合物類とトシルアルドイミン誘導体との不斉 aza-Morita-Baylis-Hillman 反応に本触媒を用いると、高収率・高選択的に付加体が得られることを見出した。

・新規スピロ型配位子の効率的調製法の開発

マロン酸エステルと多様なホモアリルハライド類との反応により多種多様な新規スピロ型配位子の効率的構築に成功した。調製した新規スピロ型配位子を有するパラジウム二価錯体は、アルケニルアルコールの触媒的不斉ワッカー型環化反応やタンデム環化反応において高い触媒活性と選択性を示すことが判明した。イソオキサゾリンとイソオキサゾールの特異的配位環境ならびに剛直なスピロ骨格が構

築する不斉環境の有用性を明らかにした。

・光学活性な新規スピロイオン性液体とスピロ型第四級アンモニウム塩の開発

環境低負荷型不斉反応プロセス開発に重要な光学活性イオン性液体の設計ならびに合成を行った。スピロ骨格にイミダゾリウム塩、ピリジニウム塩およびアンモニウム塩を導入した新規有機塩を創製した。室温で液化するキラルスピロイミダゾリウム塩の合成に成功した。

・面不斉シクロペンタジエニル錯体による立体選択的反応の開発

面不斉シクロペンタジエニルールテニウム錯体を利用した不斉触媒反応の開発に成功した。面不斉シクロペンタジエニルールテニウム錯体を触媒とした不斉アリル位置換反応の展開としてシンナミル誘導体によるフェノールおよびアルコール類の不斉アリル化反応を検討したところ、高収率、高位置ならびに高エナンチオ選択的に生成物が得られることを見出した。

・有機遷移金属化合物を用いる精密重合

オルト位に嵩高い置換基を有するアリールイソシアニドが有機ロジウム錯体を開始剤としてリビング重合することを見出した。本反応系に過剰のホスフィンを添加すると、重合反応が加速されると共にリビング性も向上することがわかった。また、本重合系を利用して、種々の光学活性エステル基を有する嵩高いアリールイソシアニドモノマーから一方向巻きのらせん状ポリイソシアニドを合成することにも成功した。

・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触媒反応の開発

“固体分散相”という新しいアイデアの基に、ソルベントーフリー固相状態で有機化合物の酸化反応を行うグリーン酸化触媒反応システムを開発した。ドデカタングステン酸セチルピリジニウム塩触媒/urea-H_2O_2 酸化剤/アパタイトを組み合わせた固相系システムは、アルケンやアルケニルアルコールなどのエポキシ化反応を環境に低負荷であるアパタイト固体分散相上、常温で効率よく行うことができ再利用できるシステムである。不均一固相系反応であるにもかかわらずこのように高い効率を示すのは、新規パーオキソ種が分散相上で分解しにくいことに起因する。従来の液相系では、W12 のクラスター構造は完全に分解し、Ｗ２つを含む活性種となる。新規パーオキソ種の構造は、ナノサイズのポリ酸クラスター構造を保持し、その特異的位置がパーオキソ型に変換したものであることを明らかにした。従って、本システムはポリ酸クラスター構造の多様性を生かした触媒反応システムとなる。

この“固体分散相”を利用して、分子状酸素を酸化剤とするソルベントーフリー酸化触媒反応システムを開発した。1 気圧の酸素雰囲気下、バナジウム置換ヘテロポリ酸触媒/アパタイト分散相を用いた粉末状態で行う、簡便な酸化的脱水素反応のリサイクルシステムとなった。このシステムでは、α－テルピネンから *p*－シメンへの変換が、常温、大気中でも容易に行えることを見出した。

［ 原著論文 ］

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka and H. Sasai, Org. Lett., 8[2] (2006) 227-230.

Conformational Lock in Brønsted Acid - Lewis Base Organocatalyst for the Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa and H. Sasai, Tetrahedron: Asymmetry, 17[4] (2006) 578-583.

A Brønsted Acid - Lewis Base Organocatalyst for the Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, S. Takizawa and H. Sasai, Synlett., [5] (2006) 761-765.

Precise Synthesis of Porphyrin Array Scaffolding Polyisocyanides, F. Takei, D. Kodama, S.

Nakamura, K. Onitsuka and S. Takahashi, J. Polym. Sci. Part A, Polym. Chem., 44[1] (2006) 585-595.

Living Polymerization of Bulky Aryl Isocyanide with Arylrhodium Complexes, K. Onitsuka, M. Yamamoto, T. Mori, F. Takei and S. Takahashi, Organometallics, 25[5] (2006) 1270-1278.

Diastereoselectivity at Chiral Metal Center of Half-sandwich-type Ruthenium Complexes with Planar-chiral Cyclopentadienyl Ligands in Multiple Ligand Transfer Reaction, T. Katayama, K. Onitsuka and S. Takahashi, J. Organomet. Chem., 691[10] (2006) 2245-2256.

Synthesis and Redox Properties of Trinuclear Ruthenium-acetylide Complex with Tri(ethynylphenyl)amine-bridge, K. Onitsuka, N. Ohara, F. Takei and S. Takahashi, Dalton Trans., [30] (2006) 3693-3698.

Helical Sense Selective Polymerization of Bulky Aryl Isocyanide Possessing Chiral Ester or Amide Groups Initiated by Arylrhodium Complexes, K. Onitsuka, T. Mori, M. Yamamoto, F. Takei and S. Takahashi, Macromolecules, 39[21] (2006) 7224-7231.

Development of Efficient Methods for the Immobilisation of Multicomponent Asymmetric Catalysts, D. Jayaprakash, S. Takizawa, T. Arai and H. Sasai, Journal of Experimental Nanoscience, 1[4] (2006) 477-510.

Vanadomolybdophosphoric Acid/Fluorapatite Solid-phase System for Aerobic Oxidative Dehydrogenation, K. Iteya, J. Ichihara, Y. Sasaki and S. Ito, Catal. Today, 111[3-4] (2006) 349-353.

Participation of New Active Species in Epoxidation with Cetylpyridinium Dodecatungstate/FAp/Urea-H_2O_2 System, J. Ichihara and Y. Sasaki, Catal. Today, 117[1-3] (2006) 120-125.

[解説、総説]

らせん状ポリイソシアニドの精密合成と機能、鬼塚清孝、武井史恵、高分子論文集、63[7] (2006) 458-467.

外部刺激によるポリイソシアニドのらせん構造変化、鬼塚清孝、武井史恵、Jasco Report、48[2] (2006) 26-30.

固体分散相を用いた無溶媒エポキシ化反応および酸化反応、佐々木洋、市原潤子、化学工業、57[6] (2006) 431-436.

[著書]

「有機分子触媒の新展開」(柴崎正勝編集)、笹井宏明、滝澤忍、松井嘉津也、シー・エム・シー出版、(2006) 231-242.

[特許]

「新規バナジウム化合物」滝澤忍、笹井宏明、片山智美、特願 2006-240632

［ 国際会議 ］

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 8th International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development of Effective Enzyme Mimic for Urease, *D. Jayaprakash, R. N. Nadaf, H. Sasai, 8th International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development and Applications of Novel Spiro-type Ligands, *P. Koranne, T. Tsujihara, K. Takenaka, K. Onitsuka, H. Sasai, 8th International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development of Catalytic Enantioselective Reaction Utilizing Chiral Spiro-type Ligands (Oral), *T. Tsujihara, P. Koranne, J. Yogo, K. Wakita, T. Shinohara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference, Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference, Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

A Novel Bifunctional Asymmetric Organocatalysts for Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, S. Takizawa, H. Sasai, 7th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto, Japan, May 25-26, 2006.

Enantioselective Catalyses Using Novel Spiro-type Ligands, *P. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, J. Yogo, K. Onitsuka, H. Sasai, 7th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto, Japan, May 25-26, 2006.

Development of Novel Chiral Isoxazoline/Isoxazole Hybrid-type Ligands (Oral), P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, *H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Development of New Methods towards the Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, *S. Takizawa, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, *H. Sasai, International Symposium on Organocatalysis in Organic Synthesis, Glasgow, UK, Jul. 5-7, 2006.

Development of Metal-bridged Polymers as Enantioselective Catalysts, S. Takizawa, *N. Inoue, H. Sasai, XXII International Conference on Organometallic Chemistry, Zaragoza, Spain, Jul. 23-28, 2006.

Keggin Phosphomolybdate on Apatite: An Environmentally Benign Solid Catalyst System for Selective Oxidation of Sulfides, *J. Ichihara', K. Iteya, Y. Sasaki, 5th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology, Tokyo, Jul. 23-28, 2006.

Precise Synthesis and Properties of Helical Polyisocyanides (Invited), *K. Onitsuka, S. Takahashi, 16th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers & IUPAC 2nd International Symposium on Novel Materials and Synthesis, Lanzhou, China, Jul. 24-27, 2006.

Enantioselective Catalysis Using Novel Spiro-type Ligands and Novel Spiro Isoxazoline-Isoxazole Hybrid Ligands (Oral), *P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 232nd ACS National Meeting, San Francisco, USA, Sep. 10-14, 2006.

Asymmetric Catalysis of Planar-Chiral Cyclopentadienyl-Ruthenium Complexes in Allylic Substitutions, *K. Onitsuka, H. Okuda, H. Sasai, 1st International Conference of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Naha, Okinawa, Japan, Oct.16-20, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 1st International Conference of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Naha, Okinawa, Japan, October16-20, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Asymmetric Allylation Catalyzed by Planar-Chiral Cyclopentadienyl-Ruthenium Complexes, *K. Onitsuka, H. Okuda, H. Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Dual Activation in an Enantioselective Homolytic Coupling Reaction, *T. Katayama, C. Kameyama, S. Takizawa, K, Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Enantioselective Synthesis of Heterocyclic Compounds Utilizing Pd(II)-SPRIX Catalyst, *G. B. Bajracharya, P. Koranne, T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Development of Oxidative Reactions Catalyzed by Ir Complex, *T. Suzuki, N. K. Mangu, T. Yamada, T. Matsuo, K. Watanabe, T. Katoh, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Applications of Novel Chiral Spiro Isoxazoline/Isoxazole, P. Koranne, G. B. Bajracharya, K. Onitsuka, *H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Chiral Isoxazoline/Isoxazole Ligands and Their Application in Enantioselective Catalysis, *P. Koranne, G. B. Bajracharya, M. L. Patil, T. Tsujihara, C. V. L. Rao, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on

Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Novel Asymmetric Cascade Reaction Catalyzed by Pd-SPRIX, *T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Artificial Enzyme Utilizing Multiple Interactions in Catalytic Site, *T. Kawase, R. N. Nadaf. G. R. Kassem, D. Jayaprakash, S. Takizawa, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Living Polymerization of Bulky Aryl Isocyanide with Arylrhodium Complexes and Application to Precise Synthesis of Helical Polymers, *K. Onitsuka, M. Yamamoto, T. Mori, F. Takei, S. Takahashi, Osaka University Macromolecular Symposium on Chemistry, Physics, and Biology in Macromolecular Science, Osaka, Japan, Feb. 19-21, 2007.

Utility of Cetylpyridinium Dodecatungstate As a Green Solid Catalyst for Epoxidation, Y. Sasaki, K. Momoi, K. Iteya, *J. Ichihara, GSC-AON 2007 (JOINT MEETING OF THE 1st Asian-Oceanian Conference on Green and Sustainable Chemistry AND THE 7th Annual Green and Sustainable Chemistry Symposium), Tokyo, Japan, March 6-9, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

笹井　宏明　　ICOB-5 & ISCNP-25 IUPAC International Conference on Biodiversity and Natural Product（組織委員）

[国内学会]

有機合成シンポジウム	1 件
有機反応懇談会	2 件
有機金属化学討論会	3 件
電気化学秋季大会	1 件
高分子討論会	1 件
日本化学会春季年会	12 件

[取得学位]

修士（理学）

奥田　治己	面性キラリティーを有するシクロペンタジエニルールテニウム錯体触媒を用いたフェノール及びアルコール類の不斉 *O*－アリル化反応
片山　智美	キラルな二核バナジウム(V)錯体を触媒とする 2－ナフトール誘導体の酸化的不斉ホモカップリング反応の開発
城本　隆行	ルイス塩基部位を有するらせん状ポリイソシアニド触媒の開発に関する研究
堀井　厚志	酸－塩基型不斉有機分子触媒による aza-Morita-Baylis-Hillman (aza-MBH) 反応の開発

博士（理学）

川瀬　敬啓	触媒サイトでの多点制御機能を活用する人工酵素の開発
Cilamkoti　Venkat	Design, Synthesis and Applications of Novel Chiral Spiro Heterocyclic Compounds

Laxman Rao
Priti Sharad Koranne　Design of Novel Hybrid Spiro Isoxazoline-isoxazole Ligands and Applications to Pd-catalyzed Enantioselective Reactions

[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	2,100
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	1,300
特別研究員奨励費		
笹井　宏明	酵素機能の発現を志向するデンドリマー固定化触媒の開発	1,200
笹井　宏明	スピロ骨格を有する新規不斉触媒の開発と応用	1,500
基盤研究（C）		
市原　潤子	環境にやさしい固体分散相を用いる無溶媒型酸化触媒反応システム	700

[受託研究]

笹井　宏明	科学技術振興機構（JST）	スピロ型不斉配位子の創製を基盤とする新規医薬品合成中間体の供給	3,250

[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	500
笹井　宏明	日産化学工業	400
市原　潤子	協和化学工業株式会社	300

[共同研究]

該当なし

[その他の競争的研究資金]

鬼塚清孝	日本証券奨学財団	有機−無機ハイブリッド材料を指向した機能性有機金属ナノ分子の創製	1,200
鬼塚清孝	向科学技術振興財団	らせん状ポリイソシアニドを利用した光学異性体分離材料の開発	1,500

分子材料解析研究分野

教授（兼任）　　加藤　修雄
助手　　高井　嘉雄、開發　邦宏
博士研究員　　森　修一（平成 18 年 12 月 1 日採用）

a) 概要

分子材料解析研究分野は、平成 16 年度より新設された。当分野では、分子化学、材料化学、生命化学、環境化学の重要な課題に関する高度な解析手法・分析手法およびそれらの解析理論・分析理論に基礎をおいた先端性の高い分子材料解析化学の研究を行う。すなわち、物質の原子・分子・集合体構造と材料機能発現との相関解析を行い、新規な、あるいは高度な機能を発揮する新素材の創製をめざして、機能性分子材料の分子構造と機能の解析法の開発、機能性分子材料の分子構造と機能の解析の開発、分子材料の原子・分子レベルの基礎的かつ総合的な研究を行う。同時に、材料解析センターの支援業務にも寄与する。

b) 成果

・エレクトロスプレーイオン化質量分析による研究

アキラルな分析法であるエレクトロスプレー質量分析を用いた高感度、迅速にキラルカルボン酸(ゲスト)の光学純度決定に挑戦した。我々が開発した質量分析を用いたエナンチオマー同位体標識ホスト法によるジアステレオメリックなホスト–金属–ゲストコンプレックスイオン対のピーク強度比較は、ゲストキラルカルボン酸の正確な光学純度と相関することがわかった。

・固体高分解能 NMR 測定による研究

励起分子化学研究分野との共同研究として、固体高分解能 NMR を使って TiO_2 光触媒反応について検討した。TiO_2 表面に吸着したカテコール類の吸着状態に関する知見と、その光触媒反応による表面吸着分子の化学反応について知見を得た。

・赤外二光子応答型アンチセンスペプチド核酸を用いた DNA の転写制御

細胞内の遺伝子発現をピンポイント、且つ望むべきタイミングで ON 又は OFF に制御にすることが可能になれば、生命現象解明のツールや遺伝子疾患治療薬など幅広い用途に応用できると期待される。我々は、非天然核酸分子に生体非侵襲性の赤外線に応答するアゾベンゼン分子を搭載することで、細胞内の遺伝子発現をリモートコントロールする技術の開発を目指した。これまでに、医薬品化学研究分野および励起化学研究分野との共同研究として、赤外二光子応答型のアゾベンゼン誘導体の合成に成功した。これまでのところ、それらアゾベンゼン誘導体を非天然アンチセンス分子（ペプチド核酸）に搭載し、標的とする DNA に対する会合を制御することに成功している。

・インフルエンザウイルス感染を効率的に阻害する新規カテキン誘導体の創製

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）はインフルエンザの感染を阻害することが報告されてきた。しかしながら、その生理条件下での安定性、及び細胞膜親和性が低いことから、医薬品への応用が検討されてこなかった。我々は医薬品化学研究分野との共同研究により、リパーゼ触媒エステル化反応を用いて EGCG 脂肪酸モノエステル誘導体を合成する手法を開発した。そして、各 EGCG モノエステル誘導体のインフルエンザウイルスに対する感染阻害効果をイヌ腎臓細胞に対するプラーク形成能を指標に評価した。EGCG モノエステル誘導体の抗ウイルス効果は脂肪酸の炭素鎖が長くなるに従って向上した。さらに EGCG パルミチン酸モノエステルを用いた場合、その抗ウイルス効果は EGCG に比較して約 30 倍に達することを見出した。

［ 原著論文 ］

Enantiomeric Excess Determination of a Chiral Carboxylic Acid Using the Enantiomer-Labeled Host Method by Electrospray Ionization Mass Spectrometry, Y. Takai, K. Iguchi, H. Yamada, M. Shizuma, R. Arakawa and M. Sawada, JMS Letters, J. Mass Spectrometry, 41[2] (2006) 266-268.

Visible Light-Induced Degradation of Ethylene Glycol on Nitrogen-Doped TiO_2 Powders, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, H. Irie, K. Hashimoto and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[26] (2006) 13158-13165.

Probing the Surface Adsorption and Photocatalytic Degradation of Catechols on TiO2 by Solid-State NMR Spectroscopy, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka and T. Majima, Langmuir, 22[3] (2006) 893-896.

［ 解説、総説 ］

Lipase-Catalyzed Synthesis of Novel Tea Catechin Derivatives and Their Application to Anti-Influenza Agents, K. Kaihatsu, S. Mori, S. Miyake, T. Nakaya, S. D. Fuller and N. Kato, Yakugaku Zasshi, 126 (2006), 57-58.

［ 国際会議 ］

Evidence for Ring-size Controlled Competitive Channels in α vs. ω-Hydrogen Migration in *N*-(5-Phenylvaleryl)azacycloalkan-2-thiones Probed by Isotope Labeling and Charge Inversion, *H. Yamaoka, K. Shiono, S. Hayakawa, K. Isa, N. Dougawa, Y. Takai; N. M. M. Nibbering: The 54th ASMS Conference, Seatle, USA, May 28-Jun 1, 2006..

Unimolecular Dissociation for *N*,*N*'-(Di)acylimidazolidin(e)-2-(thi)ones, *H. Yamaoka, K. Okada, K. Isa, N. Dougawa, K. Kuzuno, Y. Kawabata, Y. Takai, M. Sawada, N. M. M. Nibbering, 17th International Mass Spectrometry Conference, Prague, Czech Republic, Aug 27–Sep 1, 2006.

Regulation of DNA Transcription by Infrared Controllable Antigene Peptide Nucleic Acids, *I. Imada, K. Kaihatsu, X. Cai, M. Fujitsuka, T. Majima and N. Kato, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 [SISNN-2006], Osaka, Japan, Sep 19-20, 2006.

Synthesis of Monoester Derivatives of Epigallocatechin Gallate Using Pancreatic Esterase and Their Application to Antiviral Agents, *S. Mori, K. Kaihatsu, S. Miyake, T. Nakaya and N. Kato, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 [SISNN-2006], Osaka, Japan, Sep 19-20 2006.

Regulation of DNA Transcription by Infrared Controllable Antigene Peptide Nucleic Acids, *K. Kaihatsu, X. Cai, M. Fujitsuka, T. Majima and N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

Synthesis of Monoester Derivatives of Epigallocatechin Gallate Using Pancreatic Esterase and Their Application to Antiviral Agents, *S. Mori, K. Kaihatsu, S. Miyake, T. Nakaya and N. Kato, 5th 21st Century COE "Toward Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Hyogo, Japan, Dec 8-9, 2006.

［ 国内学会 ］

日本化学会	6 件
質量分析総合討論会	4 件
基礎有機化学討論会	1 件
日本カテキン学会	1 件
食品薬学シンポジウム	1 件
バイオオプティクス研究会	1 件
その他	3 件

［ 受託研究 ］

単位：千円

開發　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	14,300

［ 共同研究 ］

開發　邦宏	太陽化学株式会社	電界紡糸技術による食品素材からの高機能部材の開発	1,000

知能システム科学研究部門

概要

膨大な情報がディジタル化され、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ーフェイ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（高次推論方式分野）など、人間の知的活動の根源に関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的な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開発
・オントロジー工学に基づく機能的知識の体系化とその実証
・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
・協調学習インタラクション分析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のためのサービス利用者行動モデル構築方法論の強化とオントロジーの改良
・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
・理解容易な知識のマイニングに関する研究
・数値データからの時間依存法則式発見

知識システム研究分野

教授	溝口　理一郎
助教授	來村　徳信
助手	笹嶋　宗彦
特任助手（常勤）	林　雄介
ポスドク研究員	Daniele Allard
大学院学生	砂川　英一、武内　雅宇、小路　悠介、垂見　晋也、磯谷　セイジ、Mesbahy Houda、鷲尾　尚哉、大久保　公則
学部学生	遠藤　諭、古谷　孝一郎
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。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が失われ、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、分散環境下におけるオントロジー構築を支援するために、複数オントロジーをネットワーク上で共有すると共にそれらの依存関係を管理しながらオントロジーの構築を進める機能を開発した。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を進めた。

・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。本年度は、企業内ネットワークにおける技術文書に装置の機能を表すメタデータを付加し、深い意味的な検索を可能にする枠組みとシステムを開発した．さらに、機能だけではなく装置に関連するプロセスについて体系化を試み、また既存の機能概念体系との対応付けを行うことで、知識の相互運用性の向上を進めた。

・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、オントロジー工学応用の一環として、情報教育教授設計を支援する包括的なオントロジーを構築し、それに基づくマルチエージェント技術を適用して，情報教育授業設計を動的に支援するシステムのプロトタイプを構築した。昨年度までに開発したメタ認知システムの包括モデルに基づいて、論文作成訓練システムの設計を行った。さらに、長年進めてきた学習理論・教授理論のオントロジーを一般公開すると共に、それに基づいて理論と標準技術の両方に準拠した学習・教授シナリオ作成支援システムのプロトタイプシステム SMARTIES を開発した。また，既に開発した協調学習理論オントロジーを改善して、協調学習のプロセスモデルを開発し、それに基づいて理論を可視化するシステムを開発した。

・知識の継承・創造支援のための情報基盤

人間の社会は、長い歴史の中で知識を生み出し・継承し、洗練することで成長している。そのための媒体として書物が永く使われてきたが、近年は情報インフラが整備され、ネットワークで有機的に結合されたコンピュータが主な媒体として定着しつつある。本研究では、組織論・経営学の知見を参照しながら情報基盤を基礎とした組織知識の成長のモデルを提示し、それを核にした情報基盤の全体構想の構築と情報システム *Kfarm* の開発を進めている。この研究テーマは、オントロジー工学と教育情報システ

ムという本分野が世界的に先駆けている２つの領域の専門性を複合して初めて可能になる独創的なものである。この構想の基礎として本年度までに様々な方向からアプローチし、協調学習支援システム、組織知メモリ、知識創造コミュニティの形成支援システムを実現している。また、協調場設計意図説明機能、ナレッジマネジメントシステムを指向した外部発信システム、及び組織における実践と学習の両方の長所を活かした協調場設計支援システムを開発した。本年度は、*Kfarm* と機能構造記述システムとを統合して、人工物の設計意図を広範囲に保存し、設計知識の成長と共有を促進するシステムを開発した。

・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享受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。本年度も引き続きモバイルサービスを提供する企業との共同研究を行い、サービス利用者行動モデル構築方法論の適用対象を拡大した。モデル構築の核となるオントロジーの改良を進め、次年度以降のシステム試作につなげるためのコンテンツ整備を行った。

[原著論文]

An Ontological Model of Device Function: Industrial Deployment and Lessons Learned, Y. Kitamura, Y. Koji and R. Mizoguchi, Applied Ontology, 1[3-4] (2006) 237-262.

Building an Ontology of IT Education Goals, T. Kasai, H. Yamaguchi, K. Nagano and R. Mizoguchi, Int. J. Cont. Engineering Education and Lifelong Learning, 16[1/2] (2006) 1-17.

実践・教育複合型協調学習場の設計支援に向けたオントロジー工学的アプローチ、武内 雅宇、 林 雄介、 池田 満、 溝口 理一郎、人工知能学会論文誌、21[2] (2006) 184-194.

[解説、総説]

オントロジー工学とセマンティック Web における意味表現、溝口理一郎、人工知能学会誌、21[6] (2006) 699-705.

[著書]

「オントロジー構築入門」（溝口　理一郎編集）、 古崎晃司、笹島宗彦、來村徳信、溝口理一郎、オーム社、(2006).

[国際会議]

Towards Ontologies of Functionality and Semantic Annotation for Technical Knowledge Management (Oral), *Y. Kitamura, N. Washio, Y. Koji, and R. Mizoguchi, New Frontiers in Artificial Intelligence: Joint JSAI 2005 Workshop Post-Proceedings, LNCS 4012, Springer Berlin / Heidelberg (2006) 17-28

A Collaborative Learning Design Environment to Integrate Practice and Learning based on Collaborative Space Ontology and Patterns (Oral), *M. Takeuchi, Y. Hayashi, M. Ikeda, R.

Mizoguchi, the 8th International Conference on Intelligent Tutoring Systems(ITS2006), Jhongli, Taiwan, June 26-30, 2006

Mobile User Behavior Modeling for Task-oriented Navigation Based on Ontological Engineering (Invited), *R. Mizoguchi and *M.Sasajima, International Workshop on Mobile Services and Ontologies, Nara, Japan, May 9, 2006.

Fundamental Consideration of Role Concepts for Ontology Evaluation (Oral), *K. Kozaki, E. Sunagawa, Y. Kitamura and R. Mizoguchi, Evaluation of Ontologies for the Web (EON2006) 4th EON Workshop, Edinburgh, United Kingdom, May 22, 2006

Ontology Engineering and Its Applications (Plenary), *R. Mizoguchi, KICSS2006, Ayutthaya, Thailand, August, 2006.

Role Organization Model in Hozo (Oral), E. Sunagawa, K. Kozaki, Y. Kitamura, *R. Mizoguchi, EKAW 2006 - 15th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management Managing Knowledge in a World of Networks, Podebrady, Czech Republic, Oct. 2-6, 2006.

An Ontology-based Annotation Framework for Representing the Functionality of Engineering Devices (Oral), *Y. Kitamura, *N. Washio, Y. Koji, M. Sasajima, S. Takafuji, R. Mizoguchi, ASME 2006 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference (ASME IDETC/CIE 2006), Philadelphia, Pennsylvania, USA, September 10-13, 2006.

Roles of Ontologies of Engineering Artifacts for Design Knowledge Modeling (Invited), *Y. Kitamura, the 5th International Seminar and Workshop Engineering Design in Integrated Product Development (EDIProD 2006), Gronow, Poland, September 21-23,2006.

Some Ontological Distinctions of Functions of Technical Artefacts (Invited), *Y. Kitamura, R. Mizoguchi, The 15th Altenberg Workshop in Theoretical Biology “Comparative Philosophy of Technical Artefacts and Biological Organisms”, Altenberg, Austria, September 21-24, 2006,

Towards a Reference Ontology of Functionality for Interoperable Annotation for Engineering Documents, *Y. Kitamura, N. Washio, M. Ookubo, Y. Koji, M. Sasajima, S. Takafuji, R. Mizoguchi. ESWC 2006, Budva, Montenegro, June 11-14, 2006.

Task Ontology-based Framework for Modeling Users’ Activities for Mobile Service Navigation, *M. Sasajima, Y. Kitamura, T. Naganuma, S. Kurakake, R. Mizoguchi, ESWC 2006, Budva, Montenegro, June 11-14, 2006.

Ontological Support for a Theory-eclectic Approach to Instructional and Learning Design (Oral), *Y. Hayashi, J. Bourdeau and R. Mizoguchi, First European Conference on Technology Enhanced Learning, EC-TEL2006, Crete, Greece, Oct. 1-4, 2006.

Ontological Modeling Approach to Blending Theories for Instructional and Learning Design (Oral), *Y. Hayashi, J. Bourdeau and R. Mizoguchi. The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006), Beijing, China, Nov.30-Dec. 4, 2006.

An Integrated Framework for Fine-Grained Analysis and Design of Group Learning (Oral), *S. Isotani and R. Mizoguchi. The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006), Beijing, China, Nov.30-Dec. 4, 2006.

Building and Evaluation of a Semantic Web System that Provides Teachers with Lesson Plans (Oral), *T. Kasai, H. Yamaguchi, K. Nagano and R. Mizoguchi, The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006), Beijing, China, Nov. 30-Dec. 4, 2006

Surmonter l'interference culturelle et linguistique a l'aide de CALL (Oral), *A. Daniele, R. Mizoguchi, J. Bourdeau, Actes de colloque de la Journee Scientifique Francophone (JSF) 2006, Tokyo, Japan, Dec. 1, 2006.

Task Ontology-based Modeling Framework for Navigation of Mobile Internet Services (Oral), *M. Sasajima, Y. Kitamura, T. Naganuma, K. Fujii, S. Kurakake and R. Mizoguchi, Internet and Multimedia Systems and Applications- EuroIMSA2007, Chamonix, France, March 13-15, 2007.

Ontological Engineering and Its Deployment (Plenary), *R. Mizoguchi, Third International Conference on Intelligent Computing and Information Systems, Cairo, Egypt, March 15-18, 2007.

Industrial Impact of Ontology Engineering (Plenary), *R. Mizoguchi, Semantic Technology Annual Conference 2007, Seoul, Korea, March 28, 2007.

Development of Contents Management System Based on Light-weight Ontology (Oral), *K. Kozaki, Y. Kitamura and R. Mizoguchi, Proc. of the 2007 IAENG International Conference on Internet Computing and Web Services, Hong Kong, March 21-23, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

溝口理一郎	European Project on SEKT（Steering committee 委員)
溝口理一郎	Semantic Web Science Association（副会長）
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 1st Asian Semantic Web Conference (ASWC2006) (プログラム委員長)
溝口理一郎	The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006)（プログラム委員長）
溝口理一郎	The 3rd European Semantic Web Conference (ESWC2006)（プログラム委員）
溝口理一郎	Fifth international semantic web conference (ISWC2006)（プログラム委員）
溝口理一郎	The 15th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management (EKAW2006)（プログラム委員）
溝口理一郎	The 15th International World Wide Web Conference Semantic Web Track (プログラム委員)
溝口理一郎	The 8th International Conference on Intelligent Tutoring Systems (ITS2006) （プログラム委員）
溝口理一郎	The First European Conference on Technology Enhanced Learning (EC-TEL 2006) (プログラム委員)
溝口理一郎	The 12th International Conference on Artificial Intelligence: Methodology, Systems, Applications (AIMSA 2006) (プログラム委員)

溝口理一郎	2006 IEEE International Conference on Information Reuse and Integration (IEEE-IRI 06) (プログラム委員)
溝口理一郎	The First International Conference on Knowledge, Information and Creativity Support Systems (KICSS 2006) (Technical Committee and International Advisory Committee)
溝口理一郎	IFIP AI 2006: Artificial Intelligence in Theory And Practice (プログラム委員)
溝口理一郎	The Ninth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI2006) (Workshop 委員長)
溝口理一郎	The Sixth International Symposium on Tools and Methods of Competitive Engineering (TMCE 2006)（プログラム委員）
溝口理一郎	International Workshop on Applications of Semantic Web Technologies for E-Learning (SW-EL) (プログラム委員)
溝口理一郎	LORNET Conference I2LOR 2006（プログラム委員）
溝口理一郎	International Journal of Applied Ontology（編集委員）
溝口理一郎	International Journal of Advanced Engineering Informatics（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	International Journal of Web Semantics（編集委員）
溝口理一郎	International Journal of Web Engineering and Technology（編集委員）
來村徳信	The 1st Asian Semantic Web Conference (ASWC2006) (プログラム委員)
來村徳信	The Sixth International Symposium on Tools and Methods of Competitive Engineering (TMCE 2006)（プログラム委員）
來村徳信	Canadian Semantic Web Working Symposium 2006 （プログラム委員）
來村徳信	2006 IEEE International Conference on Information Reuse and Integration (IEEE-IRI 06) (プログラム委員)
來村徳信	The 5th International Seminar and Workshop Engineering Design in Integrated Product Development (EDIProD 2006) (プログラム委員)
林雄介	The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006)（プログラム委員）

[国内学会]

人工知能学会	8 件
電子情報通信学会	1 件
日本機械学会	3 件
臨床医学オントロジー研究会	2 件

[取得学位]

修士（工学）

Mesbahy Houda	A Design of Ontology-based Architecture to Support Description of Functional Decomposition Tree
鷲尾　尚哉	機能を中心としたメタデータスキーマと技術文書のセマンティック検索システムの開発

博士（工学）

小路　悠介	機能を中心とした人工物の物理プロセス知識統合管理に関する研究
砂川　英一	分散開発フレームワークとロール概念組織化理論に基づくオントロジー構築支援環境に関する研究

武内　雅宇　　ドメイン適用可能な組織知の創造・継承支援環境の構築に関する研究

[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

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	5,400

若手研究（A）

來村　徳信	一般機能オントロジーを核としたオープン型知識運用プラットフォームの開発	3,600

特別研究員奨励費

溝口　理一郎	オントロジー工学を用いた言語学習における文化差要因のモデル化と日本人のための英語学習支援システムの開発	700

[受託研究]

溝口　理一郎	（社）化学工学会	「ナノ粒子」及び「ナノカーボン」に係る「ナノ材料知識基盤」プラットフォーム構築に関する調査事業に関わる委託調査研究項目１基本システムのブラッシュアップ及び「ナノ粒子」とナノカーボン」に係るコンテンツ拡充に必要な情報の収集	3,150

[奨学寄附金]

溝口　理一郎	㈱ジャストシステム	5,000
溝口　理一郎	㈱ワイ・エム・ピー・インターナショナル	650
溝口　理一郎	㈱ワイ・エム・ピー・インターナショナル	650
溝口　理一郎	㈱ワイ・エム・ピー・インターナショナル	650
溝口　理一郎	㈱ワイ・エム・ピー・インターナショナル	650
溝口　理一郎	㈱エネゲート	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

複合知能メディア研究分野

教授	八木　康史
助教授	向川　康博
助手	佐川　立昌、槇原　靖
特任研究員	王　君秋、モハマド　アルタブ　ホサイン、ラドゥ　オルギダン
大学院学生	青木　伸也、近藤　一晃、ヴ　ハイ、チュン　タン　ゴ
	万波　秀年、大澤　奈々穂、小嶋　裕一郎、角野　皓平
	阪井　拓郎、鈴木 和哉、中森　雄哉
学部学生	杉浦 一成、東 はるか、赤坂 清隆、張 泓皓
事務補佐員	家村　雅子、安井　紀子、中澤　優子

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

・分解能特性を考慮した反射屈折光学型カメラシステムに関する研究

反射屈折光学系を用いた全方位視覚は、一度に周囲360 度の映像が獲得できることから、仮想体験、ロボット、監視などさまざまな応用分野でその利用が期待されている。しかしその一方で、実タスクでの利用を考えた場合、光学特性がタスクに対して不十分な場合がある。すなわち実利用のためには、用途・目的に応じて空間分解能や撮影範囲など光学特性を考慮した光学システムを構築していく必要がある。そこで本論文では全方位視覚の設計において、その利用目的や用途を考慮した光学系の一つとして、空間分割の密度を示す“分解能特性” と撮影範囲の両者を考慮した全方位カメラシステムに関して論じる。具体的には、以下の2 つの異なる空間分割記述に基づいた光学系を提案する。

まずはじめに、方位に関して分解能が変化するような特性を持つ全方位視覚系の設計手法について述べる。主な設計指針は、全方位視覚系をカメラと凸型反射鏡により構成し、その凸型反射鏡の形状を水平な軸方向に引き伸ばした上でさらにシーンの水平断面を観測できるようにする、である。回転対称な放物面ミラーを利用した等方な全方位視覚系にこの設計手法を適用することで、非等方な全方位視覚系：HBP ミラー系を得た。さらに試作機の作成や評価実験を通じてHBP ミラー系の特性を検証した。

また反射鏡により撮影範囲を広げたカメラを自己の周囲に配置した構成により、円筒面空間を均一な分解能特性で撮影する全方位視覚系の設計手法についても述べる。提案手法では、滑らかに変化する曲面で反射鏡形状を定義し、対象とする円筒面空間上での射影誤差を最小とするような制御パラメータを求めることで、目的の全方位視覚系を得ている。実際の設計では人物視点全周囲映像の記録を想定し、人物の頭部周囲に4 台配置した場合の設計を行い、分解能特性を検証した。

さらに分解能特性を考慮した全方位視覚系の応用として、HBP ミラー系を移動ロボットの視覚とした場合の性能評価を行った。評価対象は障害物検知、衝突時間推定、遠隔監視における興味物体の発見および災害地を探索する遠隔ロボットへの実応用である。評価実験を通じ、それら全てにおいてHBP ミラー系が移動ロボットの視覚系として有効に働くことを確認した。

・視差検出フィルタによる狭基線長全方位ステレオ

我々は全方位の観測が可能な複眼全方位センサと、これを用いて実時間で近接物体を検出する手法を提案している。この近接物体検出手法は、対応点探索を行わず、無限遠対応点に同一物体が投影されているかどうかを判定することにより、ある一定距離以内に接近した物体を検出することができる。この手法はエピポーラ線上の対応点探索を行う必要がないため、複雑なエピポーラ線を持つシステムにも適用しやすく、計算量も少ないという利点を持っているが、物体が近接しているかどうかという 2 値の情報しか得られなかった。そこで本論文では、視差検出フィルタによる視差検出手法を提案する。これは、様々なウィンドウサイズで平滑化した画像を用いることで入力画像を階層的に表現し、それぞれの画像において検出した視差を統合することによって、入力画像における視差を求める手法である。それぞれの階層における視差計算には、近接物体検出手法と同様に、物体が無限遠にある場合に画像上に投影される位置、無限遠対応点を利用する。そのため、複雑なエピポーラ線を持つシステムにも適用しやすく、計算量も少ないという、近接物体検出法と同様の利点を持っている。また、試作した複眼全方位センサから得られる画像に提案手法を適用することにより、その有効性を確認した。

・楕円鏡とプロジェクタを用いた反射特性の高速計測システムの開発

物体表面の反射特性を表す双方向反射率分布関数を密に計測するためには、様々な角度から照明した場合の反射光を様々な角度から計測する必要があるため、膨大な時間が必要であった。本研究では、楕円鏡とプロジェクタを組み合わせることで、高速に反射率を計測する手法を提案する。楕円鏡の一方の焦点に試料を配置し、もう一方の焦点にカメラとプロジェクタをハーフミラーを用いて配置する。これにより、投影画像を変えるだけで光源方向を自由に制御できる。また、試料のあらゆる角度への反射光は、カメラで一度に計測できるため、高速な反射率計測が可能となる。さらに、プロジェクタによる多重化照明を用いることにより、計測精度の向上も実現した。試料の配置方法の異なる 2 種類の装置を実際に作成し、性能を評価した。

・センサ特性を考慮した確率的距離画像位置合わせ

本論文ではセンサ特性を用いた距離画像の確率的な位置合わせ手法について述べる。距離画像の位置合わせには対応点探索が必要であるが、計測データに大きな誤差が含まれる場合には正確な対応点を求めるのが困難なため、センサ特性を考慮して位置合わせを行う必要がある。提案手法では、距離画像の位置合わせを最適な変換パラメータを求める最尤推定問題として定式化する。位置合わせの際には EM アルゴリズム(Expectation Maximization) を用いてパラメータを推定するが、誤差モデルを仮定すると Iterative Closest Point (ICP) 法の派生法として実装することが可能である。実際にレンジファインダの誤差分布を分析し、視線方向に沿った正規分布としてモデル化した。最後に、シミュレーションデータと実際の距離画像を用いて提案手法の評価を行った。本手法では距離画像の各頂点間について複数の対応点をとるため、一対の対応点を用いる方法よりも位置合わせ後の誤差が小さくなった。

・多視点同期歩容撮影システムの構築

本研究では大規模歩容データベースを効率的に作成するための撮影システムの構築を行う。方向変化については、歩行機を中心とし周囲 12 方向に上下 2 段で 24 台のカメラを設置し、さらに頭上の映像を撮影するカメラを 1 台を加えた計 25 台のカメラにより同期撮影することで、一度のシーケンスで取得する。速度変化や傾きの変化については、歩行機を制御することにより、複数の組み合わせを一度のシーケンスで扱えるようにする。また、背景差分によるシルエット抽出を効率的に行うために、全周囲マルチスクリーンとプロジェクタによる背景制御を行う。最後に、多視点撮影システムのキャリブレーションとして、レンズ歪み補正と、カメラ間の位置関係や内部パラメータの算出を行い、実験によりこれらのキャリブレーションが正しく行われている事を確認した。

・全方位カメラを用いた複数方向からの観測による歩容認証

本研究では、全方位カメラから得られる複数方向の歩容画像を用いた個人認証手法を提案する。 最初に背景差分により全方位画像列からシルエットを抽出する。それをパノラマ展開し、時空間の歩容シルエットボリューム(GSV)を得る。 次に GSV から算出した歩行周期に基づいてフーリエ解析を行い、周

波数領域特徴を抽出する。 また全方位カメラを用いることによる観測方向の変化を利用して、複数の基準方向を設定し、各基準方向と歩行周期を基に複数方向の特徴を抽出する。 認証時には、入力と辞書シーケンスに対する同一方向同士の特徴間距離を算出し、それらを統合して照合を行う。 最後に 15 人の被験者の 5 方向を含むシーケンス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。

・近赤外光投影によるテクスチャ付き距離画像の実時間計測センサ

動物体の形状とテクスチャを同時実時間計測する事は実世界志向ロボットの制御や認識の分野での応用が期待できるが、そのためには高速な形状計測と同時にテクスチャを計測する必要があり、これは困難である。高速な形状計測はカラー構造化光を用いた一回の撮影での形状計測手法が提案されており、実現が可能であるが可視光を用いた構造化光であるため、テクスチャの同時計測は実現できない。そこで本論文では赤外光の構造化光を投影し、形状とテクスチャを同時に計測するセンサを提案し、開発した。可視光でテクスチャ計測、赤外光を形状計測と用途別に波長を分離することにより、同時計測を可能にした。また、テクスチャ計測用のカメラと形状計測用のカメラを同軸上に配置することにより、テクスチャマッピングにおいてオクルージョンが発生しないシステムを構築した。

・装着型全方位監視に向けて － 小型センサの試作と動物体検出法の提案 －

装着型全方位監視とは、人を中心として、効率的に監視を行う方法である。本研究ではこの監視の実現に向けて、動物体検出法と小型センサを提案する。提案する動物体検出法では、動物体の特徴点が規則性のある動きをすることに注目して、揺れ補正と動物体検出を同時に行う。あらかじめ移動方向についての参照マップを作成しておくことで、対応点探索を行うことなく高速に動物体を検出する。シミュレーション実験により、動物体を正しく検出できることを確認した。また、複数の放物面鏡と双曲面鏡を組み合わせた複眼全方位センサを新たに試作した。このセンサは従来のものよりも小型・軽量を実現している。

[原著論文]

複眼全方位センサの提案、 小嶋 裕一郎、 栗田 尚樹、 佐川 立昌、 越後 富夫、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、 47[SIG10(CVIM15)] (2006) 152-161

Super Wide Field of View Head Mounted Display Using Catadioptrical Optics, H. Nagahara, Y. Yagi, M. Yachida, Presence: Teleoperators & Virtual Environments, 15[5] (2006) 588-598.

[解説、総説]

非等方性全方位視覚 HBP、八木康史、映像情報 Industrial、38[5] (2006) 91-96

全方位視覚センサの光学系と応用、八木康史、 光アライアンス、11 月(2006) 16-21

[国際会議]

Gait Recognition Using a View Transformation Model in the Frequency Domain, *Y. Makihara, R. Sagawa, Y. Mukaigawa, T. Echigo, Y. Yagi, the 9th European Conf. on Computer Vision, Graz, Austria, May 7-13, 2006.

A Probabilistic Method for Aligning and Merging Range Images with Anisotropic Error Distribution, *R. Sagawa, N. Osawa, Y. Yagi, Third International Symposium on 3D Data Processing, Visualization and Transmission, Chapel Hill, USA, June 14-16, 2006.

Which Reference View is Effective for Gait Identification Using a View Transformation Model?, *Y. Makihara, R. Sagawa, Y. Mukaigawa, T. Echigo, Y. Yagi, the IEEE Computer Society Workshop on Biometrics 2006, New York, USA, Jun. 17-18, 2006.

Adaptation to Walking Direction Changes for Gait Identification, *Y. Makihara, R. Sagawa, Y. Mukaigawa, T. Echigo, Y. Yagi, the 18th Int. Conf. on Pattern Recognition, Hong Kong, China, Aug. 20-24, 2006.

Adaptive Control of Video Display for Diagnostic Assistance by Analysis of Capsule Endoscopic Images, *H. Vu , T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, Y. Yagi, the 18th Int. Conf. on Pattern Recognition, Hong Kong, China, Aug. 20-24, 2006.

A Fast Compensation Method of Inter-reflection for Pattern Projection onto a Non-Planar Surface, *Y. Mukaigawa, T. Kakinuma, Y. Ohta, IEEE International Workshop on Projector-Camera Systems (PROCAMS2006), New York, USA, June 17, 2006.

Diagnosis Supporting System for Capsule Endoscopy, *Y. Yagi, H. Vu, T. Echigo, R. Sagawa, K. Yagi, M. Shiba, K. Higuchi, T. Arakawa, International Conference on Ulcer Research (ICUR), Jul. 7-9, 2006.

Evaluation of a HBP Mirror System for Remote Surveillance, *K. Kondo, Y. Mukaigawa, T. Suzuki, Y. Yagi, IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, Beijing, China, October 11-13, 2006.

Analytical Compensation of Inter-reflection for Pattern Projection, *Y.Mukaigawa,T.Kakinuma, Y.Ohta, ACM Symposium on Virtual Reality Software and Technology (VRST2006), Limassol, Cyprus, Nov. 1-3, 2006.

Integrating Shape and Color Features for Adaptive Real-Time Object Tracking, *J. Wang, Y. Yagi, The 2006 IEEE International Conference on Robotics and Biomimetics, Kunming, China, December 17-20, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

八木　康史	IEEE International Conference on Robotics&Biomimetics 2006 (プログラム共同委員長)
八木　康史	International Journal of Automation and Computing （編集委員）
八木　康史	8th Asian Conference on Computer Vision（プログラム委員長）
八木　康史	IEEE International Conference on Robotics and Automation（編集委員）
八木　康史	International Conference On Smart homes and health Telematics（組織委員）
八木　康史	IEEE International Conference on Computer Vision（プログラム委員）
八木　康史	The Korea-Japan joint workshop on Frontiers of Computer Vision2007（日本側実行委員）
八木　康史	The Seventh Workshop on Omnidirectional Vision, Camera Networks and Non-classical Cameras（プログラム委員）
八木　康史	Computer Vision and Pattern Recognition 2006（プログラム委員）
八木　康史	9th European Conference on Computer Vision ECCV 2006（プログラム委員）
八木　康史	2006 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems（プログラム委員）
八木　康史	2007 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition（査読委員）

向川　康博	Computer Vision and Pattern Recognition 2006（プログラム委員）
向川　康博	IEEE International Conference on Computer Vision（プログラム委員）
向川　康博	8th Asian Conference on Computer Vision（領域委員長）
佐川　立昌	8th Asian Conference on Computer Vision（技術スタッフ）
佐川　立昌	The 6th International Conference on 3-D Digital Imaging and Modeling（プログラム委員）
槇原　靖	8th Asian Conference on Computer Vision（技術スタッフ）

[国内学会]

情報処理学会	10 件
電子情報通信学会	9 件
日本船舶海洋工学会	1 件
計測自動制御学会	1 件

[取得学位]

修士（情報科学）	
小嶋 裕一郎	視差検出フィルタによる狭基線長全方位ステレオ
角野 皓平	楕円鏡とプロジェクタを用いた反射特性の高速計測システムの開発
大澤 奈々穂	センサ特性を考慮した確率的距離画像位置合わせ
博士（情報科学）	
近藤 一晃	分解能特性を考慮した反射屈折光学型カメラ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	28,210
若手研究（A）		
向川　康博	不均一な双方向性反射率分布関数の完全な計測とその高度利用	10,790

[共同研究]

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スタビライズ技術の研究	2,100

[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	61,212
八木　康史	総務省 戦略的情報通信研究開発推進制度	遠隔ロボットを用いた災害時マルチメディア情報収集技術に関する研究開発	1,950

知能アーキテクチャー研究分野

教授	沼尾　正行
助教授	栗原　聡
助手	森山　甲一
特任助手	福井　健一
博士研究員	Roberto Legaspi
大学院学生	中村　和志、河野　稔、清原　良三、山下　長義、 Md. Nazmul Huda(～平成 18 年 7 月 30 日)、今中　規景、 川崎　敏範、小西　基樹、太田　晶大、福井　秀徳、 本田　誠一、松本　光弘、安場　直史、
学部学生	杉本　知仁、玉置　洋、西川　敬之
事務補佐員	中尾　史江，小八木　香奈(平成 18 年 4 月 1 日～平成 18 年 9 月 30 日), 杉田　寿見子(平成 18 年 9 月 1 日～)

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はなく、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。そうなると、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]

A Category-based Framework of a Self-Improving Instructional Planner, R. Legaspi, R. Sison, and M. Numao, Transactions of Japanese Society for Artificial Intelligence, 21 [1] (2006) 94-102.

An Emotion-driven Musical Piece Generator for a Constructive Adaptive User Interface, R. Legaspi, Y. Hashimoto, and M. Numao, Lecture Notes in Artificial Intelligence, 4099 (2006) 890-894.

Adaptive Agent Selection in Large-scale Multi-Agent Systems, T Sugawara, K. Fukuda, T. Hirotsu, S. Sato and S. Kurihara, Lecture Notes in Computer Science, 4099 (2006) 818-822.

Visualization Architecture Based on SOM for Two-class Sequential Data, K. Fukui, K. Saito, M. Kimura, and M. Numao, Lecture Notes in Artificial Intelligence, 4252 (2006) 929-936.

How Does Collective Intelligence Emerge in the Standard Minority Game?, S. Kurihara, K. Fukuda, T. Hirotsu, O. Akashi, and T. Sugawara, Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, 567 (2006) 279-289.

携帯電話ソフトウェア更新のためのバージョン間差分表現方式、清原 良三、栗原 まり子、三井 聡、木野 茂徳、 電子情報通信学会論文誌、 J89-B[4] (2006) 478-487.

[解説、総説]

センサーネットワークによる能動的な環境の実現に向けて、栗原　聡、生産と技術、58[3] (2006) 43-46.

[著書]

「スモールワールドーネットワークの構造とダイナミクス」（栗原 聡、 福田 健介、 佐藤 進也翻訳）ダンカン ワッツ（著）、京電機大学出版局 (2006).

「IT text, データマイニングの基礎」（情報処理学会編集）元田 浩、 津本 周作、 山口 高平、 沼尾 正行、 オーム社 (2006).

[国際会議]

How Can Agent Know the Global Information without Close Coordination?, *****S. Kurihara, K. Fukuda, S. Sato, and T. Sugawara, 5th International Joint Conference on Autonomous Agents and Multiagent Systems (AAMAS2006), Hakodate, Japan, May 8-12, 2006.

Getting Daily Human Habitual Behaviours from Infrared Sensor Network, *****S. Kurihara, S. Honda, K. Fukui, K. Moriyama, M. Numao, K. Fukuda, T. Hirotsu, T. Takada, and T. Sugawara, 3rd International Conference on Networked Sensing Systems (INSS2006), Chicago, Illinois, U.S.A., May 31-Jun.2, 2006.

Total Performance by Local Agent Selection Strategies in Multi-agent Systems, *T. Sugawara, S. Kurihara, T. Hirotsu, K. Fukuda, S. Sato and O. Akashi, 5th International Joint Conference on Autonomous Agents and Multiagent Systems (AAMAS2006), Future University - Hakodate, Japan, May 8-12, 2006.

Application of Massively Multi-agent System to Internet Routing Management, *O. Akashi, K. Fukuda, S. Kurihara, H. Toshio and T. Sugawara, Joint International Workshop on Massively Multi-agent Systems (MMAS2006) and Challenges in Large-Scale Coordination in Multi-Agent Systems (LSMAS2006) (held in conjunction with AAMAS2006), Future University - Hakodate, Japan, May 9, 2006.

Evaluation of Sequential AE Signals in SOFC Utilizing SOM, *N. Imanaka, K. Fukui, K. Sato, K. Moriyama S. Kurihara, and M. Numao, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industry Based on Inter-Nanosicence" International Symposium, Awaji, Japan, Dec.8-9, 2006.

Salient Word Extraction Using Link Analysis Based on Structual Equivalence, *N. Yamashita, M. Numao, and S. Kurihara, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industry Based on Inter-Nanosicence" International Symposium, Awaji, Japan, Dec.8-9, 2006.

Learing First-oder Rules from Chemical Compound Data, *M. Numao, S. Sinthupinyo, C. Natee, and T. Okada, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industry Based on Inter-Nanosicence" International Symposium. Awaji, Japan, Dec.8-9, 2006.

Infusing Affective Perceptions in Music Compositional AI, *R. Legaspi, Y. Hashimoto, K. Moriyama, S. Kurihara, and M. Numao, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industry Based on Inter-Nanosicence" International Symposium, Awaji, Japan, Dec.8-9, 2006.

Dependency of Network Structures in Agent Selection and Deployment, *K. Fukuda, T. Hirotsu, S. Kurihara, S. Sato, O. Akashi, and T. Sugawara, IEEE/WIC/ACM International Conference on

Intelligent Agent Technology (IAT2006), Hong Kong, Dec.18-22, 2006.

Multi-agent Systems Performance by Adaptive/non-Adaptive Agent Selection, *T. Sugawara, K. Fukuda, T. Hirotsu, S. Sato, and S. Kurihara, IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligent Agent Technology (IAT2006), Hong Kong, Dec.18-22, 2006.

Using Multiple-part Learning and a Genetic Algorithm to Compose Emotion-inducing Tunes, *R. Legaspi, Y. Hashimoto, K. Moriyama, S. Kurihara, and M. Numao. International Workshop on Artificial Intelligence and Music (Music-AI 2007, held in conjunction with the 20th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-07), Hyderabad, India, Jan.6, 2007.

Music Compositional Intelligence with an Affective Flavor, *R. Legaspi, Y. Hashimoto, K. Moriyama, S. Kurihara, and M. Numao. ACM International Conference on Intelligent User Interfaces, Hawaii, U.S.A., Jan.28-31, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

沼尾　正行	New Generation Computing (エリアエディター)
沼尾　正行	The 5th International Joint Conference on Autonomous Agents and Multi Agent Systems (プログラム委員)
沼尾　正行	Ninth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (プログラム委員)
沼尾　正行	The 2006 Pacific Rim Knowledge Acquisition Workshop (プログラム委員)
沼尾　正行	ECML PKDD 2006 Workshop on Knowledge Discovery from Data Streams(プログラム委員)
沼尾　正行	1st Annual Symposium on Japanese-French Frontiers of Science(プランニング・グループ・メンバー)
栗原　聡	IEEE/WIC/ACM International Conference on Intelligence Agent Technology(IAT'06) （プログラム委員)
栗原　聡	5th International Joint Conference on Autonomous Agents and Multiagent Systems (AAMAS2006) (プログラム委員)
栗原　聡	The International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI'07) （プログラム委員)
栗原　聡	4th International Workshop on Networked Sensing Systems (INSS2007) （プログラム委員)
栗原　聡	Workshop on Emergent Intelligence on Networked Agents (WEIN'06)（オーガナイザー）
栗原　聡	Second International Workshop on Massively Multi Agent Systems (MMAS'06)（プログラム委員）
栗原　聡	Seventh International Workshop on Multi-Agent-Based Simulation (MABS'06) (プログム委員）
森山　甲一	PAKDD08: 12th Pacific Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (Local Arrangement 委員)

[国内学会]

人工知能学会	6 件
情報処理学会	6 件
電子情報通信学会	2 件
計測自動制御学会	1 件
日本ソフトウェア科学会	2 件

電気化学会　1 件

[取得学位]

修士（情報科学）

今中　規景	SOM を用いた固体酸化物燃料電池の損傷評価
川崎　敏範	個人の感性を反映したストリートダンス振付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

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	800

[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	日本電信電話株式会社	ユビキタス環境のためのマルチエージェントアルゴリズムと応用の研究	800

[その他の競争的研究資金]

栗原　聡	(財)人工知能研究振興財団	実環境から人への能動的インタラクションのためのプランニング手法に関する研究	500

高次推論方式研究分野

教授	鷲尾　隆
助手	大原　剛三
大学院学生	Hadiyanto、中西　耕太郎、陸　洪涛、Nguyen Viet Phuong、城戸　健太郎、桑島　洋、高林　健登、深田　健太
学部学生	大西　智之、原　昌弘
事務補佐員	岡田　拡子

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、セキュリティー、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、理解容易な知識のマイニング、数値データからの時間依存法則式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、例えば巨大なショッピングモールにおける様々な条件下での品物売れ行き、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。本研究分野においては、今年度から新たにこのような複雑、大規模な対象の時間的変化ダイナミクスや変数関係を、データから明らかにする手法の研究を開始した。

その最初の試みとして、多数の平行事象の時系列データから共起する事象グループの効率的完全探索を行い、更にそれら事象グループ間の生起関係の効率的完全探索を行う HISC（High-order Substate Chain）モデリング手法を提案した。これにより、ショッピングモールの例ではどの店舗グループでいかなる時間帯にいかなる品物グループが売れると、次に他のどの店舗グループでいかなる品物グループが売れやすいかなどに関する規則性を把握できるようになった。

また、数万変数以上から構成されるデータについて、変数間の相関係数を効率的に高速推定計算する手法の開発も行った。膨大な変数間の相関係数計算には多くの計算パワーが必要とされるため、その効率化は変数間の因果関係分析のために非常に重要である。本手法は、一部の変数間相関係数から他の変数間相関係数を高速推定することで、直接計算よりも遥かに高速な相関係数計算を可能とした。

・　グラフ構造データからの知識発見に関する研究

近年、データ発掘に関して多くの研究があるが、多くは通常の関係データベースを念頭においたものである。特に複雑なデータ構造に対しては有効な手法はなく、当研究室では、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。昨年度までの成果を以下に要約する。

1)　有向グラフ中に頻繁に現われる特徴的なパターンを、隣接する 2 つのノードを逐次チャンクするこ

とによって発見するグラフに基づく帰納推論 GBI を提唱した。更にチャンクなしで探索発見を行う方法 CL-GBI、一定幅ビーム探索を行う方法 B-GBI、グラフ内の特徴的なパターンを発見しながらグラフの分類を行う手法 DT-GBI など、より機能、汎用性、探索効率の高い方法を開発して来た。これらの手法を、ユーザインターフェイスのコマンド予測や肝炎患者治療履歴の特徴分析に適用し、良好な解析結果を得てきた。

2) グラフを隣接行列で表現し、同型グラフを正準形に変換するアルゴリズムを考案して、それを共起分析を行う Apriori アルゴリズムと組み合わせることにより、非連結グラフも含め誘導部分グラフの完全探索、およびそれらの共起相関を完全導出可能な新たな手法 AGM を開発した。この手法は、ノードやリンクがラベルを有し自己ループリンクも含むようなもっとも汎用な有向、無向グラフを扱うことができ、厳密解を効率よく探索することができる。更に、探索対象とする部分グラフを誘導連結部分グラフや一般連結部分グラフに限定し探索を飛躍的に高速化する手法 AcGM、このような限定バイアスをさらに拡張し、部分順序木、部分非順序木、部分経路、部分系列などの多頻度パターンマイニングが可能な B-AGM を開発した。これにより、AGM の適用領域が飛躍的に拡大した。これらの手法を、実用上のニーズが高い多くの化学物質の生理活性相関解析に適用して有用な成果を得た。更に、遺伝子発現因果ネットワークデータに適用し、膨大な数の遺伝子が複雑に絡み合って発現作用を実現する過程を解析するための、グラフマイニングベース統計的因果推論の枠組みを提案した。
3) AGM をオープンフリーソフトとして公開し、社会的成果還元を行った。
4) XML 表現言語のサブセット規格である PMML(Predictive Model Markup Language)に基づき、複雑なグラフ構造データを柔軟に表現可能なグラフ表現言語 GML(Graph Markup Language)規格を提案した。現状の各種グラフマイニングツールは、それぞれ固有のグラフ表現を用いており、データや結果共有が困難であった。しかし、この標準規格の提案により、多くのツールやシステムを結合した強力なグラフマイニング環境の実現が可能となった。
5) 提案したグラフ表現言語 GML(Graph Markup Language)に基づいてグラフデータの表現、変換、AGM 解析を行うためのツールをオープンフリーソフトとして公開し、社会的成果還元を行った。
6) 閉路のないグラフである木構造データに埋め込まれた多頻度部分木構造を発見する Dryade 及び Dryade-Parent を開発した。これは解析対象が木構造に限定されるが、完全かつ高速な探索発見が可能である。

本年度は、DAG（有効非巡回グラフ：Directed Acyclic Graph）に埋め込まれた多頻度部分構造を効率的に部分探索する Dryade-DAG 手法を開発した。そして、遺伝子発現因果ネットワークデータに適用し、膨大な数の遺伝子が複雑に絡み合って発現作用を実現する大規模過程を効率的に解析するための、大規模グラフマイニングベース統計的因果推論の枠組みを提案した。また、実用上の観点から、発見した部分グラフパターンに含まれるべき、もしくは含まれてはいけない部分グラフを事前に制約として指定できるように CL-GBI を拡張し、事前に与えられた制約を満たす部分グラフパターンを効率的に発見可能なことを実験的に示した。さらに、グラフ上の探索ノードペアの情報量利得に基づいた探索アルゴリズムを設計して CL-GBI を拡張し、グラフを分類する上で有効な部分グラフパターンを効率的に発見可能なことを実験的に確認した。

・ 理解容易な知識のマイニングに関する研究

従来、記号属性のみからなるデータ中で共起する記号組合せパターンやそれら相互の生起関係を表す相関規則を効率的かつ完全に探索する手法として、バスケット分析が用いられている。しかしながら、現実の多くのデータは記号属性に留まらず数値属性データやその記号属性との混合によって構成されている。そのため、数値属性も含めてデータ中で共起する組合せパターンやそれら相互の生起関係を表す相関規則を効率的かつ完全に探索できれば、バスケット分析の適用範囲は飛躍的に拡大し、かつそこから多くの実際的成果が得られると期待される。当研究室では数年前からこの問題に取り組み、昨年度までに以下の成果を得ている。

1) 与えられた数値属性データについて、属性空間次元が増加すると単調減少するデータ密度を基準にして、定量的多頻度アイテム集合と定量的相関規則を導出する定量的バスケット分析手法の原理を確立した。また、それをプログラム実装した分析ツール QFIMiner を開発した。この結果、当該プログラムと一部類似する機能を有する海外研究グループのプログラムより約 2 桁高速でかつより高精度な処理を実現することができ、本分野で世界トップクラスの性能を得ることができた。
2) 更に定量的多頻度アイテム集合を用いて、データクラスの高精度分類予測が可能な定量的分類相関規則学習手法 LSC-CAEP の開発を行った。これらの結果、数値属性を有するデータに対する定量的多頻度アイテム集合の導出、定量的分類手法の高い性能が確認された。

本年度は、定量的バスケット分析手法とそのツール QFIMiner の原理を、前述の大規模次元データからの時間的変化ダイナミクスへ適用する検討を行った。

・ 数値データからの時間依存法則式の発見に関する研究

観測値として得られる大量の数値データからデータ間の関係を支配する第一原理法則を、対象領域に依存しない数学的知識のみを用いて発見する方法を追求している。昨年までに、以下の主要成果を得ている。

1) 測定量の尺度の性質や恒等性に関する制約を用いて測定データ間に許される関係式を一般的に求めることに成功し、幾つかの重要な定理を証明し、これに基づき表現された関係式の範囲の中から実験操作可能な系や受動的な観測しか許されない系について実際に得られた観測データを説明できる具体的な関係式を求めるアルゴリズムを開発し、それを実装した科学的知識発見システムを構築した。
2) 連立方程式の制約構造が有する数学的不変性、対称性、束構造を明らかにし、データだけから対象が何本の方程式で表され、かつ何れの数量が何れの方程式に現れるかを知ることのできる原理を確立した。その原理に基づいて、計算機が自動的にデータから連立方程式法則モデルを導くアルゴリズムの確立、実装を行った。そして、プロセスプラントや社会現象から得られるデータを用いて、実際に正しいモデルを発見できる能力を確認した。
3) 時系列観測データなど対象の時間依存ダイナミクス情報を含むデータから、それを支配する法則式として満たすべき数学的制約に従う微分方程式を発見する手法の開発に取り組んだ。まず、対象系を表現するために必要な状態自由度決定方法、観測変数のスケールタイプから状態変数のスケールタイプを推論する方法、状態変数を支配する候補連立微分方程式の探索方法、探索した方程式の精度評価方法等の詳細な手法を確立した。更に、以上の原理を時系列観測データ連立微分方程式法則発見システム SCALETRACK に実装し、シミュレーションデータによって性能検証を実施した。その結果、カオスを含む複雑な対象系の時間依存ダイナミクスを表す法則式を発見可能であることを確認した。

本年度は、前記の大規模な対象の時間的変化ダイナミクスの発見手法の研究において、上記手法の適用可能性を検討した。

[原著論文]

Consumer Behavior Analysis by Graph Mining Technique, K. Yada, H. Motoda, and T. Washio, New Mathematics and Natural Computation, 2[1] (2006) 59-68.

適応的密度基準に基づく部分空間クラスタリングを用いた定量的多頻度アイテム集合のマイニング、光永悠紀、鷲尾隆、元田浩、人工知能学会論文誌、21[5] (2006) 439-449.

部分空間クラスタリングと相関規則に基づく分類学習手法、中西耕太郎、鷲尾隆、光永悠紀、藤本敦、

元田浩、人工知能学会論文誌、21[6] (2006) 526-536.

Scientific Discovery of Dynamic Models Based on Scale-type Constraints, F. Adachi, T. Washio, and H. Motoda, IPSJ Transactions on Mathematical Modeling and Its Applications, 47[SIG_14] (2006) 31-42.

A Study on Rough Set-aided Feature Selection for Automatic Web-page Classification, T. Wakaki, H. Itakura, M. Tamura, H. Motoda, and T. Washio, WIAS Journal, 4[4] (2006) 431-441.

グラフマイニングとその統計的モデリングへの応用、鷲尾隆、樋口知之、井元清哉、玉田嘉紀、佐藤健、元田浩、統計数理、54[2] (2006) 315-331.

[著書]

“New Frontiers in Artificial Intelligence: Proceedings of the 19th Annual Conferences of the Japanese Society for Artificial Intelligence” (T. Washio et al. Ed.): LNAI 4012, T. Washio, K. Nakanishi, H. Motoda, and T. Okada, Springer-Verlag, (2006) 436-445

“New Frontiers in Artificial Intelligence: Proceedings of the 19th Annual Conferences of the Japanese Society for Artificial Intelligence”: LNAI 4012, T. Washio, A. Sakurai, K. Nakajima, H. Takeda, S. Tojo and M. Yokoo Ed., Springer-Verlag, (2006)

“Mining Graph Data” (L. B. Holder and D. J. Cook Ed.), K. Ohara, P. C. Nguyen, A. Mogi, H. Motoda and T. Washio, Wiley-Interscience, (2006) 203-226

[特許]

「大量事例の準正定類似性尺度推定プログラム、記録媒体及び装置」鷲尾　隆、中西　耕太郎、桑島　洋 特願 2007- 34905

[国際会議]

Constructing Decision Trees for Graph-Structured Data by Chunkingless Graph-based Induction (Oral), *P. C. Nguyen, K. Ohara, A. Mogi, H. Motoda and T. Washio, The 10th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2006), Singapore Hilton Hotel, Singapore, Apr. 9-12, 2006.

Analysis on a Relation between Enterprise Profit and Financial Sate by Using Data Mining Techniques (Oral), *T. Washio, Y. Shinnou, K. Yada, H. Motoda and T. Okada, Workshop on Risk Mining (RM2006), Collocated with the 20th National Meeting of JSAI, Tower Hall Funahori, Tokyo, Japan, Jun. 6, 2006.

Extracting Discriminative Patterns from Graph Structured Data using Constrained Search (Oral), *K. Takabayashi, P. C. Nguyen, K. Ohara, H. Motoda and T. Washio, The 2006 Pacific Rim Knowledge Acquisition Workshop (PKAW 2006), Workshop held in conjunction with the 9th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI 2006), Guilin Park Hotel, Guilin, China, Aug 7-8, 2006.

Mining Discriminative Patterns from Graph Structured Data with Constrained Search (Oral), *K. Takabayashi, P. C. Nguyen, K. Ohara, H. Motoda and T. Washio, The Workshop on Mining and Learning with Graphs (MLG), Workshop held in conjunction with the 17th European Conference on Machine Learning (ECML) and the 10th European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (PKDD), Humboldt-University, Berlin, Germany, Sep. 18, 2006.

High-order Substate Chain Prediction Based on Massive Sensor Outputs (Oral), *V. P. Nguyen and T. Washio, The 4th International Workshop on Knowledge Discovery from Data Streams, Workshop held in conjunction with the 17th European Conference on Machine Learning (ECML) and the 10th European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (PKDD), Humboldt-University, Berlin, Germany, Sep. 18, 2006.

Model Trawling : Modeling Dynamics of Massive Dimensional and Complex Systems (Invited), *T. Washio and V. P. Nguyen, Joint 3rd International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 7th International Symposium on Advanced Intelligent Systems (The IEEE SCIS & ISIS 2006), Tokyo Institute of Technology, Tokyo, Japan, Sep. 20-24, 2006.

From Closed Tree Mining to Closed DAG Mining (Invited), *A. Termier, Y. Tamada, S. Imoto, T. Washio, and T. Higuchi, The International Workshop on Data-Mining and Statistical Science (DMSS2006), Century Royal Hotel, Sapporo, Japan, Sep. 25-26, 2006.

Modeling Dynamics of Massive Dimensional and Complex Systems (Oral), *V. P. Nguyen and T. Washio, The International Workshop on Data-Mining and Statistical Science (DMSS2006), Century Royal Hotel, Sapporo, Japan, Sep. 25-26, 2006.

Modeling Dynamic Substate Chains among Massive States for Prediction (Oral), *V. P. Nguyen and T. Washio, Foundations of Data Mining and Novel Techniques in High Dimensional Structural and Unstructured Data, Workshop held in conjunction with the 6th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM 2006), Hong Kong Convention and Exhibition Centre, Hong Kong, Dec. 18, 2006.

A Method to Search ARX Model Orders and Its Application to Sales Dynamics Analysis (Oral), *K. Fukata, T. Washio, and H. Motoda, International Workshop on Data Mining for Design and Marketing 2006 (DMDM2006), Workshop held in conjunction with the 6th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM 2006), Hong Kong Convention and Exhibition Centre, Hong Kong, Dec. 18, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

鷲尾　隆	Special Issue on Applications Eligible for Data Mining, Journal of Advanced Engineering Informatics （編集委員）
鷲尾　隆	New Frontiers in Artificial Intelligence: Proceeding of the 19th Annual Conferences of the Japanese Society for Artificial Intelligence （編集委員）
鷲尾　隆	The 9th Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆	The 11th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2007)（ワークショップチェア）

鷲尾　隆　The 23rd International Conference on Machine Learning (ICML2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 16th International Conference on Inductive Logic Programming (ILP2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　European Conference on Machine Learning/European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Database (ECML/PKDD2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　Knowledge Management (KM) track of the ACM 15th Conference on Information and Knowledge Management (CIKM2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　New Frontiers in Artificial Intelligence: Proceeding of the 20th Annual Conferences of the Japanese Society for Artificial Intelligence（編集委員）
鷲尾　隆　The 12th Pacific-Asia Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (PAKDD2008)（プログラム委員長）
鷲尾　隆　The 9th International Conference on Discovery Science (DS2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　International Workshop on Knowledge Discovery in Inductive Databases (KDID2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The IEEE International Conference on Data Mining2006:Workshop on Risk Mining 2006 (ICDM2006/RM2006)（プログラム委員長）
鷲尾　隆　The 2006 Pacific Rim Knowledge Acquisition Workshop（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 6th IEEE International Conference on Data Mining (ICDM2006)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　New Frontiers in Artificial Intelligence: Proceeding of the 19th Annual Conferences of the Japanese Society for Artificial Intelligence（編集委員）
鷲尾　隆　International Conference on Mining and Learning with Graphs (運営委員)
鷲尾　隆　IADIS European First International Conference on Data Mining（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 10th International Conference on Discovery Science (DS2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　International Conference on Large-scale Knowledge Resources (ILKR2008)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 24th International Conference on Machine Learning (ICML2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 20th International Conference on Industrial, Engineering & Other Applications of Applied Intelligent Systems (IEA/AIE2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 6th European Conference on Computational Biology (ECCB)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 15th Annual International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology (ISMB)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 18th European Conference on Machine Learning (ECML)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 11th European Conference on Principles and Practice of Knowledge Discovery in Databases (PKDD2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The 24th International Conference on Mining and Learning 2007 Workshop on the Induction of Process Models(ICML2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　The ACM 16th Conference on Information and Knowledge Management (CIKM2007)（プログラム委員）
鷲尾　隆　Data Mining and Knowledge Discovery（編集委員）
大原　剛三　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　The 9th Australian Joint Conference on Artificial Intelligence (AI2006)（プログラム委員）
大原　剛三　The 17th Annual International Conference on Inductive Logic Programming (ILP2007)（プログラム委員）

[国内学会]

人工知能学会	10 件
日本統計学会	1 件
横幹連合総合シンポジウム	1 件

[取得学位]

修士（工学）

中西　耕太郎	幾何学的制約に基づく高効率な高相関変数集合導出に関する研究
陸　洪涛	データ解析履歴に基づくマイニングアルゴリズム選択支援に関する研究
Nguyen Viet Phuong	膨大な状態間の動的な状態連鎖モデリングに関する研究

[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（B）		
鷲尾　隆	3 次元グラフ構造マイニング手法とそれに基づく生理活性分子部位同定システムの開発	3,200
特定領域研究		
鷲尾　隆	大規模次元時系列の知識発掘・モデル化原理確立と商業ユビキタスデータによる検証	2,900
萌芽研究		
鷲尾　隆	数値相関ルール高速完全探索手法の開発と薬品処方規則発見への摘要評価	900

[受託研究]

鷲尾　隆	独立行政法人科学技術振興機構	大規模次元データマイニング手法を用いた半導体製造プロセス歩留り向上技術の開発	3,382

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

- ラット胎児海馬神経細胞における神経軸索誘導関連タンパク質FEZ1の機能解析
- 改変型バイオナノカプセルを用いる新規ドラッグデリバリーシステムの開発
- トロンボスポンジン様タンパク質NELL1のシグナルカスケードの解析
- キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素の生合成におけるサチライシン様セリンプロテアーゼの関与
- マクロヒーターによるF1-ATPaseの回転のリアルタイム制御
- 1分子操作技術によるF1-ATPaseの触媒活性のモジュレーション機構の解明
- 膜輸送小胞形成過程の1分子イメージング
- フェムトリットルチャンバーを用いたF1-ATPaseの回転と触媒反応の協約効率の計測
- フェムトリットルチャンバーを用いた1分子DNA解析
- フェムトリットルチャンバーを用いた多剤耐性に関する1細胞アッセイ
- 大腸菌主要異物排出トランスポーターAcrB 基質結合型結晶構造決定
- 細胞間情報センシング分子としてのインドールによる異物排出遺伝子発現誘導と異菌種間情報センシングの発見
- ＰＴＳ糖によるカタボライトコントロールを介した異物排出遺伝子発現誘導機構の解明
- 異物排出遺伝子の成育段階依存的発現誘導機構
- 新規ABCA ファミリー遺伝子ABCA5 ノックアウトマウスの解析
- 血小板からのスフィンゴシン１リン酸排出機構の立証
- ABCA7ノックアウトマウスの構築

生体触媒科学研究分野

教授	谷澤　克行
助教授	黒田　俊一
助手	立松　健司
特任研究員	角矢　博保、良元　伸男、小野　和利、朴井　伸行（平成 19 年 1 月 1 日－平成 19 年 3 月 31 日）、松下　葉子、四角　紀子、飯嶋　益巳（平成 19 年 1 月 16 日－平成 19 年 3 月 31 日）
博士研究員	Andrés D. Maturana（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 10 月 31 日）、鄭　周姫
研究支援員	波佐間　久美子（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 6 月 30 日）、豊島　孝恵（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 4 月 30 日）、松永　典子（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 7 月 31 日）、貞本　和代（平成 18 年 9 月 1 日－平成 18 年 12 月 20 日）
大学院学生	朴井　伸行（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 12 月 31 日）、生田　潤子、粕谷　武史、殿井　裕之、三瓶　浩史、中西　将太、長見　篤、新山　真由美、佐々木　康雄
事務補佐員	村田　真由美（平成 18 年 4 月 1 日－平成 18 年 6 月 30 日）、大久保 亜依（平成 18 年 7 月 1 日－平成 19 年 3 月 31 日）、村井 摩由子（平成 18 年 9 月 1 日－平成 19 年 3 月 31 日）

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する中空バイオナノ粒子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

・ラット胎児海馬神経細胞における神経軸索誘導関連タンパク質 FEZ1 の機能解析

新規な神経軸索誘導関連タンパク質 FEZ1（Fasciculation and Elongation protein Zeta1）のラット胎児海馬神経細胞における役割を RNAi により解析したところ、RNAi で FEZ1 の発現を抑制した細胞では、軸索形成が顕著に阻害されていることが明らかとなった。また、同細胞では、細胞質から神経突起の先端へと移動するミトコンドリアの移動速度が正常細胞と比較して減速しており、さらにミトコンドリアが細長く変形しているように観察された。以上から、FEZ1 は、キネシンを介したミトコンドリア輸送に関わるとともに、伸長過程の神経軸索内におけるミトコンドリア同士の過度の融合も調節していることが示唆された。

・改変型バイオナノカプセルを用いる新規ドラッグデリバリーシステムの開発

バイオナノカプセルは、脂質二重膜とＢ型肝炎ウイルス表面抗原タンパク質を基本骨格とする微粒子である。本カプセルは、直径約 100 nm の中空粒子であり、内部に薬物を封入することが可能である。また、表面に存在する肝炎ウイルス由来タンパク質の作用により、ヒト肝臓に特異的に集積する性質を

有しているため、肝臓特異的に薬物を送達する担体として有用なナノマテリアルである。本研究では、ヒト肝臓特異的に集積する従来のバイオナノカプセル表面を部分的に改変し、様々な標的化分子を結合させることで、各種組織への特異的なドラッグデリバリーを可能にするバイオナノカプセルの開発を行った。従来のバイオナノカプセルは、表面に多数存在するB型肝炎ウイルス表面抗原タンパク質のうち、pre-S と呼ばれる領域が肝臓への指向性を担っている。これまでに、この部分を抗体の Fc 領域との親和性を有する protein A の Z ドメインに置換することにより、標的に応じた様々な抗体を表面に提示することができる改変型バイオナノカプセルの創製に成功している。例えば、上皮増殖因子受容体に対する抗体を提示したバイオナノカプセルは、この受容体を多量に発現している細胞に集積しやすい。本研究では抗体のみならず、その他の標的化分子を表面に提示するために、バイオナノカプセルにビオチンを共有結合させ、ストレプトアビジンとの結合を介して、ビオチン化した標的化分子を結合させるシステムを考案した。このシステムを利用し、転移性腫瘍で多量に発現している糖鎖を認識するレクチンを結合させた改変型バイオナノカプセルを作製することに成功した。同様の手段を用いて、現在までに組織特異的集積能を有するペプチドや機能性糖鎖など、様々な分子を提示することにも成功している。

・トロンボスポンジン様タンパク質 NELL1 のシグナルカスケードの解析

NELL1 タンパク質は約 400 kDa の分泌タンパク質で、ラット脳やマウス胎児に顕著に発現している。*NELL1* は頭蓋骨早期癒合症候群（Craniosynostosis; CS）の原因遺伝子であり、*NELL1* トランスジェニックマウスは CS 患者と類似した症状を呈する。今回 NELL1 タンパク質の精製に成功したので、ラット頭頂骨初代培養細胞への効果を検討したところ、骨誘導因子である BMP とほぼ同等の生物活性を有することが判明した。一方、NELL1 のホモログである（相同性 53 %）NELL2 は、神経初代培養細胞において MAPK family に属する JNK（c-Jun N-terminal kinase）のリン酸化を介して神経生存維持活性を示す。また、BMP も MAPK カスケードを介して骨誘導することがこれまでに明らかになっている。以上の知見に基づき NELL1 が関与する骨芽細胞内のシグナル分子の挙動を探索したところ、MAPK family に属する ERK（extracellular signal-regulated kinase）1/2、JNK1/2/3 を主にリン酸化することが判明した。また NELL1、BMP によってリン酸化された ERK1/2 が骨形成に必須の転写因子 Cbfa1/Runx2 をリン酸化していることも明らかとなった。ところが NELL1 は BMP による骨誘導に関与すると考えられている Smad カスケードへは、ほとんど影響を及ぼさなかった。以上のことから NELL1 は BMP と異なるシグナルカスケードを経由して骨誘導を引き起こす可能性が示唆された。現在 NELL1 に特異的に結合するチロシンリン酸化タンパク質の存在が示唆されており、今後 NELL1 が関与する詳細なシグナルカスケードを解明してゆく予定である。

・キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素の生合成におけるサチライシン様セリンプロテアーゼの関与

キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素（QHNDH）は、*Paracoccus denitrificans* などのグラム陰性細菌のペリプラズムに誘導生成する酵素で、αβγのヘテロ三量体サブユニット構造をもつ。約 60 kDa のα-サブユニットには 2 分子のヘム *c* 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。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いる。これまでに、本酵素遺伝子を含む *bau* オペロンの第 2 番目にコードされ、鉄-イオウクラスターを結合すると推定される約 55 kDa のタンパク質（ORF2 タンパク質）の役割について検討し、*P. denitrificans* の ORF2 タンパク質の遺伝子を欠失した変異株では QHNDH 活性が消失すると同時に、翻訳後修飾を全く受けていないγ-サブユニットが細胞質内に蓄積することを明らかにした。また、ORF2 遺伝子欠損株に、ORF2 遺伝子を含むプラスミドを導入したところ、QHNDH 活性が顕著に回復した。これらのことから、ORF2 タンパク質は QHNDH の生合成に必須の役割を担っていると考えられた。今回は、ORF2 遺伝子欠損株で生産されるγ-サブユニットをさらに詳細に解析するとともに、*bau* オペロンの第 5 番目にコードされているサチライシン様セリンプロテアーゼに相同性の高いタンパ

ク質の関与についても検討した。ORF2 遺伝子欠損株の細胞質内に蓄積したγ-サブユニットを質量分析により解析したところ、γ-サブユニットの遺伝子中で翻訳開始点と考えていた Met-1 より前に 28 残基ものペプチドが付加していることが判明した。この 28 残基の N-末端延長配列は酸性および塩基性アミノ酸に富み、ペリプラズムへの移行に機能する一般的なシグナル配列とは異なっていた。次に、γ-サブユニットの遺伝子破壊株を作成し、この 28 残基を含むγ-サブユニットの遺伝子をプラスミドにより補充したところ、活性な QHNDH が生産された。さらに、Met-1 を部位特異的変異導入により Leu や Thr に変換しても酵素生成には影響なかったが、N-末端 28 残基のないγ-サブユニット遺伝子のプラスミド補充によっては、活性のある QHNDH の生産は認められなかった。これらの結果は、γ-サブユニットの翻訳開始点は–28 番目の Met であり、N-末端 28 残基の存在とその除去が活性な QHNDH 生成に必須であることを示している。一方、*bau* オペロンの第 5 番目にはサチライシン様セリンプロテアーゼに相同性のあるタンパク質がコードされていることが分かっていたが、QHNDH との関係は不明であった。そこで、この ORF5 遺伝子破壊株を作成し QHNDH 生成に及ぼす影響を調べたところ、ORF2 遺伝子破壊株と同様に、酵素活性が全く消失しただけでなくγ-サブユニットは細胞質内に蓄積していた。また、この蓄積γ-サブユニットペプチドは、活性のある成熟型γ-サブユニットよりもやや大きな分子サイズを有していた。ORF5 遺伝子破壊株に ORF5 遺伝子をプラスミドで補充したところ、γ-サブユニットは野生株と同様にペリプラズムへ移行し、活性のある QHNDH が生産された。これらの結果より、ORF5 遺伝子も QHNDH 生合成に必須であると結論した。

［ 原著論文 ］

Quantum Mechanical Hydrogen Tunneling in Bacterial Copper Amine Oxidase Reaction, T. Murakawa, T. Okajima, S. Kuroda, T. Nakamoto, M. Taki, Y. Yamamoto, H. Hayashi, and K. Tanizawa, Biochem. Biophys. Res. Commun., 342 (2006) 414–423.

Crystal Structures of Cytochrome c_L and Methanol Dehydrogenase from *Hyphomicrobium denitrificans*: Structural and Mechanistic Insights into Interactions between the Two Proteins, M. Nojiri, D. Hira, K. Yamaguchi, T. Okajima, K. Tanizawa, and S. Suzuki, Biochemistry, 45 (2006) 3481–3492.

Engineered Bio-nanocapsules, the Selective Vector for Drug Delivery System, D. Yu, T. Fukuda, Tuoya, S. Kuroda, K. Tanizawa, A. Kondo, M. Ueda, T. Yamada, H. Tada, and M. Seno, IUBMB Life, 58 (2006) 1–6.

Kinetic and Structural Studies on the Catalytic Role of the Aspartic Acid Residue Conserved in Copper Amine Oxidase, Y.-C. Chiu, T. Okajima, T. Murakawa, M. Uchida, M. Taki, S. Hirota, M. Kim, H. Hayashi, Y. Yamamoto, and K. Tanizawa, Biochemistry, 45 (2006) 4105–4120.

Involvement of a Putative [Fe-S]-Cluster-Binding Protein in the Biogenesis of Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, K. Ono, T. Okajima, M. Tani, S. Kuroda, D. Sun, V. L. Davidson, and K. Tanizawa, J. Biol. Chem., 281 (2006) 13672–13684.

Secretory Production System of Bionanocapsules Using a Stably Transfected Insect Cell Line, T. Shishido, M. Muraoka, M. Ueda, M. Seno, K. Tanizawa, S. Kuroda, H. Fukuda, and A. Kondo, Appl. Microbiol. Biotechnol., 73 (2006) 505–511.

Quantitative and Dynamic Analyses of G Protein-Coupled Receptor Signaling in Yeast using Fus1, Enhanced Green Fluorescence Protein (EGFP), and His3 Fusion Protein, J. Ishii, S. Matsumura, S. Kimura, K. Tatematsu, and S. Kuroda, H. Fukuda, and A. Kondo, Biotechnol. Prog., 22 (2006) 954–960.

NELL-1 Induced Bone Formation within the Distracted Intermaxillary Suture, C. M. Cowan, S. Cheng, K. Ting, C. Soo, B. Walder, B. Wu, S. Kuroda, and X. Zhang, Bone, 38 (2006) 48–58.

Nell-1 Induces Acrania-like Cranioskeletal Deformities during Mouse Embryonic Development, X. Zhang, C. M. Cowan, X. Jiang, C. Soo, S. Miao, D. Carpenter, B. Wu, S. Kuroda, and K. Ting, Lab. Invest., 86 (2006) 633–644.

Nell-1-Induced Bone Regeneration in Calvarial Defects, T. Aghaloo, C. M. Cowan, Y. F. Chou, X. Zhang, H. Lee, S. Miao, N. Hong, S. Kuroda, B. Wu, K. Ting, and C. Soo, Am. J. Pathol., 169 (2006) 903–915.

[解説、総説]

中空バイオナノ粒子を用いたDDSの開発とその産業化、近藤昭彦、黒田俊一、谷澤克行、妹尾昌治、上田政和、ドラッグデリバリーシステム、4 (2006) 435–443.

X線結晶解析と反応速度論的解析に基づく銅アミン酸化酵素の触媒機構、岡島俊英、谷澤克行、日本応用酵素協会誌、41 (2006) 1–7.

新しいビルトイン型キノン補酵素CTQと分子内チオエーテル架橋構造―その特異な構造形成機構の解明に向けて―、谷澤克行、酵素工学ニュース、56 (2006) 5–9.

遺伝子・薬剤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現状とこれから、粕谷武史、鄭　周姫、谷澤克行、黒田俊一、化学と生物、44 (2006) 760–766.

バイオナノカプセルの開発とバイオメディカル分野での応用、黒田俊一、粕谷武史、鄭　周姫、谷澤克行:化学工業、57 (2006) 869–874.

バイオナノカプセルの開発と医薬品分野での応用、黒田俊一、PHARM STAGE、6 (2006) 61–69.

乳酸菌表層ディスプレイ技術による新しいHPVワクチンの創製、瀬脇智満、夫　夏玲、金　哲仲、成　文喜、黒田俊一、細胞、38 (2006) 36–39.

[著書]

「ナノパーティクルテクノロジー・ハンドブック（分筆）－ワンポイントデリバリー」（細川益男・野城清編集）、黒田俊一、日刊工業新聞社（大阪）(2006)

“A Manual on Gene Transfer Vector and Genetic Modification Technology - Bionanocapsules for *In Vivo* Pinpoint Gene and Drug Delivery System” (John Rossi & Ted Friedmann, Eds.), T. Yamada, J. H. Jung, M. Seno, M. Ueda, A. Kondo, K. Tanizawa, and S. Kuroda, Cold Spring Harbor Press (2006)

「感染防御のBird’s-eye view（分筆）－新規乳酸菌表層ディスプレイ技術を用いた感染症防御のための経口粘膜ワクチンの開発」（西村泰治・丸山征郎・渡邊　武編集）、黒田俊一、瀬脇智満、夫　夏玲、金　哲仲、成　文喜、南江堂（東京）(2006)

[特許]

「中空バイオナノ粒子への遺伝子導入剤及び導入法」黒田俊一、鄭　周姫、谷澤克行、大石　潤、片山佳樹、羹　貞勲、山田忠範、特願 2006-205698

「バイオナノカプセルの効率的な精製方法」黒田俊一、前川圭美、名木田真奈、特願 2006-35666

「バイオナノカプセル内部への効率的な物質封入方法」黒田俊一、植田淳子、名木田真奈、特願 2006-240746

「基板およびその製造方法」平松紳吾、鄭　基晩、畠平智子、金森大典、黒田俊一、谷澤克行、特願 2006-257829

「免疫学的測定用ナノ粒子」平松紳吾、鄭　基晩、畠平智子、金森大典、黒田俊一、谷澤克行、特願 2006-258398

「ビオチン化ないしホーミングペプチド提示型バイオナノカプセル」黒田俊一、植田淳子、名木田真奈、殿井裕之、特願 2006-356378

「免疫学的測定用ビオチン化ナノ粒子」平松紳吾、鄭　基晩、畠平智子、金森大典、角矢博保、黒田俊一、谷澤克行、特願 2007-3677

「ドラッグデリバリーシステムに用いる複合粒子」清水宣明、荻野千秋、黒田俊一、特願 2007-32765

[国際会議]

Reaction Mechanism of Bacterial Copper Amine Oxidase: Conformational Changes of the TPQ Cofactor during the Catalytic Cycle, *T. Okajima, T. Murakawa, Y.-C. Chiu, S. Kuroda, and K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Quantum Mechanical Hydrogen Tunneling in Bacterial Copper Amine Oxidase Reaction, *T. Murakawa, T. Okajima, S. Kuroda, M. Taki, Y. Yamamoto, H. Hayashi, and K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Involvement of a Putative Radical SAM Protein in the Posttranslational Formation of Intra-peptidyl Thioether Crosslinks in Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, *K. Ono, T. Okajima, M. Tani, S. Kuroda, D. Sun, V. L. Davidson, and K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Novel Functions of a Splice Variant of a RING-IBR Protein RBCK1 in Proteasomal Protein Degradation, *N. Yoshimoto, K. Tatematsu, K. Tanaka, T. Suzuki, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Pinpoint Drug and Gene Delivery System Using ZZ tag-Displaying Bio-nanocapsule and Targeting Molecule-fused IgG Fc Protein, *H. Tonoi, H. Tada, A. Ueda, A. Kondo, M. Seno, M. Ueda, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular

Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Anterograde Mitochondrial Transport Is Promoted by FEZ1 in Neurites of NGF-differentiated PC12 Cells, *J. Ikuta, A. Maturana, T. Fujita, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

ENH1 Scaffolds the PKCε-PKD1 Signaling Complex at the Z-discs of Cardiomyocytes, M. Ishida, *A. D. Maturana, M. Iwata, J. Van Lint, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Improvement of *In Vivo* Pinpoint Drug Delivery System Using Bio-nanocapsules, *J.-H. Jung, T. Yamada, A. Kondo, M. Seno, M. Ueda, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

Hepatitis B Virus Envelope Pre-S Peptide Applicable for the Human Liver-specific Protein Delivering System, *T. Kasuya, A. Uyeda, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, June 18–23, 2006.

PDZ-LIM Protein, ENH1 Scaffolds Protein Kinase D1 to Modulate the Activity of L-Type Calcium Channels in Neonatal Rat Cardiomyocytes (Oral), A. D. Maturana, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 – Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho Kaikan, Suita, Osaka, Japan, September 19–20, 2006.

Mechanism of Reductive Half-reaction Catalyzed by Topa Quinone-containing Copper Amine Oxidase (Invited), K. Tanizawa, Japan-China Crossover Science Symposium 2006, Mito, Ibaraki, Japan, October 13–18, 2006.

Involvement of a Hypothetical [Fe-S]-Binding Protein in the Biosynthesis of Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase (Invited), K. Tanizawa, Japan-Italy Symposium of New Trends in Enzyme Science and Technology, Nagoya, Japan, November 15–17, 2006.

Fasciculation and Elongation Protein Zeta-1 (FEZ1) Participates in the Polarization of Hippocampal Neuron by Controlling the Mitochondrial Motility, *J. Ikuta, A. D. Maturana, T. Fujita, T. Okajima, K. Tatematsu, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 5th 21st Century COE International Symposium “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Awaji, Hyogo, Japan, December 8–9, 2006.

Improvement of *In Vivo* Pinpoint Drug Delivery System Using Bio-nanocapsules, J.-H. Jung, T. Yamada, A. Kondo, M. Seno, M. Ueda, *K. Tanizawa, and S. Kuroda, 5th 21st Century COE International Symposium “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Awaji, Hyogo, Japan, December 8–9, 2006.

Hepatitis B Virus Envelope Pre-S Peptide Applicable for the Human Liver-specific Protein Delivering System, T. Kasuya, A. Uyeda, *K. Tanizawa, and S. Kuroda, 5th 21st Century COE International Symposium “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Awaji, Hyogo, Japan, December 8–9, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

谷澤　克行	The 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and the 11th FAOBMB Congress（プログラム委員会委員・ヤングサイエンティストプログラム査読委員）
谷澤　克行	Federation of Asian and Oceanian Biochemists and Molecular Biologists（日本代表）
黒田　俊一	Human Science Forum (Kinki Bio-industry Association)（実行委員）

[国内学会]

日本農芸化学会関西支部会	1件
日本分子生物学会	1件
ビタミンB研究委員会	2件

[取得学位]

修士（生命機能）

殿井　裕之	ホーミングペプチド提示型バイオナノカプセルによる生体内ピンポイント DDS の開発

博士（理学）

小野　和利	キノヘムタンパク質・アミン脱水素酵素の翻訳後修飾における鉄硫黄タンパク質の役割に関する生化学的・分子生物学的研究
生田　潤子	ラット胎児海馬神経細胞における神経軸索誘導関連タンパク質 FEZ1 の機能解析

[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（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	9,200

特定領域研究(C)(2)

黒田　俊一	癌特異的ホーミングペプチドを提示する中空バイオナノ粒子によるミサイル療法の開発	6,300

（分担者として配分されたもの）

21 世紀 COE 研究

立松　健司	無害金属クラスターの化学修飾による標的指向性ドラッグデリバリーシステムの開発	1,000

[厚生労働科学研究費補助金（萌芽的先端医療技術推進研究事業）]

（分担者として配分されたもの）

黒田　俊一	ピンポイントデリバリー用バイオナノキャリアの開発とがん遺伝子治療への応用		4,000

［ 受託研究 ］

谷澤　克行	日本学術振興会	構造生物化学及び機能生物化学分野に関する学術動向の調査・研究	3,500
谷澤　克行	三菱電機株式会社（NEDO 基盤技術研究促進事業）	ゲノム研究成果産業利用のための細胞内シグナル網羅的解析技術	3,675
谷澤　克行	科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業（CREST）	医療に向けた化学・生物系分子を利用したバイオ素子・システムの創製：中空バイオナノ粒子を用いる遺伝子導入法の開発	1,300
谷澤　克行	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）	酵母由来中空バイオナノ粒子を用いる革新的超高感度バイオセンシング技術の開発	20,000
黒田　俊一	文部科学省	脳・神経系の総合プロテオミクスプロジェクト（タンパク 3000 プロジェクト）	2,500
黒田　俊一	経済産業省近畿経済局(バイオサイトキャピタルより再委託)（中小企業地域新生コンソーシアム研究開発事業）	コンビ・バイオによる低分子リード化合物の開発技術	500
黒田　俊一	科学技術振興機構 プラザ大阪育成研究事業	実験動物各臓器や培養細胞に対して遺伝子・タンパク質・薬剤をピンポイントに送達する中空バイオナノ粒子の開発	10,000
黒田　俊一	科学技術振興機構 地域研究開発資源活用促進プログラム	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	44,910

［ 奨学寄附金 ］

谷澤　克行	ビタミン B 研究委員会		250

［ 共同研究 ］

黒田　俊一	アズワン株式会社	コンビバイオを応用したアゴニスト、レセプターのスクリーニング方法の開発	16,000
黒田　俊一	株式会社ビークル	臓器および細胞特異的ターゲッティングやイメージングが可能な中空バイオナノ粒子の開発	2,180

立松　健司	株式会社ジェノラック BL	乳酸経口ワクチン発現用ベクター開発に関する研究	406
立松　健司	東洋紡株式会社	細胞抽出液の調製、及び保存安定性の確立	320

高次細胞機能研究分野

教授	野地　博行
助教授	和田　洋
助手	田端　和仁、飯野　亮太
博士研究員	奥野　大地、今村　博臣、上野　博史、Liza Lam、榎　佐和子
特任研究員	伊香　祐子、中野　雅裕、長谷川　理恵
大学院学生	堀口　淳矢、仲田　昌義、藤沢　亮、游　慧娟
学部学生	松野　真人、中村　真梨子、籠谷　嘉人、西川　芳宏、Huynh Nhat Phuong Kim
事務補佐員	ウォルシュ　美樹、伊達　理沙

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

・生体回転分子モーターである F_1-ATPase の 1 分子に磁性ビーズを結合させて外部磁場（磁気ピンセット）により回転方向や速度を制御し、化学反応を制御することに成功した。特に、基質である ATP の親和性が回転子 γ サブユニットの角度に依存して 1000 倍変化するのに対し、ATP 加水分解・合成の平衡は γ サブユニットの角度にはあまり依存しないことが初めて明らかとなった。
・真核細胞おいて小胞体からの膜小胞形成を担う COPII システムを人工膜上に再構成し、膜小胞形成過程を 1 分子レベルでリアルタイムイメージングすることに世界で初めて成功した。
・微細加工技術を利用して作製したフェムトリッターチャンバーアレイに大腸菌 1 細胞を閉じ込めることにより、個々の細菌の異物排出活性を迅速に検出することに成功した。これは、新規な異物排出遺伝子や異物排出トランスポーターの新規な阻害剤を網羅的にスクリーニングすることを可能にする画期的な成果である。
・フェムトリッターチャンバーに閉じ込めた DNA 1 分子を制限酵素により切断し、交流電場により引き伸ばして分子量を計測することに成功した。

[原著論文]

Single Molecule Energetics of F_1-ATPase Motor, E. Muneyuki, T. Watanabe-Nakayama, T. Suzuki, M. Yoshida, T. Nishizaka. and H. Noji, Biophys J. 92. (2006) 1806-1812.

Temperature Distribution Measurement on Microfabricated Thermodevice for Single Biomolecular Observation Using Fluorescent Dye, H. F. Arata, P. Low, K. Ishizuka, C. Bergaud, B. Kim, H. Noji and H. Fujita, Sensors and Actuators, B: Chemical 117 (2) (2006) 339-345.

Chemical Delivery Microsystem for Single-Molecule Analysis Using Multilaminar Continuous Flow, S. W. Lee, T. Yamamoto, H. Noji and T. Fujii, Enzyme and Microbial Technology 39 (3) (2006) 519-525.

Electrophysiological Recordings of Single Ion Channels in Planar Lipid Bilayers Using

Apolymethyl Methacrylate Microfluidic Chip, H. Suzuki, K. V. Tabata, H. Noji and S. Takeuchi, Biosens Bioelectro 22 (6) (2006) 1111-1115.

Motion Control of Single F_1-ATPase Rotary Biomolecular Motor Using Microfabricated Local Heating Devices, H. F. Arata, H. Noji and Fujita, H., APPLIED PHYSICS LETTERS 88, (2006) 083902

Highly Reproducible Method of Planar Lipid Bilayer Reconstitution in Polymethyl Methacrylate Microfluidic Chip, H. Suzuki, K. V. Tabata, H. Noji and S. Takeuchi, Langmuir 22 (2006) 1937-1942.

[解説、総説]

F_1-ATPase: a highly coupled reversible rotary motor, R. Iino, H. Noji. Biochem Soc Trans. 34 (2006) 993-996.

モータータンパク質とその利用、野地博行、「ナノテクのためのバイオ入門」（2007）80-94 共立出版

超微小溶液チャンバーを用いた 1 分子反応計測、野地博行、細胞工学 25(8) (2006) 868-872

第 3 章 磁性ビーズを用いた回転分子モーターの研究、野地博行、「磁性ビーズのバイオ・環境技術への応用展開」（2006）P.293-301　シーエムシー出版　（共著）

1分子からシステム再構成へ　生化学的再構成と1分子生物物理の融合をめざして、野地博行、蛋白質 核酸 酵素 51(12) (2006) 1719-1720

フェムトリットル溶液チャンバーを用いた生体分子 1 分子計測、野地博行、生物物理 46(3) （2006） 154-158

超微小反応チャンバーで生体回転分子モーターの作動機構を探る、飯野亮太，野地博行、未来材料 6(5) (2006) 32-38

Let’s enjoy Science!、野地博行、学術月報　Vol.59 No.5, (2006) 348-350

[特許]

「細胞検体の異物排出活性検出方法、及びその利用」飯野亮太，西野邦彦，仲田昌義，榊原昇一，山口明人，野地博行、特願 2006-294558

[国際会議]

Single-Molecule Studies on the Mechanism of ATP Synthesis by F_1-ATPase (Invited), H. Noji, Gordon Research Conference of The Molecular & Cellular Bioenergetics, USA. June 12, 2006

Femtolitre Chamber Array for Single Molecule Analysis of F_1-Motor Protein (Invited), H. Noji, Bioscience2006, United Kingdom, July 27, 2006

Mechanochemical Coupling of F_1-ATPase (Invited), H. Noji, The 20th Symposium of The Protein Society and 20th Anniversary Celebration, USA, August 6, 2006

Rotary Motors (Invited), H. Noji, 2006 Biophysical Society Discussions, USA. October 20, 2006

Femtoliter Chamber for Single-Molecule Analysis (Invited), H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Chemomechanical coupling of F_1-ATPase motor protein (Invited), H. Noji, SANKEN Workshop on Nano-Bioscience at Berkeley, USA, March 21, 2007

Micron-Sized Reaction Chamber Array for Highly Sensitive Detection of Biological Reaction (Invited), R. Iino, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Highly Sensitive Measurement of Biological Reaction in Femtoliter Chamber Array (Invited), R. Iino, SANKEN WORKSHOP on Nano-Bioscience at Berkeley, USA, March 21, 2007

Rotation Mechanism of V_1-ATPase Is Distinct from That of F_1-ATPase, *H. Imamura, M. Takeda, S. Funamoto, M. Yoshida, K.Yokoyama, 20TH IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, June 19, 2006

Does Forcible Rotation of F_1 motor Enhance ATP Hydrolysis?, *Y. Iko, T. Akamatsu, S. Sakakihara, K. V. Tabata, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Pausing of F_1 by 5'-(β, γ-imido)triphosphate (AMPPNP), *R. Fujisawa, D. Okuno, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Observation of Single-Molecule Restriction Enzyme Reaction in Microchamber Made from Acrylamide Gel, *L. Lam, K. Ishizuka, S. Sakakihara, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Mechanical Modulation of ATP Binding Affinity and ATP Hydrolysis / Synthesis Equilibrium of F_1-ATPase, *D. Okuno, R. Watanabe, S. Sakakihara, K. Shimabukuro, M. Yoshida, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Development of The Single Molecule Imaging System of The F_o motor, *H. Ueno, K. V. Tabata, T. Suzuki, T. Ide, M. Yoshida, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Pathway for Assembly of V_1 Complex of Thermus Thermophilus V-ATPase, *H. Imamura, S. Funamoto, M. Yoshida, K. Yokoyama, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

Imaging of COPII Vesicle Formation and Budding from Artificial Membrane, *K. V. Tabata, K. Sato, T. Ide, H. Noji, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology

2006, Osaka, Japan, September 19, 2006

ε Subunit Stops Rotation of Thermophilic F_1-ATPase; Single Molecular Analysis of The Inhibition by The ε Subunit, *T. Haruyama, Y. Hirono-Hara, H. Noji, Y. Kato-Yamada, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Membrane Transport Assay System for Transporter Proteins Using Artificial Lipid Bilayers, *H. Suzuki, K. V. Tabata, H. Noji, S. Takeuchi, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Imaging of COPII Vesicle Formation and Budding from Artificial Membrane, *K. V. Tabata, K. Sato, T. Ide, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Designing a Mutant F_1-ATPase for Easy and Rapid Single Molecule Analysis, *M. Nakamura, H. Ueno, H. Imamura, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Single-Molecule Analysis of F_1-Motor Loaded with Nonhydrolyzable Substrate, *R. Fujisawa, D. Okuno, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Does Forcible Rotation of F_1 Motor Enhance ATP Hydrolysis?, *Y. Iko, T. Akamatsu, S. Sakakihara, K. V. Tabata, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Development of the single molecule imaging system of the F_o motor, H. Ueno, K. V. Tabata, T. Suzuki, T. Ide, M. Yoshida, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Mechanical Modulation of ATP Binding Affinity and ATP Hydrolysis / Synthesis Equilibrium of F_1-ATPase, *D. Okuno, R. Watanabe, S. Sakakihara, K. Shimabukuro, M. Yoshida, H. Noji, EABS & BSJ 2006, Okinawa, Japan, November 13, 2006

Single Cell Measurement of Drug Efflux by RND Family Transporter in Femtoliter Chamber Array, *R. Iino, M. Nakata, K. Nishino, S. Sakakihara, S. Takeuchi, A. Yamaguchi, H. Noji, 5th 21th Century COE International Symposium “Towards creating new industries based on inter-nanoscience”, Osaka, Japan, December 8, 2006

Mechanical Twisting of Single Green Fluorescent Protein Molecules, *S. Enoki, R. Iino, H. Noji, 5th 21th Century COE International Symposium “Towards creating new industries based on inter-nanoscience”, Osaka, Japan, December 8, 2006

Lipid Bilayer Microchambers: An Pptical Detection System for Membrane Transport, *H. Suzuki, K. V. Tabata, H. Noji and S. Takeuchi, (2006) Proceedings of the IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS) 1627841, pp.482-485

Restriction Enzyme Assay in Femtoliter Microchamber, *L. Lam, K. Ishizuka, S. Sakakihara and H. Noji, (2006) Proc. 10th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (μTAS), Tokyo, Vol. 1, pp.1429-1431

Development of an Assay System for ABC Transporters Reconstituted in an Artificial Lipid Bilayer. *H. Suzuki, K. V. Tabata, H. Noji and S. Takeuchi, (2006) Proceedings of 10th International

Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences (μTAS), Tokyo, Vol. 2, pp. 1363-1365

[国内学会]

日本蛋白質科学会	1 件
電気学会センサ・マイクロマシン準部門バイオマイクロシステム研究会	2 件
日本生体エネルギー研究会	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

厚生労働科学研究費補助金 野地　博行	1 分子 PCR デバイスの開発	5,000
特定領域研究　革新的ナノバイオ領域　計画研究 野地　博行	F_oF_1-ATP 合成酵素の回転動作機構の解明	49,800
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	15,600
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	2,000
大阪大学産研・原子力工学専攻 21 世紀 COE 若手研究 A 飯野　亮太	マイクロ加工技術を駆使した異物排出遺伝子の網羅的スクリーニング	1,000
大阪大学産研・原子力工学専攻 21 世紀 COE 若手研究 A 田端　和仁	光解離性 GFP を用いたパターンニングと脂質二重膜上における単一分子蛍光測定	1,000
特別研究員奨励費 Liza Lam	1 分子 DNA 検出のためのマイクロデバイス開発	1,200
特別研究員奨励費 今村　博臣	1 分子計測およびX線結晶構造解析による回転分子モーターV_1の回転メカニズムの研究	1,200

特別研究員奨励費 上野　博史	ATP 合成酵素の F_o モーターの 1 分子回転観察 - 平面膜による膜電位の制御		1,200

[受託研究]

野地　博行	農業・生物系特定産業技術研究機構	ナノ加工技術を利用した膜タンパク質のナノバイオロジー	30,760

生体情報制御学研究分野

教授	山口　明人
助教授	村上　聡
招へい助教授	松本　佳巳（平成 19 年 1 月 1 日採用）
助手	平田　隆弘
特任助手	西　晶子
博士研究員	松本　崇、松本　佳巳（平成 18 年 11 月 1 日～12 月 31 日）、平川　秀忠（平成 19 年 2 月 1 日採用）
大学院学生	小林　直木、橋本　聡文、岩田　歩、大東　穂、千田　靖子、久野　悠、二階堂　英司、王　麗媛、宮田　耕資、尾上　麻実子
学部学生	坂田　博樹、吉田　康伸
技術員	伊勢　琴子
技術補佐員	佐藤　玲子
事務補佐員	西田　真理

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。今年度の主な成果の概要は次の通りである。

最も特筆大書される成果は、細菌の代表的異物排出輸送体 AcrB の基質結合型結晶構造の決定に成功し *Nature* 誌 Article として出版したことである。本研究分野の村上らが世界で初めて異物排出輸送体 AcrB の結晶構造決定に成功したのは 2002 年であったが、そのときの構造は輸送される基質を含んでおらず、基質結合部位は特定できなかった。今回の構造決定成功により、異物は後述のごとく、F_0F_1-ATPase などとも類似性のある 3 量体の機能的回転という、膜輸送体としては全く新しい機構によって排出されていることが明らかとなった。これは、異物の認識・排出機構の研究の歴史にとってまさにエポックメーキングな事と考えている。

異物排出蛋白発現制御に関しては、*mdtEF* がカタボライトコントロールを介して PTS 糖により発現誘導されることを発見した。また、菌の発育段階に応じた発現制御機構についても解析した。

動物細胞排出輸送体の研究では、血小板のスフィンゴシン 1 リン酸分泌が排出輸送体によるものであることを立証し、現在そのタンパク質を同定するために、cDNA ライブラリの構築などを進めている。

b） 成果

・異物排出タンパク AcrB の基質結合型結晶構造決定

村上らは 2002 年、異物排出タンパク AcrB の結晶構造解析に成功した。これは、異物排出タンパクで初めての結晶構造決定であるのみならず、プロトン輸送と共役する膜輸送タンパク質では初めての構造決定である。この構造決定によって、初めて溶質の膜輸送が具体的な分子機構に基づいて理解することが可能になった。しかし、この段階では基質結合部位は不明であった。本年度、基質結合型 AcrB 結晶の構造決定に成功した。基質分子は AcrB 分子の水溶性ドメイン中に存在する芳香族アミノ酸に富んだ結合ポケット中に結合しており、薬剤は主に芳香族アミノ酸などによる疎水的相互作用により主に認識される事が分かった。異なる種類の基質に対してはポケット内の別の疎水性アミノ酸の組み合わせにより対応するという多面結合モデルであった。また基質分子が AcrB 三量体のうち一つの単量体にのみ結合することを発見し、AcrB 三量体に含まれるそれぞれの単量体は基質結合状態が異なる三種類の反応中間体であるということを明らかにした。これらの実験的事実から AcrB が機能的回転を伴い基質分子

を排出する新規作動メカニズムを提唱した。この結果は 2006 年 9 月号の Nature 誌に Article として掲載された。

・異物排出蛋白質の細菌情報伝達による発現制御及び生理的役割の解明

大腸菌のゲノム上には、異物排出蛋白質遺伝子が 20 種類存在し、クローニングにより強制発現させると実際にひとつないしは複数の薬剤・毒物を排出する膜輸送タンパク質である。20 種もの多数の異物排出遺伝子を保持するにも関わらず、遺伝子ノックアウトによって薬剤・毒物への感受性が変化するものは AcrB を含む 2〜3 個にすぎない。すなわち、その他の異物排出蛋白質遺伝子は通常の培養条件下では発現していないか発現レベルが極めて低いと考えられる。しかしながら、これらのオペロンに隣接して転写抑制遺伝子の存在が確認されているのはわずかに 3 個に過ぎない。未知の抑制性因子の存在が強く示唆される。また、正の制御因子として私たちはこれらの異物排出遺伝子が、細菌の環境感知応答システムである二成分情報伝達系により発現誘導されてくることを見出し発現制御ネットワークを報告している。また大腸菌の代謝産物であるインドールの細胞間コミュニケーションにおける役割にも注目しインドールが異物排出遺伝子発現を誘導することも見出している。多数存在する異物排出蛋白質がこのように精密に制御されていることから異物排出以外にも本来の生理的役割の存在が示唆され、その解明も目指している。

本年度は以下の成果を得た。（１）異物排出遺伝子の増殖期依存的な発現の解析：生理的役割解明のためのヒントを得る目的で異物排出遺伝子の増殖期依存的な発現に注目した。MdtEF 異物排出蛋白質が定常期後期に顕著に発現上昇することを見出した。実際に定常期後期の菌を調製して薬剤感受性を比較すると MdtEF 依存的な薬剤耐性が観察された。詳細な解析によりこの誘導には、RpoS-Hfq(GadY)-GadX 制御系が関与し、部分的にはインドールによる誘導が関わっていることを明らかとした。（２）新規異物排出蛋白質遺伝子抑制性因子の探索: 昨年度、鉄の代謝に関連する遺伝子の発現抑制因子である Fur が異物排出遺伝子 *acrD, mdtABC* の発現も抑制していることを見出した。*fur* 遺伝子欠損により異物排出遺伝子のうち AcrD, MdtABC が特異的に発現誘導される。また鉄欠乏によっても両蛋白質が発現誘導された。本年度は、フットプリンティング法により Fur が *acrD* および *mdtABC* 遺伝子のプロモーター付近に結合することを見出し、その作用が直接的制御であることを証明した。何故、鉄代謝に関連する抑制因子 Fur が異物排出遺伝子 *acrD, mdtABC* の発現も抑制するのかという疑問から出発して、両異物排出蛋白が鉄キレート性低分子物質であるエンテロバクチンの放出の可能性に注目した。*acrD, mdtABC* の二重欠損株における培地中エンテロバクチン量は、野生株の 50%以下に有意に減少しており、両異物排出蛋白の生理的役割がエンテロバクチンの菌体外放出であるという可能性を強く支持する結果を得た。（３）菌体外インドール量の増大による大腸菌の感染因子誘導：細胞間情報伝達物質としてインドールが異物排出遺伝子発現を誘導すること、それが二成分系を介する誘導と、二成分系とは独立の経路の２通り存在することを既に示した。本年度は腸管出血性大腸菌のインドール非産生株(*tnaA*)を構築し感染因子の量の変動を調べた。感染成立初期に必要な LEE4 オペロンにコードされる分泌蛋白 EspA, EspB 細胞外分泌量はインドール合成酵素 *tnaA* 欠損により顕著に減少したが、TnaA を発現プラスミドにより相補させた場合あるいは培地中にインドールを添加した時に産生量は回復した。実際に *tnaA* 欠損株は野生株と比較して培養細胞への感染初期に見られるアクチン再構成,集積化が顕著に低下しており感染力の低下が示唆された。（４）サルモネラ菌の病原性および薬剤耐性における異物排出蛋白質の役割：新たにサルモネラ菌の異物排出蛋白質に関しても解析した。ゲノム情報に基づきサルモネラ菌のすべての異物排出蛋白質欠損株および強制発現株を作成し、サルモネラの薬剤耐性化に関与する 9 個の異物排出蛋白質を同定した。サルモネラ菌特異的な異物排出蛋白質 MdsABC システムを発見しそれが外膜蛋白質 MdsC あるいは TolC と複合体を形成して薬剤排出機能を担うことを明らかにした。サルモネラ菌の EmrAB, MdfA, MdtK 異物排出蛋白質は大腸菌オルソログに対して、90%という高い相同性を示すにも関わらず、大腸菌のものとは異なる基質特異性を保持していた。また MacAB 排出システムを欠損させたサルモネラ菌はマウスに対しての感染力が顕著に低下し、9 個の異物排出蛋白質を欠損させたサルモネラ菌は完全に感染力を失っていた。胆汁酸などに対する抵抗性の減少及び機構未解明の Δ*macAB* による感染能減少により腸管内で定着できなかったものと推定している。また、MacAB 排出蛋白質は、サルモネラ菌の病原性発現調節を担う PhoP/PhoQ 二成分情報伝達系により制御されることを見出した。薬剤耐性と病

原性という本来は結びつかなかった機構のつながりが見えてきた。（５）カタボライトコントロールによる発現誘導：以前発見した N-acetyl glucosamine による MdtEF の誘導機構が PTS 糖による CRP-cAMP を介したカタボライトコントロールによる発現誘導であることを明らかにした。

・ABC 輸送体 A サブファミリーの機能解析

我々は脂溶性情報伝達物質の細胞外への放出機構を明らかにするために、オーファン輸送体である ABC 輸送体の A サブグループに着目して機能解析を進めている。本年度は ABCA5 の解析と並行して ABCA7 ノックアウトマウスの構築を進めそれを完成した。

・血小板からのスフィンゴシン１リン酸輸送体の同定

スフィンゴシン１リン酸は、血小板に高濃度に蓄積し、血小板活性化刺激により放出される脂質メディエーターである。我々はこの放出が開口放出によるものではなく、細胞膜に局在する輸送体によることを、SLO や α-Toxin 等の細胞膜に異なる大きさの穴をあける事のできる毒素を用いて明らかにした。更に輸送体の特異的阻害剤を用いる事で、スフィンゴシン１リン酸の輸送に ABCA 型輸送体が関与している可能性を示した。

[原著論文]

Crystal Structure of the DsbB-DsbA Complex Reveals a Mechanism of Disulfide Bond Generation, K. Inaba, S. Murakami, M. Suzuki, A. Nakagawa, E. Yamashita, K. Okada and K. Ito, Cell, 127[4] (2006) 789-801.

Application of Femtosecond Laser Ablation for Detaching Grown Protein Crystals from Glass Capillary Tube, M. Kashii, R. Fujisawa, H. Adachi, Y. Mori, T. Sasaki, Y. Koga, K. Takano, S. Kanaya, H. Matsumura, T. Inoue, S. Murakami, K. Sugamoto and H. Yoshikawa, J. Biosci. Bioeng., 102[4] (2006) 372-374.

Crystal Structures of a Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism, S. Murakami, R. Nakashima, E. Yamashita, T. Matsumoto and A. Yamaguchi, Nature, 443[7108] (2006) 173-179.

N-Acetyl-D-Glucosamine Induces the Expression of Multidrug Exporter Genes, *mdtEF*, via Catabolite Activation in *Escherichia coli*, H. Hirakawa, Y. Inazumi, Y. Senda, A. Kobayashi, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi, J. Bacteriol., 188[16] (2006) 5851–5858.

Growth Phase-Dependent Expression of Drug Exporters in *Escherichia coli* and Its Contribution to Drug Tolerance, A. Kobayashi, H. Hirakawa, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi, J. Bacteriol., 188[16] (2006) 5693–5703.

Effect of Drug Transporter Genes on Cysteine Export and Overproduction in *Escherichia coli*., S. Yamada, N. Awano, K. Inubushi, E. Maeda, S. Nakamori, K. Nishino, A. Yamaguchi and H. Takagi, Appl. Environ. Microbiol., 72[7] (2006) 4735-4742.

Crystallization and Preliminary Crystallographic Analysis of Orotidine 5’-Monophosphate Decarboxylase from the Human Malaria Parasite *Plasmodium falciparum*, S. R Krungkrai, K. Tokuoka, Y. Kusakari, T. Inoue, H. Adachi, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, Y. Mori, Y. Kai, J. Krungkrai and T. Horii, Acta Crystallogr., F62[6] (2006) 542-545.

Purification, Crystallization and Preliminary X-ray Diffraction of SecDF, a Translocon-Associated Membrane Protein, from *Thermus thermophilus*, T. Tsukazaki, H. Mori, S. Fukai, T. Numata, A. Perederina, H. Adachi, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori, T. Sasaki D. G Vassylyev, O. Nureki and K. Ito, Acta Crystallogr., F62[4] (2006) 376-380.

Crystallization and Preliminary X-ray Analysis of the tRNA Thiolation Enzyme MnmA from *Escherichia coli* Complexed with $tRNA^{Glu}$, T. Numata, Y. Ikeuchi, S. Fukai, H. Adachi, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori, T. Sasaki, T. Suzuki and O. Nureki, Acta Crystallogr., F62[4] (2006) 368-371.

Sphingosine 1-Phosphate is Released from the Cytosol of Rat Platelets in a Carrier-Mediated Manner, N. Kobayashi, T. Nishi, T. Hirata, A. Kihara, T. Sano, Y. Igarashi and A. Yamaguchi, J. Lipid Res., 47[3] (2006) 614-621.

Solution-Stirring Method Improves Crystal Quality of Human Triosephosphate Isomerase, H. Adachi, A. Niino, T. Kinoshita, M. Warizaya, R. Maruki, K. Takano, H. Matsumura, T. Inoue, S. Murakami, Y. Mori and T. Sasaki, J. Biosci. Bioeng., 101[1] (2006) 83-86.

[解説、総説]

タンパク質結晶構造解析入門-ブラックボックスの中身-（3）モデリングの中身をのぞいてみよう　位相改良による電子密度図のリファイン、村上聡、日本結晶学会誌、48 [6] (2006) 381-386.

薬剤耐性化のなぞにせまる―多剤排出トランスポーターの薬剤認識・排出機構、村上聡、Bionics、3 [12] (2006) 38-43.

フェムト秒レーザー照射によるタンパク質・有機低分子の結晶化、安達宏昭、森勇介、佐々木孝友、高野和文、松村浩由、井上豪、村上聡、酵素工学ニュース、56 (2006) 9-13.

細菌に薬がきかなくなる最大の“カラクリ”、村上聡、Newton、26 [11] (2006).

フェムト秒レーザー照射による結晶核発生と溶液攪拌による新しいタンパク質結晶化技術、森勇介、安達宏昭、高野和文、井上豪、村上聡、松村浩由、佐々木孝友、OPTRONICS、25 [295] (2006) 201-207.

創晶プロジェクトとバイオグリッドの連携による創薬開発の試み、井上豪、門祐示、有竹浩介、松村浩由、甲斐泰、福西快文、中村春木、木下誉富、仲西功、南方聖司、小松満男、安達宏昭、森勇介、高野和文、村上聡、佐々木孝友、宮野雅司、裏出良博、坂田恒昭、SAR News、10 (2006) 2-6.

[特許]

「細胞検体の異物排出活性検出方法、及びその利用」飯野亮太、西野邦彦、仲田昌義、榊原昇一、山口明人、野地博行、特願 2006-294558

[国際会議]

Crystal Structure of Multi-Drug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Invited), *S. Murakami, Seminar, Department of Physiology, UCLA, Mar.23, 2007.

Crystal Structure of Multi-Drug Transporter AcrB Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Oral), *S. Murakami, SANKEN Workshop on Nano-Bioscience at Berkeley, University of California Berkeley, USA, Mar.21-22, 2007.

Crystal Structure of a Bacterial Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Invited), *S. Murakami, Seminar, University of Cambridge, UK, Feb.8, 2007.

Structure and Function of Bacterial Xenobiotic Exporters (Oral), *A. Yamaguchi, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology SANKEN and SANKEN 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience", Osaka Univ., Japan, Jan.25-26, 2007.

Crystal Structure of a Bacterial Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Invited), *S. Murakami, Seminar, BOSE INSTITUTE, Kolkata, India, Jan.10, 2007.

Crystal Structure of a Bacterial Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Invited), *S. Murakami, Seminar, Dept. of Crystallography and Biophisics Univ. of Madras, Chennai, India, Jan.8, 2007.

Crystal Structure of a Bacterial Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Invited), *S. Murakami, 94th Indian science congress, Symposium IV: Structure and Functional Relationship of Macromolecules, Chidambaram, Tamilnadu, India, Annamalai Univ., Jan.4-7, 2007.

Synthesis of Autoinducer-2 Antagonists in Bacterial Quorum-Sensing, *M. Hiraoka, Y. Yano, T. Kawano, H. Hirakawa, A. Kobayashi, T. Hirata, A. Yamaguchi, J. Ohkanda and N. Kato, 5th 21COE International Symposium, Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

Single Cell Measurement of Drug Efflux by RND Family Transporter in Femtoliter Chamber Array, *R. Iino, M. Nakata, K. Nishino, S. Sakakihara, S. Takeuchi, A. Yamaguchi and H. Noji, 5th 21COE International Symposium, Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

Characterization of Mouse ABCA5 Protein, *M. Ohigashi, T. Nishi and A. Yamaguchi, 5th 21COE International Symposium, Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

A Biological Function of Multidrug Transporters in Iron Homeostasis, *K. Nishino, T. Hirata and A. Yamaguchi, 5th 21COE International Symposium, Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

Tissue Specific Expression of the Splicing Variants of the Mouse Vacuolar Proton Translocating ATPase a4 Subunit, *S. Kawasaki-Nishi, A. Yamaguchi, M. Forgac and T. Nishi, 5th 21COE International Symposium, Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

Intracellular Localization and Tissue Distribution of Novel RND-Type Proteins in Mice, *S. Hashimoto, Y. Kubo, T. Nishi, T. Hirata and A. Yamaguchi, 5th 21COE International Symposium,

Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec.8-9, 2006.

A Functionally Rotating Mechanism Revealed in Crystal Structures of the Multidrug Transporter, AcrB, with Bound Substrates (invited), *S. Murakami, AsCA'06/CrSJ:Joint Conference of the Asian Crystallographic Association and the Crystallographic Society of Japan, Tsukuba, Japan, Nov.20-23, 2006.

The Crystal Structure of Orotidine 5'-Monophosphate Decarboxylase from the Human Malaria Parasite *Plasmodium falciparum*, *K. Tokuoka, S. Krungkrai, Y. Kusakari, T. Inoue, H. Adachi, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, Y. Mori, Y. Kai, K. Jerapan and T. Horii, AsCA'06/CrSJ:Joint Conference of the Asian Crystallographic Association and the Crystallographic Society of Japan, Tsukuba, Japan, Nov.20-23, 2006

The Crystallization and X-ray Diffraction of the Exo-Arabinanase from *Penicillium Chrysogenum*, *Y. Sogabe, T. Kinoshita, A. Yamaguchi, T. Kitatani, T. Sakamoto, H. Ihara, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori and T. Tada, AsCA'06/CrSJ:Joint Conference of the Asian Crystallographic Association and the Crystallographic Society of Japan, Tsukuba, Japan, Nov.20-23, 2006.

Membrane Protein Crystallization under High Pressure, *H. Yoshikawa, S. Nakata, R. Murai, T. Kitatani, M. Syou, H. Adachi, T. Inoue, H. Matsumura, K. Takano, S. Murakami, Y. Mori and T. Sasaki, AsCA'06/CrSJ:Joint Conference of the Asian Crystallographic Association and the Crystallographic Society of Japan, Tsukuba, Japan, Nov.20-23, 2006.

Crystal Structure of a Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism (Oral), *S. Murakami, EABS & BSJ 2006:Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa, Japan, Nov.12-16, 2006.

Improvement and Analysis of ATP Synthase Crystals, *Y. Shirakihara, A. Shiratori, S. Murakami, T. Suzuki and M. Yoshida, EABS & BSJ 2006:Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa, Japan, Nov.12-16, 2006.

A Functionally Rotating Mechanism Revealed in Crystal Structures of the Multidrug Transporter, AcrB, with Bound Substrates (Invited), *S. Murakami, SLS seminar, Swiss, Sep.20, 2006.

A Functionally Rotating Mechanism Revealed in Crystal Structures of the Multidrug Transporter, AcrB, with Bound Substrates (Invited), *S. Murakami, Switzerland-Japan Symposium on Structural Biology 2006 , Brunnen, Switzerland, Sep.17-19, 2006.

A Functionally Rotating Mechanism Revealed in Crystal Structures of the Multidrug Transporter, AcrB, with Bound Substrates (Invited), *S. Murakami, Astbury Seminar, University of Leeds, UK, Sep.12, 2006.

Bacterial Multidrug Exporters -From the Molecular Structure to the Biological Funciton (Oral), *A. Yamaguchi, The 6th Awaji International Forum on Infection and Immunity, The Hyogo Prefectual Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Sep.4-8, 2006.

Effect of Solution Stirring on Protein Crystallization, *R. Murai, S. Nakata, M. Kashii, H. Adachi, K. Takano, H. Matsumura, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori and T. Sasaki, American Crystallographic Association, 2006 Annual Meeting, Honolulu, Hawaii, Jul.22-27, 2006.

Protein Crystal Processing Using Ultraviolet Laser Irradiation, *K. Takano, H. Kitano, H. Adachi, M. Kashii, H. Matsumura, S. Murakami, T. Inoue, Y. Mori, M. Doi and T. Sasaki, American Crystallographic Association, 2006 Annual Meeting, Honolulu, Hawaii, Jul.22-27, 2006.

Plasma Membrane Transporters Participate the Sphingosine 1-Phosphate Secretion from the Rat Platelet, *T. Nishi, N. Kobayashi, T. Hirata and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

Cellular Localization of Mouse ABCA5 Proteins in Mouse Tissues, *M. Ohigashi, T. Nishi and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

Membrane Topology of EmrB, an Outer Membrane Channel-Coupled Multidrug Efflux Transporter, in *Escherichia coli*, *Y. Hisano, N. Tamura, S. Murakami and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

Lipopolysaccharide Modifications Mediating Bacterial Resistance to Fe(III) and Al(III), *K. Nishino, E. Groisman and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

The Induction of Bacterial Xenobiotic Exporter, MdtEF, by N-Acetyl-D-Glucosamine is Mediated via PTS System in *Escherichia coli*, *Y. Senda, A. Kobayashi, Y. Inazumi, H. Hirakawa, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

mdtABC and *acrD* Drug-Exporter Genes are Suppressed by a Ferric Uptake Regulator, Fur, in *Escherichia coli*, T. Masaki, H. Hirakawa, K. Nishino, *T. Hirata and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun.18-23, 2006.

Fur Negatively Regulates Drug-Exporter Genes of *mdtABC* and *acrD* in *Escherichia coli*, T. Masaki, H. Hirakawa, *T. Hirata and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May21-25, 2006.

Studies on the Substrate-Recognition Site of AcrB Using Chimeric and Site-Directed Mutagenesis, *N. Kobayashi, S. Murakami and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May21-25, 2006.

Topological Analysis of EmrB, a TolC-Coupled Multidrug Efflux Protein in *Escherichia coli*, *Y. Hisano, N. Tamura, S. Murakami and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May21-25, 2006.

[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]

日本薬学会 第 127 年会	4 件
第 5 回感染症沖縄フォーラム	1 件
日本分子生物学会 2006 フォーラム	4 件
第 1 回関学 SPring-8 シンポジウム	1 件
21 世紀 COE ナノバイオグループシンポジウム	2 件
日本生体エネルギー研究会　第 32 回討論会	4 件
タンパク 3000 プロジェクト　個別的解析プログラム「脳・神経系」　第 5 回ワークショップ	1 件
第 28 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	2 件
第 10 回 SPring-8 シンポジウム	1 件
さきがけライブ 2006	2 件
第 18 回微生物シンポジウム	2 件
第 54 回日本化学療法学会総会	2 件
第 6 回日本蛋白質科学会	3 件
第 3 回 21 世紀大腸菌研究会	2 件
第 5 回国際バイオ EXPO	1 件
第 80 回日本細菌学会総会	5 件

[取得学位]

学士（薬学）

坂田　博樹	サルモネラ菌異物排出蛋白質の生理的機能の解明
吉田　康伸	スフィンゴシンキナーゼ発現によるスフィンゴシン 1 リン酸高産生細胞の構築

修士（薬学）

千田　靖子	PTS system を介した大腸菌異物排出蛋白質 MdtEF 誘導機構の解析
久野　悠	外膜チャネル TolC と共役する異物排出蛋白質 EmrB のトポロジー決定

[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）

平田　隆弘	異物排出蛋白質の多彩な生理的役割の解明	700

若手研究（B）

村上　聡	多剤排出トランスポーター群の内因性基質の解析	1,200
西　晶子	アイソフォームによる V-ATPase の細胞内環境形成への新たな役割の解明	1,800

[受託研究]

山口　明人	科学技術振興機構 CREST	異物排出トランスポーターの構造機能解析と多剤耐性機構の解明	6,240
村上　聡	文部科学省・タンパク 3000 プロジェクト	蛋白質の個別的解析プログラム（脳・神経系）	1,000
村上　聡	株式会社創晶	タンパク質結晶の評価	936

村上　聡	科学技術振興機構 CREST	タンパク質完全結晶創成	11,050
村上　聡	科学技術振興機構 戦略的国際科学技術協力推進事業・英国	多剤排出トランスポーターの結晶構造に基づく、多剤排出メカニズムの解明	3,250
山口　明人	新興・再興感染症研究拠点形成プログラム	細菌の病原性と多剤排出蛋白質発現制御の網羅的、系統的解析と創薬の新戦略	1,000

[その他の競争的研究資金]

山口　明人	科学技術振興機構 CREST	異物排出トランスポーターの構造機能解析と多剤耐性機構の解明	43,400

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、ミュー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す基礎過程の研究、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性能向上を目指して、SHB システム用高性能 216 MHz-RF 空洞 1 台を開発する研究と、クライストロンからの出力 RF パワーの振幅と位相をフィードフォワードにより安定化する研究、直流電源制御用の RS422 の制御プログラムを改良して計算機制御システムの応答速度を高める研究をおこなった。
- 電子ビームの高輝度化と特性評価の研究を引続き行い、ワイヤースキャナーを用いて蛍光板モニターのにじみによる分解能悪化を定量的に評価すると共に、RF の位相とエネルギーを同時に測定できる位相空何モニターの開発を始めた。
- 大強度電子ビームが L バンド電子ライナックに誘起するウエーク場とエネルギースペクトルの関係を明らかにした。
- 強集束ウイグラーを用いて遠赤外領域での SASE の発生実験を行い、SASE の基本波と、非線形高調波発生による 2 次と 3 次のピークをライナックの改修前と同程度あるいはそれ以上の強度で観測した。
- SASE 用高性能ウイグラーの開発研究の一環として、高精度磁場測定装置を立ち上げた。
- 代表的な高分子材料の放射線化学反応を初めて初期過程から系統的に明らかにした。
- フェムト秒電子線パルスとフェムト秒レーザーを同期させた新規のパルスラジオリシスを用いて、サブピコ秒の時間領域で初めて放射線化学反応を直接観測するのに成功した。
- 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σ共役系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。

・ 高分子のイオン照射効果の実験に基づいて、架橋・分解の理論の見直しを行った。
・ 低速陽電子を用いて、高分子材料の機能発現機構の解明と高機能化の研究を行った。

量子ビーム発生科学研究分野

教授	磯山　悟朗
助教授	加藤　龍好
助手	池田　稔治、柏木　茂
特任助教授	Ravi Kumar Anakara Vadakath（平成 19 年 1 月 1 日採用、同年 3 月 31 日退職）
大学院学生	今　教禎

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

単バンチモードと多バンチモード運転の高安定化を目指し、3 台の RF 加速空洞よりなるサブハーモニックバンチャー（SHB）システムを更新する計画を開始した。その第 1 段階として、216 MHz 4 分の 1 波長 RF 空洞 1 台の設計・製作を行った。電子ビームの安定化には、RF 空洞の温度安定が必須であるので、従来使用していたステンレス鋼と銅のクラッド板に替えて熱伝導が良い無酸素銅ブロックを採用すると共に主要部分を効率的に水冷できるようにした。即ち、無酸素銅で出来た内導体と外導体にビーム軸方向に直径 5 mm の長穴を開けて、温度安定度が 0.01 度の冷却水を流すことにより効率的で高安定な水冷システムを実現した。今後、ハイパワー試験を行った後、L バンド電子ライナックに組み込む予定である。

ライナックのバンチャーやプレバンチャー、加速管に供給するパルス RF パワーの振幅と位相は、時間幅 4 μs にわたり一定であることが必要である。そのために RF パワー源であるクライストロンに印加する高電圧パルスの頂上平坦部変動を 0.1%に低減したが、クライストロンの出力 RF パワーは振幅で 10.5 %、位相で 5 度にわたりパルス内で変動する。この振幅と位相変動は、電子ビームのエネルギーに影響を与え、多バンチモードや定常モードなど長い時間幅を持つ電子ビームのエネルギーがそろった加速を不可能にしている。この問題を解決するためにフィードフォワードによる振幅と移相の安定化を試みた。クライストロン駆動用の RF パワーアンプと移相器の時間応答性が共に 1 μs 近く有るにもかかわらず、その応答時間を考慮した微分制御を行うことにより振幅を 1%以内に、位相変動を 1 度以内に保つことが出来た。

L バンド電子ライナック用計算機制御システムの性能向上の一環として、制御用 PLC に RS422 で接続されている直流電流電源に対する状態や出力電流の読込み周期を上げる改造を行った。RS422 の制御には PLC の BASIC モジュールを使用していたが、これが律速となり応答性を悪くしていた。BASIC モジュールに替えて通常のラダー言語で制御できる RS422 モジュールに交換すると共に、プログラムを書換えて、読込周期を約 2 倍に速めることが出来た。

・電子ビームの高輝度化と特性評価

平成 17 年度設置したワイヤスキャナを用いて L バンド電子ライナックで加速した電子ビームの特性

を測定した。50 μm 以下の高い分解能を持つワイヤスキャナを用いて、蛍光板ビームモニターの板厚と分解能との関係を、蛍光板の厚さを 50 μ m から 2 mm まで変えて測定した。その結果、蛍光のにじみによる分解能の低下が小さいと考えられている 50 μm の蛍光板でもにじみによる分解能の低下が無視できないことを初めて明らかにした。

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開始した。偏向磁石で運動量分散を生じた電子ビームがエアロジェルと呼ばれる屈折率が空気よりわずかに大きい物質中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。ストリーク軸を運動量分散方向と直交する方向に取ると、ストリークカメラの表示画面上で電子ビームの位相空間分布が再現される。試験的な研究を始めたばかりであるが、発光体にエアロジェルを採用することにより通常使用される金属板表面での遷移放射や空気中のチェレンコフ放射に比較してチェレンコフ光の強度が大きいために、時間分解能が高い計測が出来ることが分かった。

・短距離縦方向ウェーク場とエネルギースペクトルの研究

大強度単バンチ電子ビームが L バンド電子ライナックの加速管内で誘起するウェーク場と呼ばれる電磁場は、加速する電子に影響を与えるので、ウェーク場とその影響を理解することが、高輝度電子ビームの発生と利用に対して重要である。電荷量約 30 nC/bunch の大強度電子ビームのエネルギースペクトルを、電子バンチの加速位相の関数として測定した。大強度電子ビームのエネルギースペクトルは、加速位相を変えると大きくかつクレストに対して非対称変化する。この結果を解析するために、電子バンチが誘起するウェークポテンシャルおよび電子バンチのエネルギースペクトルの数値計算を行った。ウェークポテンシャルを計算するにはウェーク関数が必要であるが、SLAC 近似ウェーク関数は、RF クレスト付近の位相で加速したときのエネルギースペクトルから推定した L バンド電子ライナックの加速管のウェーク関数と一致しない。そのため電磁場計算コード ABCI を使用してウェークポテンシャルを計算し、この結果に一致するように近似ウェーク関数のパラメーターを再定義した。その結果、新しい近似ウェーク関数を用いた計算は測定結果とほぼ一致することを示した。

・遠赤外領域での SASE の基礎研究

平成 18 年度に導入した強集束ウイグラーを用いて SASE の発生実験を行った。設計どおり電子ビームを小さく絞るには、ライナックからの FEL ビームラインのベータトロン関数をウイグラー入口で強集束ウイグラーの固有値に適合させなければならない。そのために FEL ビームラインのベータトロン関数を四極磁石掃引法で測定した後に、測定結果を用いて FEL ビームラインをモデル化して軌道計算により適合条件を探した。エネルギー10.3 MeV の単バンチ電子ビームを用いて SASE の発生実験を行い、波長 218 μm に SASE の基本波を、SASE の非線形高調波発生による第 2 次と 3 次の高調波ピークをそれぞれ 110 μm 付近と 74 μm に観測した。観測したピークの強度は、通常のウイグラーを使用した実験の最大値と同程度か、それを上回るものであった。

・SASE 用高性能ウイグラーの開発研究

SASE や FEL 用高精度ウイグラーを実現するための基礎となる永久磁石素材の特性測定と評価の研究を行っている。我々が使用する永久磁石材料は、ネオジ鉄ボロン化合物である。粉末の材料物質を磁場中で圧縮・整形した後に、高温炉で焼結して、目的の寸法に機械加工をする。次に再度磁場中に入れて着磁して永久磁石が完成する。磁場強度や、磁化軸、磁化の一様性など永久磁石の主要な特性は、最後の着磁ではなく、最初に行う磁場中での圧縮・整形で決まる。この過程を調べるためには着磁した磁石材料の表面磁場強度の分布を測定する必要がある。そのため KEK の磁場測定装置と同じ精度を持つホール素子を用いた磁場測定装置を阪大産研に組み上げて多数の永久磁石の表面磁化を測定する準備を進めた。その過程で、NMR を用いたホール素子較正装置を用いて、阪大産研で使用するホール素子を KEK で較正した。

[原著論文]

Comparison of Electrical Properties of Ceramic Insulators under Gamma Ray and Ion Irradiation, T. Tanaka, R. Nagayasu, F. Sato, T. Muroga, T. Ikeda, and T. Iida, Fusion Engineering and Design, 81 (2006) 1027-1031.

Coherent Radiation from High-Current Electron Beams of Linear Accelerators and its Applications, S. Okuda, M. Takanaka, M. Nakamura, R. Kato, T. Takahashi, S-K Nam, R. Taniguchi, T. Kojima, Radiation Physics and Chemistry, 75 (2006) 903-907.

[解説、総説]

いま注目される第 4 世代放射光源 SASE とは?ーバイオ研究を躍進させる新しいレーザー、磯山悟朗、化学 61 (2006) 30-35

[国際会議]

Study of Focusing Properties of a New Type Wiggler on the ISIR FEL at Osaka University, *S. Kashiwagi, G. Isoyama, R. Kato, N. Noda, K. Tsuchiya, S. Yamamoto, Proc. of the 28th International Free Electron Laser Conference, Berlin, Germany, August 27 - September 1, 2006 (THPPH040).

Longitudinal Phase-space Measurements of a High-brightness Single-bunch Beam, *R. Kato, T. Igo, G. Isoyama, S. Kashiwagi, Y. Kon, Proc. of the 28th International Free Electron Laser Conference, Berlin, Germany, August 27 - September 1, 2006 (THPPH041).

Terahertz SASE-FEL using a Strong Focusing Wiggler, *S. Kashiwagi, Y. Kon, R. Kato, T. Igo, G. Isoyama, Proc. of the SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka, Japan, September 19-20, 2006, p.63.

Stability Evaluation of the L-Band Electron Linear Accelerator at ISIR, OSAKA University, *R. Kato, S. Kashiwagi, T. Igo, Y. Kon, T. Yamamoto, S. Suemine, G. Isoyama, Proc. of the SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka, Japan, September 19-20, 2006, p.64.

Performance of the Renewed L-band Linac and Recent Progress of Development of FEL and SASE at Osaka University, *G. Isoyama, R. Kato, S. Kashiwagi, T. Igo, Y. Kon, T. Yamamoto, S. Suemine, Proc. of 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006, p.90.

Distributed Control System based on PCs and PLCs for the L-band Electron Linac, *R. Kato, S. Kashiwagi, T. Yamamoto, S. Suemine, G. Isoyama, Proc. of 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006, p.91.

New Method of Femtosecond Electron Beam Generation for Reaction Analysis in Nano-space, *S. Kashiwagi, T. Kondo, J. Yang, R. Kato, G. Isoyama, Y. Yoshida, A. Masuda, T. Nomoto, K. Sakaue, M. Washio, Proc. of 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006, p.92.

[国内学会]

日本加速器学会	9 件
日本放射線安全管理学会	3 件
プラズマ・核融合学会	1 件

[取得学位]

修士（理学）

今　教禎	自由電子レーザー用高輝度電子ビーム発生を目的にした電子ライナックに供給する高周波電力位相と振幅の速い制御

博士（理学）

井合　哲也	Study of the Short-Range Longitudinal Wake Field Produced by a High-Intensity Electron Beam in a Linear Accelerator and its Influence on the Energy Spectrum

[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	2,100

若手研究（B）

柏木　茂	ビーム集束型エッジフォーカスウイグラーを用いた遠赤外 SASE の基礎研究	600

[共同研究]

磯山　悟朗	KEK 共同開発研究	エッジ集束アンジュレーターを用いた SASE の発生とハイパワー領域での動作特性の解明	800

[その他の競争的研究資金]

磯山　悟朗	KEK 加速器支援事業	長波長 SASE-FEL 技術開発とその応用に関する研究	2,000

量子ビーム物質科学研究分野

教授	田川　精一
助教授	関　修平
助手	小林　一雄、佐伯　昭紀
特任教授	堀江　一之
特任研究員	藤田　慎一
共同研究員	古川　喜久夫
大学院学生	佃　諭志、小泉　美子、山本　洋揮、山上　隆平、大西　優子、夏田　健一郎、廣瀬　亮
学部学生	福山　雄大、田中　将史
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) 非炭素骨格を持つ高分子やσ・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) イオンビーム照射効果の基礎過程、5) 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、6) 生体における放射線損傷過程の解明として、DNA のホール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。本年度は 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。

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いる。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。本研究ではベンゼン、トルエ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、高分子骨格のミクロ構造と物性の間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。

３）化学増幅型レジストの反応機構

次世代電子線･EUV 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ピコ秒パルスラジオリシス法を用いて、酸発生機構におけるレジストのラジカルカチオンと酸のカウン

ターアニオンの空間分布を測定することに成功した。その結果を基に、次世代リソグラフィにおいて最も重要な問題の一つと考えられるラインエッジラフネスへの影響を考察した。

４）イオンビーム照射効果の基礎過程

荷電粒子ビームの全く新しい応用形態として、これらビームによる高密度エネルギー付与・励起を利用し、新しいナノスケール素子の形成手法を提案した。特に高分子中にイオンビームが入射した際、飛跡に沿ってトラック構造と呼ばれる非常に高密度の反応中間体集合が形成され、ここでの特殊な物理化学反応から、トラック外部には全く影響を与えずに元の形質を維持したまま、非常に微細な空間領域にのみ新しい微細構造体を形成すると同時に、極めて高度にサイズ・構造制御されたナノ構造集合体の形成に成功した。

５）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、ペンタセン薄膜、σ 共役高分子ポリシランの電気・光学物性を研究した。超分子ナノチューブではチューブ長軸方向に沿った非等方的伝導度を測定することに成功し、アクセプター分子でラミネートされたナノチューブでは、その超分子構造が有する高い伝導特性を実証することができた。低分子有機半導体として注目されているペンタセン薄膜では、グレインサイズに依存した過渡伝導度の時間変化を得ることができ、その本質的電荷キャリア移動度はアモルファスシリコンに近いものであることを示した。また、AC 伝導度で重要な過渡伝導度の実部と虚部の分離に成功し、実部の寄与が大きいことを実証した。

６）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、グアニンカチオンラジカルが生成後、プロトンがシトシンに移動する過程に注目した。その結果 G と水素結合している C の 5 位に置換基(X)を導入すると、その G の N1 位の脱プロトン過程が置換基の影響を受けることが分った。このことは G 酸化に伴う N1 から C へのプロトン移動が C の置換基により大きく変化していることを示している。さらに溶媒の H_2O を D_2O に変えた時の同位体効果についても検討した。DNA を含まないグアニンにおける脱プロトン化の同位体効果は1.7に対して､オリゴヌクレオチドにおけるその同位体効果は3.8 であった。以上の結果より、DNA 鎖の塩基損傷においてプロトン化したンシトシンの溶媒 H_2O による脱プロトン化が重要な過程であると結論した。

[原著論文]

A Glass Hook Allows Fishing of Hexa-peri-hexabenzocoronene Graphitic Nanotubes: Fabrication of a Macroscopic Fiber with Anisotropic Electrical Conduction, Y. Yamamoto, T. Fukushima, W. Jin, A. Kosaka, T. Hara, T. Nakamura, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, and T. Aida, Adv. Mater., 18 (2006) 1297-1300.

Room Temperature Ultra Violet Emission at 357 nm from Polysilane based OLEDs, A. Sharma, M. Katiyar, Deepak, S. Seki, and S. Tagawa, Appl. Phys. Lett., 88 (2006) 143511-143513.

Pulse Radiolysis of Polystyrene in Cyclohexane – Effect of Carbon Tetrachloride on Kinetic Dynamics of Dimer Radical Cation−, K. Okamoto, T. Kozawa, M. Miki, Y. Yoshida, and S. Tagawa, Chem. Phys. Lett., 426 (2006) 306-310.

Photogenerated Hole Mobility in DNA Measured by Time-Resolved Microwave Conductivity, R. Yamagami, K. Kobayashi, A. Saeki, S. Seki, and S. Tagawa, J. Am. Chem .Soc., 128 (2006) 2212-2213.

Experimental Probe for Hyperconjugative Resonance Contribution in Stabilizing the Singlet State of 2,2-Dialkoxy-1,3-diyls: Regioselective 1,2-Oxygen Migration, M. Abe, M. Hattori, A. Takegami, A. Masuyama, T. Hayashi, S. Seki, and S. Tagawa, J. Am. Chem .Soc., 128 (2006) 8008-8014.

Self-Condensed Nanoparticles of Oligofluorenes with Water-soluble Side Chains, Y. Koizumi, S. Seki, S. Tsukuda, S. Sakamoto, and S. Tagawa, J. Am. Chem .Soc., 128 (2006) 9036-9037.

Electrodeless Measurement of Charge Carrier Mobility in Pentacene by Microwave and Optical Spectroscopy Techniques, A. Saeki, S. Seki, and S. Tagawa, J. Appl. Phys., 100 (2006) 023703-023708.

Resolution Blur of Latent Acid Image and Acid Generation Efficiency of Chemically Amplified Resists for Electron Beam Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa, J. Appl. Phys., 99 (2006) 054509-054513.

Effects of Low Energy Electrons on Pattern Formation in Chemically Amplified Resist, T. Kozawa, H. Yamamoto, A. Saeki and S. Tagawa, J. Photopolym. Sci .Technol., 19 (2006) 361-366.

Formation of Trimer and Dimer Radical Cations of Methyl Substituted Benzenes in gamma-Irradiated Low Temperature Matrices, K. Okamoto, S. Seki, S. Tagawa, J. Phys .Chem. A, 110 (2006) 8073-8080.

Formation and Decay of the Triplet Excited State of Pyridine, K. Enomoto, J. A. LaVerne, S. Seki, and S. Tagawa, J. Phys .Chem. A, 110 (2006) 9874-9879.

Customized Morphologies of Self-condensed Multi-segment Polymer Nanowires, S. Tsukuda, S. Seki, M. Sugimoto, and S. Tagawa, J. Phys .Chem. B, 110 (2006) 19319-19322.

Electronic Structure and Optical Properties of Charged Oligofluorenes Studied by VIS/NIR Spectroscopy and Time-Dependent Density Functional Theory, S. Fratiloiu, F. C. Grozema, Y. Koizumi, S. Seki, A. Saeki, S. Tagawa, S. P. Dudek, and L. D. A. Siebbeles, J. Phys .Chem. B, 110 (2006) 5984-5993.

Acid Generation Efficiency in a Model System of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resist, T. Kozawa, S. Tagawa, H. Oizumi and I. Nishiyama, J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) L27-L30.

Correlation between Proton Dynamics and Line Edge Roughness in Chemically Amplified Resist for Post-optical Lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, and H. B. Cao, J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 3066-3072.

Reaction Mechanism of Fluorinated Chemically Amplified Resists, H. Yamamoto, T. Kozawa, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Ando, M. Sato, and H. Komano, J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 1833-1836.

Analysis of Acid Yield Generated in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Kozawa, T. Shigaki, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa, J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 3055-3060.

Noise Analysis of Si-Based Planar-Type Ion-Channel Biosensors, H. Uno, Z. L. Zhang, M. Suzui, R. Tero, Y. Nonogaki, S. Nakao, S. Seki, S. Tagawa, S. Oiki, and T. Urisu, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L1334-L1336.

Protonation Sites in Chemically Amplified Resists for Electron Beam Lithography, K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L1256-L1258.

Reactivity of Acid Generators for Chemically Amplified Resists with Low-Energy Electrons, A. Nakano, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Szreder, J. F. Wishart, T. Kai and T. Shimokawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L197-L200.

Relationship between Acid Generator Concentration and Acid Yield in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozawa, H. Yamamoto, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 5735-5737.

Acid Generation Mechanism of Poly(4-hydroxystyrene)-Based Chemically Amplified Resists for Post-Optical Lithography: Acid Yield and Deprotonation Behavior of Poly(4-hydroxystyrene) and Poly(4-methoxystyrene), A. Nakano, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 6866-6871.

Dependence of Acid Yield on Resist Thickness in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozama, H. Yamamoto, and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 5445-5449.

Correlation between Width Roughness of Nanowires and Backbone Conformation of Polymer Materials, S. Seki, S. Tsukuda, S. Tagawa, and M. Sugimoto, Macromolecules, 39 (2006) 7446-7450.

Line Edge Roughness of a Latent Image in Post-optical Lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa and H. B Cao, Nanotechnology, 17 (2006) 1543-1546.

Femtosecond Single Electron Bunch Generation by Rotating Longitudinal Bunch Phase Space in Magnetic Field, J. Yang, T. Kondoh, K. Kan, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, Nucl. Instrum. Meth. A, 556 (2006) 52-56.

Picosecond Pulse Radiolysis using Femtosecond White Light with a High S/N Spectrum Acquisition System in One Beam Shot, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, Nucl. Instrum. Meth. A, 556 (2006) 391-396.

Charge-carrier Dynamics in Polythiophene Films Studied by In-situ Measurement of Flash-photolysis Time-resolved Microwave Conductivity (FP-TRMC) and Transient Optical Spectroscopy (TOS), A. Saeki, S. Seki, T. Sunagawa, K. Ushida, and S. Tagawa, Phil. Mag., 86 (2006) 1261-1276.

Pulse Radiolysis Based on a Femtosecond Electron Beam and a Femtosecond Laser Light with Double-pulse Injection Technique , J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, Radiat. Phys. Chem., 75 (2006) 1034-1040.

Photoconductive Coaxial Nanotubes of Molecularly Connected Electron Donor and Acceptor Layers, Y. Yamamoto, T. Fukushima, Y. Suna, N. Ishii, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, M. Taniguchi, T. Kawai, T. Aida, Science, 314 (2006) 1761-1764.

Photoconductivity in Fullerene-doped Polysilane Thin Films, A. Acharya, S. Seki, A. Saeki, S. Tagawa, Synth. Met., 156 (2006) 293-297.

Crystallization and Preliminary X-ray Crystallographic Studies of the Oxidative-stress Sensor SoxR and Its Complex with DNA, S. Watanabe, A. Kita, K. Kobayashi, Y. Takahashi and K. Miki, Acta Cryst. F62 (2006) 1275-1277

[解説、総説]

マイクロ波による電極レス電荷キャリア移動度測定, 佐伯昭紀, 関修平, 田川精一, *放射線化学*, **81** (2006) 29-39.

[著書]

イオンビームとナノ構造体, 小泉均, 関修平 , *放射線化学のすすめ*, (2006) 134-135.
微細加工技術とレジスト, 古澤孝弘, *放射線化学のすすめ*, (2006) 52-54.
γ 線源, 山本幸男, *放射線化学のすすめ*, (2006) 159-160.
ジェミネート再結合とオンサガー理論, 佐伯昭紀, *放射線化学のすすめ*, (2006) 256-258.
高分子とイオンビーム照射, 関修平, 工藤久明, *放射線化学のすすめ*, (2006) 132-133.
生体系への放射線影響：直接効果と間接効果, 小林一雄, *放射線化学のすすめ*, (2006) 83-85.
水和電子と溶媒和電子, 古澤孝弘, *放射線化学のすすめ*, (2006) 64-65.
高分子中の放射線化学反応概論, 関修平, 大島明博, *放射線化学のすすめ*, (2006) 41-44.
OH ラジカルおよび H 原子の反応, 小林一雄, *放射線化学のすすめ*, (2006) 72-73.
放射線によるがん治療、小林一雄、*放射線化学のすすめ*, (2006) 89-91.

[国際会議]

Tri-layer Resists Process for Fabricating 45-nm L&S Patterns by EPL, *F. Koba, K. Matsumaro, E. Soda, T. Watanabe, Y. Matsubara, H. Arimoto, T. Matsumiya, D. Kawana, N. Yamashita, Y. Fujii, K. Ohmori, M. Sato, T. Kozawa and S. Tagawa, 31st Int. Symp. Microlithography 2006, San Jose, California, USA, Feb. 22-25, 2006.

Reactivity of Model Compounds of ArF Immersion, ArF, and KrF Resists with Diphenylsulfinyl Radical cation, a Cage-escape Product of Photochemistry of Triphenylsulfonium Salts, *Y. Matsui, H. Sugawara, S. Tsuji, T. Itani, S. Seki, T. Kozawa and S. Tagawa, 31st Int. Symp. Microlithography 2006, San Jose, California, USA, Feb. 22-25, 2006.

Difference between Initial Distributions of Proton and Counter Anion in Chemically Amplified Electron-beam Resist, *T. Kozawa, H. Yamamoto, A. Saeki and S. Tagawa, 31st Int. Symp. Microlithography 2006, San Jose, California, USA, Feb. 22-25, 2006.

The Reaction Mechanism of Poly[4-hydroxystyrene-co-4-(1,1,1,3,3,3-hexafluoro-2-hydroxypropyl)-styrene], *H. Yamamoto, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, T. Ando, M. Sato

and H. Komano, 31st Int. Symp. Microlithography 2006, San Jose, California, USA, Feb. 22-25, 2006.

Line Edge Roughness in Chemically Amplified Resist of Electron Beam Lithography, *A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, and H. B. Cao, EIPBN, Baltimore, USA, May 31-June 2, 2006.

Analysis of Acid Yield Generated in Chemically Amplified Electron Beam Resist, *T. Kozawa, T. Shigaki, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa, EIPBN, Baltimore, USA, May 31-June 2, 2006.

Electrodeless Measurement of Charge Carrier Mobility in Pentacene by Microwave and Optical Spectroscopy Techniques, *A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, Gorden Research Conference, Colby College, USA, July 2-8, 2006.

Formation of Aggregated Radical Cations of Benzene and Polystyrene in Condense Phases, *K. Okamoto, S. Seki, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, Gorden Research Conference, Colby College, USA, July 2-8, 2006.

The Mobility of Holes through DNA, *R. Yamagami, K. Kobayashi, A. Saeki, S. Seki, and S. Tagawa, Gorden Research Conference, Colby College, USA, July 2-8, 2006.

Self-Assemble Properties of Oligofluorenes with Amphiphilic Side Chains, *Y. Koizumi, S. Tsukuda, S. Seki, S. Tagawa, Gorden Research Conference, Colby College, USA, July 2-8, 2006.

Pico/subpicosecond Pulse Radiolysis and Research on Nanolithography by EB/EUV, *A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, Gorden Research Conference, Colby College, USA, July 2-8, 2006.

Synthesis and Self-Assemble Properties of Oligofluorenes With Amphiphilic Side Chains, *Y. Koizumi, S. Tsukuda, S. Seki, S. Tagawa, 11th Tihany Symposium on Radiation Chemistry, Eger, Hungary, Aug. 26-31, 2006.

Femtosecond Pulse Radiolysis Based on Photocathode Electron Accelerator, Y. Yoshida, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, S. Tagawa, Asian and Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC) , Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006.

Nanostructure Formation by Single Particle Nanofabrication Technique in Polymers, *S. Seki, S. Tsukuda, S. Tagawa, M. Sugimoto, Asian and Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC), Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006.

Subpicosecond Pulse Radiolysis Studies and Critical Issues on EB and EUV Resists, *S. Tagawa, Asian and Pacific Symposium on Radiation Chemistry (APSRC), Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006.

Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists, *T. Kozawa, S. Tagawa, H. Oizumi and I. Nishiyama, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct. 16-20, 2006.

Exposure Dose Dependence on LER of Latent Image in EB/EUV Lithographies Studied by Monte Carlo Technique, *A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, H. Deng, and M. J. Leeson, EUVL

Symposium, Barcelona, Spain, Oct. 16-20, 2006.

Polymer Structure Dependence of Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists, *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, Hai Deng, and M. J. Leeson, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct. 16-20, 2006.

Critical Issues of EUV Resists and New Research Approach, *S. Tagawa, T. Kozawa, A. Saeki, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct. 16-20, 2006.

Effect of Acid Diffusion and Polymer Structure on Line Edge Roughness, *H. Yamamoto, T. Kozawa, A. Saeki, K. Okamoto, S. Tagawa, K. Ohmori, M. Sato and H. Komano, Int. Microprocesses and Nanotechnology Conf., Kamakura, Japan, Oct. 25-27, 2006.

Proton Dynamics and Amines in Chemically Amplified Resist, *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto and S. Tagawa, Int. Microprocesses and Nanotechnology Conf., Kamakura, Japan, Oct. 25-27, 2006.

[国内学会]

応用物理学会	3 件
日本原子力学会	2 件
日本放射線化学会	10 件

[取得学位]

修士（工学）

夏田　健一郎	化学増幅型レジスト中のプロトンダイナミクスの研究
大西　優子	超高速過渡吸収分光法を用いたポリシランの構造ダイナミクス

博士（工学）

佃　諭志	高エネルギーイオンビームによる高分子ナノ構造体の形成機構に関する研究

[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）		
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	19,700
若手研究（A）		
関　修平	一つの粒子が引き起こす化学反応を用いたナノ構造体の形成と特性	9,700
特定領域		
関　修平	マイクロ波による共役ポリマー分子鎖の１次元伝導特性の電極レス評価	1,300
若手研究（B）		
佐伯　昭紀	電子線加速器を用いた孤立高分子主鎖上での電荷キャリア移動度測定と高機能化	1,000

特別研究員奨励費

佃　諭志	単一イオンイベントによる高分子ナノ構造体の形成と機能	900
山本　洋揮	ナノビーム誘起反応機構に基づいた新規微細加工プロセスの創製	1,000
小泉　美子	共役高分子 1 分子鎖の本質的伝導特性の非接触定量評価	1,000

[受託研究]

田川　精一	原子力安全基盤調査研究	放射線化学の最先端の研究を基盤とした安心安全の確保のための目に見える線量計材料の開発	11,765
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
関　修平	株式会社　原子力安全システム研究所	マイクロ波検出技術を用いた高分子材料への放射線照射による経年劣化過程の解明	2,683

[共同研究]

田川　精一	三菱瓦斯化学株式会社	ArF フォトレジストに関する基礎研究	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	1,680

新産業創成研究部門

概要

本研究部門は、平成 18 年度 4 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応用研究に取り組み、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

- 日本の代表的製造業の比較分析
- 日本経済における金融業の位置分析
- 日本の全上場企業の株所有ネットワーク分析
- 知財マップの開発
- 未来の治療薬の概念創成を議論する研究会開催
- 新しいライフサイエンスの研究・ビジネス・産業の将来を語る会開催
- 産学連携サイエンス・ビジネスクラブ（新しい産官学の融合）：準備中
- 新規知財創出および知財分析方法論を研究する知財戦略工学研究会開催
- 知財マネージメント研究会開催

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

・日本の代表的製造業の比較

日本経済を牽引するリーディング産業である、自動車産業と電気機器産業との比較分析を行った。2006 年 3 月末時点での時価総額は、1985 年 1 月を基準にすると、自動車産業に属するトヨタ、ホンダ、日産の 3 社はいずれも 2 倍程度に上昇しているのに対し、大手電気機器メーカー各社のそれは基準以下である。また、売上高営業利益率も、自動車産業においては一時の低迷を脱し上昇基調であるのに対し、電気機器産業においては長期低落に歯止めがかかっていないことが明らかになった。

・日本経済における金融業の位置

日本企業の総資産はべき乗分布にしたがっているため、その分布は両対数グラフでは直線になる。しかしながら、1 兆円を境にして直線の傾きは異なる。そこで売上高と総資産との同時分布を調べてみたところ、総資産が 1 兆円を超える領域には主に銀行を中心とする金融業が位置しているためであることがわかった。また、銀行の総資産は同じ売上高の製造業と比べて数十倍の大きさであり、かつ売上高に対して高い効率で利益を得ていることがわかった。

・日本の全上場企業の株所有ネットワーク

企業を点（ノード）とし、企業間に株の所有・被所有の関係があるときに当該企業間を線でつないで構成される株所有ネットワークの特徴を調べた。その結果、クラスター係数と次数（点に接続する線の本数）との間には負の相関があり、媒介中心値と次数との間には正の相関があることがわかった。前者は株所有ネットワークが樹状構造であることを示し、後者はハブ（次数の多い点）が企業同士を結び付ける重要な役割を担っていることを示唆している。

・知財マップの開発

技術（シーズ）と市場（ニーズ）と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、出願・公開された特許明細書（あるいは／及び学術論文）等の文献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。一例として、トヨタ、ホンダ, 日産の 3 社が出願した燃料電池に関する特許明細書を解析したところ、高分子電解質膜に関するホンダ固有の出願が際立っていることを視覚的に明らかに示すことができた。

［ 特許 ］

「Transparent ferromagnetic alkali/Chalcogenide compound comprising solid solution of transition metal or rare earth metal and method of regulating ferromagnetism thereof」吉田博, 清家聖嘉, 佐藤和則, 柳瀬章、欧州連合特許登録番号 EP1634979A1

「Magnetic Random Access Memory Device」吉田博、佐藤和則、大韓民国特許登録番号 第 0557387 号

「磁気抵抗ランダムアクセスメモリー装置（磁阻隋機存取存儲器装置）」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I262593 号

「強磁性 VI 族系半導体、 強磁性 III-V 族系化合物半導体、または強磁性 II-VI 族系化合物半導体とその強磁性特性の調整方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 252521 号

「磁性半導体を用いた円偏光スピン半導体レーザーおよびレーザー光の発生方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、日本特許登録番号　第 3797936 号

「Circular polarized light-generating spin-based semiconductor laser source using magnetic semiconductor and method of generating laser light」吉田博, 佐藤和則、大韓民国特許登録番号　第 10-0603057 号

「シリコン結晶中の遷移金属不純物のゲッタリング方法」吉田博、大韓民国特許登録番号　第 10-0596701 号

「Ⅱ-Ⅳ族またはⅢ-Ⅴ族系単結晶強磁性化合物及びその強磁性の調整方法」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 254088 号

「Ferromagnetic p-type single crystal zinc oxide and method for preparation thereof 吉田博、佐藤和則、米国特許登録番号　US7022182B1 号

「Verfahren zur herstellung von diamanten des n-type mit niedrigem widerstand (Method for synthesizing n-type diamond having low resistance)」吉田博、ドイツ連邦特許登録番号 DE69926985T2

「 Ferromagnetic ZnO-type compound including transition metallic element and method for adjusting ferromagnetic characteristics thereof」吉田博、佐藤和則、米国特許登録番号 US7115213B2

［ 国内学会 ］

日本物理学会　1 件
産学連携学会　1 件

新産業創造システム研究分野

特任教授　　千田　一貫

a) 概要

本研究分野は、新しい研究部門として新産業創成研究部門が 4 月に設置された新産業創成研究部門（新産業予測・新産業創造システム・知的財産管理）について研究する３つの研究分野の1つである。産業界との密接な連携をはかり、21 世紀の科学技術・産業技術の発展を先導する先端的研究の成果を新産業の創成に結びつける研究を行う。

特に、大学の社会的役割としてその要請に応えるべく、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なシステムの構築に関する研究を行う。

b) 成果

新産業創造のシステム構築の一環として、以下の研究会を開催した。

1. 未来の治療薬の概念創成を議論する研究会：3回開催（シーズから新規の創薬ビジネスへの模索）

第1回：脳・神経科学からの創薬概念

「アミロイドβペプチド代謝とアルツハイマー病」
西道　隆臣　氏：チームリーダー/神経蛋白制御研究チーム/
老化・精神疾患研究グループ/脳科学研究所/理化学研究所
「こころは分子で理解できるのか」
内匠　透　氏：研究室長/神経科学研究部門/大阪バイオサイエンス研究所

第2回：ガン研究からの創薬概念

「前立腺がん細胞の3次元培養-Spheroid を用いた解析」
広川　佳史　氏：講師／医学系研究科／病態解明医学講座／
腫瘍病態解明学／三重大学
「DNA 複製開始を標的とした細胞分裂阻害剤開発の試み」
堤　賢一　氏：教授/寒冷バイオシステム研究センター／農学部／岩手大学
客員教授／医学部／日本大学
「赤血球の新知見」
寺沢　和貴　氏：寺沢耳鼻咽喉科　院長
客員研究員/医学部／岡山大学
第3回：遺伝子情報からの創薬概念
「RNA Silencing: from disease to RNA-directed inheritance」
塩見　春彦　氏：教授／分子機能解析分野／ゲノム機能研究センター／
徳島大学
「遺伝子ネットワークに基づいたグローバルな新薬開発」」
江口　至洋　氏：創薬解析センター長/Gene-Networks, Ltd

2. 新しいライフサイエンスの研究・ビジネス・産業の将来を語る会：4回開催（ライフサイエンスの新融合分野創成）
3. 技術・知財戦略マネージメント研究会：毎月開催（知的財産創造の新しい方法論の模索）
4. 産学連携サイエンス・ビジネスクラブ（新しい産官学の融合：準備中）

知的財産研究分野

特任教授　　清水　裕一

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

・知財創出および分析評価の研究

知財戦略工学研究会を開催し、知的財産である科学技術概念を効率よく正確に特許として創出する工学的手法、既存の特許の内容を詳細に分析し評価することを可能にする手法およびその応用分野の確立に向けた研究を行った。これらの研究は、産研の知能システム研究分野およびヒューマンインターフェース研究グループと共同で行っている。

・知財マネージメントの研究

新産業の創出に向けて知的財産を戦略的に確立し活用するためのマネージメントについて研究を行っている。知財マネージメント講演会を主催し、新規事業化における知財の役割、大学における知財の評価手法、事業展開を競争優位とするための特許戦略について、各分野の実践的専門家による招待講演を実施し、ディスカッションを行った。この研究は、新産業創造システム研究分野と共同で行った。

[特許]

「光半導体デバイスおよびその製造方法並びにその製造装置」小林光、清水裕一、 特願 2006-239646

〔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　　甲元　彩

概要

産業科学ナノテクノロジーセンターは、原子・分子を積み上げ材料を創成するボトムアップ・ナノテクノロジー、材料を極限まで削りナノデバイスを作製するトップダウン・ナノテクノロジー、ナノスケールのデバイス・プロセスを評価・解析するテクノロジー、さらに積極的な産業応用を目指し総合的にナノテクノロジーを推進することを目的とした研究センターである。

①原子・分子の配列をナノスケールで直接的に制御しながら、物質・材料・デバイスの構築を行うナノマテリアル・デバイス研究部門、②量子ビームと総称される電子線やX線、レーザー、陽電子ビームなどを用いてナノファブリケーションやナノ空間・フェムト秒に至る極短時間領域での反応解析、ナノテクノロジーに必要不可欠な高輝度・高安定の新しい量子ビームの開発研究、ビームプロセスの基礎となるビームナノプロセスに関する研究を行うナノ量子ビーム研究部門、③産業界にとって有用であり、また将来の新産業の創出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を産業応用するための中核となる研究を行うナノテクノロジー産業応用研究部門、そして、④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ナノ構造機能評価研究部門の 4 部門があり、全体で 16 の研究分野から構成されている。

附属実験室は、加速器量子ビーム実験室、電子顕微鏡室、電子プロセス実験室、ナノ加工室、オープンラボラトリーがあり、プロセス・ファンドリーが設置されている。

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、人工タンパク、人工光合成分子、ナノ粒子などの超分子の設計と合成を行い、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
- ナノスケール有機／無機／界面制御
- 新規ボトムアップ材料形成装置の開発
- 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
- ナノトランスファープリンティングによるトップコンタクトナノ電極の形成
- 絶縁体基板を用いる静電気力顕微鏡の開発
- 時間分解静電気力検出の方法論的開発
- 点接触電流画像化原子間力顕微鏡による分子界面とネットワークの電気特性計測
- 周波数検出原子間力顕微鏡による分子認識の画像化
- 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
- 多機能不斉金属ナノ触媒の開発
- 機能性球状粒子の効率的合成法の開発と機能評価
- 銅含有アミン酸化酵素の触媒反応中間状態の構造解析
- キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素の生合成機構の解明
- 基質を結合した大腸菌主要異物排出トランスポーターAcrB の X 線結晶構造決定

人工生体情報ナノマテリアル分野

教授	田畑　仁
助手	佐伯　洋昌
特任助手	松井　裕章
特任研究員	法澤　公寛、肖　芝燕（平成 18 年 8 月 1 日採用）
大学院学生	鶴田　浩二、小出　卓史、山原　弘靖
学部学生	野口　真路、三上　正晃、河野　正人
事務補佐員	池田　恵

a） 概要

原子レベルで結晶構造制御可能なレーザーMBE 法を用いて、強相関系物質薄膜や人工格子による未来物質創製を実施している。例えば酸化物磁性体、スピングラス、リラクサー強誘電体の次元性や揺らぎと物性に関する基礎研究や、強誘電性－強磁性が共存するマルチフェロトロニクス、さらに酸化物ワイドギャップ半導体を用いたスピントロニクス、光誘起スピン素子やシナプス接合型メモリ等の酸化物エレクトロニクス関連の研究を実施中である。さらに、生体の持つユニークな特長を模倣すべく、これらの機能性材料の双安定性およびグラス特性を利用した“ゆらぎ”素子の研究を実施している。

さらに、ナノバイオデバイスを目指して、DNA などのバイオ分子の自己組織化、クローニングを利用したナノ構造制御によるバイオセンサ・メモリの創製や、走査プローブ顕微鏡を用いたナノ領域物性に関する研究を実施している。また DNA 塩基間水素結合やタンパク質－DNA 結合の直接評価を目指して、新しい分光法としての THz 分光（Far-IR 分光）による DNA・蛋白質分子などの生体関連材料の結合状態計測も行っている。

b） 成果

・ガーネットフェライト薄膜における歪み誘起室温マルチフェロ創成

強誘電性と強磁性（あるいはフェリ磁性）を併せ持つマルチフェロイック物質は新しいデバイス、メモリなど様々な分野への応用が期待できるだけでなく、磁場-電場の相互作用が創り出す新しい物性の発現が期待されている。電子の持つ自由度である「電荷」の分極に起源を持つ「電気双極子」のオーダリングである「双極子秩序」を制御する強誘電体の基礎研究は、超音波・マイクロ波デバイス、非線形光学デバイス、赤外線センサなどの多様なデバイスを実用化した。近年では、シリコン CMOS 半導体技術と絡み合いながら微細化と多機能化が進み、これまでに半導体集積回路や強誘電体メモリなどを生み出してきた。また、ピエゾ電気効果に代表される「格子歪秩序」を積極的に利用した圧電素子や電圧制御によるマニュピレータなどは強弾性体の応用が生み出した成果である。一方、電子の持つもう一つの自由度である「スピン」のオーダリングである「スピン秩序」を利用した磁性体の研究も、基礎と応用が絡み合いながら、情報技術の基盤となる磁気メモリを生み出してきた。

我々はフェリ磁性体に着目し、そのフェリ磁性体（ガーネット系フェライト）を用いたマルチフェロイック物質開発を試みた。フェリ磁性におけるスピンは、反強磁性配置であり、磁気相関が強く転移点も室温でのマルチフェロ特性が期待できると同時に、強誘電性キュリー温度と同程度の磁気転移温度を実現する事で、大きな電気磁気相互作用が期待できる。

１例として、ガーネットフェライトとして、$Lu_3Fe_5O_{12}$（バルクの格子定数：12.284Å）を、組み合わせる基板として $Gd_3Ga_5O_{12}$（GGG）：12.376Åを選択した。このときの基板と試料のミスマッチは 0.74%であり、ガーネット薄膜に対して引っ張りの応力（格子歪み）の導入が期待される。薄膜はパルスレーザー蒸着法により基板温度=700℃、酸素ガス圧=10^{-5}～10^{-1}Pa の条件下で作製した。また薄膜形成時に生じる可能性のある酸素欠損を補償するため、O_2 中で 700℃、1 時間のポストアニーリング処理を施した。

結晶構造および歪みについて報告する。ガーネット結晶は立方晶であり、バルク状態の格子定数を参考にすると GGG 基板上へ $Lu_3Fe_5O_{12}$ が cube on cube で成長し、格子のミスマッチ(0.74%)により、面内に

一様な歪み（薄膜に対して伸張応力）が、導入されると期待される。面内方向に正方晶性が増大され、この方向に強誘電性が発現すると想定されるため、電気特性は櫛形電極（電極ピッチ 5μm）を形成して評価した。

磁気特性および強誘電性の評価の結果について報告する。測定は面内に電界を印加し、その方向の誘電性を測定した。室温でバルクのガーネット材料と同程度の大きなヒステリシスを持つ磁気特性を示した。また電気的特性についても、室温で強誘電性を示唆するヒステリシス曲線が観測された。しかしながら、印加電圧 1000kV/cm でも飽和せず、マイナーループの部分が現れている。通常の強誘電性評価のようにキャパシタ構造で、薄膜垂直方向に電界を印加測定する場合と異なり、櫛電極により面内に電界を印加し測定した場合は、格子が基板に拘束されている状態であり、また薄膜だけでなく常誘電体の基板にも電界が並列に印加されているためであると考えられる。

磁気光学材料として利用されてきたガーネット系フェライトに着目し、基板との格子ミスマッチを積極的に活用した格子歪みにより強誘電性を発現させることで、室温においてスピンと双極子の自発的秩序構造が共存する室温マルチフェロ薄膜の創製に初めて成功した。２１世紀の高度情報化社会を支える次世代エレクトロニクスの基盤技術開発という社会的要請を満たすため、強誘電体の起源となる「双極子秩序」、強弾性体の起源となる「格子歪秩序」、および強磁性体の起源となる「スピン秩序」を一つの物質やナノ超構造の中に融合することにより、複数の秩序相（強誘電体、強磁性体）が同一結晶内で共存する相共存状態（機能融合型フェロイック）は大きな可能性を秘めている。これらの物質に於いては、超構造、軌道、格子、および電子的相分離を制御することにより、電場・応力・磁場などの外場に対して多重強的(Multi-Ferroic)応答や巨大電気磁気応答が期待される。今後これを利用した既成デバイスの高機能化と新概念デバイスなど新しいエレクトロニクスへの展開が期待される。

・$Zn_{1-x}Co_xO$ の成長モード制御とバンド端発光の磁気変調

希薄磁性半導体は、スピン、フォトン及びキャリアとの相互作用により、興味ある磁気光学及び磁気輸送が観測でき、ZnO 系の磁性混晶の適用は興味深い。特に、ZnO は、酸化物の中でも発光特性に優れ、3d 軌道に局在スピンを持つ Co 原子の添加により、発光特性に磁気変調が生じる可能性がある。本年度は、$Zn_{1-x}Co_xO$ 混晶層の２次元成長モードの確立と発光特性の観測を目指した。

1) 成長モード制御：　酸素分圧変調法

ZnO における 2 次元面は主に、Zn 極性成長において得られる。ZnO の Zn 極性成長は、ZnO 基板の Zn 極性面上に酸素プラズマ照射下で薄膜成長をさせる必要がある。これは、酸素プラズマ内に存在する原子状酸素(O*)が成長に重要な役割を果たすためである。一方、共有性の強い 3d 軌道を有する Co^{2+}イオンの添加は、ZnO の成長モードを著しく変化させる。ZnO と同様の作製条件では、成長表面はラフニングを起こし、相分離が生じる。ZnCoO 層は、低酸素分圧(10^{-6} mbar 以下)の酸素ガスフロー下で成長表面のラフニングは抑制される。しかし、基板と薄膜間での格子緩和に伴う V ピットと呼ばれる貫通転位が残存する。V ピットは、成長膜厚を 10nm 以下に制限することで $10^7 cm^{-2}$ 以下に抑制できる。そして、ZnO と $Zn_{1-x}Co_xO$ 層の成長時の酸素分圧を変調させながら交互に超格子構造を形成した結果、成長表面は２次元成長を維持し、コヒーレント成長が達成された。この成長方法は、ZnCoO 混晶を用いたヘテロ構造の作製に有効的である。

2) 紫外エキシトン発光の観測

$Zn_{1-x}Co_xO$ ($x \leqq 0.05$)層は、Al_2O_3(0001)基板上に 600℃及び 1.4×10^{-5} mbar の成長条件下で成長させた。バンド端は、低温（10K）で励起子吸収ピーク及び磁気円色性（MCD）の共鳴端 EO で評価した。ZnCoO のバンドギャップの増大の比率は、～30m eV/Co（1%）であり、ワイドギャップ化する。しかし、バンド端のΓ点で、s,p-d 交換作用により大きなゼーマン分裂を示す。エネルギーバンドのワイドギャップの起源は、光電子分光(UPS)から、Co(3*d*) と O(2*p*)との混成が有望とされる。低温 PL 発光は、吸収端のブルーシフトに伴い、励起子発光が高エネルギー側にシフトし、混晶系特有のブロードニングを示す。さらに、Co 添加に伴い LO フォノンの増大が観測され、ZnO 母体内への Co 添加は、結晶子内に強い内部電界を誘起する。また、極低温、強磁場下で、バンド端発光はピーク分離し、LO フォノンはさらに先鋭化する。これは磁場印加により、エキシトンとフォノンとの結合が増大することを示唆し、外部磁場により ZnCoO 内に形成された局所電場が影響を受けることが想定される。

・DNA 関連生体材料のテラヘルツ分光とイメージング

テラヘルツ光は、長い間安定した光源がなく未踏の光と言われてきたが、1990 年代に入ってから技術の大きな進展があった。テラヘルツ光は遠赤外光とも呼ばれ、1 テラヘルツ（THz）のエネルギーは 33cm^{-1}＝4.3meV に相当する。紫外～可視光域には電子遷移、近赤外～中赤外域には分子内振動遷移のモードが見えるのに対し、テラヘルツ域には気相分子の回転遷移や大域分子間振動・ねじれ振動遷移、水素結合の振動遷移のモードが見られる。特に DNA などの生体高分子においては、大域分子間振動・ねじれ振動・水素結合振動遷移が見られ、テラヘルツ分光法により生体高分子の指紋スペクトルを得ることができる。

DNA は 2 重らせん構造を取るが、１本鎖が２本鎖にハイブリダイゼーションすることでテラヘルツ帯の吸収が増えることが知られている。これはアデニン(A)とチミン(T)、グアニン(G)とシトシン(C)の相補となる各塩基のアミノ基どうしの水素結合による振動モードがテラヘルツ帯に現れるからだと考えられており、分子間相互作用を直接観測することができる。DNA をテラヘルツ分光により見ることで、ノンラベリング・非破壊・非接触のハイブリダイゼーション判定を行うことができる。また、2 次元・3 次元イメージング手法も開発されており、癌や腫瘍をテラヘルツ光で見ることで医療への応用が試みられている。

我々はこれまでに DNA 構成塩基分子であるアデニン(A)、チミン(T)、グアニン(G)、シトシン(C)、λ-DNA、サケ白子 DNA という風に、基礎的分子から DNA に至るまで徐々に大きな分子のテラヘルツ透過スペクトルを系統的に調べてきた。

テラヘルツ分光・イメージングの DNA へのアプリケーションは数多く提案されているが、系が複雑なこともあって振動モードの理論的解析・考察は殆ど行われていない。そこで我々は塩基配列の制御された人工合成 DNA オリゴマーを試料とし、簡単な系で水素結合振動モードの解析を行った。1 対の GG ミスマッチを有する 11 塩基対 DNA オリゴマーを用意し、GG ミスマッチに選択的に結合するナフチリジンダイマーをインターカレートさることで、GG ミスマッチ部位の水素結合モードが THz スペクトルに表れるかを測定した。DNA が半経験的分子軌道法により、0.8THz と 1.5THz に表れるピークが、それぞれ DNA2 重螺旋のねじれ振動、2 本の DNADNA 間隔の伸縮振動に対応することが分かった。

［ 原著論文 ］

Co-doped ZnO Homoepitaxy: Repeated Oxygen-pressure Modulated Epitaxy, H. Matsui and H. Tabata, Physica Status Solidi C, 3 (2007) 4106-4109.

Simultaneous Control of Growth Mode and Ferromagnetic Ordering in Co-doped ZnO Layers with Zn Polarity, H. Matsui and H. Tabata, Phys. Rev. B, 75 (2007) 014438.

Influence of Microstructure on the Complex Permeability of Spinel Type Ni-Zn Ferrite, S.T. Mahmuda, A.K.M. Akther Hossain, A.K.M. Abdul Hakim, M. Seki, T. Kawai, H. Tabata, J. Magnetism & Magnetic Materials, 305 (2006) 269-274.

Stranski-Krastanov Growth in $Mg_{0.37}Zn_{0.63}O$/ZnO Heteroepitaxy: Self-organized Nanodots and Local Composition Separation, H. Matsui, N. Hasuike, H. Harima, T. Tanaka, H. Tabata, Appl. Phys. Lett., 89 (2006) 091909.

Novel DNA Nano-Patterning Design Method Utilizing Poly-L-Lysine Patterning by Nanoimprint Lithography, T. Ohtake, K. Nakamatsu, S. Matsui, H. Tabata and T. Kawai, J.Nanosci.Nanotechnol., 6 (2006) 2187-2190.

Correlation of Self-organized Surface Nanostructures and Anisotropic Electron Transport in Nonpolar ZnO (10-10) Homoepitaxy, H. Matsui and H. Tabata, J. Appl. Phys., 99 (2006) 124307.

Dielectric and Ferroelectric Properties of c-axis Oriented Strontium Bismuth Tantalate Thin Films Applied Transverse Electric Fields, K. Kotani, I. Kawayama, M. Tonouchi, Y. Hotta and H. Tabata, J. Appl. Phys., 99 (2006) 124106.

Modification of Temperature Dependence of Dielectric Properties by Symmetry-Controlled Superlattices Thin Films of $BaZr_xTi_{1-x}O_3$, T. Kawahara, T. Ohno, A. Doi, H. Tabata, T. Kawai and T. Hino, Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 4484-4488.

Critical Thickness and Lattice Relaxation of Mg-rich Strained $Mg_{0.37}Zn_{0.63}O$ (0001) Layers Towards Multi-quantum-wells, H. Matsui, H. Tabata, N. Hasuike and H. Harima, J. Appl. Phys., 99 (2006) 024902.

［ 解説、総説 ］

酸化物半導体 ZnO 薄膜の成長表面と格子欠陥、松井　裕章、田畑　仁、表面科学、27 (2006) 708-714.

酸化亜鉛半導体薄膜の光・電子・磁気機能 －極性・非極性の観点から－、松井　裕章、田畑　仁、応用物理、75 (2006) 1211-1217.

強誘電体薄膜 $BaZr_xTi_{1-x}O_3$ の超格子による温度特性の制御、河原　敏男、大野　隆裕、田畑　仁、川合　知二、日野　孝紀、超音波 TECHNO、9-10 (2006) 31-34.

［ 著書 ］

「科学立国日本を築く」（榊　裕之　監修、丸文研究交流財団選考委員会　編）、田畑　仁、日刊工業新聞社、(2006)　228-242

［ 国際会議 ］

Multi-Ferroic Relaxors (Invited), *H.Tabata, International Symposium on Integrated Ferroelectrics (ISIF2006), Hawaii, USA, Apr. 23-27, 2006.

Charge Transport Properties of DNA Molecules Measurements by Nano-gap Electrodes (Invited), *H.Tabata, Charge Migration in DNA, Manitoba, Canada, Jun. 6-9, 2006.

Magnetic and Transport Properties of (Zn,Co)O Thin Films, *H. Saeki, H. Tabata, PASPS-Ⅳ, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

A Correlation between Carrier, Ferromagnetism and Structural Quality in Strained $Zn_{1-x}Co_xO$/ZnO Hetroepitaxy, *H. Matsui and H. Tabata, PASPS-Ⅳ, Sendai, Japan Aug. 15-18, 2006.

Room Temperature Multiferroic Properties of Strained $R_3Fe_5O_{12}$ Thin Films. (R=rare metal) , *K. Tsuruta, T. Koide, M. Seki and H. Tabata, JKC-FE06(The 6th Japan-Korea Conference on Ferroelectricity), Sendai, Japan, Aug.17-20, 2006.

Room Temperature Weak Ferromagnetism in Ferroelectric $Pb(Fe,Ta)_{0.5}O_3$ & $Ba(Fe,Ta)_{0.5}O_3$ Thin Films, *A. K. M. Akther Hossain, M. Seki, T. Kawai, H. Tabata, The 17th International Conference on Magnetism, Kyoto, Japan, Aug. 20-25, 2006.

A Correlation between Carrier, Ferromagnetism and Structural Quality in Strained $Zn_{1-x}Co_xO/ZnO$ Hetroepitaxy, *H. Matsui and H. Tabata, The 17th International Conference on Magnetism, Kyoto, Japan　Aug. 20-25, 2006.

Rump Session B　Nanotechnology-Impact on Electronics, Photonics and Biology- (Invited), *H. Tabata, SSDM2006, Yokohama, Japan, Sep. 13-15, 2006.

THz Time-Domain Spectroscopy of Thin-Film DNA Oligomer Having G-G Mismatch(Oral), *K. Norizawa, H. Tabata, F. Takei, K. Nakatani, The IRMMW-THz 2006, Shanghai, China, Sep.18-22, 2006.

Repeated Oxygen-pressure Modulated Epitaxy for Zn-polar Growth of ZnCoO Alloys, *H. Matsui and H. Tabata, SISNN-2006, Osaka, Japan, Sep.19-20, 2006.

Advanced Control of Surface Nanostructures in ZnO Homoepitaxy, *H. Matsui and H. Tabata, SISNN-2006, Osaka, Japan, Sep.19-20, 2006.

Room Temperature Multiferroic Propertied of Strained $R_3Fe_5O_{12}$ Thin Films (Oral), K. Tsuruta, T. Koide, M. Seki and *H. Tabata, The 13th International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, Oct. 8-11, 2006.

Polarity Control and Magnetic Ordering in Strained ZnCoO/ZnO Heteroepitaxy Towards Oxygenpressure Modulated Superlattices, H. Matsui and *H. Tabata, The 13th International Workshop on Oxide Electronics,　Ischia, Italy, Oct. 8-11, 2006.

Advances in Nonpolar ZnO Homoepitaxy: 1D Surface Nanostructure and Electron Transport (Invited), *H. Matsui and H. Tabata, Photonics West-2007, San Jose, USA, Jan. 20-25, 2007.

［ 国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員 ］

田畑　仁	2006 年 International Conference on Solid State Devices and Materials（論文委員　サブコミッティチェア）
田畑　仁	2006 年　International Conference on Solid State Devices and Materials　（論文委員）
田畑　仁	13th International Workshop on Oxide Electronics　（International Committee）
田畑　仁	6th Japan-Korea Conference on Ferroelectricity Publication Committee（Committee Chair）
田畑　仁	第 45 期応用物理学会代議員
田畑　仁	JJAP 特別編集委員
田畑　仁	応用物理学会　論文誌出版委員会委員

［ 国内学会 ］

応用物理学会	9 件
その他	1 件

［ 取得学位 ］

修士（基礎工学）
鶴田　浩二　　フェライト薄膜における光誘起磁性とマルチフェロイック物性に関する研究
博士（工学）
中河原　修　　圧電単結晶基板への Al 薄膜のエピタキシャル成長とその応用に関する研究

[科学研究費補助金]

（代表者）　　単位：千円

基盤研究（B）
田畑　仁　　対称性が破れた強誘電体リラクサー人工格子形成と脳型メモリ創成　　2,800

萌芽研究
田畑　仁　　自己組織化半導体ナノロッドを用いた非蛍光標識型遺伝子トランジスタ　　800

若手研究（B）
佐伯　洋昌　　層状ホモロガス結晶を用いたスピントロニクス材料の探索　　2,600

若手研究（B）
松井　裕章　　表面ナノ構造体によるヘテロ界面構造の変調とその電子、磁気機能　　2,100

（分担者）
特定領域研究「量子デザイン」
田畑　仁　　計算機ナノマテリアルデザインエンジンの開発・応用　　600

特定領域研究「ポストスケール」
田畑　仁　　自己整合３次元構造化とマルチフェロイックデバイス　　13,500

[共同研究]

田畑　仁　　和歌山県地域結集型共同研究事業　　有用アグリリソース/アパタイト複合材料を利用した機能素材応用技術の開発　　600

単分子素子集積デバイス分野

教授（兼任）　川合　知二
助教授　松本　卓也
助手　谷口　正輝
研究員　高木　昭彦
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の担い手として、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を開発し、この配線法を用いてナノ分子デバイスの開発を行っている。

b） 成果

・プラズマプロセスを用いた自己組織化

金属微粒子、有機分子、酸化物など全く異なる種類の物質を自己組織的に互いに結合し、高度は複合構造を形成するためには、一度に全ての構成要素を混ぜたのではうまくいかない。自己組織化をシーケンシャルに進めるためには、先のステップで形成した構造を破壊しないで、かつ反応性を確保する必要がある。自己組織化のステップ間にプラズマプロセスを導入することで、反応活性や溶媒親和性を調整し、分子／微粒子構造体を得る手法を開発した。

・絶縁体上ナノスケール電荷の画像化

絶縁体基板上におけるナノ電荷計測手法の開発を行った。一般に、走査プローブ顕微鏡を用いたナノスケールの電荷観察のためには、導体の基板を用いた電場変調が必要である。基板が絶縁体のときには、電場変調ができないので、電荷観察は不可能であると考えられてきた。ところが、探針絶先端の不均一電界を利用すれば、絶縁体基板上においてもナノサイズ電荷の計測が可能であることを見出した。

・自己組織化配線法を用いた光スイッチングデバイスの特性解析

自己組織化配線法を用いて開発した光スイッチングデバイスのスイッチング特性と電気伝導機構を調べた。自己組織化配線法は、異なる機能がプログラムされた３種類の分子を化学結合により電極間に逐次的につなげていく自己組織的な方法である。光スイッチが ON 状態の温度特性を測定したところ、スチルベンが機能分子として導入された分子ワイヤと同様に、伝導機構は熱活性型であり、高温領域における活性化エネルギーは 117meV であった。配向制御分子の分子長が長いため、配向制御分子における伝導機構はホッピングと考えられ、分子ワイヤ全体の伝導機構は配向制御分子のホッピング伝導に支配される。その結果、光スイッチング分子が導入された分子ワイヤでホッピング機構が観測され、スチルベン分子を機能分子とする分子ワイヤと同程度の活性化エネルギーが得られたと考えられる。

・カルコゲン原子を用いた電極－分子界面の制御

金－チオール結合は、自己組織化膜の形成、DNA や蛋白質などの生体分子の標識、および単分子デバイスにおける電極と分子の接合形成等々に広く用いられてきた非常に重要な結合である。しかし、金－チオール結合は、単分子デバイスにおけるデバイス特性にとっては有利ではないということが、単分子デバイスの開発が盛んになった当時から指摘があった。単分子、あるいは少数分子の電気伝導やデバイス特性において量子伝導を実現し、ナノ分子エレクトロニクスを発展させるためには、電極－分子結合

の高い安定性と電極から分子への低い電荷注入障壁を満たす電極－分子界面を開発することが不可欠である。そこで、量子伝導を示す分子デバイスの開発に適した電極－分子接合を開拓するため、Au－S、Au－Se、および Au－Te 結合を３つのベンゼン誘導体を用いて、XPS 測定と UPS 測定を用いて調べた。Au-S 結合と Au-Se 結合は安定に形成される。Au－Te 結合は金基板上で形成されるものの、テルル酸化物が生成されるため、Au－Te 結合は分子デバイスには不適切である。一方、Au－S 界面と Au－Se 界面を比較したところ、分子の HOMO へのホールの注入障壁が Au―Se 界面の方が小さく、より低い電圧で大きな電流値が得られると期待される。従って、Au-S 結合、Au-Se 結合、および Au-Te 結合の中では、Au-Se 結合が分子デバイスに最も適した結合であることが明らかとなった。これらの結果と自己組織化配線法を組み合わせることで、よりパフォーマンスの高い分子デバイスが開発できると期待される。

[原著論文]

Optical Rotation Inversion of Porphyrin-DNA Complexes, Ch. Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, T. Shitoh and K. Takeda, Tetrahedron Lett., 47 (2006) 519-522.

Single Molecular Morphology of Porphyrin / DNA Complex, Ch.Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, T. Saitoh and K. Takeda : Chem. Lett., 35 (2006) 88-89.

Giant Porphrin Wheels With Large Electronic Coupling as Models of Light Harvesting Photosynthetic Antenna, T. Hori, N. Aratani, A. Takagi, T. Matsumoto, T. Kawai, Min-Chul Yoon, Zin Seok Yoon, Sung Cho, Dongho Kim and A. Osuka, Chem. Eur. J., 12 (2006) 1319-1327.

Atomic Force Microscopic Observation of Escherichia Coil Ribosomes in Solution, T. Matsuura, Hiro. Tanaka, T. Matsumoto and T. Kawai, Biosci. Biotechnol. Biochem., 70 (2006) 300-302.

Porphyrin Molecules Working as Nanodevice on Single-Walled Carbon Nanotube Wiring, H. Tanaka, T. Yajima, T. Matsumoto, Y. Otsuka and T. Ogawa, Adv. Materals., 18 (2006) 1411-1415.

A Directly Fused Tetrameric Porphyrin Sheet and Its Unique Electronic Properties That Arise from The Planar Ycloоctatetraene Core, Y. Nnakamura, N. Aratani, H. Shinokubo, A. Takagi, T. Kawai, T. Matsumoto, Zin Seok Yoon, Deok Yun Kim, Tae Kyu Ahn, Dongho Kim, A. Muranaka, N. Kobayashi and A. Osuka, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 4119-4127.

$(Fe, Mn)_3O_4$ Nanochannels Fabricated by AFM Local Oxidation Nanolithography Using Mo/poly(methyl. Methadrylate) Nanomasks, L. Pellegrino, Y. Yanagisawa, M. Ishikawa, T. Matsumoto, Hid. Tanaka and T. Kawai, Adv. Materials, 18 (2006) 3099-3104.

Characteristics of Electrochemical Transistors, M. Taniguchi and T. Kawai, Mol. Cryst. Liq. Cryst., 444 (2006) 61-66

Time-Resolved Electrical Conductance Spectroscopy of Chemical Reactions on Nano-Space, K. Yokota, M. Taniguchi and T. Kawai, Chem. Phys., 330 (2006) 184-189.

Effect of α-Cyclodextrin on Electronic Properties of Molecular Wires, M. Taniguchi and T. Kawai, Chem. Phys. Lett., 431 (2006) 127-131.

Self-Organized Interconnect Method for Molecular Devices, M. Taniguchi, Y. Nojima, K. Yokota, J. Terao, K. Sato, N. Kambe and T. Kawai, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 15062-15063

(Communication).

Photoconductive Coaxial Nanotubes of Molecularly Connected Electron Donor and Acceptor Layers, Y. Yamamoto, T. Fukushima, Y. Suna, N. Ishii, A. Saeki, S. Seki, S. Tagawa, M. Taniguchi, T. Kawai and T. Aida, Science, 314 (2006) 1761-1764.

[解説、総説]

プログラム自己組織化によるナノ材料・ナノデバイスの創成、小嶋薫、安立京一、李奉局、李恵りょん、谷口正輝、松本卓也、川合知二、表面科学、27 (2006) 151-156.

電子構造計測から探るＤＮＡ分子内の電荷移動機構, 加藤浩之、古川雅士、初井宇紀、谷口正輝、川合知二、小杉信博、川合真紀、 表面科学 27[8] (2006) 469-474.

DNA Electronics (Review Article), M. Taniguchi and T. Kawai, Physica E, 33 (2006) 1-12.

[特許]

「金ナノ微粒子の固定化法」, 小嶋薫、高木昭彦、山田郁彦、松本卓也、川合知二、特願 2006-077059.

「磁気抵抗素子およびその製造方法、並びにその利用」松本卓也、山田郁彦、黒田孝義、川合知二、特願 2006-29903.

“Method and Apparatus for Measuring and Evaluating Local Electrical Characteristics of a Sample Having a Nano-scale Structure” Takuya Matsumoto, Yoichi Otsuka, Yasuhisa Naitoh and Tomoji Kawai, US 7,088,120 B2

“Probe Device” ,Takuya Matsumoto, Naitoh Ysuhisa, Tomoji Kawai, US. Pat. PTC/JP03/03728

“Microelectrode Manufacturing Method and Microelectrode Manufactured by The Microelectrode Manufacturing Method”, Takuya Matsumoto, Shinji Matsui, Kenichiro Nakammatsu, Kaoru Ojima and Tomoji Kawai, PCT/JP2005/005584, WO 2006/035524A1

[国際会議]

Influence of Sequences and Salts on Electrical Conductivity (Invited), *M. Taniguchi, T. Kawai, CREST Workshop on Physics of Single Molecules; Transport Properties of Single Molecules, Atomic Wires and DNA, Shonan, Japan, May 16-18, 2006.

Time-Resolved Scanning Force Microscopy, *T. Matsumoto, T. Kawai, 9th International Conference on Non-contact Atomic Force Microscopy, Kobe, Japan, July 16-20, 2006.

Surface Potential Microscopy of Adsorbates on Insulating Materials: Imaging and Modeling, *F. Yamada, Ch. Takatho, T. Matsumoto, T. Kawai, 9th International Conference on Non-contact Atomic Force Microscopy, Kobe, Japan, July 16-20, 2006.

Electrical Transport of Molecular Nanomaterials and interfaces Probed by Point-contact Current-imaging Atomic force Microscopy, *T. Matsumoto, Y. Otsuka, A. Terawaki, T. Tabuchi, T.

Yajima, H. Tanaka, H. Tabata, T. Ogawa, T. Kawai, International Conference on Nanoscience and Technology NANO9 Meets STM'06, Basel, Switzerland, July30-Aug.4, 2006.

Anchoring Gold Nanoparticles onto Mica Surface by Oxygen Plasma Ashing for Sequential Nanocomponent Assembly, *A. Takagi, K. Ojima, E. Mikamo, T. Matsumoto, T. Kawai, International Conference on Nanoscience and Technology NANO9 Meets STM'06, Basel, Switzerland, July30-Aug.4, 2006.

Structuring One-dimensional Molecular Array Based on Sequensial Self-assembly, *K. Ojima, K. Adachi, M. Taniguchi, T. Matsumoto, T. Kawai, International Conference on Nanoscience and Technology NANO9 Meets STM'06, Basel, Switzerland, July30-Aug.4, 2006.

Surface Potential Microscopy of Adsorbates on Insulating Substrate, *F. Yamada, Ch. Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, International Conference on Nanoscience and Technology NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July30-Aug.4, 2006.

Molecular-Scale Elctrical Properties of DNA-templated Porphyrin Arrays, *Ch. Takatoh, T. Matsumoto, T. Kawai, K. Takada, T. Saitoh, International Conference on Nanoscience and Technology NANO9 meets STM'06, Basel, Switzerland, July30-Aug., 2006.

Electrical Property of Non-Doped DNA and DNA-Templated Molecular Assays (Invited),*T. Matsumoto, T. Kawai, 2006 Osaka Univ./LANL International Workshop on "The 2nd Nanoelectronics and Dynamics of DNA", Hawaii, U.S.A, Aug.21-22, 2006.

Influence of Sequences and Salts on Electrical Conductivity, *M. Taniguchi, T. Kawai, 2006 Osaka Univ. / LANL International Workshop on "The Nanoelectronics and Dynamics of DNA", Hawaii, U.S.A., August 21-22, 2006.

Conductivity of Biomolecular Nanostructures (Invited), *T. Matsumoto, T. Kawai, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006, Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Single Molecule Recognition Imaging by Frequency Shift Detection in Liquids, *T. Kawahara, T. Matsumoto, H. Hokonohara, T. Kawai, The 14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Atagawa, Japan, Dec. 7-9, 2006.

Time-Resolved Electrostatic Force Detection, *T. Matsumoto, T. Kawai, The 14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Atagawa, Japan, Dec. 7-9, 2006.

Dynamic KFM/EFM Detecting a Potential by Frequency Shift with Amplitude Feedback, *A. Takagi, F. Yamada, T. Matsumoto, T. Kawai, The 14th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Atagawa, Japan, Dec. 7-9, 2006.

[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
松本　卓也　　e-Journal of Surface Science and Nanotechnology　Editorial Board

[国内学会]

応用物理学会	10 件
分子構造総合討論会	2 件
日本物理学会	1 件
その他	9 件

[取得学位]

修士（理学）

横田　一道	単分子エレクトロニクスに向けた電子物性に関する研究

[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（B）

松本　卓也	ストロボスコピック・プローブ顕微鏡の開発と光電子移動の単分子レベル時間分解画像化	3,800

若手研究（B）

谷口　正輝	分子デバイス配線法の開発	3,000

特定領域研究

谷口　正輝	分子―電極接合の界面制御技術の開発	2,300

[受託研究]

松本　卓也	独立行政法人科学技術振興機構	巨大ポルフィリンアレーメゾスコピック構造デバイス	900

[共同研究]

松本　卓也	松下電器産業	プローブ顕微鏡による Si ナノワイヤーの電子物性評価	2,000
谷口　正輝	松下電器産業	被覆共役分子を用いた新規機能性材料の開発	3,250

[その他の競争的研究資金]

松本　卓也	独立行政法人科学技術振興機構、戦略的基礎研究	巨大ポルフィリンアレーメゾスコピック構造デバイス	15,800
松本　卓也	財団法人小笠原科学技術振興財団	イオン性ポリマーを用いた自己組織化ナノ分子アレーによる磁気抵抗デバイス	1,200
谷口　正輝	信越化学工業株式会社	ポリマーFET の開発	2,000
谷口　正輝	関西エネルギー・リサイクル科学研究振興財団	インクジェットプロセスによる高移動度ポリマー電界効果トランジスタの開発	900

超分子プロセス分野

教授	真嶋　哲朗（兼）
助教授	川井　清彦
助手	滝澤　忍
特任助手	竹中　和浩

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 分子センサーの構築に関する研究を行っている。DNA ナノブロックを利用した DNA センサーの開発、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 内光電荷分離の生体影響の解明を行っている。

また、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不斉触媒の開発研究を行っている。さらに開発した多機能不斉触媒をナノ粒子化した高活性固定化触媒の開発およびリサイクルプロセスの構築を推進している。

b） 成果

・DNA ナノブロックを利用した DNA 分子センサーの開発

DNA の酸化により DNA 中に生じた正電荷(ホール)が、DNA を長距離にわたり移動することが明らかになり、その生物学的影響、また DNA をセンサーとして応用する観点から注目を集めている。これまでに我々は、DNA 中の長距離ホール移動の観測に成功し、ホール移動速度から DNA 中に生じたミスマッチの検出が可能であることを報告した。本研究では、DNA 内電荷移動速度から SNPs（一塩基多型）を読み出す DNA センサーを開発するため、DNA ナノブロックを利用した DNA 中の電荷移動について検討した。診断を行う配列に直接煩雑な化学修飾を行わなくて良いように、診断したい配列を一つのブロックとして、これに電荷注入ブロック、電荷検出ブロックを混合することにより電荷移動速度を読み出すことを検討した。混合するだけでブロック同士が結合するためには、結合部位が熱力学的に安定であり、かつ電荷が速く移動する必要がある。そこで、CG 繰り返し中の電荷移動速度をもとめたところ高速に移動することがわかり、CG 繰り返し配列をもとに DNA ナノブロックの連結部位を設計した。その結果、診断ブロックを電荷注入ブロック、電荷検出ブロックと混合するだけで電荷移動速度から診断ブロックの情報を読み出すことに成功した。

・光増感 DNA 損傷機構の解明

これまでに我々は、光増感 DNA 酸化損傷において DNA 中の電荷移動による電荷分離状態の生成が DNA 損傷を促進することを明らかにした。今回、光増感剤として Naphthalimide および Naphthaldiimide を修飾した DNA を合成し、レーザーフラッシュフォトリシスを用いた電荷分離寿命の測定、および HPLC による DNA 損傷の定量を行い DNA 損傷機構について、速度論的に検討した。損傷効率を両光増感剤で比較すると、Naphthalimide の方がより効率よく DNA 損傷を引き起こすことがわかった。不可逆的な反応は、逆電子移動の前にラジカルアニオンと酸素の反応、あるいはグアニンラジカルカチオンと水、酸素の反応が起こることにより引き起こされる。電荷分離の際に生じる光増感剤ラジカルアニオンと酸素の反応速度をそれぞれ測定したところ、Naphthalimide のラジカルアニオンと酸素の反応速度が Naphthaldiimide のラジカルアニオンと酸素の反応速度に比べ倍速いことが判明し、光増感剤ラジカルア

ニオンと酸素の反応速度がDNA損傷の効率の鍵を握っていることが明らかになった。また、光増感DNA酸化損傷において初期的にアデニンが酸化されることの重要性を調べるため、種々の光増感剤を合成しDNA 損傷効率を調べた。DNA の損傷効率は、光増感剤が光励起に伴いアデニンを酸化できる場合にのみ、アデニン連続配列選択的に高くなることが示された。レーザーフラッシュフォトリシスを用いた速度論的検討から、アデニン連続配列のアデニン酸化が DNA 内電荷移動を経て長寿命電荷分離状態を生成することにより DNA 損傷を促進することが明らかになった。

・多機能不斉金属ナノ触媒の開発

触媒の回収や再利用が容易となる固定化触媒の開発は、環境調和型プロセスを構築する重要な研究課題となっている。しかし、例えば、複数の配位子を含む触媒をポリマー上に固定化するには、配位子の相対配置を適切に制御する新規な方法論が必要となる。そこで、複数の配位子を有する触媒の汎用性に富む固定化法として、金属架橋型高分子不斉触媒の開発研究を行っている。高分子の金属部位は、高分子構造の架橋部位と不斉触媒の活性中心の二つの機能を有する。有機溶媒に可溶な配位子からの金属錯体形成により触媒は固定化されるため、配位子間の距離及び相対配置は、均一系触媒と同一構造となり、高活性な固定化触媒が構築できる。実際、(*R,R*)-6,6'-bi(BINOL)と $LiAlH_4$ との反応により Al と Li を含む金属架橋型高分子不斉触媒を調製した。得られた金属架橋型高分子は、各種溶媒に不溶な固定化不斉触媒として機能し、再利用も可能であった。現在、より汎用性の高い多機能不斉固定化触媒の開発を行っている。

・機能性球状粒子の効率的合成法の開発と機能評価

触媒の回収や再利用が容易となる固定化触媒の開発は、環境調和型プロセスを構築する重要な研究課題となっている。現在、我々は、ナノ粒子表層に不斉触媒能を有する超高活性ナノ粒子固定化触媒および金属架橋型高分子触媒の効率的構築法の開発研究を行っている。界面活性モノマーの形成する球状ミセルを水中で重合反応により固定し、得られた球状ポリマーに配位子を担持することで高活性ナノ粒子触媒が得られることを見出した。また、金と硫黄の親和力を利用して、金属クラスター担持触媒を調製し、金属ナノクラスターが高活性固定触媒の固相として十分機能することを明らかにした。更なる高次機能を持つナノ粒子の合成と応用に関して、現在、検討している。

［ 原著論文 ］

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T Majima, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 103 (2006) 18072-18076.

Temperature-Driven Oxygenation Rate Control by Polymeric Photosensitizer, H. Koizumi, Y. Shiraishi, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Majima, and T. Hirai, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 8751-8753.

Rapid Long-Distance Hole Transfer through a Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 11012-11013.

In Situ and Ex Situ Observations of the Growth Dynamics of Single Perylene Nanocrystals in Water, T. Tachikawa, H.-R. Chung, A. Masuhara, H. Kasai, H. Oikawa, H. Nakanishi, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 15944-15945.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S.-C.Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 16340-16341.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of the Intramolecular Dimer Radical

Cation of Cyclophanes, M. Fujitsuka, D. W. Cho, S. Tojo, S. Yamashiro, T. Shinmyozu, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 5735-5739.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 9319-9324.

Properties and Reactivity of Xanthyl Radical in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 9788-9792.

Solvent Effect on the Deactivation Processes of Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 11800-11808.

S-S Bond Mesolysis in alpha,alpha'-Dinaphthyl Disulfide Radical Anion Generated during -Radiolysis and Pulse Radiolysis in Organic Solution, M. Yamaji, S. Tojo, K. Tahkehira, S. Tobita, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110 (2006) 13487-13491.

Intramolecular Exciplex and Intermolecular Excimer Formation of 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, K. H. Choi, M. J. Park, U. C. Yoon, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 4576-4582.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligand to S2-Excited Sb-Tetraphenylporphyrin, M. Fujitsuka, D. W. Cho, T. Shiragami, M. Yasuda, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 9368-9370.

Photoinduced Electron Transfer Processes in 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, U. C. Yoon, P. S. Mriano, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 11062-11068.

Singlet Energy Migration along Alternating Block Copolymer of Oligothiophene and Oligosilylene in Solution, M. Fujitsuka, D. W. Cho, J. Ohshita, A. Kunai, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 12446-12450.

Visible Light-Induced Degradation of Ethylene Glycol on Nitrogen-doped TiO_2 Powders, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, H. Irie, K. Hashimoto, and T. Majima, J. Phys. Chem.B, 110 (2006) 13158-13165.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 13296-13303.

Photoinduced Charge Separation in Titania Nanotubes, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Sekino, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 14055-14059.

Monitoring the DNA Binding and Dissociation Events by Observing the Local Structural and Environmental Changes in the Dimer Interface of BamHI Using a Solvatochromic Dansyl Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110 (2006) 21311-21318.

Probing the Surface Adsorption and Photocatalytic Degradation of Catechols on the TiO_2 by Solid-State NMR Spetroscopy, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir, 22 (2006) 893-896.

Acceleration of Laser Induced Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir, 22 (2006) 6361-6366.

Reactivity of Triaryphosphine Peroxyl Radical Cations Generated through the Reaction of Triaryphosphine Radical Cations with Oxygen, S. Tojo, S. Yasui, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Org. Chem., 71 (2006) 8227-8232.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of 9-cyano-10-phenylethynylanthracenes with Donor and Acceptor Substituents, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, H.-J. Liang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T.Majima, J. Org. Chem., 71 (2006) 8732-8739.

Detection of G-quadruplex-TMPyP4 Complex by 2-Aminopurine Modified Human Telomeric DNA, T. Kimura, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 401-402.

Probing of Microenvironments in the Grooves of Z-DNA using Dan-modified Oligonucleotides, T. Kimura, K. Kawai, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 1542-1544.

Thermodynamic Properties of Branched DNA Complexes with Full-matched and Mismatched DNA Strand, M. Endo and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 2329-2331.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T Majima, Chem. Commun., (2006) 3918-3920.

Effects of Substituents on Aryl Groups during the Reaction of Triarylphosphine Radical Cation and Oxygen, S. Yasui, S. Tojo, and T. Majima, Org. Biomol. Chem., 4, (2006) 2969-2973.

Formation of Pyrene Dimer Radical Cation at the Minor Groove of DNA, K. Kawai, T. Kimura, H. Yoshida, A. Sugimoto, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T.Majima, Bull. Chem. Soc. Jpn., 79 (2006) 312-316.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Angew. Chem. Int. Ed., 45 (2006) 120-122.

Properties of Excited Ketyl Radicals of Benzophenone Analogues Depending on the Size and Electronic Character of Aromatic Rings, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12 (2006) 1610-1617.

One-Electron Redox Processes during the Polyoxometalate-Mediated TiO2 Photocatalytic Reactions Studied by Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12 (2006) 3124-3131.

Pyrene-Stacked Nanostructures Constructed in the Tabacco Mosaic Virus Rod Scaffold, M. Endo, H.

Wang, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem Eur. J., 12 (2006) 3735-3740.

α-Carbonyl Substituent Effect on the Lifetimes of Triplet 1,4-Biradicals from Norrish Type II Reaction, X. Cai, P. Cygon, B. Goldfus, A. G. Griesbeck, H. Heckroth, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12 (2006) 4662-4667.

One-Electron Oxidation Pathways during beta-Cyclodextrin-Modified TiO2 Photocatalytic Reactions, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12 (2006) 7585-7594.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 420 (2006) 90-94.

Photophysical and Photochemical Properties of Corannulenes Studied by Emission and Optoacoustic Measurements, Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis, M. Yamaji, K. Takehira, T. Mikoshiba, S. Tojo, M. Fujitsuka, Y. Okada, T. Majima, S. Tobita, and J. Nishimura, Chem. Phys. Lett., 425 (2006) 53-57.

Direct Fluorescence Measurement of Excited Radical Cations of 1,3,4-Trimethoxybenzene by ns-ps Two-color Two-laser Flash Photolysis, X. Cai, P. M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 432 (2006) 436-440.

Important Factors for the Formation of Radical Cations of Stilbene and Substituted Stilbenes during Resonant Two-Photon Ionization with a 266- or 355-nm Laser, S. Samori, M. Hara, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Photochem. Photobiol. A, 179 (2006) 115-124.

Emission from Charge Recombination between Radical Cations and Radical Anions of 9-Cycano-10-(p-substituted phenyl)anthracene Generated during Pulse Radiolysis, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-H. Lin, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Chinese Chem. Soc., 53 (2006) 1225-1234.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, Org. Lett., 8 (2006) 227-230.

Conformational Lock in Brϕnsted Acid - Lewis Base Organocatalyst for the aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, Tetrahedron: Asymmetry, 17 (2006) 578-583.

［ 解説、総説 ］

DNA 内の光誘起電子移動と DNA ナノサイエンス、真嶋哲朗、現代化学、11 (2006) 25-29.

マルチレーザー励起で生じる高励起状態の化学、藤塚守、坂本雅典、真嶋哲朗、光化学、37 (2006) 157-164.

Development of Efficient Methods for the Immobilisation of Multicomponent Aasymmetric Catalysts, D. Jayaprakash, S. Takizawa, T. Arai, H. Sasai, Journal of Experimental Nanoscience, 1 (2006) 477-510.

［ 著書 ］

“電子線エネルギーの吸収と高励起状態 光応用技術・材料事典、（山岡亜夫編）” 真嶋哲朗、㈱産業技術サービスセンター、(2006) 35-37.

“酸‐塩基型不斉有機分子触媒による aza-Morita-Baylis-Hillman 反応,「有機分子触媒の新展開」（監修；柴崎正勝）” 笹井宏明、滝澤忍、松井嘉津也、シー・エム・シー出版、(2006) 231-242.

［ 特許 ］

「金属ナノ粒子の形成方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-121694

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-142132

「DNA ナノブロックを利用した DNA ナノエレクトロニクス」真嶋哲朗、川井清彦、小阪田泰子、藤塚守、特願 2006-291734

「活性酸素種を単一分子レベルで検出する方法」真嶋哲朗、立川貴士、藤塚守、特願 2006-316047

「DNA 電荷移動を利用した DNA 一分子蛍光測定による一塩基多型の検出法」真嶋哲朗、高田忠雄、川井清彦、藤塚守、特願 2007-6829

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-28166

「修飾金属ナノ粒子およびその製造方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-095031

「新規バナジウム化合物」滝澤忍、笹井宏明、片山智美、特願2006-240632

「ビナフトール骨格を有する新規有機分子触媒およびその製造法と応用」笹井宏明、滝澤忍、松井嘉津也、特開 2006-28021

“Novel organic molecular catalyst having binaphthol skeleton and processes for producing the same and application thereof. ” Sasai, Hiroaki; Takizawa, Shinobu; Matsui, Katsuya., United States Patent Application *20060009646*

「光学活性スピロビスイソオキサゾリン誘導体とその製造方法およびその金属錯体を用いた不斉触媒反応」笹井宏明、脇田和彦、加藤考浩、荒井緑、篠原俊夫、滝澤忍、特開2006-076939

「光学活性スピロビスイソオキサゾール誘導体およびその製造法、並びにその金属錯体を用いた不斉触媒反応」笹井宏明、脇田和彦、加藤考浩、荒井緑、篠原俊夫、滝澤忍、特開2006-076915

「スピロキラリティを有する第４級アンモニウム塩およびその製造法、並びに該アンモニウム塩を用いた不斉触媒反応」下元愛、米澤浩司、滝澤忍、笹井宏明、特開2006-076911

「新規スピロ構造化合物とその製造法」マヘッシュ エル パティル、シラムコッティ ベンカット ラクシュマン ラオ、滝澤忍、笹井宏明、特開2006-076887

「スピロ骨格を持つキラルな相間移動触媒およびその製造法、並びにそれを用いた不斉触媒反応」米澤浩司、下元愛、滝澤忍、笹井宏明、特開2006-070001

［ 国際会議 ］

Mechanism of Photosensitized DNA Damage: Hole Transfer in DNA and the Role of Oxygen (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Photochemistry of Amino Acid Derivatives: Stereoselective Synthesis of β-Lactames and Cyclobutanols (Invited), *A. G. Griesbeck, T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

TiO_2 Photocatalytic One-Electron Oxidation of Aromatic Compounds Studied by Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Rapid Energy Migration in Porphyrin Polypeptides, *M. Fujitsuka, D. W. Cho, N. Solladié, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Transient Radical Pair in the Photoinduced Electron Transfer Mediated by the Double Strand DNA (Invited), *K. Akiyama, K. Kawai, T. Takada, T. Ikoma, T. Majima, S. Tero-Kubota, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Energy and Charge Transfer in Porphyrin Supramolecular Systems (Invited), *T. Majima, 209th ECS Meeting at Denver (The Electrochemical Society) Symposium on “Porphyrins and Supramolecular Assemblies”, Adams Mark Denver Hotel, Denver, May 7-12, 2006.

Photosensitized One Electron Oxidation of DNA towards Photodynamic Therapy (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Transport in DNA, T. Takada, K. Kawai (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Photochemical Control of a Restriction Enzyme BamHI Activity Using Azobenzene-Bearing Amino Acids, K. Nakayama, M. Endo, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Monitoring the B-A Conformational Transition of Nucleic Acids by Dan-Modified DNA, T. Kimura, K. Kawai and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and

Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts, Seminar in Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC (Invited), *T. Majima, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, Oct 27, 2006.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, "CLUSTOXDNA Meeting on the Chemistry and Biochemistry of Oxidative DNA Damage," in Gandia, Valencia, Spain, Oct 28-Nov 1, 2006.

Pyrene-Assmbled Nanostructures Constructed in the Tobacco Mosaic Virus Scaffold (Invited), *M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer in DNA and Photosensitized DNA Damage: Importance of Adenine Oxidation (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Energy Migration along Photofunctional Polymers (Invited), *M. Fujitsuka, D. W. Cho, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Two-Color Two-Laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film (Invited), *M. Sakamoto, K. S. Sik, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences (Invited), * T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of *Bam*HI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Invited), *K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

DNA Nano-Structures Controlled by Branched DNA Connectors (Invited), *M. Endo and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of Intramolecular Dimer Radical Cation of Cyclophanes, *M. Fujitsuka, T. Shinmyozu, T. Majima, K. Kawai, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer Rates in A-from DNA/2'-OMeRNA Hybrid, *K. Kawai, Y. Osakada, A. Sugimoto, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photochemical Regulation of BamHI Activity Using an Azobenzene Moiety Site-selectively Introduced into the Protein-Protein Interface, *K. Nakayama, M. Endo, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, *M. Sakamoto, K. S. Sik, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Kinetics of Transient End-to-End Contact of Single-Stranded DNAs, *A. Sugimoto, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Laser-induced Molecular Chemistry and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser

irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Laser Chemistry of Nanomaterials and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser

irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Beam-Induced Molecular Chemistry (Oral), *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

One-Electron Oxidation Pathways during β-Cyclodextrin-Modified TiO_2 Photocatalytic Reaction, Takashi Tachikawa, Sachiko Tojo, Mamoru Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Long-Distance Hole Transfer through Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, S. S. Kim, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S. C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Charge Transfer in DNA (Oral), *T. Majima, Commemorative Workshop of Opening SANKEN USA Branch, San Francisco, Dec 15-16, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), *T. Majima, The 8th International Conference on ECOMATERIALS, Kitakyusyu International Conference Center, Jan 11-14, 2007.

Single Molecule Fluorescence Imaging of TiO_2 Photocatalytic Reaction (Oral), *T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the

Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, *K. Naito, T. Tachikawa, S. -C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Rapid Energy Migration along Photofunctional Polymers, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Charge Separation via Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, S. S. Kim, Takashi Tachikawa, Mamoru Fujitsuka, and *Tetsuro Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Single-Molecule Fluorescence Imaging of the Remote TiO_2; Photocatalytic Reaction, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 8^{th} International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan,April 23-26, 2006.

Development of Catalytic Enantioselective Reaction utilizing Chiral Spiro-type Ligands, T. Tsujihara, P. Koranne, J. Yogo, K. Wakita, T. Shinohara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference (IMCT, MC2006), Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference (IMCT, MC2006), Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

A Novel Bifunctional Asymmetric Organocatalysts for aza-Morita-Baylis-Hillman (aza-MBH) Reaction, K. Matsui, S. Takizawa, H. Sasai, 7^{th} Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto, Japan, May 25-26, 2006.

Enantioselective Catalyses using Novel Spiro-type Ligands, P. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, J. Yogo, K. Onitsuka, H. Sasai, 7^{th} Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto,

Japan, May 25-26, 2006.

Development of Novel Chiral Isoxazoline/Isoxazole Hybrid-type Ligands, P. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality (Chirality-2006), Busan, Korea, June 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, Takizawa, S. Matsui, K. Tanaka, K. Horii, A. Sasai, H. 18th International Symposium on Chirality (Chirality-2006), Busan, Korea, June 25-28, 2006.

Development of New Methods towards the Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality (Chirality-2006), Busan, Korea, June 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, Matsui, K.; Tanaka, K.; Horii, A.; Takizawa, S.; Sasai, H. International Symposium on Organocatalysis in Organic Synthesis, Glasgow, UK, July 5-7, 2006.

Development of Metal-bridged Polymers as Enantioselective Catalysts, S. Takizawa, N. Inoue, H. Sasai, XXII International Conference on Organometallic Chemistry, Zaragoza, Spain, July 23-28, 2006.

Enantioselective Catalyses using SPRIX Ligands and Novel Spiro Isoxazoline-isoxazole Hybrid Ligands, P. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, J. Yogo, K. Onitsuka, H. Sasai, 232nd ACS National Meeting, CA, USA, Sep 10-14, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective aza-Morita-Baylis-Hillman (aza-MBH) Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 1st International Conference of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Okinawa, Japan, Oct 16-20, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective aza-Morita-Baylis-Hillman (aza-MBH) Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-10), Kyoto, Japan, Nov 13-17, 2006.

Dual Activation in an Enantioselective Homolytic Coupling Reaction, T. Katayama, C. Kameyama, S. Takizawa, K, Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-10), Kyoto, Japan, Nov 13-17, 2006.

Enantioselective Synthesis of Heterocyclic Compounds Utilizing Pd(II)-SPRIX Catalyst, G. B. Bajracharya, P. Koranne, T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry (IKCOC-10), Kyoto, Japan, 2006. Nov 13-17, 2006.

Development of Chiral Isoxazoline/isoxazole Ligands and Their Application in Enantioselective Catalyses, P. Koranne, G. B. Bajracharya, M. L. Patil, T. Tsujihara, C. V. L. Rao, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec 8-9, 2006.

Development of Novel Asymmetric Cascade Reaction Catalyzed by Pd-SPRIX, T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec 8-9, 2006.

Development of Artificial Enzyme Utilizing Multiple Interactions in Catalytic Site, T. Kawase, R. N. Nadaf. G. R. Kassem, D. Jayaprakash, S. Takizawa, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec 8-9, 2006.

[国内学会]

日本化学会年会	13 件
放射線化学討論会	3 件
FIBER Forum 2006	1 件
SORST 齋藤チームシンポジウム	1 件
光化学討論会	10 件
電子スピンサイエンス学会年会	1 件
有機反応懇談会	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

基盤研究（S）		
真嶋　哲朗	光機能性ＤＮＡのナノサイエンス	19,240
特定領域研究		
真嶋　哲朗	光機能界面における有機物の反応機構の解明	10,200
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	2,100
萌芽研究 真嶋　哲朗	DNA 自己組織化に基づくカーボンナノチューブアレイの構築	1,000
若手研究（B） 川井　清彦	DNA ナノ光電荷分離システムの構築	2,500

[受託研究]

真嶋　哲朗	IDEC 株式会社、 株式会社サタケ	レーザー光を用いたプラスチックの種類判別方式の研究	4,510
笹井　宏明	科学技術振興機構（JST）	スピロ型不斉配位子の創製を基盤とする新規医薬品合成中間体の供給	3,250

[奨学寄附金]

真嶋　哲朗	旭硝子株式会社	1,000
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	500
笹井　宏明	日産化学工業	400

［ 共同研究 ］

真嶋　哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノチューブを用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,155
真嶋　哲朗	三菱化学株式会社	高励起状態からの化学反応に関する基礎的研究	1,000

［ その他の競争的研究資金 ］

川井 清彦	財団法人国際科学技術財団研究助成（若手）	DNA ナノ構造体を利用した光電変換システムの構築	1,000
滝澤　忍	科学技術振興調整費若手任期付研究員支援	自己組織化による機能性ナノマテリアルの創製	19,430

ナノバイオデバイス分野

教授（兼任）　谷澤　克行
助教授　岡島　俊英
助手　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

・銅含有アミン酸化酵素の触媒反応中間状態の構造解析

銅含有アミン酸化酵素は微生物から哺乳動物に至る生物界に広く分布し種々の生理活性アミンの酸化的脱アミノ反応を触媒する酵素である。本酵素はサブユニット分子量約 70,000ー95,000 のホモダイマー構造をもち、各サブユニットは、補欠金属の２価銅イオンとアミノ酸残基に由来したキノン補酵素、トパキノン（TPQ）を有している。本酵素の触媒過程は、前半の還元的半反応と後半の酸化的半反応の２つに大きく分けられる。前半の還元的半反応では、酸化型 TPQ が基質アミンによって還元され、還元型 TPQ とアルデヒドが生成する。後半の酸化的半反応では、還元型 TPQ が酸素分子によって再酸化され、酸化型 TPQ が再生されるとともに、過酸化水素が生成する。これまでに、定常状態速度論および反応中間体モデル化合物の特性にもとづいて、本酵素の詳細な触媒機構が提唱されてきたが、多くの点が未だに未解明に残されている。例えば、酸化的半反応の初期において還元型 TPQ の電子移動に関して、Cu^{1+}/TPQ セミキノンラジカルの状態を経て、銅イオンから分子状酸素に電子が移動するのか、あるいは還元型 TPQ から直接分子状酸素に電子が移動するのか、２通りの説があった。そこで、この点を明らかにするために、*Arthrobacter globiformis* に由来した銅含有アミン酸化酵素（AGAO）において、反応中間体の立体構造解析を行った。まず、銅型 AGAO 結晶と Ni 置換型結晶を嫌気条件下、過剰の基質アミンでソーキングした。結晶顕微分光スペクトルを測定した結果、セミキノンラジカルと還元型 TPQ の状態をそれぞれが生成されていることが明らかとなった。そこで、これらの結晶を、液体フロン中で瞬間凍結して、X 線結晶解析によって構造決定した。興味深いことに、銅型 AGAO のセミキノンラジカル反応中間体においては、酸化型 TPQ や還元型 TPQ と異なり、TPQ が銅イオンに直接配位していることが判明した。おそらく、セミキノンラジカル反応中間体の形成に際して、TPQ のコンフォメーション変化が起こり、TPQ が銅イオンに直接配位することによって、還元型 TPQ と銅イオンとの間で速い電子移動が生じていると考えられた。これまでの速度論解析の結果とあわせると、Cu^{1+}/TPQ セミキノンラジカルの状態は、AGAO の触媒反応サイクル上にはなく、還元型 TPQ から直接分子上酸素に電子が移動すると考えられた。

・キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素の生合成機構の解明

キノヘムタンパク質アミン脱水素酵素（QHNDH）は、培地中の*n*-ブチ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-サブユニットには、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、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番目のORF（ORF2）は、本酵素

のどのサブユニットとも対応していない約55 kDaの未知タンパク質をコードしている。配列比較に基づくと、このタンパク質はラジカルSAMスーパーファミリーに属すると考えられるが、QHNDHとの関係は未解明に残されている。本研究では、*P. denitrificans*のORF2タンパク質に着目し、QHNDHの生合成過程、特にγ-サブユニット内のCTQ生成やチオエーテル架橋構造の形成に果たす役割を解明した。

ORF2タンパク質の機能について解析するため、まず相同組換えによって、ORF2遺伝子破壊株（ΔORF2株）を作成した。*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、野生株とΔORF2株の増殖能とQHNDH活性を比較した結果、ΔORF2株はQHNDH活性を欠失しており、この培地中に増殖することができなかった。ΔORF2株の最小培地における増殖能とQHNDH活性は、広宿主域ベクターを用いて構築したORF2タンパク質発現プラスミドをΔORF2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、鉄硫黄クラスターおよびS-アデノシルメチオニン（SAM）結合と推定される配列に変異を導入したORF2遺伝子を持つ発現プラスミドでは、ΔORF2株の同培地での増殖能力を回復しなかった。以上の結果から、ORF2タンパク質がラジカルSAMタンパク質として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。QHNDHの各サブユニットの細胞内局在について調べたところ、α-およびβ-サブユニットは野生株と同様にΔORF2株においても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-サブユニットをHPLCにより精製し、その質量分析を行った結果、成熟型γ-サブユニットとは対象的に、細胞質内蓄積γ-サブユニットは、補酵素生成とチオエーテル結合形成のいずれの翻訳後修飾も受けていないことが明らかになった。さらに、成熟型γ-サブユニットにはない28残基のプレ配列がN末端に存在することが明らかになった。このプレ配列は、通常のペリプラズムへの輸送シグナルとは異なり、塩基性及び酸性残基に富んでいた。また、遺伝子欠失株において、このプレ配列を除去したγ-サブユニットはペリプラズムに輸送されず、QHNDH活性も検出されなかった。以上の結果から、γ-サブユニットは極めて複雑な翻訳後修飾機構とペリプラズムへの輸送機構をもつと考えられる。

・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た。これは、異物排出蛋白質として初めての結晶構造決定であるのみならず、プロトン輸送と共役する膜輸送蛋白質では初めての構造決定であった。そして 2006 年には基質結合型 AcrB 結晶の構造解析にも成功した。基質は AcrB 三量体のうち一つの単量体のフエニルアラニンクラスターに結合しており、３量体は非対称で、基質結合→放出→結合準備という膜輸送の３段階それぞれのスナップショットであった。これにより、３量体が機能的に回転して順次結合放出を繰り返すという全く新しい輸送機構モデルが確立された。

[原著論文]

Quantum Mechanical Hydrogen Tunneling in Bacterial Copper Amine Oxidase Reaction, T. Murakawa, T. Okajima, S. Kuroda, T. Nakamoto, M. Taki, Y. Yamamoto, H. Hayashi, and K. Tanizawa, Biochem. Biophys. Res. Commun., 342 (2006) 414–423.

Crystal Structures of Cytochrome cL and Methanol Dehydrogenase from Hyphomicrobium denitrificans: Structural and Mechanistic Insights into Interactions between the Two Proteins, M. Nojiri, D. Hira, K. Yamaguchi, T. Okajima, K. Tanizawa, and S. Suzuki, Biochemistry, 45 (2006) 3481–3492.

Engineered Bio-nanocapsules, the Selective Vector for Drug Delivery System, D. Yu, T. Fukuda,

Tuoya, S. Kuroda, K. Tanizawa, A. Kondo, M. Ueda, T. Yamada, H. Tada, and M. Seno, IUBMB Life, 58 (2006) 1–6.

Kinetic and Structural Studies on the Catalytic Role of the Aspartic Acid Residue Conserved in Copper Amine Oxidase, Y.-C. Chiu, T. Okajima, T. Murakawa, M. Uchida, M. Taki, S. Hirota, M. Kim, H. Hayashi, Y. Yamamoto, and K. Tanizawa, Biochemistry, 45 (2006) 4105–4120.

Involvement of a Putative [Fe-S]-Cluster-Binding Protein in the Biogenesis of Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, K. Ono, T. Okajima, M. Tani, S. Kuroda, D. Sun, V. L. Davidson, and K. Tanizawa, J. Biol. Chem., 281 (2006) 13672–13684.

Secretory Production System of Bionanocapsules Using a Stably Transfected Insect Cell Line, T. Shishido, M. Muraoka, M. Ueda, M. Seno, K. Tanizawa, S. Kuroda, H. Fukuda, and A. Kondo, Appl. Microbiol. Biotechnol., 73 (2006) 505–511.

Initial Repertoire of Anti-(4-hydroxy-3-nitrophenylacetyl) Antibodies as Potential Donors for Effective Affinity Maturation, K. Furukawa, A. Manabe, A. Furukawa, H. Kuba, T. Okajima, and T. Azuma, Mol. Immunol., 43 (2006) 1751–1760.

Conformational Changes during Apoplastocyanin Folding Observed by Photocleavable Modification and Transient Grating, S. Hirota, Y. Fujimoto, J. Choi, N. Baden, N. Katagiri, M. Akiyama, R. Hulsker, M. Ubbink, T. Okajima, T. Takabe, N. Funasaki, Y. Watanabe, and M. Terazima, J. Am. Chem. Soc., 128 (2006) 7551–7558.

Crystal Structures of a Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism, S. Murakami, R. Nakashima, E. Yamashita, T. Matsumoto, and A. Yamaguchi, Nature, 443 (2006) 173–179.

[解説、総説]

中空バイオナノ粒子を用いたDDSの開発とその産業化、近藤昭彦、黒田俊一、谷澤克行、妹尾昌治、上田政和、ドラッグデリバリーシステム、4 (2006) 435–443.

X線結晶解析と反応速度論的解析に基づく銅アミン酸化酵素の触媒機構、岡島俊英、谷澤克行、日本応用酵素協会誌、41 (2006) 1–7.

新しいビルトイン型キノン補酵素CTQと分子内チオエーテル架橋構造―その特異な構造形成機構の解明に向けて―、谷澤克行、酵素工学ニュース、56 (2006) 5–9.

遺伝子・薬剤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現状とこれから、粕谷武史、鄭　周姫、谷澤克行、黒田俊一、化学と生物、44 (2006) 760–766.

[国際会議]

Active-site Structure of Copper Amine Oxidase Probed by Three Hydrazine Derivatives Reactive with the TPQ Cofactor, *T. Murakawa, T. Okajima, M. Taki, Y. Yamamoto, S. Kuroda, H. Hayashi, K. Tanizawa, Gordon Research Conference on Protein Derived Cofactors, Radicals and Quinones, Ventura, California, U.S.A. Jan. 22-27, 2006.

Involvement of a Hypothetical [Fe-S]-binding Protein in the Biosynthesis of Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, *K. Ono, M. Tani, T. Okajima, D. Sun, V. L. Davidson, S. Kuroda, K. Tanizawa, Gordon Research Conference on Protein Derived Cofactors, Radicals and Quinones, Ventura, California, U.S.A. Jan. 22-27, 2006.

Reaction Mechanism of Bacterial Copper Amine Oxidase: X-ray Crystal Structures of Catalytic Intermediates with Reduced Forms of the TPQ Cofactor, *T. Okajima, T. Murakawa, S. Kuroda, K. Tanizawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Suita, Osaka, Japan, Jan. 30-Feb. 1, 2006.

Quantum Mechanical Hydrogen Tunneling in Bacterial Copper Amine Oxidase Reaction, *T. Murakawa, T. Okajima, S. Kuroda, M. Taki, Y. Yamamoto, H. Hayashi, K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Reaction Mechanism of Bacterial Copper Amine Oxidase: Conformational Changes of the TPQ Cofactor during the Catalytic Cycle, *T. Okajima, T. Murakawa, S. Kuroda, K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Involvement of a Putative Radical SAM Protein in the Posttranslational Formation of Intra-peptidyl Thioether Crosslinks in Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, *K. Ono, T. Okajima, M. Tani, S. Kuroda, D. Sun, V. L. Davidson, K. Tanizawa, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, June 18-23, 2006.

Anterograde Mitochondrial Transport Is Promoted by FEZ1 in Neurites of NGF-differentiated PC12 cells, *J. Ikuta, A. Maturana, T. Fujita, K. Tanizawa, S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Improvement of In Vivo Pinpoint Drug Delivery System Using Bio-nanocapsules, *J. Jung, T. Yamada, A. Kondo, M. Seno, M. Ueda, K. Tanizawa, and S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Pinpoint Drug and Gene Delivery System Using ZZ tag-displaying Bio-nanocapsule and Targeting Molecule-fused IgG Fc Protein, *H. Tonoi, H. Tada, A. Ueda, A. Kondo, M. Seno, M. Ueda, K. Tanizawa, S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Hepatitis B Virus Envelope Pre-S Peptide Applicable for the Human Liver-specific Protein Delivering System, *T. Kasuya, A. Uyeda, K. Tanizawa, S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

ENH1 Scaffolds the PKC -PKD1 Signaling Complex at the Z-discs of Cardiomyocytes, *M. Ishida, A. Matsurara, M. Iwata, J. V. Lint, K. Tanizawa, S. Kuroda, 20th IUBMB International

Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Novel Functions of a Splice Variant of a RING-IBR Protein RBCK1 in Proteasomal Protein Degradation, *N. Yoshimoto, K. Tatematsu, K.Tanizawa, S. Kuroda, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006.

Pinpoint Drug and Gene Delivery System Using ZZ-displaying Bio-nanocapsule and Homing Peptide-fused IgG Fc Protein, *H. Tonoi, A. Ueda, T. Kasuya, K. Tatematsu, T. Okajima, K. Tanizawa, S. Kuroda, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Suita, Osaka, Japan, Sep. 19-20, 2006.

Involvement of a Putative Radical SAM Protein in the Posttranslational Formation of Intra-peptidyl Thioether Crosslinks in Quinohemoprotein Amine Dehydrogenase, *K. Ono, T. Okajima, M. Tani, S. Kuroda, D. Sun, V. L. Davidson, K. Tanizawa, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Suita, Osaka, Japan, Sep. 19-20, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

谷澤　克行	20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress（プログラム委員会委員・ヤングサイエンティストプログラム査読委員）
谷澤　克行	Federation of Asian and Oceanian Biochemists and Molecular Biologists（日本代表）

[国内学会]

日本農芸化学会	1 件
日本農芸化学会関西支部会	1 件
ビタミン B 研究委員会	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

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	9,200
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	10,920
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	1,200

[受託研究]

谷澤　克行	日本学術振興会	構造生物化学及び機能生物化学分野に関する学術動向の調査・研究	3,500
谷澤　克行	三菱電機株式会社（NEDO 基盤技術研究促進事業）	ゲノム研究成果産業利用のための細胞内シグナル網羅的解析技術	3,675

谷澤　克行	科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業（CREST）	医療に向けた化学・生物系分子を利用したバイオ素子・システムの創製：中空バイオナノ粒子を用いる遺伝子導入法の開発	1,300
谷澤　克行	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）	酵母由来中空バイオナノ粒子を用いる革新的超高感度バイオセンシング技術の開発	20,000
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	10,000

[その他の競争的研究資金]

谷澤　克行	ビタミン B 研究委員会	ビルトイン型キノン補酵素の生合成機構と触媒機能に関する研究	250

ナノシステム設計分野

客員教授　　大下　浄治　（平成 18 年 4 月 1 日～平成 18 年 6 月 30 日）

a） 概要

ケイ素を有機化合物の導入することで、発光特性や伝導物性が大きく変化することが知られている。このようなケイ素を有効に活用した有機発光デバイスおよび伝導デバイスの作成には、有機合成からデバイス作成までの幅広い検討が必要である。また、これらの発光および伝導物性ではピコ秒オーダーの素過程が重要であることから、高速分光による物性評価が機能発現において重要であるが、検討例は極めて少ない。

真嶋哲朗教授と共同で、オリゴチオフェンとオリゴシランの交互共重合体の発光をフェムト秒蛍光測定により測定し、鎖内でのエネルギー移動過程を支配する要素を明らかにした。

b） 成果

オリゴチオフェンとオリゴシランの交互共重合体の蛍光異方性解消測定を行った。蛍光異方性の解消は数ピコ秒のオーダーで起こることが明らかになり、この速度はオリゴチオフェン間のエネルギー移動速度に対応することを明らかにした。エネルギー移動速度はオリゴチオフェン部分の長さが増大するのに伴い遅くなることを見出し、理論式との比較より、エネルギー移動速度がホッピング距離によって支配されていることを明らかにした。さらに、より構造が明確なオリゴマーモデルにおいてもエネルギー移動速度を導出し、その構造との相関を明らかにした。以上の結果を The Journal of Physical Chemistry 誌に発表した。

[原著論文]

Singlet Energy Migration along an Alternating Block Copolymer of Oligothiophene and Oligosilylene in Solution, M. Fujitsuka, D. W. Cho, J. Ohshita, A. Kunai, and T. Majima, The Journal of Physical Chemistry B, 110 [25] (2006) 12446-12450.

Fluorescence Properties of Si-linked Oligothiophenes, M. Fujitsuka, D. W. Cho, J. Ohshita, A.Kunai, and T. Majima, The Journal of Physical Chemistry C, 111 [5] (2007) 1993-1998.

ナノシステム設計分野

客員助教授　　高橋　憲司　（平成 18 年 4 月 1 日～平成 18 年 6 月 30 日）

a） 概要

イオン液体は、すべてカチオンとアニオンからなる塩であり、室温において液体状態で存在し、新奇反応溶媒として期待されている。イオン液体は有機分子で構成され、化学構造の置換やアニオン種カチオン種の組み合わせにより、さまざまな分子設計、機能設計が可能である。電子線パルスラジオリシスにより、イオン液体中に電子ビームによって溶媒和電子を生成して過渡光吸収測定を行った。電子捕捉剤としてピレンを添加して、溶媒和電子の反応を研究した。イオン液体を構成するカチオン種を変えて溶媒和電子の特性を研究した。

b） 成果

・イオン液体中の溶媒和電子の反応特性

イオン液体 DEMMA-TFSI中に電子線で生成される溶媒和電子の反応をナノ秒パルスラジオリシスで調べた。電子捕捉剤としてピレンを添加した結果、溶媒和電子の減衰速度定数が増加し、ナノ秒時間分解能での初期収量が減少した。ピレン濃度に依存して溶媒和電子の減衰速度も増加した。イオン液体中での溶媒和電子の反応特性を解明し、また、溶媒和前電子とピレンとの反応を発見した。

・カチオン種効果

溶媒和電子構造を変化させるために、カチオン種の異なるイオン液体TMPA-TFSIについて溶媒和電子の過渡光吸収スペクトルを測定した。期待したような顕著なスペクトル変化は見られなかった。

［原著論文］

Kenji Takahashi, Shingo Sakai, Hiroaki Tezuka, and Yusuke Himejima, Yosuke Katsumura, Masayoshi Watanabe, Reaction between Diiodide Anion Radicals in Ionic Liquids, J. Phys. Chem. B, 10.1021/jp0671087, Published on Web 02/01/2007

Ryuzi Katoh, Yoichi Yoshida, Yousuke Katsumura, and Kenji Takahashi, Electron Photo detachment from Iodide in Ionic Liquids through Charge-Transfer-to-Solvent Band Excitation, J. Phys. Chem.B, 10.1021/jp067107e, Published on Web 01/11/2007

ナノシステム設計分野

客員教授　　垣内　史敏　（平成 18 年 7 月 1 日～平成 18 年 9 月 30 日）

a） 概要

一般に結合エネルギーが大きな結合は化学的に安定であるが、その活性化によって分子変換することができれば極めて有用である。遷移金属錯体を用いて、実用的な有機合成法となりうる新触媒反応の開発について検討した。

b） 成果

これまでに、隣接官能基のルテニウムへの配位を活用して、芳香族化合物の炭素−水素結合の切断を含む触媒反応を開発しているが、新たに炭素−酸素結合の切断を伴った新反応の開発に成功した。ルテニウム錯体と(*o*-アリールオキシ)ピバロフェノンを反応させると、酸化的付加反応によって炭素−酸素結合が切断し、(*o*-ピバロイルアリール) (アリールオキシ)ルテニウム錯体を与えた。この錯体を触媒に用いて、(*o*-アリールオキシ)ピバロフェノンとフェニルボロン酸エステルを作用させると、対応するアリール化生成物が得られた。NMR による反応追跡の結果、速度論的には炭素−水素結合の切断が有利であるが、熱力学的には炭素−酸素結合の切断が有利であることが分かった。ルテニウム触媒存在下、(*o*-メトキシ)アセトフェノンにビニルシランとフェニルボロン酸エステルを反応させた場合には、選択的な炭素−炭素結合の形成が起こることを見出した。

ナノシステム設計分野

客員教授　　干　強　（平成 18 年 7 月 1 日～平成 18 年 9 月 30 日）

a） 概要

電気製品の小型化・軽量化の流れはとどまることなく進展し続けている。その流れを支えているのがエレクトロニクス実装技術の進歩である。信頼性の高い小型電気製品を実現するためには、信頼性の高いマクロ接合部構造を構築する必要がある。構造設計の基礎となる材料力学(材料強度学)における従来の考え方は、大型構造物において現れる応力集中部分の寸法スケールに対応した解析・試験法を基礎としている。しかし、マイクロ接合部の大きさ自体が従来の材料力学で考えられてきた寸法スケールと同等かそれより小さく、有効な設計や評価を行うことが困難になってきている。その一例として、mm スケール以上の試験片を用いて測定した材料強度に関する情報をそのまま構造設計に利用することができないということが挙げられる。また、一方で製品開発期間の短縮化の要求も強く、短時間で的確な設計を行う必要もある。これらの様々な要求を満足させるためにはマイクロ構造設計や解析のための新しいコンセプトを確立が不可欠である。今回はそのコンセプトの中で中心的な位置を占める CAE (Computer Aided Engineering)を利用したマイクロ接合部の設計に焦点を当てた研究教育活動を行った。

b） 成果

鉛フリーはんだを用いたマイクロ接合部の有限要素法による解析を実施した。いくつかのマイクロ接合部構造に対して温度サイクル等の環境条件を付与した場合の変形・破壊挙動をシミュレートした結果は実験結果を有効な精度内で再現することができることがわかった。最初に与えられる設計コンセプトが不適切であると部分的な改善を加えたとしても高信頼性マイクロ接合部を実現することができないので、適切な設計コンセプトを見出す上で CAE は極めて強力なツールとなると考えられる。

ナノシステム設計分野

客員教授　　小口　多美夫　（平成 18 年 10 月 1 日～平成 18 年 12 月 31 日）

a） 概要

マルチフェロイック物質とは、物質中の電子のもつスピン、軌道、電荷（電気分極）に関する自由度の複数が同時に強的（もしくは反強的）な秩序を示す物質群を指す。多くの場合、これらの電子の自由度は同時に格子の自由度とも結合している。マルチフェロイック物質では、複数の秩序を有すること自身の興味に加えて、これらの秩序間に存在する交差項が新たな機能やデバイスに発展するものと期待されている。本研究では、第一原理計算に基づき、ペロフスカイト構造やガーネット構造を有する酸化物を対象系として、薄膜化で実現される歪みの効果による電気分極の発現の可能性について検討を進めた。

b） 成果

ペロフスカイト構造に関しては、強誘電体の $PbTiO_3$(PTO)および $Pb(ZrTi)O_3$(PZT)を取り上げ、格子定数比 c/a を変化させ正方晶歪みを加えることによって格子の不安定化と分極の発生を第一原理計算に基づき調べた。ガーネット構造に関しては、その典型酸化物として $Y_3Fe_5O_{12}$(YIG) を対象とし第一原理計算を実行し、Fe のスピン磁気モーメントによるフェリ磁性の発現を確認した。現在、YIG に対して正方晶歪みによる格子の不安定化に関する研究へと展開している。

ナノシステム設計分野

客員助教授　　川越　毅　（平成 18 年 10 月 1 日～平成 18 年 12 月 31 日）

a） 概要

次世代デバイスと目され脚光を浴びているスピントロニクスデバイスの心臓部は磁性薄膜の積層構造である。これらのデバイス特性を向上させるには、磁性薄膜の磁区構造や積層薄膜の界面構造の知見が不可欠となっている。スピン偏極走査型トンネル顕微鏡/走査型トンネル分光(SP-STM/STS)法は磁性薄膜の磁区構造をナノスケールで評価できる手法であるが、その多くは金属磁性薄膜に対して行われてきた。一方、ナノテクセンター量子マテリアルデバイス機能評価分野では希薄磁性半導体薄膜の評価を行っており、磁性半導体用いてスピントロニクスデバイスを作製する上でナノスケールでの磁気的評価が不可欠である。そこで、SP-STM を用いて希薄磁性半導体薄膜の磁気的性質をナノスケールで評価する手法の確立を目指している。

b） 成果

GaCrN などの遷移金属添加の希薄磁性半導体を SP-STM によりナノスケール評価する上で必要不可欠な要素技術について、議論と検討を行った。特に、強磁性探針の作製法、表面清浄化法、d*I*/d*V* 像観察法について詳細に検討した。

スピントロニクスおよび関連分野の研究者・大学院生を対象に、(1)各種磁気像観察法の比較、(2)SP-STM/STS の原理と測定法、(3)スピン偏極表面準位を利用した SP-STS による Cr(001)薄膜のナノ磁気構造評価実験結果、の内容で講義を行った。

ナノシステム設計分野

客員教授　　砂川　洵　（平成 19 年 1 月 1 日～平成 19 年 3 月 31 日）

a） 概要

多くの抗生物質の開発により 20 世紀末には微生物による感染症は克服されたとの見方もあったが、薬剤耐性菌の出現に伴う再興感染症、日和見感染症、新興感染症により重症・難治性疾患の増加が危惧されている。最も難治性感染症原因菌のひとつである緑膿菌を中心に最近の新知見・新技術を活用した抗感染症薬開発の手法を開拓する。

b） 成果

β-ラクタム系抗生物質に対する薬剤耐性機構の一つに β-ラクタマーゼによる加水分解がある。β-ラクタマーゼは 4 種に分類されるが、そのうち 3 種は活性中心にセリン残基を持つ。残り 1 種は、酵素中心に金属を有し、メタロ-β-ラクタマーゼと呼称され、特にこの酵素による薬剤耐性が大きな問題になっている。以上の背景から、特にメタロ-β-ラクタマーゼ阻害剤の開発を指向し、基本戦略の提案と分子設計を行った。

ナノシステム設計分野

客員助教授　　上羽　牧夫　（平成 19 年 1 月 1 日～平成 19 年 3 月 31 日）

a） 概要

液体や気体のような一様無秩序な状態から対称性の異なる秩序状態、結晶へどのように成長していくかを理解することは、ボトムアップによるナノスケールからデバイススケールの構造形成など、ナノテクノロジーの様々な場面で重要である。温度可変超高真空走査トンネル顕微鏡(STM)を用いたナノスケール構造の熱力学的現象やダイナミクスの実験結果を基に、ナノスケール構造の熱緩和のメカニズムと表面における原子移動のメカニズムを共同で解明する。

b） 成果

$SrTiO_3$(100)表面の一様無秩序な状態から、規則的にステップが配列した原子レベルで平坦な表面への熱緩和に関する実験結果について、理論的に解析し、シミュレーションによる再現を試み、現象の記述に成功した。成果は、学会や研究会で発表した。

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線の発生
- 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
- 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
- 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
助教授　　楊　金峰
特任助手　　近藤　孝文
大学院生　　竹谷　孝司、菅　晃一、黒田　洋一、武本　将、廣瀬　正佳、浅野　晃
学部学生　　田中　治輝、加嶋　宏章、井澤　晋也
事務補佐員　　寺下　美絵

a) 概要

阪大産研では、S-バンドレーザーフォトカソード RF 電子銃ライナックの研究開発を行い、低エミッタンスシングルバンチのフェムト秒電子ビームの発生を行っている。発生した極限短電子線パルスを用いてフェムト秒・アト秒という高時間分解能を持つパルスラジオリシスを開発し、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 18 年度には、パルスラジオリシスの時間分解能を向上するため、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が生じない等価速度分光法パルスラジオリシス測定システムの開発を行い、ライナックでのエネルギー変調と磁気パルス圧縮との組み合わせにより、等価速度分光法に最も重要である電子線パルス形状の制御と計測に成功した。サブフェムト秒・アト秒パルスラジオリシスの基礎研究として、同期ジッターをなくすことのできるダブルデッカー電子ビーム利用したパルスラジオリシスの測定システムを開発する共に、サブフェムト秒・アト秒電子パルスの発生方法をシミュレーションなどにより検討した。

b) 成果

・等価速度分光法フェムト秒パルスラジオリシスの研究

等価速度分光法フェムト秒パルスラジオリシスの測定システムは、フォトカソード RF 電子銃ライナックと分析用のフェムト秒レーザー、時間ジッター補正と電子バンチ波面の測定に用いるフェムト秒ストリークカメラから構成されている。光吸収の測定には、Si フォトダイオードを用いた。分析レーザー光をレーザー室から照射室内の照射位置まで約 50m輸送する必要がある。伝搬中、光強度の変動による測定の S/N の劣化を防止するために、AOM パルスセレクターを用いて、繰り返し 79.3MHz のフェムト秒レーザーパルスから数パルスを切り出し、ダブルパルス測定法を採用した。ダブルパルス法では、近接するパルスから参照光を取り出すため、ドリフト、振動、音波などの低周波数の光強度の変動を除去する事ができる。その結果、S/N 比が、従来のシングルパルス法の場合の 4.7%から 1.8%まで改善でき、微小な OD も測定可能となった。

本測定では、分析光レーザーのオシレーターは、クロックロックにより電子ビーム加速用の 2856MHz の RF を分周した 79.3MHz の RF の位相に同期されている。レーザーパルスと電子パルスの時間同期ジッターが 1ps 以内に抑えられたが、フェムト秒の時間分解能を実現するために、フェムト秒ストリークカメラを用いた時間ジッター補正システムを導入した。電子線パルスが発したチェレンコフ光とレーザーパルス光を同時に測定することにより、レーザーと電子線の同期ジッターによる時間分解能の劣化を 200 フェムト秒以下に抑えられることを確認した。

本年度は等価速度分光法に最も重要である電子パルス形状の制御技術と計測技術を開発した。サンプルの屈折率が n の時、サンプル中での光速は $v_l=c/n$ となり、サンプル中でもほぼ光速を保つ電子との間に速度差が生じる。この速度差が時間分解能劣化を生じ、これまでフェムト秒電子線パルスラジオリシスを不可能にしていた。等価速度分光法では、電子線と分析光を斜めに入射し、電子線の光方向速度成分がサンプル中での光速と等しくなるように配置する。その上で、電子パルスと光パルスが重なりなが

ら交差するように電子線パルスの形状を制御する（波面を回転させる）。電子パルスの回転角度が、交差領域での時間分解能劣化に反映される。このために、電子パルス形状を計測する技術と形状を制御（回転させる）技術が必要である。

電子パルス形状の制御は、電子加速の RF 位相と、2 台の偏向電磁石と 4 台の四極電磁石から構成された磁気パルス圧縮器での磁場分布の調整により行われた。電子パルス形状の評価は、フェムト秒ストリークカメラを用いて電子パルスから発するチェレンコフ光を測定することにより行われた。その結果、回転された電子パルスを利用することにより、水中での分析光と電子の速度差による時間分分解能劣化の問題が一気に解決できる。また、サンプルの長さに依存しないため、電荷量が低い電子ビームを用いても高い S/N を得ることができる。

・ダブルデッカー電子ビームパルスラジオリシスの研究

電子線パルスと分析光パルスの同期ジッターを無くすため、従来の分析レーザーを使わない、昨年度に発生したダブルデッカー電子ビームを利用したパルスラジオリシスの研究を行った。ダブルデッカー電子ビームは、フォトカソードへの入射レーザーを分岐して加速 RF 周期 350ps の整数倍の時間差をつけてカソードに入射させて電子を発生するため、原理的には同期ジッターが生じないという利点がある。

本年度は、ダブルデッカー電子ビームを用いたパルスラジオリシスに最も重要である電子線パルスから分析光パルスの発生を研究した。そこで、空気中よりも 1000 倍程強力な分析光を得るために、チェレンコフラジエータを設計した。チェレンコフラジエータを作成し、石英中でのチェレンコフ放射による分析光パルスの発生実験を行った。チェレンコフラジエータで発生した分析光は、光学遅延とウェッジを通って斜めにサンプルに入射し、フォトマルで測定した。加えて、チェレンコフ放射より光発散角度が小さく、光パルス発生が境界面で起きるためにパルス幅の伸長がほとんど生じない Optical Transition Radiation（OTR 光）についても検討した。Al 蒸着ミラーによる OTR 光の発生実験も行った。両者とも、パルスラジオリシスのために、非常に強い分析光が得られた。

・サブフェムト秒・アト秒電子パルス発生の研究

サブフェムト秒・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、ライナックでの電子パルスの非線形エネルギー変調による磁気パルス圧縮中高次効果の補正法を考案し、サブフェムト秒・アト秒電子線パルスの発生研究を行った。特に、磁気パルス圧縮器における 2 次と 3 次の効果は、フェムト秒・アト秒電子線パルスの生成には極めて問題となり、補正する必要がある。

これを解決するために、我々はライナックでの電子パルスの非線形エネルギー変調による磁気パルス圧縮器中の 2 次効果の補正方法を考案した。シミュレーションにより、電荷量が 0.1nC のときフォトカソード RF 電子銃ライナックにおいて最短で 78fs の電子パルスが発生できることが分かった。空間電荷効果を低減するために電荷量を減らした結果、1 フェムトクーロンまで減らすと、最短で、640 アト秒の電子線パルスが発生できることが分かった。

[原著論文]

Femtosecond Single Electron Bunch Generation by Rotating Longitudinal Bunch Phase Space in Magnetic Field, J. Yang, T. Kondoh, K. Kan, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa: Nucl. Instrum. Meth., A 556 (2006), 52-56.

Pulse Radiolysis based on a Femtosecond Electron Beam and a Femtosecond Laser Light with Double-pulse Injection Technique, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 75 (2006), 1034-1040.

Double-decker Femtosecond Electron Beam Accelerator for Pulse Radiolysis, J. Yang, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida: Rev. Sci. Instrum., 77 (2006), 043302.

Femtosecond Single-bunch Electron Linear Accelerator Based on a Photocathode RF Gun, J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida: Proceedings of EPAC 2006, Edinburgh, Scotland, 2514-2516, 2006.

Equivalent Velocity Spectroscopy Based on Femtosecond Electron Beam Accelerator, S. Takemoto, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida: Proceedings of EPAC 2006, Edinburgh, Scotland, (2006), 2511-2513.

Higher-order Effect Compensation in Magnetic Compressor for < 50 fs Electron Bunch Generation, K. Kan, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida: Proceedings of EPAC 2006, Edinburgh, Scotland, (2006), 2502-2504.

Development of Double-decker Electron Beam Accelerator for Femto/attosecond Pulse Radiolysis, Y. Kuroda, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida: Proceedings of EPAC 2006, Edinburgh, Scotland, (2006), 2505-2507.

Electron Beam Pulse Processing toward the Intensity Modified Radiation Therapy (IMRT), T. Kondoh, S. Tagawa, J. Yang, Y. Yoshida: Proceedings of EPAC 2006, Edinburgh, Scotland, (2006), 2334-2336.

［ 国際会議 ］

Generation of　Femtosecond Electron Beam for Ultrafast Reaction Analysis in Nanospace, J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, A. Yoshida, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka Univ, Jan.30-Feb.1, 2006.

Generation of 98-Femtosecond Single Electron Bunch in Photocathode Linear Accelerator, *Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

Generation of a Gradation Electron Beam Pulse Toward the Intensity Modified Radiation Therapy (IMRT), T. Kondoh, J. Yang, Akira Yoshida, Tamotsu Yamamoto, Y. Yoshida and S. Tagawa, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

Study of Beam Dynamics in photocathode RF Linac and Magnetic Bunch Compressor for Femtosecond Electron Bunch Generation, K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

100-femtosecond Electron Beam Generation and Ultrafast Reaction Analysis in Nano-space, J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, A. Yoshida, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

A New Picosecond Pulse Radiolysis based on a Photocathode Linear Accelerator, A. Asano, J. Yang. T. Kondoh, A. Yoshida and Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

A Concept of Double-decker Electron Beam Accelerator for Att/femtosecond Reaction Analysis, Y. Kuroda, J. Yang, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

3D-Measurement for Short Electron Bunch, A. Yoshida, Yang J., T. Kondoh, Y. Yoshida, Atsushi Ogata, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

Electron Beam Pulse Processing toward the Intensity Modified Radiation Therapy (IMRT), T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida and S. Tagawa, Proceedings of the 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006.

Higher-order Effect Compensation in Magnetic Compressor for <50fs Electron Bunch, K. Kan, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, Proceedings of the 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006.

Development of Double-decker Electron Beam Accelerator for Femto/attosecond Pulse Radiolysis, Y. Kuroda, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, Proceedings of the 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006.

Equivalent Velocity Spectroscopy Based on Femtosecond Electron Beam Accelerator, S. Takemoto, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, Proceedings of the 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006.

Femtosecond Single-bunch Electron Linear Accelerator Based on a Photocathode RF Gun, J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, Proceedings of the 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006.

High-brightness Electron Source based on Photocathode RF Gun in Osaka Univ., *J. Yang, Agenda for 7th Beam Physics Seminar in Pusan (JSPS Core University Program), Pusan National University, Korea, Sep. 13, 2006.

1 mm-mrad Electron Beam at 1 nC, *J. Yang, Agenda for 7th Beam Physics Seminar in Pusan (JSPS Core University Program), Pusan National University, Korea, Sep. 13, 2006.

Spatial Modulation of Electron Beam for IMRT, T. Kondoh, J. Yang, Tamotsu Yamamoto, Y. Yoshida and S. Tagawa, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka Univ., Sep. 19-20, 2006.

Ultrashort Electron Beam for Reaction Analysis in Nanofabrication, J. Yang, Koichi Kan, Y. Kuroda, T. Kondoh and Y. Yoshida, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka Univ., Sep. 19-20, 2006.

Femtosecond Pulse Radiolysis based on Photocathode Electron Accelerator, *Y. Yoshida, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, S. Tagawa, The 1st ASIAN-PACIFIC SYMPOSIUM ON RADIATION CHEMISTRY, Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006.

Pulse Radiolysis Study on Solvated Electrons in Ionic Liquid with Controlling Water Content, J. Yang, R. Nagaishi, T. Kondoh, Y. Yoshida, The 1st ASIAN-PACIFIC SYMPOSIUM ON RADIATION CHEMISTRY, Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006.

Processing of Incident Light by the DMD for the Photocathode RF Gun, T. Kondoh, Hiroaki Kashima, J. Yang, Tamotsu Yamamoto, Y. Yoshida, S. Tagawa, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Collective Ionization by Attosecond Electron Bunches, A. Ogata, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Simulation Study on Sub-femtosecond Electron Bunch Generation, K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Femtosecond Electron Beam and Femtosecond Pulse Radiolysis for Reaction Analysis in Nano-space, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006.

[国内学会]

先端放射線化学シンポジウム	2 件
日本放射線化学会	6 件
日本加速器学会	5 件
日本原子力学会	2 件
日本化学会	1 件
高周波電子銃研究会	2 件
第 1 回高崎量子応用研究シンポジウム	1 件

[取得学位]

修士（工学）

黒田　洋一	ダブルデッカー電子ビーム加速器の開発とアト秒パルスラジオリシスの研究
武本　将	フェムト秒パルスラジオリシスのための等価速度分光システムの開発

[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・アト秒電子線励起時間分解吸収分光法の基礎研究	29,800
基盤研究（C）		
楊金峰	高速重イオンビーム励起時間分解吸収分光法の基礎研究	1,800

[共同研究]

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	東	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	高	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	高	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
東京大学		高輝度高速応答金属酸化物電子ビームモニターの開発

ナノ量子ビーム開発分野

教授（兼任）　磯山　悟朗
助教授　誉田　義英
助手　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

・S バンドライナックの立ち上げ

S バンドライナックには現在２種類あるが、本研究室における陽電子に関連する実験では、従来からの 3 本の加速管を使用する、代表的電子エネルギーが 100 MeV の電子ライナックを主として利用している。前年度は直流電源に関するトラブルの原因が電圧制御系のフィードバック回路に乗るノイズが原因であることがわかったため、接地系の配線のし直し、電源内ノイズ除去フィルターの改良や時定数の変更などを行ったが、依然として長時間安定に運転することはできなかった。今年度も引き続き接地系の取り回しやケーブルの交換等を行ったが、長時間安定に運転を行うことができなかった。そこで、矩形パルス形成回路およびサイラトロンの放電回路を含むモジュレーター筐体を更新することにした。来年度は新たな筐体を用いて安定な連続運転を目指す。

・陽電子回折実験系の整備

陽電子回折実験を行うためには高輝度陽電子ビームが必要となる。高輝度化とは陽電子が物質(リモデレーター)から再放出される際、放出角度の拡がりが小さいことを利用してビームのエミッタンスを低減させ、結果的に輝度（∝ビーム強度／エミッタンス）を向上させる方法である。以前行った陽電子ビームの高輝度化実験では、リモデレーター上でのビーム径が大きかったために、輸送効率が悪化し、回折実験を行なうまでには至らなかった。本年度も小型モデレーターを用いた高輝度化実験を行い、反射高エネルギー陽電子回折実験を行う予定であったが、ライナックのトラブルにより実験を行うには至っていない。しかし、本年度は新たにリモデレータの搬送部や陽電子回折実験用のステージ等を購入し、ライナックが復調し次第実験を行えるよう準備を行った。

・陽電子を用いた固体高分子形燃料電池の劣化解析

Ｘ線の小角散乱や中性子散乱法などを用いてプロトン伝導に関係する構造変化を調べるためには、例えば逆ミセル構造から成るようなある程度周期構造を持つことが要求される。従って、このような計測手法で構造がわかる材料は限られる。過熱による構造変化は示差走査熱量測定（DSC）を用いても調べることができるが、その変化は常用温度に比べかなり高温であらわれる。これに対し陽電子消滅法は、固体高分子形電解質膜（PEM）のプロトン伝導率が影響を受けるであろうナノスケールの空間サイズや

電子状態を、常温で調べることができるという利点を持っている。これまでの陽電子を用いた電解質膜の研究では、関心が自由体積空孔と呼ばれるナノスケールの孔の平均径の評価にあり、この情報と具体的なイオン交換能力やプロトン伝導率との相関についてはほとんど調べられてきていない。本研究では特に PEM の熱劣化の様子を陽電子寿命と消滅γ線エネルギー同時測定法（AMOC 法）を用いて調べた。本研究ではデュポンで開発された Nafion-117 をパーフルオロスルホン酸膜として使用した。

陽電子寿命測定と消滅γ線ドップラー拡がり測定、及び AMOC 法を用いて、熱処理の有無により現れる PFSA における変化を調べた結果、熱負荷を与えることで陽電子寿命に変化は見られたが、*o*-Ps の寿命から算出される孔の平均径の差は 0.01 nm とその変化はわずかであった。しかし、S パラメータはサンプル間で異なり、熱処理を行なった試料の方が大きくなった。これは熱処理した試料ではより低エネルギー電子の数が増大したことを示している。AMOC 測定の結果 S パラメータは時間と共に単調に減少していたが、*o*-Ps に対応する S パラメータの成分において、増加は見られなかった。このことは *o*-Ps のピックオフ消滅する環境は熱処理の影響を受けないことを示している。これに対し、陽電子の自由消滅に対応する S パラメータは熱処理により増大した。これはおそらく熱ラジカルに関連した低エネルギー電子の増加を示唆している。交流インピーダンス法を用いてプロトン伝導率を調べた結果、熱処理をした試料では低下していることがわかった。熱処理した後含水させた場合でも、プロトン伝導率は元に戻らなかったことから、官能基近傍での化学的構造が不可逆的に変化したと考えられる。

・陽電子寿命測定法による解離型電子捕捉反応の研究

一電子付加によるハロゲン化アルキルの炭素―ハロゲン（C-X）結合の還元的解離は解離型電子移動反応の一番簡単な反応系である。このような還元的解離反応は電子線レジスト材料中でも起こり、機構的解明が重要である。近年、この反応の反応動力学が理論計算によって求められ、反応が極短時間（10^{-13} s）に完結することが報告されている。しかし、このような極短時間の実時計測は現段階では非常に難しい。

近年、陽電子寿命測定法が高分子材料中のナノ空孔の測定に利用されている。ポジトロンを物質中に照射すると、電子線照射の場合と同様にイオン化が起こり、電子と陽イオンを生成する。熱化したポジトロンがこの二次電子を捕捉することによってポジトロニウム（Ps）生成する。この Ps の生成過程は、電子と陽イオンの再結合やハロゲン化アルキルによる電子捕捉反応と競争的に起こる。本研究では Ps の生成時間が数ピコ秒（10^{-12} s）であることから、再結合や電子捕捉反応と競争的に起こる Ps の生成量を測定することによって、二次電子の電子捕捉剤に対する反応性を調べることを目的としている。

[原著論文]

陽電子消滅寿命測定法および熱分析を用いた生体高分子ゲルの膨潤過程の解析,三町博子, 秋山庸子, 武田真一, 泉佳伸, 誉田義英, 西嶋茂宏, RADIOISOTOPES **55**(2006)525-531.

[著書]

「放射線化学のすすめ（分筆）」（日本放射線化学会編）、誉田義英、学会出版センター, (2006) 169-171.

[国際会議]

Study on Polymer Electrolyte Membrane for Fuel Cell by Using AMOC Technique, *Y. Honda, Y. Shibahara, Y. Akiyama, N. Kimura, G. Isoyama, S. Tagawa, S. Takeda, Y. Izumi, S. Nishijima, 14th International Conference on Positron Annihilation, Hamilton, Canada, July 23-28, 2006.

The Investigation of Swollen Process in Gelatin Gel by Using Positron Annihilation Spectroscopy, *Y. Akiyama, Y. Shibahara, S. Takeda, Y. Izumi, S. Nishijima, Y. Honda, 14th International Conference on Positron Annihilation, Hamilton, Canada, July 23-28, 2006.

Study on Polymer Electrolyte Membrane by using Positron Annihilation Spectroscopy, *Y. Honda, Y. Shibahara, Y. Akiyama, N. Kimura, G. Isoyama, S. Tagawa, S. Takeda, Y. Izumi, S. Nishijima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Tightness of Hydrogen Bonding in Polymers Studied by Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy, *N. Kimura, Y. Honda, G. Isoyama, S. Tagawa, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Structure Analysys of Polymer Electrolyte Membrane for Fuel Cell Using Positron Annihilation Spectroscopy
Y. Akiyama, Y. Shibahara, N. Kimura, S. Tagawa, S. Takeda, Y. Izumi, Y. Honda, S. Nishijima
5th 21th Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” Internal Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Preparation of Polymer Nanogel Using Quantum-ray and Its Swelling-shrinking Process, *H. Miyauchi, Y. Akiyama, Y. Shibahara, S. Takeda, Y. Izumi, Y. Honda, S. Nishijima, 5th 21th Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” Internal Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Study of Structural Analysis of Macrocyclic Polyethers Using Positron Annihilation Measurements, *Y. Shibahara, Y. Akiyama, S. Takeda, Y. Izumi, Y. Honda, S. Nishijima, 5th 21th Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” Internal Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Nano-structural Analysis of Biopolymer Gels Using Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy, *Y. Honda, Y. Akiyama, Y. Shibahara, N. Kimura, S. Tagawa, S. Takeda, Y. Izumi, S. Nishijima, 5th 21th Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” Internal Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

［ **国内学会** ］

リニアック技術研究会	1 件
日本原子力学会	1 件
アイソトープ・放射線研究発表会	1 件

ナノビームプロセス分野

教授（兼任）　田川　精一
助教授　古澤　孝弘

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、生成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。

・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、微細加工材料の限界解像度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くてはならない。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と PAG のナノ分布を調べることを目的とし、X 線反射率測定による測定を行った。

[原著論文]

Pulse Radiolysis of Polystyrene in Cyclohexane – Effect of Carbon Tetrachloride on Kinetic Dynamics of Dimer Radical Cation−, K. Okamoto, T. Kozawa, M. Miki, Y. Yoshida and S. Tagawa: Chem. Phys. Lett., 426 (2006) 306-10.

Resolution Blur of Latent Acid Image and Acid Generation Efficiency of Chemically Amplified Resists for Electron Beam Lithography, T. Kozawa and S. Tagawa: J. Appl. Phys., 99 (2006) 054509-.

Effects of Low Energy Electrons on Pattern Formation in Chemically Amplified Resist, T. Kozawa, H. Yamamoto, A. Saeki and S. Tagawa: J. Photopolym. Sci .Technol., 19 (2006) 361-6.

Reaction Mechanism of Fluorinated Chemichally Amplified Resists, H. Yamamoto, T. Kozawa, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Ando, M. Sato and H. Komano: J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 1833-6.

Acid Generation Efficiency in a Model System of Chemically Amplified Extreme Ultraviolet Resist, T. Kozawa, S. Tagawa, H. Oizumi and I. Nishiyama: J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) L27-L30.

Analysis of Acid Yield Generated in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Kozawa, T. Shigaki, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa: J. Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 3055-60.

Correlation between Proton Dynamics and Line Edge Roughness in Chemically Amplified Resist for Post-optical Lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa and H. B. Cao: Vac. Sci. Technol. B, 24 (2006) 3066-72.

Reactivity of Acid Generators for Chemically Amplified Resists with Low-Energy Electrons, A. Nakano, T. Kozawa, S. Tagawa, T. Szreder, J. F. Wishart, T. Kai and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L197-L200.

Acid Generation Mechanism of Poly(4-hydroxystyrene)-Based Chemically Amplified Resists for Post-Optical Lithography: Acid Yield and Deprotonation Behavior of Poly(4-hydroxystyrene) and Poly(4-methoxystyrene), A. Nakano, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 6866-71.

Protonation Sites in chemically Amplified Resists for Electron-Beam Lithography, K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto and S. Tagawa: Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) L1256-L1258.

Relationship between Acid Generator Concentration and Acid Yield in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozawa, H. Yamamoto, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozawa, H. Yamamoto, S. Tagawa, T. Kai and T. Shimokawa: Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 5735-7.

Dependence of Acid Yield on Resist Thickness in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozama, H. Yamamoto and S. Tagawa: Jpn. J. Appl. Phys., 45 (2006) 5445-9.

Correlation between Width Roughness of Nanowires and Backbone Conformation of Polymer Materials, S. Seki, S. Tsukuda, S. Tagawa, and M. Sugimoto: Macromolecules7446-7450, 39, 2006.
Line edge roughness of a latent image in post-optical lithography, A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa and H. B. Cao: Nanotechnology, 17 (2006) 1543-6.

Picosecond Pulse Radiolysis Using Femtosecond White Light with a High S/N Spectrum Acquisition System in One Beam Shot, A. Saeki, T. Kozawa and S. Tagawa: Nucl. Instrum. Meth. A, 556 (2006) 391-6.

Femtosecond Single Electron Bunch Generation by Rotating Longitudinal Bunch Phase Space in Magnetic Field, J. Yang, T. Kondoh, K. Kan, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, Nucl. Instrum. Meth. A, 556 (2006) 52-6.

Pulse Radiolysis Based on a Femtosecond Electron Beam and a Femtosecond Laser Light with Double-pulse Injection Technique, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa: Radiat. Phys. Chem., 75 (2006) 1034-40.

[著書]

「放射線化学のすすめ」(日本放射線化学会編集)、古澤 孝弘、学会出版センター、(2006) 52-4.
「放射線化学のすすめ」(日本放射線化学会編集)、古澤 孝弘、学会出版センター、(2006) 64-5.

[国際会議]

Analysis of Acid Yield Generated in Chemically Amplified Electron Beam Resist, *T. Kozawa, T. Shigaki, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai, T. Shimokawa, Baltimore, 50thEIPBN (Oral), New York, USA, May 30-Jun 2, 2006.

Line Edge Roughness in Chemically Amplified Resist of Electron Beam Lithography, *A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, 50thEIPBN, New York, USA, May 5-Jun 2, 2006.

Formation of Aggregated Radical Cations of Benzene and Polystyrene in Condense Phases, *K. Okamoto, S. Seki, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, Gorden Research Conference (Radiation Chemistry), Colby College, ME, USA, Jul 2-8, 2006.

Pico/subpicosecond Pulse Radiolysis and Research on Nanolithography by EB/EUV, *A. Saeki, T. Kozawa, S. Tagawa, Gorden Research Conference (Radiation Chemistry), Colby College, ME, USA, Jul2-8, 2006.

Polymer Structure Dependence of Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists, *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, Hai Deng, M. J. Leeson, Barcelona, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct 16-20, 2006.

Acid Generation in Chemically Amplified EUV Resists, *T. Kozawa, S. Tagawa, H. Oizumi, I. Nishiyama, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct 16-20, 2006.

Exposure Dose Dependence on LER of Latent Image in EB/EUV Lithographies Studied by Monte Carlo Technique, *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, H. B. Cao, Hai Deng, M. J. Leeson, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct 16-20, 2006.

Critical Issues of EUV Resists and New Research Approach, *S. Tagawa, T. Kozawa, A. Saeki, EUVL Symposium, Barcelona, Spain, Oct 16-20, 2006.

Effect of Acid Diffusion and Polymer Structure on Line Edge Roughness, *H. Yamamoto, T. Kozawa, A. Saeki, K. Okamoto, S. Tagawa, K. Ohmori, M. Sato, H. Komano, Microprocess and Nanotechnology Conference, Kamakura, Japan, Oct 25-27, 2006.

Proton Dynamics and Amines in Chemically Amplified Resist, *K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, S. Tagawa, Microprocess and Nanotechnology Conference, Kamakura, Japan, Oct 25-27, 2006.

Single-Component Chemically Amplified Resist Based on Dehalogenation of Polymer, SPIE, *H. Yamamoto, T. Kozawa, S. Tagawa, K. Ohmori, M. Sato, H. Komano, SPIE, San Jose, CA, USA, Feb 25-Mar 2, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

古澤　孝弘　　20th Microprocess and Nanotechnology Conference（論文委員）

[国内学会]

日本放射線化学会	5 件
応用物理学会	2 件
日本原子力学会	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

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－ナノスケール量子ビーム利用の新展開－	25,610
若手研究(B)(2) 古澤　孝弘	フェムト秒パルスラジオリシスによる極限ナノビームプロセスの創生	1,100

[受託研究]

田川　精一	原子力安全基盤調査研究	放射線化学の最先端の研究を基盤とした安心安全の確保のための目に見える線量計材料の開発	11,765
田川　精一	技術研究組合超先端電子技術開発機構 (ASET)	化学増幅レジストの反応機構の研究	999
田川　精一	（株）三菱瓦斯化学	ArF フォトレジストに関する基礎研究	750
田川　精一	半導体先端テクノロジーズ(Selete)	EUV レジストに関する研究	1,680
田川　精一	Intel Corp.	化学増幅 EUV レジスト中で生成される酸のナノスケール分布形状	12,000

超高速ナノ構造分野

客員教授　　Ulrich Hofer　（平成 18 年 4 月 10 日～平成 18 年 5 月 30 日）

a） 概要

フェムト秒時間領域の超高速表面原子プロセスを、レーザー非線形分光、2 光子光電子分光によって研究した。特に、金属表面上の種々の原子のレーザー誘起拡散、脱離現象を、光学的手法を用いて実時間追跡する。

b） 成果

1)　Si(111)-(7x7)表面の adatom のダングリングボンドに由来する表面状態における超高速なキャリヤー緩和過程を、2 光子光電子分光と表面第二高調波発生の手法を併用して研究した。

2）非線形分光と走査型トンネル顕微鏡を併用し、Si 表面における水素分子の解離吸着過程を体系的に研究した。

3）表面第二高調波発生の手法を駆使して、金属表面における吸着酸素分子のレーザー誘起拡散過程を、フェムト秒時間領域の実時間分解によって研究した。

超高速ナノ構造分野

客員教授　　Hou Xue-Long　（平成 18 年 7 月 26 日～平成 18 年 8 月 25 日）

a） 概要

高効率且つ高選択的に望みの化合物を合成することが可能な有機合成反応は、環境リスクの低減や省資源の観点から極めて重要である。金属触媒或いは有機反応剤それぞれに特有の反応性を引き出した新反応の開発について検討した。

b） 成果

ベンジルトリメチルシランはフッ化物イオンによって活性化され、種々のイミンへの付加反応が進行して対応するベンジルアミン誘導体が得られることを見出した。*N*-スルフィニルイミンを基質に用いた場合には、ジアステレオ選択的に付加生成物を与えた。また、塩基存在下、*N*-スルフィニルアルジミンに末端アセチレンを作用させると、高収率かつ高ジアステレオ選択的に *N*-スルフィニルプロパルギルアミンが得られた。さらに、不斉 *P,N*-フェロセン配位子と銅塩を組み合わせた触媒がイミノエステルへのニトロアルケンの不斉 1,3-双極子付加反応に極めて有効であることを見出した。本反応では、エンド体或いはエキソ体のピロリジン誘導体を高収率且つ高エナンチオ選択的に合成することができた。

超高速ナノ構造分野

客員教授　　James M. Howe　（平成 18 年 8 月 29 日～平成 18 年 9 月 29 日）

a） 概要

特に原子結合様式が強く関与する材料物性においては、プラズモン・ロス・スペクトルにより、その物性の様子を調べることが可能である。本研究では、アモルファス材料を構造材として用いる際に重要な機械的物性である延性に関し、電子線エネルギー損失スペククトル（EELS）を用いた解析法についての検討を行なった。

b） 成果

延性は剛性率と体積弾性率の比に関係があり、体積弾性率は EELS スペクトルのプラズモンロスから求められることから、産業科学研究所に設置されているエネルギーフィルター電顕を利用し、数種類の金属ガラスについての電子線エネルギー損失スペククトルを得ることにより、プラズモン・ロス・ピークエネルギー値の差異と延性の差異との関連性について調べた。今回の実験により得られた各種金属ガラスのプラズモン・ロス・ピークエネルギー値と既存の剛性率データを組み合わせることにより、金属ガラスの延性に関する議論を行なった。

超高速ナノ構造分野

客員教授　　Jacqueline Bourdeau　（平成 19 年 1 月 4 日～平成 19 年 3 月 31 日）

a） 概要

オントロジー工学を用いた授業設計理論、教授理論の組織化を目的として研究を進めた。まず、二種類の理論をサーベイしていくつかの視点で分類しつつ、オントロジー的分類階層を構築した。そして、理論の検索とその説明生成を念頭に置いて種々の属性記述を行った。成果は開発中のオントロジーaware オーサリング環境 SMARTIES に組み込んだ。

b） 成果

主な成果は以下の通りである。

・学習理論、教授理論、授業設計理論オントロジーOMNIBUS の公開
・授業設計理論、教授理論のオントロジーの構築
・SMARTIES が持つ説明生成機能の洗練

[国際会議]

Ontological Support for a Theory-Eclectic Approach to Instructional and Learning Design (Oral)(Plenary), *Y. Hayashi, J. Bourdeau and R. Mizoguchi, First European Conference on Technology Enhanced Learning, EC-TEL2006, Crete, Greece, Oct. 1-4, 2006.

Ontological Modeling Approach to Blending Theories for Instructional and Learning Design (Oral)(Plenary), *Y. Hayashi, J. Bourdeau and R. Mizoguchi. The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006), Beijing, China, Nov.30-Dec. 4, 2006.(Best Paper Award)

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、ナノバイオ知的システム技術、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頂きたい。

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開発
- 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
- BCN フラーレン物質の高分解能電子顕微鏡評価
- リン酸カルシウム-AMP 複合体の生体材料への応用
- オントロジー工学に基づくナノテク材料機能および製造プロセス知識共有枠組みの開発
- 機能製造プロセス知識共有枠組みに基づく材料設計支援システムの開発
- ナノ粒子およびナノ薄膜の材料設計知識の構造化と計算機への格納
- ユーザの使用実験を通した材料設計支援システムの有用性検証
- 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開発
- 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 MACHIKANEYAMA への実装
- SiO_2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
- 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
- Si中のCu不純物のゲッタリングのデザイン
- Si中の水素不純物のミクロな挙動

環境調和ナノマテリアル分野

教授	菅沼　克昭
助教授	奥　健夫
助手	山口　俊郎、井上　雅博
博士研究員	蒋　君祥、金　道燮、多田　泰徳、金　善植、酒　金婷
技術補佐員	畑村　眞理子、樋口　博雄　加賀美　宗子
事務補佐員	井手　こずえ、松下　美佐
大学院学生	李　在彦、金野　元紀、中川　登志子、山中　公博、隈元　聖史、出田　吾郎 河染　満、蔵本　雅史、斎藤　俊 和久田　大介、寄門　雄飛、Alongheng

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，BCN フラーレン物質の合成と構造研究，或いは生体親和性の高い人工骨形成などを通し，産業界へ積極的な寄与を行っている。

b）成果

・環境調和型エレクトロニクス実装技術の基礎技術確立と推進

環境調和型超高密度化が強く望まれている。このための要素技術としてエレクトロニクス実装における鉛フリー化を目差し研究を行っている。鉛フリーはんだ特有の凝固欠陥形成メカニズムを解明し，凝固シミュレーションとその場観察手法を確立し、更にこれらを CSP などの微細接続における凝固欠陥の抑制方法を提案した。低温はんだとして重要な Sn-Zn 系合金の高湿度下での劣化挙動を解明し、さらに合金化による劣化抑制方法を提案した。高温鉛フリーはんだとして Zn-Sn を設計し、優れた特性を証明した。更に、ナノ粒子ペーストや導電性接着剤接続技術の界面現象のナノレベル解明と、インクジェットやオフセットなどの印刷技術のマッチングを図り、新たな Printed Electronics 技術分野を切り開いている。

・ナノ構造創成及び超高分解能電子顕微鏡による原子直視構造解析

BN/C フラーレン物質の新規合成・評価及び HREM による極微小領域原子配列評価法の確立を目的としている。新規 BN/C クラスター創成、遷移元素による BN/C ナノチューブ合成、B_{12} 系高次ボライド構造解析、超伝導酸化物構造解析等により、新規ナノ構造の創成・構造解析・分子軌道法による構造最適化・電子状態計算・STM による電気特性評価等を行い、新規ナノ構造の将来可能性を提案した。

・バイオミメティックなアプローチによる人工関節の開発

培養軟骨の移植治療では、軟骨欠損部に培養軟骨を移植し、骨膜で固定している。この方法では十分に固定できないので、培養軟骨に骨接合部（多孔質アパタイト）を組み込んだ人工関節のモデル（軟骨細胞・コラーゲンゲル／多孔質アパタイト）を作製し、固定化を試みた。骨接合部に細胞増殖因子を包埋することで、石灰化が促進され、軟骨下骨類似構造に変化し、培養軟骨と骨接合部の強固な固定を達成した。

・バイオアクティブな骨セメントの開発

骨セメントに要求されている主な特性は、次の 4 点である。１)生体適合性、２)骨セメントの強度、３)骨セメントの硬化時間の短縮、4)骨吸収性である。リン酸カルシウム系セメントの複合化により、骨吸収性をもつリン酸カルシウムナノコンポジット系骨セメントの開発を行った。また、自己修復機能をもつナノコンポジットーPMMA 系骨セメントの開発を行っている。

・金属および金属間化合物材料表面の高機能化に関する研究

種々のプロセスにより金属および金属間化合物系材料の表面改質を行うことにより触媒機能，生体適合性，耐環境性などの機能を付与し，高機能性表面の創成を目指している。

1) ゾルーゲル電着法による機能性セラミックス薄膜の作製
2) 活性プラズマプロセスによる傾斜機能性セラミックス層の直接形成
3) 導電フィラー表面改質

[原著論文]

Synthesis of Co Nanocapsules Coated with BN Layers by Annealing of KBH_4 and $[Co(NH_3)_6]Cl_3$, I. Narita, T. Oku, H. Tokoro and K. Suganuma, Solid State Comm., **137**(2006), 44-48.

Simultaneous Measurements of Conductivity and Magnetism by Using Microprobes and Electron holography, Y. Murakami, N. Kawamoto, D. Shindo, I. Ishikawa, S. Deguchi, K. Yamazaki, M. Inoue, Y. Kondo and K. Suganuma, Appl. Phys. Lett. 88, 223103 (2006).

Effect of Curing Conditions on the Electrical Properties of Isotropic Conductive Adhesives Composed of an Epoxy-Based Binder, M. Inoue and K. Suganuma, Soldering & Surface Mount Technology, **18**[2](2006), 40-45.

Synthesis and Structures of Iron Nanoparticles Coated with Boron Nitride Nanomaterials, I. Narita, T. Oku, H. Tokoro and K. Suganuma, J. Electron Microscopy 55[3] (2006), 123–127.

New Glass Sealing Method with Lead-free Solders, K. Sakaguchi, S. Domi, and K. Suganuma Advances in Science and Technology, 45 (2006), 1604-1607.

Synthesis and Characterization of Calcium Phosphate-AMP Layered Materials, M. Kaneno, K. Sakamoto, S. Yamaguchi and K. Suganuma, Key Engineering Materials, 317-318(2006), 769-772.

Formation of Hydroxyapatite from Mechnochemically Treated b-Tricalcium Bis(orthophosphate), M. Kaneno, K. Sakamoto, S. Yamaguchi and K. Suganuma, Key Engineering Materials, 317-318(2006), 781-784.

Development of an Electrophoretic Sol-Gel Coating Process for Porous Metals M. Inoue, S.-K. Hyun, K. Suganuma, H. Nakajima, Mater. Trans., 47 [9], (2006) 2161-2166.

Formation of Ceramic Coatings on Porous Metals by Electrophoretic Sol-Gel Deposition, M. Inoue, S.-K. Hyun, K. Suganuma, H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology (Proc. of MetFoam 2005, Japan Inst. Metals), ed. by H. Nakajima and N. Kanetake, 655-658 (2006)

Influential Factor in Determining the Thermal Conductivity of Isotropic Conductive Adhesives, M. Inoue, H. Muta, T.Maekawa, S.Yamanaka and K. Suganuma, Proc. EcoDesign 2006 Asia-Pacific Conference, pp.87-92 (2006).

Role of Acidic Amino Acid for Regulating Hydroxyapatite Crystal Growth, T. Matsumoto, M. Okazaki, M. Inoue, J. Sasaki, Y. Hamada and J. Takahashi, Dental Materials Journal, **25** [2] (2006) 360-364.

Synthesis and Structures of Iron Nanoparticles Coated with Boron Nitride Nanomaterials, I. Narita, T. Oku, H. Tokoro and K. Suganuma, J. Electron Microsc. 55 (2006) 123 - 127.

Atomic Structures of Bamboo-Type Boron Nitride Nanotubes with Cup-Stacked Structures, T. Oku, I. Narita and A. Nishiwaki, J. Euro. Ceram. Soc. 26 (2006) 443-448.

Atomic Structures and Formation Mechanism of Boron Nitride Nanotubes and Nanohorns Synthesized by Arc-melting LaB_6 Powders, A. Nishiwaki and T. Oku, J. Euro. Ceram. Soc. 26 (2006) 435-441.

Epitaxial Growth of Cu Nanodot Arrays Using an AAO Template on a Si Substrate, T. Shimizu, M. Nagayanagi, T. Ishida, O. Sakata, T. Oku, H. Sakaue, T. Takahagi and S. Shingubara, Electrochem. Solid-State Lett. 9 (2006) J13-16.

Synthesis and Magnetic Property of Boron Nitride Nanocapsules Encaging Iron and Cobalt Nanoparticles, T. Oku, I. Narita and H. Tokoro, J. Phys. Chem. Solids 67 (2006) 1152-1156.

Fabrication of Hollow and Sandwiched Structure Ag Nanoclusters by High-Dose Iron Implantation F. Ren, C. Jiang, C. Liu, J. Wang and T. Oku, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 165501-1-4.

［ 解説、総説 ］

鉛フリーはんだと導電性接着剤実装技術、菅沼克昭、クリーンテクノロジー、16[3](2006), 38-41.

セラミックスの接合技術の現状と課題、菅沼克昭、セラミックス、41[6](2006), 416-423.

セラミックス/金属接合における熱応力、菅沼克昭、セラミックス、41[6](2006), 434-439.

超柔軟性接触センサの開発～ロボットの柔らかい皮膚をつくる～、井上雅博，菅沼克昭，宮下敬宏，石黒浩、検査技術、11[10](2006)、44-48.

中国版 RoHS「電子情報製品汚染防止管理法」の概要、菅沼克昭、蒋　君祥、EcoClip、25(2006)、32-37.

実装鉛フリー化の完遂、その先の高付加価値化へ、菅沼克昭、未来材料、Vol.6, No.12(2006), pp.32-37.

Current status of joining ceramics and metals,　K. Suganuma、Korean Ceramics Society, (2006), in press.

韓国と米国の RoHS 関連規制の状況、菅沼克昭、金　槿銖、**EcoCli**p、(2006)、印刷中.

BN ナノホーンの原子配列と電子状態、奥 健夫、西脇 篤史、Boundary, Vol. 22, No. 3 (2006) 12-17.

BN ナノ物質の応用を目指して、小井 成弘、奥 健夫、Boundary, Vol. 22, No. 3 (2006) 18-22.

YB_{56} の 3 次元高分解能像、奥 健夫、日本金属学会報 Materia, Vol. 45, No. 12 (2006) 864.

ロボットの皮膚感覚、石黒浩，井上雅博，宮下敬宏、綜合臨牀，**55**, [9](2006) 2216-2218.

[著書]

鉛フリーはんだ付け界面の反応と組織、（日本金属学会編集）菅沼克昭、材料開発のための顕微鏡法と応用写真集、日本金属学会、(2006), 88-96.

改訂版鉛フリーはんだ付け技術、菅沼克昭、K ブックシリーズ，工業調査会，(2006)

金属ナノ粒子ペーストのインクジェット微細配線（菅沼克昭監修）、菅沼克昭、シーエムシー出版、(2006)

セラミックス/金属の各種接合技術とその留意点（分担執筆）、菅沼克昭、異種材料の接着・接合技術、技術情報協会、(2006),pp.241-249.

Printed Electronics のためのナノ粒子微細配線技術、河染　満、金　槿銖、畑村眞里子、菅沼克昭
粉砕、Vo.50(2006/2007), pp.27-31.

IC 関連金属材料（木村忠正、八百隆文、奥村次徳、豊田太郎編集）、菅沼克昭、電子材料ハンドブック、朝倉書店、(2006.12), pp.110-117.

金属ナノ粒子ペーストのインクジェット微細配線、井上雅博、ペーストキュアの熱分析法
シーエムシー出版, (2006), pp.195-203.

異導電フィルム／ペーストの接合技術と信頼性向上、井上雅博、異種材料の接着・接合”，技術情報協会，(2006)，　pp.214-227.

[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，特願 2007-023278

金属ナノ粒子の焼結法，　菅沼克昭, 和久田大介, 畑村眞理子, 特願 2006-251329.

[国際会議]

New Glass Sealing Method with Lead-free Solders
K. Sakaguchi, S. Domi and K. Suganuma, CIMTEC2006, Sicily, Italy, June 4-9, 2006.

Synthesis and Structures of Boron Nitride Nanotubes, *T.Oku, N. Koi, K. Suganuma, R. V. Belosludov and Y. Kawazoe, Working Group Meeting on Clusters and Nanomaterials of ACCMS ,Asian Consortium on Computational Materials Science, Sendai, Japan, September 7-9,2006.

Low Temperature Printing Wiring with Ag Salt Pastes　*M. Kawazome, K. Suganuma, M. Hatamura,　K-S. Kim, S. Horie, A. Hirasawa, and H. Tanaami, 39TH International Symposium on Microelectronics (IMAPS2006), San Diego, California, USA, Oct 8-12,2006.

Thermal Conductivity of Isotropic Conductive Adhesives Composed of an Epoxy-Based Binder, *M. Inoue, H. Muta, T. Maekawa, S. Yamanaka and K. Suganuma, Proc. HDP'06 (IEEE CPMT Conference), Shanghai, China, Jun27-30,2006.

Influential Factor in Determining the Thermal Conductivity of Isotropic Conductive Adhesives, *M. Inoue, H. Muta, T. Maekawa, S. Yamanaka and K. Suganuma, Proc. EcoDesign 2006 Asia-Pacific Conference, Tokyo, Japan, Dec 11,2006.

Oxidation Behavior of Zn-Sn and Zn-30 In Alloys as A High Temperature Lead-Free Solder During Thermal and Humidity Exposure, *Jae-Ean Lee, Keun-Soo Kim, M. Inoue and K. Suganuma, 9th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, Feb8-9, 2006

Conductive Adhesives: Alternative to High Temperature Solders and The Future(keynote), *K. Suganuma, 6th International IEEE Conference on Polymer and Adhesives in microelectronics and Photonics, (Polytronics 2007),Tokyo, Japan, Jan 16-18,2007.

Novel Room Temperature Wiring Process of Ag Nanoparticle Paste, *D. Wakuda and K. Suganuma Proc.6th International IEEE Conference on Polymers and Adhesives in Microelectronics and Photonics (Polytronics 2007), Tokyo, Japan, Jan 16-18,2007.

Prevention of Sn Whisker Formation by Surface Treatment of Sn Plating(invited), *K. Suganuma, K.-S. Kim, Y. Yorikado, M. Tsujimoto, I. Yanada, 136th TMS Annual Meeting & Exhibition, Orlando, TX, Feb.26-28, 2007.

Evaluation of Zn-Sn and Bi-Ag alloys as high temperature leed-free solders, *Jae-Ean Lee, Keun-Soo Kim, Do-Seop Kim, K. Suganuma, 5th 21st Century COE International Syposium, Awaji, Japan Dec 8-9, 2006.

[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）
菅沼　克昭	CIMTEC2006 International (組織委員)
菅沼　克昭	Plastic Electronics, Scientific (組織委員)

[国内学会]

エレクトロニクス実装学会	8 件
日本金属学会	1 件
その他	4 件

[取得学位]

修士（工学）

寄門　雄飛	Sn ウィスカ発生メカニズムと抑制策の検討
和久田大介	微細回路パターン用 Ag ナノ粒子ペーストの常温焼結

博士（工学）

山中公博	Cu/Sn-3Ag-0.5Cu/Cu および Cu/In/Cu 系フィリップチップ接合部におけるはんだエレクトロマイグレーションに関する研究
李　在彦	Zn-Sn 系高温及び低温鉛フリーはんだの開発と信頼性解析

[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

21 世紀 COE プログラム事業推進担当者

菅沼　克昭	異相界面ナノ構造制御技術による環境調和型ファイン構造材料開発		3,000

萌芽研究

井上　雅博	超柔軟性導電性接着剤における金属フィラー界面のナノ構造制御		900

[受託研究]

菅沼　克昭	NEDO	高温はんだ代替技術開発	243,575
菅沼　克昭	大阪市都市型産業振興センター	超柔軟接触センサの開発	5,602
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ィスカ防止技術の開発	5,250
菅沼　克昭	アイさぽーと	デジタル情報家電産業の競争力強化のための人材育成事業	1,894
菅沼　克昭	日本電気株式会社	導電性接着剤接続技術	1,050

[奨学寄附金]

菅沼　克昭	バンドー化学工業㈱	500
菅沼　克昭	奥野製薬工業㈱	2,000
菅沼　克昭	上村工業㈱	1,000
菅沼　克昭	メック㈱	500
菅沼　克昭	㈱トクヤマ	1,500

[共同研究]

菅沼　克昭	大阪産業振興機構	低温焼結金属ナノ粒子を用いた電子情報媒体の開発	25,700
菅沼　克昭	新機能素子研究開発協会	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	21,000

計算機ナノマテリアルデザイン分野

教授（兼任）	吉田　博
助教授	白井　光雲
助手	佐藤　和則
博士研究員	Dinh Van An、濱田　幾太郎、柳澤　将、李　揆浩、山内　邦彦
大学院学生	光田　直樹、松川　和人、木崎　栄年、豊田　雅之、福島　鉄也、林田　英樹、竹内　康祐、出倉　春彦、名兒耶　彰洋、平松　雅規、南井　仁、原田　邦彦、江藤　基比古、中野　洋輔、山口　宏信
学部学生	魚住　昭文、實宝　秀幸
研究生	Jon Bergmann Maronsson
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行った。スピンを入れた GGA 計算、さらに内殻補正における補正方法の改良を行う。また相対論的効果、スピン一軌道相互作用への拡張コードを改良する。分子動力学シミュレーションの技法では、断熱ポテンシャルの鞍部を求めることが求められているが、それを力反転法（force inversion method）により実現した。

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。この系は高圧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。これが良質の結晶を作成する方法になるので、実験家に提案している。

・赤外光励起シミュレーション

半導体プロセスでは微細化が進むにつれ拡散制御に関する要請がますます厳しいものとなり、従来の温度による制御では限界が見えてくる。このような制限を取り除くために、不純物が固有振動を持つことを利用し、それに同調した赤外線レーザーで励起しその種のみを拡散促進させることを試みている。分子動力学シミュレーションによりこの方法の有効性を検証し、かつ有効な赤外線レーザー励起法のデザインを行うことを目指している。いくつかあったシミュレーション技法上の問題を解決して、実際の

シリコン中の不純物の赤外線励起のシミュレーションを行った。その結果、局在モードの性格が強い酸素、ボロン不純物に関しては赤外線励起の効果があることが分かった。一方バンドモードの性格のリン不純物に関しては赤外線励起の効果は少ないことが明らかとなった。

・Si中のCu不純物のゲッタリングのデザイン

Si中のCuは非常に高速の拡散を行うことが知られており、その不純物拡散を抑制することがデバイスプロセスに求められている。その高速拡散現象を分子動力学シミュレーションで再現し、機構を明らかにした。そしてその抑制にはBとOの複合体が優れた効果を持つことを明らかにした。これにより、より効率的なゲッタリング法が実現できる。

・Si中の水素不純物のミクロな挙動

Si 中の水素はシリコン中の価電子制御にとって重要である。その振動は水素の入るサイト、水素量を測定するための強力な道具である。シリコン中の水素の振る舞いを分子動力学シミュレーションを行うことで､水素の挙動が従来信じられてきたもの､すなわち Si のボンド中心に位置するという描写と違い、かなり折れ曲がった構造を取ることが明らかになった。この屈曲によりシリコン中の水素は大きなエネルギー緩和を有することになる。これは赤外線照射による振動励起を行うとき、重要な制御パラメータとなる。この構造の実証実験への提案を行った。

・希薄磁性半導体の相分離と超常磁性ブロッキング現象

希薄磁性半導体は一般に溶解度ギャップを持つ系で熱平衡状態では相分離を起こす。そのため、非平衡結晶成長時にスピノダル分解を起こし不純物濃度に強い不均一性が現れることが指摘されている。不純物の不均一分布が磁性に及ぼす影響についてより詳しく調べるために、超常磁性ブロッキング現象を議論した。相分離のために強い濃度不均一が起こり、クラスターが形成されてしまうと系は超常磁性状態となりキュリー温度は 0 度である。しかし、クラスターの大きさがある程度以上になると、磁気異方性からくるエネルギー障壁のためにクラスターの磁化反転に長い緩和時間が必要になる（ブロッキング現象）。このため、超常磁性状態であるにもかかわらず有限温度で系の磁化過程にヒステリシスが現れる。磁気異方性のためのエネルギー障壁の高さは磁気異方性定数とクラスターの体積に比例するため、クラスターのサイズが大きくなればなるほどブロッキング温度が高くなる。このブロッキング現象について Dimitorov らの方法(Phys. Rev. B 54 (1996) 9237)を用いてシミュレーションを行った。その結果、大きなクラスターが形成されると系のブロッキング温度が高くなってゆき、それを反映して同じ温度でも大きなヒステリシスループを描くことが示された。

・$CuAlO_2$ベース希薄磁性半導体のキュリー温度

デラフォサイト構造をもつ $CuAlO_2$ は、一般の酸化物とは違って p 型にドーピングしやすいことが実験で示されている。多くの希薄磁性半導体はホール添加により強磁性を示すことから、$CuAlO_2$ は強磁性希薄磁性半導体の候補となりうる。今年度は、精度のよいキュリー温度の予測値を得るために、$CuAlO_2$ の Cu サイトに置換された遷移金属不純物間に働く有効交換相互作用の距離依存性を第一原理から計算した。$CuAlO_2$ ベース希薄磁性半導体では遷移金属不純物はバンドギャップ中に不純物バンドを形成し Mn, Fe, Co, Ni 添加の場合、二重交換相互作用により強磁性状態が安定化される。しかし、d^5 の電子配置をとる(Cu, Cr)AlO_2 では二重交換相互作用は働かず反強磁性的な超交換相互作用の寄与のみがあらわれる。また、V を添加した系では高濃度で超交換相互作用の寄与が二重交換相互作用を上回り結果的に反強磁性的なカップリングとなっている。二重交換相互作用が短距離的であるため、磁性不純物が低濃度の領域では高いキュリー温度を得ることは難しいと予測される。

・SIC-LDA法によるMgO, BaO, CaOおよびSrOベース希薄磁性半導体の材料設計

すでに SIC-LDA 実装をおえた MACHIKANEYAMA コードを酸化物ベース希薄磁性半導体の材料設計に適用した。ハーフメタル性は半導体スピントロニクス材料の重要な特性であり、第一原理計算から多くのハーフメタル材料が提案されている。ここでは、MgO, CaO, BaO, SrO などの酸化物をベースとし、

遷移金属を用いず炭素ドーピングによりハーフメタリック強磁性を実現する材料設計を提案する。SIC-LDA によると、これらの系では C 添加によりバンドギャップ中に不純物バンドが形成され二重交換相互作用により強磁性状態が安定化され、ハーフメタリックな強磁性体となる。しかし、短距離的な相互作用であるために、モンテカルロシミュレーションを用いたキュリー温度を見積もりは 100K 程度の低い値となる。キュリー温度が低いため半導体スピントロニクス実現のための材料としては望みが薄いが、磁性不純物を用いずに強磁性が実現する特異な磁性のために物性物理の観点から興味が持たれる。

[原著論文]

Spinodal Decomposition under Layer by Layer Growth Condition and High Curie Temperature Quasi-One-Dimensional Nano-Structure in Dilute Magnetic Semiconductors, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L416-418.

Crystal Stability of α- and β-boron, A. Masago, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Phys. Rev.B 73 (2006) 104102.

Curie Temperatures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+U Electronics Structure Calculations, K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 639.

Electronic Structure of (Zn, V)O and (Zn, Co)O in the Self-Interaction-Corrected Calculation, M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 647.

Ab-Initio Calculations of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor, H. Kizaki, K. Sato, A. Yanase and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 812.

First-Principles Study of the Effect of the Superexchange Interaction in (Ga, Mn)V, V=N, P. As and Sb, Y. H. Chang, C. H. Park, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, J. Korean Phys. Soc., 49 (2006) 203.

Exchange Interaction and T_c in Alkaline-Earth-Metal-Oxide-Based DMS without Magnetic Impurities: First Principle Pseudo-SIC and Monte Carlo Calculation, V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, J. Phys. Soc. Japan, 75 (2006) 093705.

Instability of Graphite Structure Induced by Excited Holes, H. Nakayama, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 296-299.

Ab Initio Materials Design of CN for Control of DB in a α-Si, N. Mitsuda, K. Shirai, Y. Morikawa and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 204-244.

Gettering Mechanism of Transition Metals in Silicon Calculated from First Principles, K. Matsukawa, N. Hattori, S. Maegawa, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 224-226.

First-Principles Calculation of Exchange Interactions in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors with Carrier Doping, H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 2771-2774.

Vibration Problem of H in Silicon, K. Shirai, I. Hamada and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376 (2006) 41-44.

Energetics of Native Defects in $CuAlO_2$, I. Hamada and H. Katayama-Yoshida, Physica B 376-377 (2006) 808-811

Pseudo-SIC Study on the Ferromagnetism Induced by Carbon in AO-based DMS (A=Mg, Ca, Ba, Sr), V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4131-4134.

Carrier Concentration Dependence of Curie Temperature in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor by First Principles Calculation, H. Kizaki, K. Sato, and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4135-4138.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4139-4142.

Local Environment Effects on Exchange Interactions in Dilute Magnetic Semiconductors, K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4143-4146.

Curie Temperature of GaMnN and GaMnAs from LDA-SIC Electronic Structure Calculations, M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Phys. stat. sol. (c) 3 (2006) 4155-4159.

Ab Initio Study of Spinodal Decomposition in (Zn,Cr)Te, T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Phys. stat. sol. (a) 203 (2006) 2751-2755.

First-principles stabilization of an unconventional collinear magnetic ordering in distorted manganites, S. Picozzi, K. Yamauchi, G. Bihlmayer and S. Blügel, Phys. Rev. B, 74 (2006) 094402.

High-pressure properties and phase diagram of boron, K. Shirai, A. Masago, and H. Katayama -Yoshida, phys. stat. solidi (b) 244 303 (2006).

[解説、総説]

基礎講座＜分子シミュレーションの基礎と応用>第一原理計算法 II—計算機ナノマテリアルデザイン—, 佐藤和則, 吉田博, 応用物理 75 (2006) 1371-1376.

基礎講座＜分子シミュレーションの基礎と応用>第一原理計算法 III—界面と欠陥のナノダイナミクス—, 柳澤将, 白井光雲, 吉田博, 応用物理 75 (2006) 1493 - 1497.

[著書]

「ZnO 系の最新技術と応用（分担執筆）」（八百隆文編集）佐藤和則、豊田雅之、吉田博、CMC 出版（2007）193-213

［ 特許 ］

「Transparent ferromgnetic alkali/Chalcogenide compound comprising solid solution of transition metal or rare earth metal and method of regulating ferromagnetism thereof」吉田博, 清家聖嘉, 佐藤和則, 柳瀬章、欧州連合特許登録番号 EP1634979A1

「Magnetic Random Acess Memory Device」吉田博、佐藤和則、大韓民国特許登録番号 第 0557387 号

「磁気抵抗ランダムアクセスメモリー装置（磁阻隋機存取存儲器装置）」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I262593 号

「強磁性 VI 族系半導体、 強磁性 III-V 族系化合物半導体、または強磁性 II-VI 族系化合物半導体とその強磁性特性の調整方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 252521 号

「磁性半導体を用いた円偏光スピン半導体レーザーおよびレーザー光の発生方法」吉田博、荒木和也、佐藤和則、日本特許登録番号　第 3797936 号

「Circular polarized light-generating spin-based semiconductor lazer source using magnetic semiconductor and method of generating laser light」吉田博, 佐藤和則、大韓民国特許登録番号　第 10-0603057 号

「シリコン結晶中の遷移金属不純物のゲッタリング方法」吉田博、大韓民国特許登録番号　第 10-0596701 号

「Ⅱ-Ⅳ族またはⅢ-Ⅴ族系単結晶強磁性化合物及びその強磁性の調整方法」吉田博、佐藤和則、台湾特許登録番号　第 I 254088 号

「Ferromagnetic p-type single crystal zinc oxide and method for preparation threof」吉田博, 佐藤和則、米国特許登録番号　US7022182B1 号

「Verfahren zur herstellung von diamanten des n-type mit niedrigem widerstand (Method for synthesizing n-type diamond having low resistance)」吉田博、ドイツ連邦特許登録番号 DE69926985T2

「Ferromagnetic ZnO-type compound including transition metallic element and method for adjusting ferromagnetic characteristics thereof」吉田博, 佐藤和則、米国特許登録番号 US7115213B2

［ 国際会議 ］

Materials Design and Realization for Semiconductor Nano-Spintronics (Invited), *K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 25th Electronic Materials Symposium (EMS-25), Hotel Sanvalley Fujimi, Izu-no-kuni, Japan, July 5-7, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Effects of Spinodal Decomposition on Ferromagnetism in Dilute Magnetic Semiconductors, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

First-Principles Calculation under Carrier Doping Treatment in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Atom Relaxation of H in Silicon, *K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Gettering Mechanism of 3d Transition Metals Studied by First Principles Calculation, *K. Matsukawa, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

Microscopic Mechanism of Phosphorus Diffusion in Silicon, *H. Nakayama, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, 28th International Conference on the Physics of Semiconductors (ICPS2006), Vienna, Austria, July 24-28, 2006.

High Pressure Properties and Phase Diagram of Boron (Oral), *K. Shirai, 12th International Conference on High Pressure in Semiconductor Physics (HPSP12), Barcelona, Spain, July 31- Aug. 3, 2006.

Carrier Concentration Dependence of Ferromagnetic States in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductor by First-Principles Calculation, *H. Kizaki, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Theoretical Investigation of Spinodal Decomposition in Dilute Magnetic Semiconductor, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, P. H. Dederichs, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

First-Principles Study of Half-Heusler Compound Type Dilute Magnetic Semiconductor, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, P. H. Dederichs, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

First-Principles Studies of Dilute Magnetic Semiconductors using SIC-LDA Approach, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Pseudo-SIC Calculation for AO - based DMS without Transition Metals (A = Mg, Ca, Ba, Sr), *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, The 4th International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors (PASPS-IV), Sendai International

Center, Sendai, Japan, Aug. 15-18, 2006.

Computational Nano-Materials Design for High T_c Ferromagnetism in Wide-Gap Magnetic Semiconductors (Invited), *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, P. H. Dederichs, International Conference on Magnetism (ICM2006), Kyoto International Conference Hall, Kyoto, Japan, Aug. 20-25, 2006.

Theory of Ferromagnetic Semiconductors (Invited), *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, P. H. Dederichs, E-MRS 2006 FALL MEETING, Warsaw, Poland, Sep. 4-8, 2006.

Room Temperature DMS –A Perspective from CMD-, *H. Katayama-Yoshida (Invited), E-MRS 2006 FALL MEETING, Warsaw, Poland, Sep. 4-8, 2006.

Nano-Scale Control of Impurity Diffusion and Materials Design in Silicon (Oral), *K. Shirai, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

First-Principles Studies of Dilute Magnetic Semiconductors using SIC-LDA Approach, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

First-Principles Calculations under Carrier Doping Treatment in $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 10th SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006) –Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology-, Osaka univ., Japan, Sep. 19-20, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition (Oral), *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Nitride Semiconductors (Oral), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Nano-Scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *M. Toyoda, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and

Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor (Oral), *H. Kizaki, K Sato and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Theory, New Materials Design and Nano-Process Design of Ferromagnetic Semiconductors, *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, M. Toyoda, H. Kizaki, V. A. Dinh and P. H. Dederichs, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Pseudo-SIC and Monte Carlo Study of the Frromagnetism in C (N)-doped Alkaline Earth Metal Oxides, *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Conference on "Computational Magnetism and Spintronics" CompMag 2006, Forschungszentrum Jülich, Germany, Oct. 2-4, 2006.

Nano-Scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, The 4th International Workshop on ZnO and Related Materials, Univ. of Giessen, Germany, Oct. 3-6, 2006.

Ab Initio Materials Design for TCO-based New Functional Materials (Invited), H. Katayama-Yoshida, *K. Sato, H. Kizaki, H. Funashima, I. Hamada, T. Fukushima and M. Toyoda, 1st International Symposium on Transparent Conducting Oxides, Crete, Greece, Oct. 23-25, 2006.

Electronic Structures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+SIC Calculations (Oral), *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, KKR-Workshop: new developments, applications and collaborations, University of Bristol, Bristol UK, Oct. 20-22, 2006.

Computational Nano-Materials Design for Semiconductor Nano-Spintronics (Invited), *H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor Spintronics, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

LDA+SIC Calculations for ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Theoretical Approach to Nanoscale Control of Impurity Diffusion in Silicon: Material Dynamics Design, *K. Shirai, K. Matsukawa and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Ferromagnetism in Oxide-based DMS without Transition Metal Impurities, *V. A. Dinh, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006 (From Observation of Atoms/Molecules, via Measurement, to Assembly of NanoStructures), Osaka, Japan, Nov. 20-22, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Nitride Semiconductors (Invited), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Materials Design of Ferromagnetic Diamond (Oral), *H. Katayama-Yoshida, K. Kenmochi, K. Sato and A. Yanase, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Nano-scale Spinodal Decomposition Phase in ZnO-based Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Ab Initio Design of Fabrication Process and Shape Control of Self-organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Two-Dimensional Spinodal Decomposition (Oral), *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 2006 MRS Fall Meeting, Hynes Convention Center & Sheraton Boston Hotel, Boston, USA, Nov. 27-Dec. 1, 2006.

Spinodal Decomposition and Super-Paramagnetism in Dilute Magnetic Semiconductors (Oral), *K. Sato, T. Fukushima and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Vacancy-Induced Magnetism in HfO_2, *V. A. Dinh, M. Toyoda, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Valence Control of α-Rhombohedral Boron by Electronic Doping, *H. Dekura, K. Shirai and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures of Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

First-Principles Design of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima,

Japan, Dec. 3-6, 2006.

Control of Impurity Diffusion on Silicon by IR Laser Excitation, *K. Shirai, H. Yamaguchi and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Materials Design of $CuAlO_2$ Based Dilute Magnetic Semiconductors for Semiconductor Spintronics, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Electronic Structures of Dilute Magnetic Semiconductors from LDA+SIC Calculations, *M. Toyoda, H. Akai, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, International Conference on Quantum Simulators and Design (QSD2006), Hiroshima, Japan, Dec. 3-6, 2006.

Local Environment Effects on Exchange Interactions and Curie Temperatures in Dilute Magnetic Semiconductors, *K. Sato, P. H. Dederichs and H. Katayama-Yoshida, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Computational Nano-Materials Design for Semiconductor Spintronics, *H. Katayama-Yoshida, K. Sato, T. Fukushima, H. Kizaki, M. Toyoda, V. A. Dinh, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

First-Principles Study of $CuAlO_2$ Based Dilute Magnetic Semiconductors, *H. Kizaki, K. Sato and H. Katayama-Yoshida, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

First-Principles Design of Self-Organized Tera-Bit-Density Nano-Magnets in Dilute Magnetic Semiconductors by Spinodal Decomposition, *T. Fukushima, K. Sato, H. Katayama-Yoshida and P. H. Dederichs, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2007.

Inhomogeneity and its Effects on the Ferromagnetism of Dilute Magnetic Semiconductors (Invited), *K. Sato, The 2nd Indo-Japan Seminar "Novel Magnetic Materials and their Electronic Structures", Feb. 27 – Mar. 1, 2007, Univ. of Tokyo, Tokyo, Japan

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

吉田　博	第 24 回半導体中の欠陥国際会議(ICDS-24)（国際運営委員）
吉田　博	International conference on Quantum Simulators and Design（組織委員）
吉田　博	第 4 回半導体中のスピンに関連する物理と応用国際会議（PASPS-VI）（国際諮問委員及びプログラム委員）
吉田　博	磁性国際会議(ICM2006)（組織委員）
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	11 件
応用物理学会	7 件
日本高圧力学会	2 件

[取得学位]

修士（工学）

名兒耶　彰洋	金表面上チオール系分子の吸着に関する第一原理シミュレーション
竹内　康祐	第一原理分子動力学シミュレーションによる Al/Alq_3　界面の構造と電子状態に関する研究
平松　雅規	ルチル型 TiO_2(110)面に吸着した水素に関する第一原理計算

修士（理学）

出倉　春彦	固体ホウ素の不純物添加による金属化とその電子状態
南井　仁	第一原理計算による希薄磁性半導体の強磁性発現機構と磁気励起の研究

博士（工学）

松川　和人	シリコン中における 3 d 遷移金属の拡散挙動解明とゲッタリングマテリアル・デザイン

博士（理学）

光田　直樹	結晶シリコンにおける CN 分子の結合状態と拡散についての第一原理的研究

[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

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	10,400

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	1,200

[受託研究]

吉田　博	日本学術振興会 先端研究拠点事業拠点形成型	計算機ナノマテリアルデザイン	16,000

[共同研究]

吉田　博	科学技術振興機構	先端計測・分析技術に関する調査研究	1,960
吉田　博	日本原子力研究機構	グリッド環境における物性解析・材料設計シミュレーション	
吉田　博	東北大学金属材料研究所	透明室温強磁性半導体スピントロニクスマテリアルのデザイン・創製・デバイス応用	
白井　光雲	ルネサステクノロジ	シリコン中の不純物のゲッタリングのマテリアルデザイン	
白井　光雲	東大、岡山理科大、物材	二十面体半導体ホウ素における超	

	機構	伝導探索
白井　光雲	(財)高輝度光科学研究センター　Spring-8	赤外光励起による新物質プロセッシング

ナノバイオ知能システム分野

教授（兼任）　　溝口　理一郎
助教授　　古崎　晃司

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。

b) 成果

・ナノテクオントロジーに基づくコンテンツ管理システムの開発

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。本年度は、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，ネットワーク経由で使用可能な Web サービスとして整備した。

・方式知識に基づくナノテク材料設計支援システム

ナノテク材料への要求機能を分析して、要求レベルから見た機能のオントロジーを開発し、要求機能と基本機能とを接続し、材料からデバイスまでをつなぐことを目指している。更に、構造化された知識を用いたナノテク材料設計支援システムの設計・開発を行っている。まずナノテク知識を適切に計算機上で記述するために，従来の機能概念オントロジーに基づく知識共有枠組みを拡張し，機能・製造プロセス統合的記述枠組みを開発した．本枠組みは，材料が発揮する機能とその製造プロセスに関する知識を，機能概念オントロジーに基づいた「方式概念」を用いた機能分解木で記述する．これにより，これらの知識を一貫性のある視点から管理することができる．これらの方式概念をデータベースとして蓄えておき、必要に応じてユーザに提示することで、発想支援を行うことが出来る。その際に重要となるのは、機能や方式を領域に依存しない形で概念化することである。そうすることで、ある領域ではこれまで用いられていなかった方式を、他の領域の方式において適用し革新的な発想がなされることが期待される。本年度は，材料設計支援システムのプロトタイプの有用性を検証するための評価実験を実施した．実験では，複数の被験者が本システムを用いて材料設計を行った結果の分析を通してシステムの有用性を確認した．

・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、オントロジーに基づいた知識モデルの構築ツール「モデルエディタ」のプロトタイプを開発し，その表現能力の検証を行った．またオントロジーエディタにおいて，分散環境下におけるオントロジー構築を支援するために，複数オントロジーをネットワーク上で共有すると共にそれらの依存関係を管理しながらオントロジーの構築を進める機能を開発した.

[著書]

「オントロジー構築入門」(溝口　理一郎編集)、 古崎晃司、笹島宗彦、來村徳信、溝口理一郎、オーム社、(2006)

[国際会議]

Fundamental Consideration of Role Concepts for Ontology Evaluation (Oral), *K. Kozaki, E. Sunagawa, Y. Kitamura and R. Mizoguchi, Evaluation of Ontologies for the Web (EON2006) 4th EON Workshop, Edinburgh, United Kingdom, May 22, 2006.

Role Organization Model in Hozo (Oral), E. Sunagawa, K. Kozaki, Y. Kitamura, *R. Mizoguchi, EKAW 2006 - 15th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management Managing Knowledge in a World of Networks, Podebrady, Czech Republic, Oct. 2-6, 2006.

Development of Contents Management System Based on Light-Weight Ontology (Oral), *K. Kozaki, Y. Kitamura and R. Mizoguchi, Proc. of the 2007 IAENG International Conference on Internet Computing and Web Services, Hong Kong, March 21-23, 2007.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

溝口理一郎　　European Project on SEKT（Steering committee 委員）
溝口理一郎　　Semantic Web Science Association（副会長）
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 1st Asian Semantic Web Conference (ASWC2006) (プログラム委員長)
溝口理一郎　The 14th International Conference on Computers in Education (ICCE2006)（プログラム委員長）
溝口理一郎　The 3rd European Semantic Web Conference (ESWC2006)（プログラム委員）
溝口理一郎　Fifth international semantic web conference (ISWC2006)（プログラム委員）
溝口理一郎　The 15th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management (EKAW2006)（プログラム委員）
溝口理一郎　The 15th International World Wide Web Conference Semantic Web Track (プログラム委員)
溝口理一郎　The 8th International Conference on Intelligent Tutoring Systems (ITS2006) （プログラム委員）
溝口理一郎　The First European Conference on Technology Enhanced Learning (EC-TEL 2006) (プログラム委員)
溝口理一郎　The 12th International Conference on Artificial Intelligence: Methodology, Systems, Applications (AIMSA 2006) (プログラム委員)
溝口理一郎　2006 IEEE International Conference on Information Reuse and Integration (IEEE-IRI 06) (プログラム委員)
溝口理一郎　The First International Conference on Knowledge, Information and Creativity Support Systems (KICSS 2006) (Technical Committee and International Advisory Committee)
溝口理一郎　IFIP AI 2006: Artificial Intelligence in Theory And Practice (プログラム委員)
溝口理一郎　The Ninth Pacific Rim International Conference on Artificial Intelligence (PRICAI2006) (Workshop 委員長)
溝口理一郎　The Sixth International Symposium on Tools and Methods of Competitive Engineering (TMCE 2006)（プログラム委員）
溝口理一郎　International Workshop on Applications of Semantic Web Technologies for E-Learning (SW-EL) (プログラム委員)
溝口理一郎　LORNET Conference I2LOR 2006（プログラム委員）
溝口理一郎　International Journal of Applied Ontology（編集委員）
溝口理一郎　International Journal of Advanced Engineering Informatics（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　International Journal of Web Semantics（編集委員）
溝口理一郎　International Journal of Web Engineering and Technology（編集委員）

[国内学会]

人工知能学会	5 件
臨床医学オントロジー研究会	2 件
言語処理学会	1 件
日本図書館研究会	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	5,400

若手研究（B）

古崎　晃司	オントロジーベースの Web 知識統合・管理システムの開発とナノテク知識への適用	1,500

[受託研究]

溝口　理一郎	（社）化学工学会	「ナノ粒子」及び「ナノカーボン」に係る「ナノ材料知識基盤」プラットフォーム構築に関する調査事業に関わる委託調査研究項目１基本システムのブラッシュアップ及び「ナノ粒子」とナノカーボン」に係るコンテンツ拡充に必要な情報の収集	3,150

ナノテクノロジートランスファー分野

外国人客員助教授　　Supab CHOOPUN（平成 18 年 4 月 3 日～平成 18 年 5 月 2 日）

a）概要

３次元ナノ構造を形成するプロセスとして、電子線ビームリソグラフィや、収束イオンビームを用いる従来型のトップダウンナノ構造制御とは逆のアプローチであるボトムアップ手法を用いた新規プロセスの開発を目指した。触媒サイトとなる金属微粒子の配列を制御することにより、ワイドギャップ酸化物半導体の結晶成長（核形成）を任意に制御し、さらに触媒金属微粒子径を変化させることで、ナノロッド径の変化（次元性変化）により期待される状態密度の局在化、量子化機能の発現を狙った。

さらに、磁性元素を任意に組み込むことで低次元化と磁性変化（マグノン形成など）との相関、バンドギャップ整合等のヘテロ構造バンドエンジニアリングによる、ナノ構造制御したスピントロニクス素子への応用等を試みた。

b）成果

一般的に使われている VLS 法と異なり、レーザーを用いた新しいナノロッド作製方法（レーザー誘起 VLS 法）の開発に成功した。この手法は、従来型のトップダウンナノ構造制御とは逆のアプローチであるボトムアップ手法を用いた新規プロセスである。触媒サイトとなる金属微粒子の配列を制御することにより、ワイドギャップ酸化物半導体の結晶成長（核形成）を任意に制御し、さらに触媒金属微粒子径を変化させることで、ナノロッド径の変化（次元性変化）により期待される状態密度の局在化、量子化機能を評価した。

ナノテクノロジートランスファー分野

客員教授　　Tulsi　Mukherjee　（平成 18 年 5 月 11 日～平成 18 年 6 月 13 日）

a） 概要

量子ビームはエネルギーを材料に局所的に付与することが可能であり、将来のナノテクノロジーにおいて重要な役割を果たすことが期待されている。量子ビームが材料中で誘起する反応の詳細を解明することは、量子ビームの持つ優れた特性をナノテクノロジー分野で十分に活用するために、極めて重要である。

b） 成果

放射線や光によって誘起される化学反応、特にフリーラジカルや励起状態の化学反応の解明を行った。これらの反応中間体は極めて反応性が高く、化学反応において重要な役割を果たしている。本研究では特に炭化水素中でのアミンの放射線誘起反応をパルスラジオリシス法やコバルト照射による生成物分析によって解明した。

ナノテクノロジートランスファー分野

客員助教授　　Lifeng Yan（平成 18 年 6 月 14 日ー平成 18 年 7 月 13 日）

a）概要

Lifeng Yan 助教授は、これまでに高分子ブレンド薄膜の研究を行い、薄膜構造の発光への影響について論文を発表している。本共同研究では、共役高分子 MEH-PPV 薄膜の蛍光を走査トンネル顕微鏡(STM)発光分光法、光吸収、フォトルミネッセンスを用いて研究する。有機発光素子への応用の観点から基板プラズモンによる発光増強効果を調べる。

b）成果

本共同研究により、以下の論文を出版している。

1) Mutual Enhancement between Plasmon and Molecular Fluorescence of Conjugated Polymer on Metal Substrates Induced by STM, Lifeng Yan, Hongwen Liu, Hiroshi Iwasaki, Chem. Phys. Lett., 433 (2007) 312-316.
2) STM-induced Hight Emission of Conjugated Polymer Thin Film in Different Chain Aggregations, Lifeng Yan, Hongwen Liu, Hiroshi Iwasaki, Physica B, 393 (2007) 6-10.

ナノテクノロジートランスファー分野

客員教授　　Emil Píncik　（平成 18 年 7 月 13 日～平成 18 年 8 月 19 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。とりわけ極薄誘電体膜／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。固体中の欠陥準位を観測するために、過渡電荷応答測定法の開発を行っている。また、過渡応答測定で得られた知見を、光学特性ならびに結晶学的知見と併せ、界面物性に関して実験・理論の両面から研究を行っている。

b） 成果

半導体デバイスの中で、金属－酸化物－半導体（MOS）構造における極薄 SiO_2/Si 界面特性と、光電変換素子の発電層として用いられる水素化アモルファスシリコン（a-Si:H）薄膜に注目して研究を行った。準安定欠陥準位の観測と界面特性の評価のために、電荷 DLTS（Deep Level Transient Spectroscopy）法による電気的特性測定、可視・紫外および赤外分光測定ならびに、視斜角入射 X 線回折（GIXRD）測定を併用することで、以下の知見を得た。種々の方法で作製した極薄 SiO_2/単結晶 Si ならびに極薄 SiO_2/a-Si:H 試料について界面特性を比較したところ、硝酸酸化法を用いて形成した後に HCN 溶液中で欠陥終端化処理を施した SiO_2/a-Si:H 試料では、深い準位が全く観測されず、非常に良好な SiO_2/Si 構造が形成されていることが分かった。一方、Tetraethyl orthosilicate (TEOS)を用いてプラズマ CVD 法で形成した極薄 SiO_2 膜（もしくは熱 SiO_2 膜）では、Post Metallization Annealing (PMA) 処理を施しても、界面準位密度が 10^{12} $V^{-1}cm^{-2}$（もしくは 10^{11} $V^{-1}cm^{-2}$）以下には低減しなかった。これらより、シアン化物イオンが SiO_2/Si 界面における欠陥準位を完全に終端化し、電気的に不活性化したものと結論した。

プラズマ CVD 法で形成した a-Si:H 膜の赤外吸収スペクトル測定ならびに GIXRD 測定より、a-Si:H 層中に Si_mH_n クラスター［(m, n)は(10, 16)から(18, 24)まで］が存在することを見いだした。これらのクラスターの a-Si:H 構造への変化が Staebler-Wronski 効果と関係していると推察している。

また、以下の国際ワークショップを開催した。

Fifth International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces (SSSI 2006) (組織委員長)

[原著論文]

Passivation of Si and a-Si:H Surfaces by Thin Oxide and Oxy-nitride Layers, E. Pinčík, H. Kobayashi, J. Rusnák, M. Takahashi, R. Brunner, M. Jergel, A. Morales-Acevedo, L. Ortega and J. Kákoš, Appl. Surf. Sci., 252 (2006) 7713-7721.

On a Presence of Si_mH_n Clusters in a-Si:H/c-Si Structures, M. Kopani, E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, N. Fujiwara, R. Brunner, M. Jergel and L. Ortega, Appl. Surf. Sci., 252 (2006) 7722-7725.

[国際会議]

Photoluminescence of Very Thin Oxide/a-Si:H Structures Passivated in HCN Solutions (Invited), *E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, M. Kučera, R. Brunner, 5th International Workshop in the

series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Solution of the Optical Parameters of the Thin Film Systems and Interfaces, *S. Jurečka, E. Pinčík, R. Brunner, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Infrared Spectroscopy of Si_mH_n Clusters in a-Si:H/c-Si Structures, *M. Kopáni, E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, N. Fujiwara, R. Brunner, M. Jergel, L. Ortega, M. Mikula, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Structural Properties of SiO_x Layer Deposited on Flexible PET Foil, *M. Mikula, E. Pinčík, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

On Formation of Ultra-thin and Very Thin Oxide Films When Treated Semiconductor Surfaces Interact with Plasmas or Low-Energy Particle Beams or Liquid Solutions, *E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, J. Rusnák, R. Brunner, 5th International Workshop in the series of the Solid State Surfaces and Interfaces, Smolenice, Slovak Republic, Nov. 19-24, 2006.

Very Thin and Ultrathin Oxide/a-Si:H Structures and Polycrystalline-Si MOS type of Solar Cells, *E. Pinčík, H. Kobayashi, R. Brunner, R. Hajossy, H. Glesková, M. Takahashi, M. Mikula, International Conference SILICON 2006, Rožnov pod Radhoštěm, Czech Republic, Nov. 7-10, 2006.

On Solar Energy Demand and Si-based Solar Cell Technology, *E. Pinčík, R. Brunner, and M. Mikula, International Conference SILICON 2006, Rožnov pod Radhoštěm, Czech Republic, Nov. 7-10, 2006.

Brief Solar Photovoltaic Industry Overview with Focus to Japan Production, *E. Pinčík, R. Brunner, H. Kobayashi, M. Takahashi, M. Mikula, and J. Rusnák, International Conference Rural Development in the Knowledge Based Society, Bratislava, Slovak Republic, Oct. 16-17, 2006

Solar Photovoltaic Industry Overview and Remarks to Other Renewable Sources of Energy, *E. Pinčík, R. Brunner, J. Rusnák, International Conference Rural Development in the Knowledge Based Society, Bratislava, Slovak Republic, Oct. 16-17, 2006.

MOS Solar Cells. *E. Pinčík, R. Brunner, H. Kobayashi, M. Takahashi, International Conference Rural Development in the Knowledge Based Society, Bratislava, Slovak Republic, Oct. 16-17, 2006.

Reflectance Properties of a-Si:H Based Solar Cell Structures, *R. Brunner, E. Pinčík, H. Kobayashi, M. Takahashi, International Conference Rural Development in the Knowledge Based Society, Bratislava, Slovak Republic, Oct. 16-17, 2006.

ナノテクノロジートランスファー分野

客員教授　　ANISHCHIK Sergey Vladimirivich（平成18年8月21日～現在）

a） 概要

次世代ナノファブリケーションでは、更なる微細化のために、短波長化してX線（EUV）を利用する。材料（レジストなど）のイオン化ポテンシャルを超えたエネルギーを持つため、多くの問題が残っている。これらを解決して、次世代極限ナノファブリケーションを実現するため、超高速反応機構の解明が必要である。そのために非極性溶媒中でのジェミネート再結合過程を研究している。非極性溶液中での再結合発光の時間依存性におけるマイクロ波磁場効果について研究している。

b） 成果

炭化水素系高分子におけるジェミネート対生成と再結合の研究：標準的な非極性高分子試料として、n-ドデカン($C_{12}H_{26}$)を用いた。非極性溶液体であり誘電率が小さいため、電気的な相互作用が比較的長距離まで及び、放射線化学初期反応を特色付けるスパー内反応がオンサガー距離内で起こる不均一反応となる系である。ナノ秒パルスラジオリシスにより過渡光吸収スペクトルを測定した。ドデカンの励起状態、カチオンラジカルの過渡光吸収を観測した。ナノ秒時間領域でのカチオンラジカルの過渡吸収間挙動の測定により、ドデカンカチオンラジカルのジェミネートイオン再結合は非常に速く、ナノ秒時間領域以内であった。ドデカンカチオンラジカルのジェミネートイオン再結合過程を測定するために、ピコ秒パルスラジオリシスの実験を行った。ピコ秒のパルスラジオリシスでは、分析光源に電子パルス発生用のピコ秒レーザー光源を用いた。分析光発生と電子ビーム発生に同じレーザー光を用いた分析光と電子ビームの同期時間ジッターが極めて小さいパルスラジオリシスシステムを実現することができた。ピコ秒時間領域でのドデカンカチオンラジカルのジェミネートイオン再結合過程が観測できた。今後、電子とカチオンラジカルのジェミネートイオン再結合や初期分布の詳細を明らかにするため、現在開発されている等価速度分光法フェムト秒パルスラジオリシスを用いた測定を行う。

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、ナノメーター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

・高分解能電顕法、電子線構造解析法によるアモルファス構造の多面解析手法の確立
・電界放射型電子顕微鏡による相変化型記録材料の非晶質構造評価
・ナノビーム電子回折法による相変化型記録材料のソフトフォノン解析
・低エネルギー電子線ビーム励起による半導体表面構造制御の基礎過程の解明
・フェムト秒パルスレーザー光励起によるグラファイト表面構造相転移と原子層剥離の発見
・エネルギー分解差分 STM イメージ解析法の開発と半導体表面点欠陥周辺での電荷移動の定量評価
・スピントンネルデバイスの表面・界面ナノ評価
・低温成長 GaN ベース強磁性半導体の XAFS によるナノ原子配置評価解析
・走査型トンネル顕微鏡法による MOSFET 断面のナノ評価

ナノ構造多次元評価分野

教授（兼任）　弘津　禎彦
助手　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

・Fe-Si アモルファス薄膜の再結晶化過程の解明

環境半導体として注目されている鉄シリサイドは、発光特性などの向上を目的としイオンビーム合成法や分子線エピタキシー法など様々な手法により作製が試みられている。我々は、イオン注入法により作製したアモルファス Fe-Si の固相結晶化により鉄シリサイド薄膜を作製するとともに、高分解能電子顕微鏡法およびナノビーム電子回折法を用いて、熱処理に伴うアモルファス Fe-Si の再結晶化過程を調べた。その結果、アモルファス Fe-Si 層は熱処理に伴い epsilon-FeSi とアモルファス Fe-Si の 2 層構造を呈し、さらに残存したアモルファス Fe-Si が beta-$FeSi_2$ へと結晶化することで epsilon-FeSiと beta-$FeSi_2$ の積層膜を形成した後、epsilon → beta 相変態により beta-$FeSi_2$ 単相の連続膜が形成されることが明らかとなった。

・Beta-$FeSi_2$/Si ヘテロ界面における欠陥消失機構の解明

高ドーズ(>1×10^{17} cm^{-2})の鉄イオンを Si 単結晶基板に注入し、熱処理を施すことで Si 基板上に beta-$FeSi_2$ 多結晶連続膜が得られる。このようにして作製した試料では、低ドーズ(<1×10^{17} cm^{-2})試料において形成される Si 中の転位あるいは積層欠陥などの欠陥がほとんど見られない。これらの欠陥は beta-$FeSi_2$ の発光特性を向上させる上で阻害要因となりうるため、欠陥制御に関する知見が重要となる。そこで、エネルギーフィルター電子顕微鏡を用いて beta-$FeSi_2$/Si ヘテロ界面近傍の欠陥の形成、消失過程を詳細に調べた。その結果、高ドーズイオン注入試料では、イオン注入により形成されたアモルファス Si の再結晶化に伴い積層欠陥が導入されるが、鉄シリサイドの epsilon → beta 相変態に伴って生じる余剰の Fe 原子が Si 再結晶化層で Si 原子と反応し、シリサイドを形成することで欠陥が消失することが明らかとなった。

[原著論文]

Local Atomic Ordering and Nanoscale Phase Separation in a Pd-Ni-P Bulk Metallic Glass, Y. Hirotsu, T. G. Nieh, A. Hirata, T. Ohkubo and N. Tanaka, Phys. Rev. B 73 (2006) 012205(1)-012205(4).

Local Structure Studies of Fe-Nb-B Metallic Glasses using Electron Diffraction, A. Hirata, Y. Hirotsu, T. Ohkubo, E. Matsubara and A. Makino, J. Microsc. 223 (2006) 191-194.

Structural Investigation of Ge-Sb-Sn Thin Film using Transmission Electron Microscopy, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, M. Takashima and H. Matsumoto, J. Mater. Sci. 41 (2006) 2615-2616.

Formation Process of beta-$FeSi_2$/Si Heterostructure in High-Dose Fe Ion Implanted Si, M. Ishimaru, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, J. Appl. Phys. 99 (2006) 113527(1)-113527(7).

Solid Phase Crystallization of Amorphous Fe-Si Layer Synthesized by Ion Implantation, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Appl. Phys. Lett. 88 (2006) 251904(1)-251904(3).

Structure Analysis of Ion-Beam Synthesized Amorphous Fe-Si Layers using Transmission Electron Microscopy, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 283-286.

Structural Evolution in Fe Ion Implanted Si upon Thermal Annealing, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, Nucl. Instrum. Meth. B 250 (2006) 300-302.

Low-Temperature Crystallization Caused by Ultrasound in $Pd_{42.5}Ni_{7.5}Cu_{30}P_{20}$ and $Pd_{40}Ni_{40}P_{20}$ Bulk Metallic Glasses, T. Ichitsubo, E. Matsubara, K. Anazawa, N. Nishiyama, M. Naito and Y. Hirotsu, Mater. Sci. Eng. A 442 (2006) 273-277.

Amorphous Structure of Ion-Beam-Synthesized Fe-Si Thin Layer, M. Naito, M. Ishimaru and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1771.

High-Dose Fe Ion Implanted Si: Ion-Beam-Induced and Annealing-Induced Microstructures, M. Ishimaru, K. Omae, I.-T. Bae, M. Naito and Y. Hirotsu, Proc. the 16th Int'l Microscopy Cong. (2006) 1856.

[著書]

「金属ナノ組織解析法」宝野和博、弘津禎彦、アグネ技術センター、(2006)

[特許]

「磁性体粒子及びその製造方法」弘津禎彦、András Kovács、佐藤和久、 特願 2006-220037

[国際会議]

Change of Nanostructure in $(Fe_{0.5}Co_{0.5})_{72}B_{20}Si_4Nb_4$ Metallic Glass on Annealing (Invited), *Y. Hirotsu, A. Hirata, K. Amiya, N. Nishiyama and A. Inoue, International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC' 2006), Vancouver, Canada (July 4-8, 2006).

Effects of Additive Elements on Atomic Ordering and Hard Magnetic Properties of $L1_0$-Type FePt and FePd Alloy Nanoparticles (Invited), *Y. Hirotsu, K. Sato, H. W. Ryu and A. Kovács, 48th IUVSTA Workshop, Innovatial Training Course on "Influence of Trace Elements on the Nucleation and Growth of Thin Films", Budapest, Hungary (August 26-31, 2006).

Amorphous structure of ion-beam-synthesized Fe-Si thin layer (Oral), *M. Naito, M. Ishimaru, and Y. Hirotsu, The 16th International Microscopy Congress, Hokkaido (September 3-8, 2006).

Atomic Ordering and Hard Magnetic Properties of $L1_0$-Type FePtCu Nanoparticles Studied by Transmission Electron Microscopy and Electron Diffraction (Invited), *Y. Hirotsu, H. W. Ryu and K. Sato, 6th Japanese-Polish Joint Seminar on Materials Analysis -New Developments and Analysis for Fabrication of Functional Nanostructures-, Toyama (September 10-13, 2006).

Formation process of beta-$FeSi_2$ from amorphous Fe-Si, *M. Naito, A. Hirata, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, J. A. Valdez and K. E. Sickafus, 15th International Conference on Ion Beam Modification of Materials, Taormina, Italy (September 18-22, 2006).

Local Structure Studies of Metallic Glasses using HREM and Electron Diffraction (Invited), *Y. Hirotsu, A. Hirata and T. Ohkubo, International Workshop on Bulk Metallic Glasses: Sicence & Technology, Bangalore, India (January 12-17, 2007).

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

弘津　禎彦	5^{th} International Bulk Metallic Galsses Conference（組織委員長）
弘津　禎彦	16^{th} International Congress on Electron Microscopy （組織委員）
弘津　禎彦	The IUMRS International Conference in Asia 2006（セッション委員）
弘津　禎彦	International Conference on Magnetism 2006（組織委員）
弘津　禎彦	6^{th} Japan-Polish Joint Seminar on Materials Analysis（組織委員）

[国内学会]

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

特定領域研究(2)		
弘津　禎彦	融体・金属ガラスの局所原子構造のその場観察	8,400
基盤研究(S)(2)		
弘津　禎彦	気相急冷による硬質磁性合金ナノ粒子の形成と電子線構造解析ならびに磁性評価	11,100

[受託研究]

弘津　禎彦	NEDO（革新的部材産業創出プログラム）	高機能高精度省エネ加工型金属材料（金属ガラス）の成形加工技術	4,200

表面ナノ構造プロセス評価研究分野

教授　　谷村　克己
助教授　　金崎　順一

a) 概要

電子系の励起により基底構造が不安定化する現象は、多くの物質表面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、新規な高次機能構造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、フェムト秒反射分光測定を用い、キャリア動力学を解明するための研究を展開している。

b) 成果

・高分解能低エネルギー電子ビーム励起によるSi(001)-H:2x1 表面の構造変化機構の研究

低エネルギー電子による励起誘起構造変化の機構を明らかにするため、高分解能低エネルギー電子ビーム励起による水素終端Si(001)表面からの水素原子脱離に関する研究を展開した。励起後の表面構造をSTM観察した結果、2.6 ～12.6eVの電子ビームにより、表面の水素原子が除去され、水素終端されていないダングリングボンド(DB)が生成されることを明らかにした。励起初期において、DB密度は電子線ドーズ量と共に増大し、その後飽和した。実験結果の定量的な解析を行い、Si-H結合切断の断面積は$1.3x10^{-20}cm^2$で、測定したエネルギー領域において一定であることを明確にした。さらに、水素原子による表面DBの再終端過程が電子ビーム励起下において促進されるという実験的確証を得た。本研究で得られた結果より、Si-H σ －> σ *状態間電子遷移がこのエネルギー領域における電子線ビーム誘起結合切断に関与していると結論した。

・STM 探針からのキャリア注入による InP(110)1x1 表面構造変化の研究

レーザー光励起の場合と異なり、探針－試料間電圧の極性を制御することにより、探針から電子あるいは正孔いずれか一方を選択的に表面微小領域に注入する事が出来る。この注入キャリアの選択性を利用することにより、半導体表面での励起誘起構造変化に関与するキャリアを明確にすることが可能となる。本研究では、トンネル顕微鏡から InP (110)-(1x1)表面に電子あるいは正孔を注入し、キャリア注入量と表面原子結合切断効率との相関を測定した。誘起される表面構造変化を STM 観察した結果、正孔注入でのみ構造変化が発生する事を実証した。また、構造変化形態の重要な特徴として、p 型試料では孤立した空格子点が生成されるのに対して、n 型試料では空格子点クラスターが効率的に生成される事が明らかとなった。表面 P サイトの空格子点が n 型試料では負に、p 型試料では正に帯電していることを考慮すると、フェルミ準位による構造変化形態の顕著な相違は、注入された正孔と帯電した空格子点との静電的な相互作用により合理的に説明することができる。また、空格子点の生成効率はトンネル電流値の２乗に従って増大し、この結果より、注入された２つの正孔の非線形局在がボンド切断に関与していると結論した。

・グラファイト表面における光誘起構造変化機構の研究

フェムト秒レーザー光励起によるグラファイト表面構造変化の機構を解明する研究を展開した。STM を用いて光励起後の表面構造を直接観察した結果、p 偏光の光励起により 2 原子層の深さをもつ、ナノスケールの空格子点クラスターが生成されることが判明した。この結果は、表面の 2 原子層が集団的に剥離したことを示している。さらに、グラファイト表面近傍でのキャリア動力学を解明するため、フェムト秒ポンプープローブによる時間分解反射スペクトル測定をおこなった。その結果、p 偏光励起の場合にのみ、2eV の位置に短寿命の反射ピークが観測された。観測された反射ピークの特徴は、層間の電荷移動励起により生成される過渡的なエキシトン状態に対して理論的に予見されているものと一致した。この表面における光誘起構造変化の特徴が、隣接する 2 原子層に生成される電子－正孔間のクーロン引力に起因する表面炭素原子の面垂直方向への緩和を仮定したモデルにより合理的に説明できることを示した。

[原著論文]

Formation and Clustering of Surface Vacancies under Electronic Excitation on Semiconductor Surfaces, J. Kanasaki, Physica B, 376/377 (2006) 834-840.

Two-hole Localization Mechanism for Electronic Bond Rupture of Surface Atoms by Laser-induced Valence Excitation of Semiconductors, K. Tanimura, E. Inami, J. Kanasaki, W. Hess, Physical Review B, 74[3] (2006) 035337-1-8.

Excitation-Induced Structural Instability of Semiconductor Surfaces, K. Tanimura and J. Kanasaki, J. Physics: Condensed Matter, 18[30] (2006) 1479-1516.

[解説、総説]

半導体表面からのレーザー誘起脱離とその電子的機構、金崎順一、谷村克己、真空、49 [10] (2006) 581-587

[国際会議]

Graphite-to-diamond Phase Transformation Induced by Femtosecond-laser Excitation (Oral), K. Tanimura, *****J. Kanasaki, K. Nasu**,** The 5th International Symposium on Ultrafast Surface Dynamics, Abashiri, Japan, May21-26, 2006.

Femtosecond Laser-induced Phase Transformation on Graphite Surface –Creation of a Novel Crystalline Phaser of sp^3-bonded Carbon-, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, K. Nasu, 24th European Conference on Surface Science, Paris, France, September 4-8, 2006.

Structural Instabilities Induced by Injected Carriers on Cleaved InP(110)-(1x1) Surfaces, *J. Kanasaki, K. Ichihashi, J. Tsuruta, E. Inami, K. Tanimura, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Photo-induced Phase Transformation on Graphite Surface, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, Japan, September 19-20, 2006.

Femtosecond Laser-induced Phase Transformation on Graphite Surfaces, *K. Kimura, J. Kanasaki, K. Tanimura, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006

Structural Instabilities Induced by Carrier Injection from Scanning Tunneling Microscope Tips on Cleaved InP(110)-(1x1) Surfaces, *E. Inami, J. Kanasaki, K. Tanimura, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Excitation-Induced Processing for Highly Functional Nano-Structured Materials, E. Inami, *J. Kanasaki, S. Tanaka, and K. Tanimura, 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience" International Symposium, Awaji, Japan, December 8-9, 2006.

Structural Instabilities on InP(110)-(1x1) Surfaces Induced by Hole-injection from the STM Tip, E. Inami, J. Tsuruta, *. Kanasaki, 11th International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions (DIET-XI), Berlin, Germany, March 11-15, 2007.

Excitation-induced Atomic Desorption and Structural Instability of Semiconductor Surfaces (Invited), K. Tanimura, 11th International Workshop on Desorption Induced by Electronic Transitions (DIET-XI), Berlin, Germany, March 11-15, 2007.

[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
応用物理学会	1 件
日本表面科学会	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（A）		
谷村　克己	半導体表面二次元凝縮相における励起物性の研究	13,700
基盤研究（C）		
金崎　順一	低エネルギー電子線励起による半導体表面の構造不安定性	500

量子マテリアルデバイス機能評価分野

教授（兼）　　朝日　一
助手　　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

・スピントンネルデバイスの表面・界面ナノ評価

強磁性層／非磁性層／強磁性層という３層構造はスピントンネルデバイスの基本構造である。最も重要なのは薄膜の表面・界面の平坦性制御である。原子間力顕微鏡(AFM)によるナノ評価により、GaCrN/AlN/GaCrN３層構造の形成条件と表面・界面の平坦性の関係を明らかとした。GaCrN の最適成長温度 700℃で成長した後、AlN の成長温度を AlN の最適成長温度 800℃まで上げて３層構造を成長した場合、GaCrN 成長後 AlN 成長のための基板温度昇温中に GaCrN の表面が劣化することが分かった。成長条件を厳しく調整して AlN 層も 700℃で成長することにより、AlN の１原子層高さである 0.25 nm のステップが観測できた。この条件で GaCrN/AlN/GaCrN３層構造を作製することにより、良いフィッティング可能な電流電圧特性の得られることを明らかとした。

・低温成長 GaCrN 及び GaGdN の XAFS によるナノ原子配置評価解析

磁性半導体で高い磁化特性を得るには、磁性原子添加濃度の高いサンプルを得ることが重要である。第２次相の析出がなく磁性原子添加濃度の高い GaCrN, GaGdN を得るために、通常の 700℃成長から 400℃以下で成長したサンプルでも、強磁性を示すことが明らかとなった。GaCrN サンプルでの Cr 原子配置の状態を蛍光 XAFS により評価・解析を行い、Cr 金属単体、CrN などの第 2 相は確認できず、単一結晶の GaCrN が成長できていることを明らかとした。GaGdN に対しても、同様な蛍光 XAFS 測定を行い、Gd 原子は Ga サイトに入っていることが明らかとした。

・走査型トンネル顕微鏡法による MOSFET 断面のナノ評価

水素終端化処理を施した MOSFET 断面を走査型トンネル顕微鏡(STM)で観察すると、そのトポグラフ像から作製したデバイスの形状が、各点での走査型トンネル分光(STS)測定で得た I-V 特性からポテンシャルに対応した分布図が得られることをこれまでに明らかとしてきた。平成１８年度は、同じ MOSFET 試料から異なる方位角で切り出して STM 評価を行い、デバイスを切り出すことの影響について調べた。デバイス形状の分かるトポ像ではいずれでも左右対称であるが、一方、ポテンシャル分布に対応する電流像では、(110)断面では対称、(100)断面では非対称となっていることが分かった。pn 接合領域の電場の向きが断面と平行である場合には影響が余りなく、角度をなすと切り出した影響が現れることを示した結果と考えられる。2 次元 p-n 接合のシミュレーション結果もそれを支持することを明らかとした。

［ 原著論文 ］

Emission spectra from AlN and GaN doped with rare earth elements, S.W. Choi, S. Emura, S. Kimura, M.S. Kim, Y.K. Zhou, N. Teraguchi, A. Suzuki, A. Yanase, and H. Asahi, J. Alloys and Compounds 408-412 (2006) 717-720.

Ferromagnetic cubic GaCrN epitaxial growth over MgO substarte – effect of growth condition, S. Kimura, S. Shanthi, Y.K. Zhou, M.S. Kim, S. Kobayashi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (1A) (2006) 76-78.

Evaluation of Device Configurations through Cross-Sectional Planes along Gates of 0.1um Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors by Scanning Tunneling Microscopy/Scanning Tunneling Spectroscopy, S. Hasegawa, W. Doi, A. Yabuuchi and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (3B) (2006) 2033-2036.

Magnetic, optical and electrical properties of GaN and AlN doped with rare-earth element Gd, S. W. Choi, Y. K. Zhou, S. Emura, N. Teraguchi, A. Suzuki and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (c) 3(6) (2006) 2250-2253.

Nature of deep level defects in GaCrN diluted magnetic semiconductor, S. Shanthi, S. Kimura, M.S. Kim, S. Kobayashi, Y.K. Zhou, H. Hasegawa and H. Asahi, Jpn. J. Appl. Phys. 45 (4B) (2006) 3522-3525.

Ferromagnetism in short-period GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, S.W. Choi, Y. K. Zhou, M. S. Kim, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, Phys. Stat. Sol. (a) 203 (11) (2006) 2774-2777.

Local crystal structure and local electronic structure around Cr in low-temperature-grown GaCrN layers, M. Hashimoto, S. Emura, H. Tanaka, T. Honma, N. Umesaki, S. Hasegawa and H. Asahi, J. Appl. Phys. 100 (2006) 103907-1 - 103907-6.

Tunnel magnetoresistance in GaCrN/AlN/GaCrN ferromagnetic semiconductor tunnel junctions, M.S. Kim, Y.K. Zhou, M. Funakoshi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 232511-1 – 232511-3

[解説、総説]

半導体ナノスピントロニクス・デバイス、周逸凱、朝日一、真空 49(12)(2006)722-727.

[特許]

「強磁性材料」周逸凱、朝日一、特願 2006-294577

「磁性制御方法」江村修一、朝日一、周逸凱、特願 2006-319153

[国際会議]

Growth of GaCrN/AlGaN/GaCrN Trilayer Structures and Observation of Tunnel Magneto-Resistance Effect (Invited), H. Asahi, M.S. Kim, S. Matsuno, Y.K. Zhou, S. Emura and S. Hasegawa, International Symposium on Hybrid Nano Materials Toward Future Industries, Nagaoka, Japan, February 3-5, 2006.

Ferromagnetism in short-period GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, Y.K. Zhou, S.W. Choi, M. S. Kim, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, 15th International Conference on Ternary and Multinary Compounds, Kyoto, Japan, March 6-10, 2006.

Cr atom alignment in Cr-delta-doped GaN, S. Kimura, S. Emura, H. Ofuchi, Y. Nakata, Y.K. Zhou, C.W. Choi, Y. Yamauchi, S. Hasegawa and H. Asahi, The XIII International Conference on XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

New Cr-cluster formation in diluted magnetic semiconductor GaCrN, S. Kimura, S. Emura, S. Kobayashi, S.W. Choi, M.S. Kim, Y.K. Zhou, H. Asahi and H. Ofuchi, The XIII International Conference on XAFS, Stanford, USA, July 9-15, 2006.

Magnetic properties of GaGdN/GaN superlattices grown by RF-MBE, S. W. Choi, Y. K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa, and H. Asahi, International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors, Sendai, Japan, August 15-18, 2006.

Electronic State and Local Structure Analysis of GaGdN by HX-PES and XAFS, S. Emura, S.W. Choi, J.J. Kim, S. Kimura, S. Kobayashi, Y.K. Zhou, K. Kobayashi, H. Asahi, N. Teraguchi and A. Suzuki, International Conference on Physics and Applications of Spin Related Phenomena in Semiconductors, Sendai, Japan, August 15-18, 2006.

Growth and Characterization of Ferromagnetic Cubic GaCrN, S. Kimura, S. Kabayashi, Y. Zhou, S. Choi, S. Subashcandran, H. Ofuchi, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, 14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy, Tokyo, Japan, September 3-8, 2006.

Evolution of Cr-doped and Gd-doped GaN layers grown at low temperatures (Best Paper Awards), Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Magnetic properties of Gd-doped GaN single layer and GaGdN short period superlattices grown by RF-MBE, S.W. Choi, Y.K. Zhou, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Electronic structure of ferromagnetic element Cr in DMS GaCrN observed in X-ray absorption spectra, S. Emura, S. Kimura, M. Hashimoto, S. Kobayashi, S.W. Choi, M.S. Kim, Y.K. Zhou and H. Asahi, IUMRS International Conference in Asia 2006, Jeju, Korea, September 10-14, 2006.

Unique Lattice Alignment around Cr Atoms Doped in GaN under Some Growth Condition, S. Emura, S. Kobayashi, S. Kimura, Y. Yamauchi, S.W. Choi, Y.K. Zhou, H. Ofuchi, S. Hasegawa, H. Asahi, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, September 19-20, 2006.

Growth and characterization of ferromagnetic cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, H. Ofuchi, S. Shanthi, M. Ishimaru, Y. Hirotsu, Y. K. Zhou, S. Hasegawa and H. Asahi, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006, Osaka, September 19-20, 2006.

Growth and characterization of GaN-based diluted magnetic semiconductors for semiconductor spintronics (Invited), S. Hasegawa, M. Funakoshi, Y. Yamauchi, Y.K. Zhou, S. Emura and H. Asahi, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium 2006, Osaka, November 20-22, 2006.

GaN-based diluted magnetic semiconductors for nano-spintronics, H. Asahi, S. Hasegawa, S. Emura and Y.K. Zhou, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Growth and characterization of cubic GaCrN, S. Kimura, S. Emura, Y.K. Zhou, S. Shanthi, Y. Yamauchi, Y. Hiromura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Defect analysis on MBE grown ferromagnetic GaCrN epitaxial layers, S. Shanthi, S. Kimura, Y.K. Zhou, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Epitaxial growth and magnetic properties of GaGdN/GaN superlattice structures, S.W. Choi, Y.K. Zhou, S. Kimura, M. Funakoshi, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

Low temperature growth of GaCrN and GaGdN layers and their properties, Y.K. Zhou, S.W. Choi, S. Kimura, S. Emura, S. Hasegawa and H. Asahi, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience, Awaji, Hyogo, December 8-9, 2006.

［ 国際会議の組織委員、国際雑誌の編集委員 ］

朝日	一	14th International Conference on Molecular Beam Epitaxy （組織委員会副委員長、プログラム委員長）
朝日	一	15th International Conference on Ternary and Multinary Compounds（プログラム委員）
朝日	一	2006 International Conference on Solid State Devices and Materials（プログラム委員）
朝日	一	14th International Conference on Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy and Related Techniques（出版委員）
朝日	一	18th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials （国際諮問委員、プログラム委員）
朝日	一	2007 International Conference on Solid State Devices and Materials（プログラム委員）
朝日	一	19th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials （組織委員、国際諮問委員）
朝日	一	International Symposium on Compound Semiconductors 2007 （組織委員、プログラム委員）
朝日	一	Journal of Crystal Growth（編集委員）
朝日	一	Current Applied Physics（編集委員）
朝日	一	J. of Materials Science: Materials in Electronics（編集委員）
朝日	一	e-Journal of Surface Science and Nanotechnology（Advisary Board 委員）

［ 国内学会 ］

応用物理学会	7 件
電子材料シンポジウム	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）（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	7,500

プロセスファンドリー

主任者、教授　　川合　知二
室長、客員助教授　村杉　政一
客員助教授　　河原　敏男（～平成 18 年 11 月 15 日）
支援研究員　　大野　隆裕
支援研究員　　松井　良憲
支援研究員　　岡本　一将
事務補佐員　　圓見　恵子

a) 概要

平成 14 年にスタートした文部科学省ナノテクノロジー総合支援プロジェクト（RR2002）の一環として、産業科学研究所と産業科学ナノテクノロジーセンターとを基盤に設立した当ナノテクノロジープロセスファンドリーは、学内外研究者がナノテクノロジーをキーとした研究・開発また商品化・事業化を早期に達成できるよう、個別の研究機関や研究開発プロジェクトでは整備の難しい大型・特殊な施設・設備とその利用に関する高度な技術などを提供する環境を整えてきた。

最終年度にあたる平成 18 年度は、合計 36 件の研究支援を効率的に遂行してきた。（表－1）

		共同研究				装置利用				技術代行				技術相談				合計
		学	産	公	計	学	産	公	計	学	産	公	計	学	産	公	計	
H18 年度	申込	13	5	2	20	5	2	1	8	0	0	0	0	0	8	0	8	36
	支援	13	5	2	20	5	2	1	8	0	0	0	0	0	8	0	8	36

（表－１；平成 18 年度の支援課題件数）

支援を遂行する上で掲げてきた狙いは、ナノテクノロジー研究に携わる産学官の学内外研究者に対して施設・設備の利用の機会を提供し、またこれらの施設・設備を活用した極微細加工や観測・評価等の高度な技術支援を行ない、総合的なナノテクノロジー追究ができるよう支援をすることである。
産業科学研究所のナノテクノロジー研究で培われてきたナノスケール薄膜形成技術を核として、酸化物・有機物をはじめとする多様な物質のナノスケール薄膜形成とその加工技術が、この支援の中核に位置づけられている。

具体的には、ナノスケール薄膜の形成およびそれらの極微加工までのプロセスを一箇所で支援できるよう（ファンダリ機能)、下記の３領域に対して支援すべく取り組んできている。

（１）有機・無機薄膜形成支援
有機物、無機物、融点の高い材料や電極形成のための金属材料等を対象として、各種材料また各用途に最適な汎用性の高いシステムを用意し支援提供する。

（２）有機・無機薄膜をデバイス化するための極微加工支援
酸化物薄膜や有機薄膜の機能を引き出すために必要な、基板上に極細パターン形成を行う装置を充実させ、薄膜材料の基礎物性から応用デバイスの観察や評価まで、広い範囲の要求に対応できるシステムを用意し支援提供する。

（３）有機・無機薄膜評価支援
薄膜作製とその機能評価を容易にするための装置を充実させ、希望する多種多様な実験を行うときに共通して必要となる機器も含め、要請に応えた評価システムを用意し支援提供する。

b) 成果

平成 18 年度を振り返っての主な成果として言えることは、商品化や事業化一歩手前のところまで漕

ぎ着けている支援研究が出てきていることが挙げられる。
前年度に比べての特徴としては、低調だった産業界への支援が久しぶりに増加した。又、前年同様に地方や私立の大学からの支援依頼が多くプロジェクトの主旨に沿った支援状況に至っている。
学内外に開放したナノテクノロジー研究支援組織として認知も進み、当ナノテクノロジープロセスファンドリーの支援キャパシティに対して、学内外のナノテクノロジー研究者による利用がここ数年目一杯続いている状況にある。
平成 18 年度での取り組みとその成果について、下記 4 項目にて説明を加える。

・支援環境の充実
平成 15 年度まで産業科学研究所内の 7 ヶ所に分散していた各種支援装置を、新たに竣工したナノテクノロジー総合研究棟の 4 階クリーンルームと 5 階オープンラボスペースの 2 ヶ所に平成 16 年度移設し集中した。
研究プロセスに応じて①ナノ薄膜形成の装置群（5 階オープンラボ）、②微細加工の装置群（4 階クラス 1,000 クリーンルーム）を一層効率よく共同利用できるよう、利用開始後 5 年目となった装置の維持補修と点検修理を実施し、利用環境の整備と充実を平成 18 年度では取組んだ。

・支援状況の総括
これまでの 5 年間で延べ 180 件の支援依頼があったが、産業科学ナノテクノロジーセンター内のアドバイザリーの諸先生方で構成する“ナノテクノロジープロセスファンドリー支援プログラム実行委員会”で支援可否を採択した結果、延べ 172 件を実質的に支援してきた。
この内、延べ 55 件の技術相談は依頼内容から判断し実際の支援に繋がらなかったものの、ナノテクノロジープロセスファンドリー施設を提供し利用した支援課題は延べ 117 件となり、それらの支援形態としては共同研究が 63 件、施設利用が 52 件、技術代行が 2 件となっている。
また、ナノテクノロジープロセスファンドリーを活用して支援依頼元が意図する成果が得られるという証にもなるが、多数年に亘る支援課題が延べ 44 件を数える。

・平成 18 年度での新たな取組み
プロジェクトの極微細加工・造形グループ 5 機関は「集中講義」と「各機関の特徴ある実習」の 2 部制による「平成 18 年度人材育成スクール」を企画した。
平成 18 年 9 月 19 日&20 日の「実習」を担当したファンドリーは 9 名を募集したが、企業から 9 名及び学部生 1 名と博士前期課程 1 名の計 11 名を受入れ、①ITO 薄膜の作製、②金薄膜の作製、③金電極の作製の 3 コースを開講した。

・今後の役割
5 年間の支援業務の内容について、2004 年の中間と 2006 年の最終との 2 回評価を受けたが、連携がスムーズであった極微細加工造形グループの他の 4 機関（産業技術総合研究所、早稲田大学、東京工業大学、広島大学）ともども評価結果は上々であった。評価委員会からはナノテクノロジー支援を平成 19 年度以降も発展的に継続することが支持され、現在文部科学省で多方面からの観点により鋭意企画されているが、ファンドリーとしてもこれまでのプロジェクトの実績を基にしてまた新たな取組み内容を追加して、次期プロジェクトに参画するための準備を進めている。
希望通り新プロジェクトに参画できたならば、学内外の研究者支援にこれまで以上に努めることができる体制となるので、引き続き利用頂ける機関を目指していく。

[原著論文]

Dependence of Acid Yield on Chemically Amplified Electron Beam Resist Thickness, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozawa, H. Yamamoto, and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 45 (2006) 5445-5449.

Relationship between Acid Concentration and Acid Yield in Chemically Amplified Electron-Beam Resist, T. Shigaki, K. Okamoto, T. Kozawa, H. Yamamoto, and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys., Part 1 45 (2006) 5735-5737.

Reaction Mechanism of Fluorinated Chemically Amplified Resists, H. Yamamoto, T. Kozawa, K.Okamoto, and S. Tagawa, J. Vac. Sci. Technol. B 24 (2006) 1833-1836.

Acid Generation Mechanism of Poly(4-hydroxystyrene)-based Chemically Amplified Resists for Post-optical Lithography ―Acid Yield and Deprotonation Behavior of Poly(4-hydroxystyrene) and Poly(4-methoxystyrene) ―, A. Nakano, T. Kozawa, K.a Okamoto, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa, Jpn. J. Appl. Phys. Part 1 45 (2006) 6866-6871.

Protonation Sites in Chemically Amplified Resists for Electron-Beam Lithography, K. Natsuda, T. Kozawa, K. Okamoto, and S. Tagawa, Jpn. J. Appl. Phys. Part 2 45 (2006) L1256-L1258.

Pulse Radiolysis of Polystyrene in Cyclohexane -Effect of Carbon Tetrachloride on Kinetic Dynamics of Dimer Radical Cation-, K. Okamoto, T. Kozawa, M. Miki, Y. Yoshida, and S. Tagawa, Chem. Phys. Lett. 426 (2006) 306-310.

Formation of Trimer and Dimer Radical Cations of Methyl Substituted Benzenes in γ-Irradiated Low Temperature Matrices, K. Okamoto, S. Seki, and S. Tagawa, J. Phys. Chem. A 110 (2006) 8073-8080.

Analysis of Acid Yield Generated in Chemically Amplified Electron Beam Resist, T. Kozawa, T. Shigaki, K. Okamoto, A. Saeki, S. Tagawa, T. Kai, and T. Shimokawa, J. Vac. Sci. Technol. B 24 (2006) 3055-3060.

[総説]

強誘電体薄膜 $BaZrxTi_{1-x}O_3$ の超格子による温度特性の制御、河原敏男、 大野隆裕、 田畑仁、川合知二、日野孝紀、 超音波 TECHNO、9-10 (2006) 31-34.

[特許]

「金属ナノ粒子のクリーニング方法」阿川義昭、松浦正道、河原敏男、川合知二　特願 2006-343794.

[国際会議]

Formation of aggregated radical cations of benzene and polystyrene in condensed phases. (poster), *K. Okamoto, S. Seki, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa Gordon Research Conference (2006 GRC on Radiation Chemistry), ME, USA, Jun. 2-7, 2006.

Magnetic and Electric Properties of Fe-Doped ITO Thin Films.(poster), *S. Kohiki, T. Ohno, T. Kawahara, M. Murasugi, H.Tanaka and T. Kawai International Conference on Magnetism (ICM-2006), Kyoto, Japan. Aug. 22-30, 2006.

Nanotechnology Process Foundry in ISIR for the Supporting of the Nanotechnology in Japan (poster), *M. Murasugi, T. Kawahara, T. Ohno, Y. Matsui, K. Okamoto, and T. Kawai SISNN-2006, Suita, Japan, Sep. 19-20, 2006.

［ 国内学会 ］

応用物理学会	4 件
放射線化学討論会	1 件
その他	

［ 受託研究 ］

単位：千円

川合　知二	文部科学省（新世紀重点研究創生プラン; RR2002）	高度な極微細加工や観測・評価等の総合的な支援（ナノテクノロジープロセスファンドリー）	90,000

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）	松本　和彦
教授（オープンラボラトリー管理室、兼任）	小林　光
教授（オープンラボラトリー管理室、兼任）	笹井　宏明
技術担当研究員（オープンラボラトリー管理室）	吉田　亮、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、2006 年度は 32 の研究テーマについて 27 の研究代表者より利用があった。以下に 27 の研究代表者一覧を示す。

研究代表者	所属	研究代表者	所属
明石満　教授	工学研究科	中嶋英雄　教授	産業科学研究所
生田一良　教授	微生物病研究所	藤原康文　教授	工学研究科
馬越祐吉　教授	ナノサイエンス・ナノテクノロジー研究推進機構	福井希一　教授	工学研究科
大竹久夫　教授	工学研究科	増原宏　教授	工学研究科
尾崎雅則　教授	工学研究科	溝口理一郎　教授	産業科学研究所
掛下知行　教授	工学研究科	村杉政一　客員助教授	産業科学研究所
川合知二　教授	産業科学研究所	森博太郎　教授	超高圧電子顕微鏡センター
黒田俊一　助教授	産業科学研究所	森勇介　助教授	工学研究科
桑畑進　教授	工学研究科	山崎義光　助教授	医学系研究科
小林光　教授	産業科学研究所	山本雅彦　教授	工学研究科
佐々木孝友　教授	工学研究科	吉田博　教授	産業科学研究所
菅沼克昭　教授	産業科学研究所	吉田陽一　教授	産業科学研究所
田川精一　教授	産業科学研究所	和田健彦　助教授	工学研究科
谷口直行　教授	微生物病研究所		

加速器量子ビーム実験室

実験室長・教授	真嶋　哲朗（兼任）
室長補佐・教授	田川　精一（兼任）、磯山　悟朗（兼任）、吉田　陽一（兼任）
助教授	加藤　龍好（兼任）、誉田　義英（兼任）、 関　 修平（兼任）、藤塚　 守（兼任）、古澤　孝弘（兼任）、川井　清彦（兼任）、 楊　 金峰（兼任）
特任助教授	遠藤　政幸（兼任）
助手	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）
特任助手	立川　貴士（兼任）、坂本　雅典（兼任）、近藤　孝文（兼任）
技術職員	山本　 保 、馬場　久美子
事務補佐員	川口　 奈央子(2007.1.9 まで)

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 18 年度の利用状況は、前期に保守作業の 13 日を含む 108 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 195 日で通算運転時間は 2,300 時間である。L バンドライナックは、もっとも稼働率の高い装置であるため、装置のトラブルは多いが、関係者の努力と迅速な対応により、ほとんどのトラブルは発生したその日のうちに復旧した。

・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。前年度行った接地系の配線のし直し、電源内ノイズ除去フィルターの改良や時定数の変更などで、電源の即断ヒューズが切れることは無くなったが、依然として長時間の安定運転が行える状況ではないため、今年度も引き続きノイズ対策を試みた。現在はモジュレーター筐体を変更し、根本的な接地回路系の整備を行っているところである。

・RF 電子銃ライナック

RF 電子銃ライナックの正式な名称は、レーザーフォトカソード S バンド RF 電子銃ライナックであり、RF 電子銃から発生したピコ秒電子線パルスを、最大 40MeV まで加速し、磁気パルス圧縮法を用いてフェムト秒領域までの短時間パルス電子線を発生することができる。これらフェムト秒・ピコ秒電子線パルスは、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。本年度は運転は 8 ヶ

月、約 950 時間であり、順調に運転を行うことができた。

・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、微生物病研究所ならびに医学部その他の研究者に広く利用された。延べ稼働時間は約 2520 時間であり、昨年度に比べて利用時間が増加した。得に工学研究科の利用が飛躍的に増加しており、前年比にして約 3 倍の 1000 時間を越える利用が行われた。保守に関しては、本年度はコバルト 60 照射設備管理システムの抜本的・全面的な改修に着手し、改修工事は現在も進行中である。

・共同利用

本年度の共同利用件数は、産研が 26 件、学内が 12 件、学外の利用者を含むものが 4 件の合計 42 件であった。研究会は、平成 18 年 11 月 10 日に「極限量子ビーム開発の現状とその利用」の題目で、平成 19 年 1 月 19 日に「量子ビーム誘起反応の解明と応用」の題目で、更に平成 19 年 3 月 14 日に「平成 18 年度成果報告会」を産研講堂で開催した。今年度は 240 名を越える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 151 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 18 年 4 月 13、14 日に、大阪大学コンベンションセンターMO ホールにて行った。新規登録者に対する教育訓練は平成 18 年 5 月 15 日に加速器量子ビーム実験室セミナー室で行なった

電子顕微鏡室

室長　教授　　弘津　禎彦

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、ナノメートルサイズの部位の元素分析に極めて有効である。

b） 成果

2006 年度に 300 kV 電子顕微鏡を利用した研究室は 8 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 319 件であった。

電子プロセス実験室

室長（兼任）	教授	朝日　一
（兼任）	助教授	長谷川　繁彦
（兼任）	助教授	松本　卓也
（兼任）	助教授	須藤　孝一
（兼任）	助手	周　逸凱
（兼任）	助手	前橋　兼三

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。

ナノ加工室

室長　　菅沼　克昭（兼任）
技術職員　　谷畑　公昭、石橋　武（兼任）
特任研究員　　榊原　昇一（兼任）

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

縮小撮影を利用してガラスマスクを作製するための装置を立ち上げた。これによって２０μｍ程度のパターニングが容易に出来るようになった。

・加工依頼

４部門６研究室から計４５件の加工依頼があり、１５３サンプルを提供した。

・「マイクロデバイス作製・応用実習会」の実施

COE 新規事業の一環としてマイクロデバイスの作製とその応用に関する実習会を主催した。２日間の日程で３回実施し、計８名の参加者があった。

・「nanotech 2007 国際ナノテクノロジー総合展・技術会議」への参加

２００７年２月２１日～２３日に東京で行われた上記の展覧会において、産研ナノテクノロジーセンターのブースに出展した。

材料解析センター

センター長・教授	笹井　宏明（兼任）
助教授	鈴木　健之
助手	高井　嘉雄（兼任）
技術職員	山田　等（兼任）
	田中　高紀（兼任）
	松崎　剛（兼任）
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

二量体エステル類の合成のためには一級アルコール類の酸化的二量化反応はアルデヒドの Tishchenko 反応と同様に重要な方法である。これまでに、我々はジオールの酸化的ラクトン化反応や一級アルコール類の Oppenauer 酸化に有効な Ir aminoalkoxide 錯体を開発している。本錯体が室温でいろいろな一級アルコール類に対し酸化的二量化反応を促進することを見出した。また本 Ir 触媒をアルデヒドに作用させると Tishchenko 反応が進行することがわかった。

また、この Ir 触媒を用いる酸化的ラクトン化反応を利用して柑橘類の害虫である Spined citrus bug のフェロモン合成に成功した。

[原著論文]

Enantiocontrolled Synthesis of the Epoxycyclohexenone Moieties of Scyphostatin, a Potent and Specific Inhibitor of Neutral Sphingomyelinase, T. Katoh, T. Izuhara, W. Yokota, M. Inoue, K. Watanabe, A. Nobeyama, T. Suzuki, Tetrahedron, 62 (2006) 1590-1608.

Convergent and Enantioselective Total Synthesis of (−)-Nalanthalide, a Potential Kv1.3 Blocking Immunosuppressant**,** T. Abe, K. Iwasaki, M. Inoue, T. Suzuki, K. Watanabe, T. Katoh, Tetrahedron Lett., 47 (2006) 3251-3255.

Synthesis of the Hemiacetal Pheromone of the Spined Citrus Bug Biprorulus Bibax Utilizing a Iridium Catalyzed Oxidative Lactonization, T. Suzuki, K. Morita, H. Ikemiyagi, K. Watanabe, K. Hiroi, T. Katoh, Heterocycles, 69 (2006) 457-461.

[国際会議]

Iridium-catalyzed oxidative dimerization and Tishchenko reaction, T. Suzuki, T. Yamada, T. Matsuo, K. Watanabe, T. Katoh, 7th Tetrahedron Symposium, Kyoto, Japan, May.24, 2006.

Development of Oxidative Reactions Catalyzed by Ir Complex, N. K. Mangu, T.Suzuki, T. Yamada, T. Matsuo, K. Watanabe, T. Katoh, H. Sasai, the 10th International KYOTO Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov.13-17, 2006.

Iridium-catalyzed oxidative dimerization and Tishchenko reaction, T. Suzuki, T. Yamada, T. Matsuo, K. Watanabe, T. Katoh, XXII International Conference on Organometallic Chemsitry, Zaragoza, Spain, July 23-28, 2006.

[国内学会]

第 53 回有機金属化学討論会	1 件
第 86 回有機合成シンポジウム	1 件
日本化学会第 87 春季年会	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

若手研究 (B)

鈴木　健之	生物活性物質合成のための 9 族遷移金属錯体を活用する新規不斉触媒反応の開発	700

[研究助成金]

鈴木　健之	(財)徳山科学技術振興財団	イリジウム触媒を用いる酸化的二量化反応とTishchenko反応	240
鈴木　健之	(財)上原記念生命科学財団	イリジウム錯体触媒を用いる環境調和型酸化反応の開発と有用物質合成への展開	5,000
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：真嶋哲朗教授

・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：山口明人教授

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：田畑仁教授(平成 18 年 11 月 30 日まで) ・吉田博教授(平成 18 年 12 月 1 日より)

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・半導体・セラミックス、機械部材、輸送機器部材への応用、環境調和鉛フリー実装技術の低温化、ナノペースト・オンデマンド配線技術。生体分子の有機分子修飾法による機能性分子材料、多機能有機分子触媒の固定化を基盤とする環境調和型プロセス。ＡＢＣ輸送体Ａサブファミリーの機能解析および血小板からのスフィンゴシン１リン酸輸送体の同定、細胞間情報伝達による薬剤排出トランスポーター発現調節機構の発見、ビーム科学の医療応用、フォトカソード高周波電子銃加速器を用いた電子線･X 線制御技術。表面科学的手法による分子認識機構研究およびバイオセンサ素子・ネットワークと機械学習技術に基づく適応インタフェース、産業構造の転換と予測、新産業予測とデザイン、安全・安心物作りのための知識共有。

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、ナノ構造・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創製と物性解明に関する研究
・ロータス型ポーラス超高純度鉄の作製に関する研究
・新規ロータス型ポーラス材料創製技術の確立と表面加工による機能性付与に関する研究
・ナノペースト・オンデマンド配線技術の開発に関する研究
・環境調和鉛フリー実装技術の低温化に関する研究
・レーザー機能化学とその応用に関する研究
・機能性生体分子ナノスケールワイヤの創成に関する研究
・スピロ型不斉配位子 SPRIX を用いる新規反応の開発に関する研究
・酸–塩基二重活性型不斉有機分子触媒の創製に関する研究
・ナノマテリアル生成のための励起ラジカルに関する研究

ハード材料基盤研究グループ

教授	中嶋　英雄（兼）、菅沼　克昭（兼）
特任助教授	玄　　丞均
特任助手	金　　槿銖、上野　俊吉

a) 概要

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、金属およびセラミックスを水素や窒素などの高圧ガス中で溶解し一方向凝固させて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 1μm 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、連続鋳造法を用いたポーラスマグネシウム作製方法を確立するとともに、東北大学多元物質科学研究所の共同開発により、 ロータス型ポーラス超高純度鉄の創製、 ロータス型ポーラス銅の気孔内修飾による高機能化、 超音波を利用した新しいコーティング法による耐食性皮膜の作製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立し、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低温化技術の開発を行った。

b) 成果

・ロータス型ポーラス金属の創製

ロータス型ポーラスマグネシウムの量産化および低コスト化をめざした連続鋳造法によるポーラス金属の作製法を新たに開発した。加圧水素ガス雰囲気中で銅を高周波溶解し，1 mm/min ～ 200 mm/min の一定速度で引出しながら凝固させ、幅 30mm×厚さ 10mm×最大長さ 700mm のロータス型ポーラスマグネシウムを作製することに世界に先駆けて成功した。

・ロータス型ポーラス超高純度鉄の創製

東北大学多元物質科学研究所の一色グループにより開発された純度 5N 以上の超高純度鉄を原料として用い、2.5MPa の加圧水素雰囲気下で連続帯溶融法によりロータス型ポーラス超高純度鉄の作製に成功し、気孔形成のメカニズムを解明した。純度が高くなるにつれて、核生成サイトが減少するため、気孔の数が減少し、気孔径が増加するなど、原料に含まれる不純物量による気孔形成のメカニズムを明らかにした。

・ロータス型ポーラス銅の気孔内修飾による高機能化

東北大学多元物質科学研究所の田中グループとの共同開発として、Ar イオン照射によりロータス型ポーラス銅の気孔内部にマイクロ突起物を生成させる技術を確立し、流体フィルターや排気触媒など機能付加する道を拓いた。銅を酸化させてから Ar イオン照射を行うと Cu_2O からなるアスペクト比の高い円錐状なのマイクロ突起体を形成させることができるなど、Ar イオン照射の条件によりマイクロ突起体の形状を制御し得ることを明らかにした。

・超音波を利用した新しいコーティング法による耐食性皮膜の作製

東北大学多元物質科学研究所の葛西グループが開発した超音波を利用した新しい表面処理技術を用

い、同グループとの共同開発として、ステンレス鋼表面に $LaPO_4$ 皮膜を作製する技術を確立し、耐高温腐食性に優れる $LaPO_4$ 環境皮膜を有するステンレス鋼の開発に成功した。1000℃での溶融塩による腐食試験でも皮膜の健全性が確認され、ステンレス鋼の耐食性が向上した。

・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℃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℃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。本年度は、金属ナノ粒子を低温で結合させる方法として、加熱処理ではなく化学的な処理を行い、常温で銀ナノ粒子を焼結させることに成功した。化学処理による組織変化を観察した結果、銀ナノ粒子の焼結過程が確認できた。また、電気抵抗は,$10^{-5}\Omega$cm オーダーの低抵抗が実現できた。

・環境調和鉛フリー実装技術の低温化

錫ウィスカは、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、錫ウィスカ発生は深刻な問題となる。本年度は、錫ウィスカ抑制を目的に表面処理錫めっきを開発し、大気中を含む各種雰囲気で 1 年以上の長時間放置した結果、錫ウィスカが効果的に抑制できた。今後、ぬれ性などめっきの諸特性を調べ、実用化を推進する予定である。

低温鉛フリーはんだの Sn-Zn 系合金は、高温高湿保持による劣化が問題になっている。この合金に第３元素を微量添加し、高温高湿環境下での劣化が抑制できる新 Sn-Zn 系合金を開発した。

［ 原著論文 ］

Size Effects on Tensile Strength of Lotus-type Porous Copper, H. Sueno, M. Tane, J.S. Park, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2203-2207.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni_3Al with and without Boron, T. Ide, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2116-2119.

Effect of Pore Morphology on Compressive Yield Strength of Lotus-type Porous Copper with Various Specimen Sizes, J.S. Park, S.K. Hyun, H. Sueno, M. Tane, H. Nakajima, Y.S. Um, B.Y. Hur and F. Ono, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2208-2212.

Effect of Silica Additive on the Formation of Lotus-type Porous Alumina under Unidirectional Solidification, S. Ueno, L.M. Lin, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2167-2171.

Effect of Hydrogen Pressure on Moisture-Based Fabrication of Lotus-type Porous Nickel, H. Onishi, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2120-2124.

Development of an Electrophoretic Sol-gel Coating Process for Porous Metals, M. Inoue, S.K. Hyun, K. Suganuma, H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2161-2166.

Laser Welding of Lotus-Type Porous Iron, H. Yanagino, T. Tsumura, H. Nakajima, S.K. Hyun and K. Nakata, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2254-2258.

Electrochemical Behaviour of Lotus-type Porous SUS304L and SUS316L Stainless Steels, M.

Fuseya, T. Nakahata, S.K. Hyun, S. Fujimoto, H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2229-2232.

Development of Lotus-type Porous Copper Heat Sink, T. Ogushi, H. Chiba and H. Nakajima, Mater. Trans., 47[9] (2006) 2240-2247.

Vibration-damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium, Z.K. Xie, M. Tane, S.K. Hyun, Y. Okuda and H. Nakajima, Mater. Sci. Eng., A., 417[1-2] (2006) 129-133.

Vibration-damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium at Room Temperature, Z.K. Xie, T Banno, Y. Yamada, M. Tane, S.K. Hyun, Y. Okuda and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 510-511 (2006) 694-697.

Effect of Porosity on Fatigue Strength of Lotus-type Porous Copper, H. Seki, S. Yamazaki, M. Otsuka, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 510-511 (2006) 966-969.

Fabrication and Properties of Porous Materials with Directional Elongated Pores, H. Nakajima, S. K. Hyun, M. Tane and T. Nakahata, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 295-300.

Fabrication and Tensile Properties of Lotus-type Porous Iron and SUS 304L Stainless Steel, S.K. Hyun, T. Ikeda, M. Tane and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 337-342.

Extended Effective-field Analysis for Electrical Conductivity of Lotus-type Porous Nickel, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 331-336.

Measurement and Analysis of Vibration Damping Capacity of Lotus-type Porous Magnesium, Z.K. Xie, S.K. Hyun, Y. Okuda and H. Nakajima Mater. Sci. Forum, 512 (2006) 325-330.

Evaluation of Elastic and Thermoelastic Properties of Lotus-type Porous Metals via Effective-mean-field Theory, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Scri. Mater., 54 (2006) 545-552.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Unidirectional Solidification in Nitrogen Atmosphere, M. Kashihara, S.K. Hyun, H. Yonetani and H. Nakajima, Scri. Mater., 54 (2006) 509-512.

Mechanical Properties of Lotus-type Porous Carbon Steel Fabricated by Continuous Zone Melting Method, T. Kujime, S.K. Hyun and H. Nakajima, Metall. Mater. Trans. A, 37 (2006) 393-398.

Compressive Properties of Lotus-type Porous Stainless Steel, T. Ide, M. Tane, T. Ikeda, S.K. Hyun, and H. Nakajima, J. Mater. Res., 21 (2006) 185-193.

A New Fabrication Method of Porous Ceramics using Unidirectional Solidification, S. Ueno, L.M. Lin and H. Nakajima, Adv. Sci. Technol., 45 (2006) 799-802.

Impurity Diffusion in -TiAl Single Crystals, Y. Nose, T. Terashita, T. Ikeda and H. Nakajima, Acta Mater., 54, (2006) 2511-2519.

Comparison of Hot-corrosion Behaviors of Al_2O_3, Lu_2O_3 and Their Silicates, S. Ueno, T. Ohji and Hua- Tay Lin, J. Ceram. Process. Res., 7[3] (2006) 201-205.

A Crystal Structure Consideration of an Orthorhombic $BaEu_2Mn_2O_7$ Phase, S. Ueno, A. Shimono and N. Kamegashira, Ceram. Int., 32[8] (2006) 947-949.

Recession Mechanism of $Lu_2Si_2O_7$ Phase in High Speed Steam Jet Environment at High Temperatures, S. Ueno, D.D. Jayaseelan, T. Ohji and H.T. Lin, Ceram. Int., 32[7] (2006) 775-778.

Designing Lutetium Silicate Environmental Barrier Coatings for Silicon Nitride and Its Recession Behavior in Steam Jets, S. Ueno, T. Ohji and H.T. Lin, J. Ceram. Process. Res., 7[1] (2006) 20-23.

Water Vapor Corrosion Behavior of Llutetium Silicates at High Temperature, S. Ueno, D.D. Jayaseelan, T Ohji, Ceram. Int., 32[4] (2006) 451-455.

A Structural Consideration of a Solid Solution $La_4Ni_{3-x}Mn_xO_{10}$, S. Ueno, H.B. Misram and N. Kamegashira, Key Engin. Mater., 317-318 (2006) 877-880.

Comparison of Water Vapor Corrosion Behaviors of $Ln_2Si_2O_7$ (Ln=Yb and Lu) and $ASiO_4$ (A=Ti, Zr and Hf) EBC's, S. Ueno, D.D. Jayaseelan, H. Kita, T. Ohji and H.T. Lin, Key Engin. Mater., 317-318 (2006) 557-560.

In-situ Formation and Coating of Cordierite Whiskers on Cordierite Based Honeycomb Support, D.D. Jayaseelan, S. Ueno, H. Kita, N. Kondo and T. Ohji, Key Engin. Mater., 317-318 (2006) 701-704.

Casting and Mechanical Properties of Lotus-type Porous Hastelloy X, K.Taguchi, M. Sato, A. Mizuda, Y. Matsuzaki, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 219-222.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni3Al by Unidirectional Solidification, T. Ide, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 229-232.

Effect of Applied-Stress Direction on Compressive Properties of Lotus-type Porous Stainless Steel, T. Ide, T. Ikeda, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 551-554.

Fabrication of Lotus-type Porous Silicon by Unidirectional Solidification in Mixture Gas of Hydrogen and Argon, T. Nakahata, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 223-228.

Fabrication of Lotus-type Porous Silver by Unidirectional Solidification in Oxygen Atmosphere, T. Nakahata, S.K.Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 247-250.

Fabrication of Lotus-type Porous NiTi Shape Memory Alloys, M. Sugiyama, S.K. Hyun, M. Tane and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 233-236.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals by Continuous Zone Melting and Continuous Casting Techniques, S.K. Hyun, J.S. Park, M. Tane and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 211-214.

Fabrication of Lotus-type Porous Alumina by Unidirectional Solidification, S. Ueno, L.M. Lin, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 251-254.

Fabrication of Lotus-type Porous Carbon Steel by Unidirectional Solidification in Nitrogen Atmosphere, M. Kashihara, H. Yonetani, T. Kobi, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 215-218.

Measurement of Pore Length of Lotus-type Porous Nickel, H. Onishi, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 423-426.

Effect of Dissolved Hydrogen on Corrosion Behavior of Lotus-type Porous Stainless Steel, M.

Fuseya, T. Nakahata, S.K. Hyun, S. Fujimoto and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 623-626.

Tensile Properties of Lotus-type Porous Copper: Effect of Specimen Dimensions, H. Sueno, M. Tane, J.S. Park, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 529-532.

Electrical Conductivity of Lotus-type Porous Nickel: Measurements and Effective-Mean-Field Theory, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 597-600.

Yield Strength of Lotus-type Porous Iron Fabricated under Hydrogen or Nitrogen Atmosphere, M. Tane, T. Ichitsubo, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 463-466.

Relationship between Specimen Size and Compressive Yield Strength of Lotus-type Porous Copper, J.S. Park, H. Sueno, S.K. Hyun, M. Tane, H. Nakajima, Y.S. Um, B.Y. Hur and F. Ono, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 555-558.

Tribological Behaviour of Lotus-type Porous Metal, T. Kato, T. Nakahata and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 615-618.

Sound Absorption of Lotus-type Porous Magnesium, Z.K. Xie, Y. Yamada, T. Banno, S.K. Hyun, M. Tane, Y. Okuda and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 607-610.

Vibration-Damping of Lotus-type Porous Magnesium, Z.K. Xie, Y. Yamada, T. Banno, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 611-614.

Numerical Simulation of Laser Fusion Zone Profile of Lotus-type Porous Metals, T. Tsumura, T. Murakami, H. Nakajima and K. Nakata, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 647-650.

Formation of Ceramic Coatings on Porous Metals by Electrophoretic Sol-Gel Deposition, M. Inoue, S.K. Hyun, K. Suganuma and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 655-658.

Laser Welding of Lotus-type Porous Iron, H. Yanagino, T. Tsumura, H. Nakajima and K. Nakata, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 651-654.

Biocompatibility of Lotus-type Metals in Alveolar Bone, Y. Higuchi, Y. Oohashi and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 47-50.

Development of Lotus-Type Porous Copper Heat Sink, T. Ogushi, H. Chiba and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 27-34.

Fatigue Behavior of Lotus-type Porous Copper, S. Sasaki, H. Seki, S. Yamazaki, T. Yasuno, M. Otsuka, M. Murakami, S.K. Hyun, M. Tane and H. Nakajima, Porous Metals and Metal Foaming Technology, H. Nakajima and N. Kanetake, The Japan Inst. Metals, (2006) 585-588.

Effect of Bi and Pb on oxidation in humidity for low-temperature lead-free solder systems, K.S. Kim, T. Matsuura and K. Suganuma, J. Electron. Mater., 35-1 (2006) 41-47.

二探針ピエゾ駆動ホルダーを用いた導電性接着剤中の金属微粒子の電気的評価，川本直幸・村上恭和・進藤大輔、金 槿銖、菅沼克昭，日本金属学会誌，70-4 (2006) 384-388.

Advanced Transmission Electron Microscopy on Silver-Based Conductive Adhesive (In Japanese), Naoyuki Kawamoto, Yasukazu Murakami, Daisuke Shindo, Keunsoo Kim and Katsuaki Suganuma, J. Japan Inst. Metals, 70-4 (2006) 384-388.

Sn-Zn Low Temperature Solder, K. Suganuma and K.-S. Kim, J. Mater. Sci.: Materials in Electronics, 18-(1-3) (2006) 121-127.

Tin Whisker Prevention for Fine Pitch Connectors by Surface Roughening, M. Takeuchi, K. Kamiyama and K. Suganuma, J. Electronic. Mater., 35-11 (2006) 1918-1925.

Simultaneous Measurements of Conductivity and Magnetism by Using Microprobes and Electron Holography, Y. Murakami, N. Kawamoto, D. Shindo, I. Ishikawa, S. Deguchi, K. Yamazaki, M. Inoue, Y. Kondo and K. Suganuma, Appl. Phys. Lett., 88 (2006) 223103.

Electromigration Effect on Solder Bump in Cu/Sn-3Ag-0.5Cu/Cu System, K. Yamanaka, Y. Tsukada and K. Suganuma, Scripta Materialia, 55-10 (2006) 867-870.

Fabrication and Applications of Nano-metal Particle Composites by Ultrasonic, Y. Hayashi, H. Takizawa, Y. Saijo, T. Sekino, K. Suganuma and K. Niihara, Eco-process, Key Engineering Materials, 317-318 (2006) 231-234.

Differences in Heat Exposure Degradation of Sn Alloy Platings Joined with Ag-epoxy Conductive Adhesive, M. Yamashita and K. Suganuma, J. Mater. Sci., 41-2 (2006) 583-585.

Improvement in High-temperature Degradation by Isotropic Conductive Adhesives Including Ag-Sn Alloy Fillers, M. Yamashita and K. Suganuma, Microelectronics Reliability, 46[5-6] (2006) 850-858.

Degradation by Sn Diffusion Applied to Surface Mounting with Ag-epoxy Conductive Adhesive with Joining Pressure, M. Yamashita and K. Suganuma, Microelectronics Reliability, 46-7 (2006) 1113-1118.

［ 解説、総説 ］

一方向凝固ポーラス金属の作製と特性、中嶋英雄、材料の科学と工学, 43 (2006) 8-13.

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、大串哲朗、千葉博、中嶋英雄、まてりあ、45[9] (2006) 228-230.

連続帯溶融法によるロータス型ポーラス金属の作製、中嶋英雄、素形材、47[6] (2006) 45-49.

シリケート化合物の高温水蒸気腐食、上野俊吉、H.T. Lin、大司達樹、熱処理、46[4] (2006) 311-312.

ロータス金属、上野俊吉、玄均丞、中嶋英雄、熱処理、46[4] (2006) 191-192.

MGC 材料の内部摩擦、上野俊吉、高田智司、赤津隆、安田榮一、和久芳春、金属、76[6] (2006) 635-639

Printed electronics のためのナノ粒子微細配線技術、河染　満、金　槿銖、畑村　真理子、菅沼　克昭、粉砕、50（2006/2007）27-31.

金属ナノ粒子を応用したマイクロファブリケーション、金　槿銖、菅沼克昭、エレクトロニクス実装学会誌、9-7 (2006) 524-527.

韓国と米国の RoHS 関連規制の状況、菅沼克昭、金槿銖、エコ　グリップ、26 (2006) 27-33.

［ 著書 ］

金属ナノ粒子合成の歴史と概要（分担執筆)、菅沼克昭、金属ナノ粒子ペーストのインクジェット微細配線、シーエムシー出版、(2006)、3-6.

微細組織観察法（分担執筆)、金槿銖、金属ナノ粒子ペーストのインクジェット微細配線、シーエムシー出版、(2006)、237-242.

［ 特許 ］

「皮膜形成用組成物及びその利用」中嶋英雄、上野俊吉、葛西栄輝、林直人、特願 2007-077132

他 1 件申請（国内）

［ 国際会議 ］

Lotus-type porous Metals: Properties and Applications (Invited), S.K. Hyun and *H. Nakajima, 2nd International Conference on Ultra-Speed liner/rotary/motors-driven Feeder/rotors for Mechanical parts and Materials R6D, Jinju, Korea, May18-20, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Ceramics using Unidirectional Solidification Method (Oral), *S. Ueno, S.K. Hyun and H. Nakajima, 11th International Ceramics Congress, Hotel IONICA, Acireale, Italy, June4-9, 2006.

Mullite as A Coating Material (Invited), *S. Ueno, T. Ohji and H.T. Lin, Mullite 2006, University of Vienna, Vienna, Austria, June11-14, 2006.

Lotus-type Porous Copper Alloys Fabricated by Unidirectional Solidification in Hydrogen Atmosphere, *S.K. Hyun, T. Awadu, T. Ikeda and H. Nakajima, International Symposium on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC’2006), Fairmont Hotel, Fairmont Hotelm, Vancouver, Canada, July4-8, 2006.

Lotus-Type Porous Nickel-Free Stainless Steel with High Temperature Nitriding, *K. Alvarez, S.K. Hyun and H. Nakajima, International Symposium on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC’2006), Fairmont Hotel, Fairmont Hotelm, Vancouver, Canada, July4-8, 2006.

Fabrication of Porous Metals by Continuous Zone Melting and Continuous Casting (Invited), *H. Nakajima, S.K. Hyun and M. Tane, International Symposium on Processing and Manufacturing of

Advanced Materials (THERMEC'2006), Fairmont Hotel, Fairmont Hotelm, Vancouver, Canada, July4-8, 2006.

Low/high Temperature Lead-free Soldering, Tin Whiskers and Next Steps Towards the Future (keynote), K. Suganuma, 1st Electronics Systemintegration Technology Conference(ESTC2006), IEEE CPMT, Dresden, Germany, Sept.5-7, 2006.

Pore Morphology of Lotus-type Porous Copper Fabricated by Continuous Casting Technique (Oral), *J.S. Park, S.K. Hyun, M. Tane and H. Nakajima, The IUMRS International Conference in Asia 2006 (IUMRS-ICA2006), Hotel Shilla, Cheju,South Korea, Sept.10-14, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous NiAl and Ni_3Al Intermetallic Compounds (Oral), *T. Ide, M. Tane, S.K. Hyun and H. Nakajima, The IUMRS International Conference in Asia 2006 (IUMRS-ICA2006), Hotel Shilla, Cheju,South Korea, Sept.10-14, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals and Application to Biomaterials and Heat Sink (Invited), *H. Nakajima, J.S. Park, K. Alvarez, S.K. Hyun and S. Suzuki, The IUMRS International Conference in Asia 2006 (IUMRS-ICA2006), Hotel Shilla, Cheju,South Korea, Sept.10-14, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Metals by Continuous Zone Melting and Continuous Casting techniques (Invited), *H.Nakajima, S.K. Hyun, J.S. Park, and M. Tane, International Symposium on Synergistic Effects of Materials and Processing, Kumamoto, Japan, Sept.19, 2006.

Prevention of Sn Whisker Formation by Ni Thin Coating, Y. Yorikado, K.S. Kim, K. Suganuma, M. Tsujimoto and I. Yanada, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnoloby 2006, Sept. 19-20, 2006.

Effect of Bi Addition on Oxidation Properties of Sn-Zn Low-temperature Solder, J. Jiang, K. S. Kim and K. Suganuma, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnoloby 2006, Sept.19-20, 2006.

Sn Whisker Growth on Electroplated Lead-free Solder Finish for Advanced Flexible Electronic Packaging, S. K. Lin, Y. Yorikado, K. S. Kim, K. Suganuma, S. W. Chen, M. Tsujimoto and I. Yanada, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnoloby 2006, Sept.19-20, 2006.

Low Temperature Printing Wiring with Ag Salt Pastes (Oral), M. Kawazome, K. Suganuma, M. Hatamura, K.S. Kim, S. Horie, A. Hirasawa, and H. Tanaami, 39th International Symposium on Microelectronics (IMAPS2006), San Diego Convention Center, San Diego, California USA, Oct.8-12, 2006.

Alternative Choice in Lead-free Solder: Low Temperature Solders (Oral), Keun-Soo Kim, Jae-Ean Lee, Junxiang Jiang, Katsuaki Suganuma, Materials Science & Technology 2006 Conference and Exhibition (MS&T'06), Duke Energy Center, Cincinnati, Ohio, USA, Oct.15-19, 2006.

Fabrication of Lotus-type Porous Alumina by Unidirectional Solidification (Oral), *S. Ueno and H. Nakajima, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec.4-6, 2006.

Internal Friction Behavior of Unidirectionally Solidified Al_2O_3/YAG Eutectic, S. Takata, *S. Ueno, K. Suda, T. Akatsu, Y. Tanabe, E. Yasuda and Y. Waku, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec.4-6, 2006.

$Lu_2Si_2O_7$/Mullite Eutectic Film and Its Application as Environmental Barrier Coating (Oral), S Ueno, *H.T. Lin and T. Ohji, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec.4-6, 2006.

Effect of Silica and Calcia Additives on Formation of Porous Alumina during Unidirectional Solidification, *L.M. Lin, S. Ueno and H. Nakajima, 2nd Directionally Solidified Eutectic Ceramics Workshop, Kyoto Research Park, Kyoto, Japan, Dec.4-6, 2006.

Fabrication of Porous Materials with Micro and Nano Pores (Oral), *H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-13, 2007.

Fabrication of Lotus-type Porous Nickel Using Moisture Reaction between Casting Mould and Metal (Oral), *H. Onishi, Y. Suematsu, S.K. Hyun, and H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-13, 2007.

Wear Properties of Lotus type Porous Metals for the Application of an Air Bearing on the High Speed Rotary Motor (Oral), *Y.S. Um, H. Nakajima, J.H. Yoon, B.Y. Hur, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-13, 2007.

Fabrication of Lotus-type Porous Ni-(15, 28 and 31) at.% Al Alloys by Unidirectional Solidification in Hydrogen Atmosphere, *S.K. Hyun, T. Ikeda, and H. Nakajima, The 8th International Symposium on Eco-materials Processing and Design (ISEPD2007), Kitakyusyu International Conference Center, Kitakyushu, Japan, Jan.11-13, 2007.

Development of Multi-layered EBC for Silicon Nitride Ceramics (Oral), S. Ueno, T. Ohji and *H.T. Lin, 31th International Cocoa Beach Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, Jan.21-26, Florida, USA, 2007.

Oxidation Behavior of Zn-Sn and Zn-30In Alloys as High Temperature Lead-free Solder During Thermal and Humidity Exposure, Jae-Ean Lee, Keun-Soo Kim, Masahiro Inoue and Katsuaki Suganuma, 9th SANKEN International Symposium, Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006.

［ 国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員 ］

中嶋　英雄	Materials Letters (主席編集長)
中嶋　英雄	Scripta Materialia (ゲストエディター)
中嶋　英雄	Fifth International Conference on Porous Metals and Metal Foaming Technology (MetFoam2007) (組織委員会委員長)
中嶋　英雄	High Temperature Materials and Progress (国際編集委員)

中嶋　英雄	High Temperature Materials and Progress (ゲストエディター)
中嶋　英雄	Advanced Engineering Materials (ゲストエディター)
中嶋　英雄	Materials Transactions (ゲストエディター)
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	Fifth Pacific Rim International Conference on Materials (PRICM-5) (組織委員会委員)
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	International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC'2006) (組織委員会委員)
中嶋　英雄	2nd International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (国際顧問)
中嶋　英雄	International Conference on Eco-Materials Processing and Design VIII (国際顧問)
中嶋　英雄	International Symposium on Synergistic Effects of Materials and Processing (ISSEMP2006) (国際顧問)
中嶋　英雄	International Conference on Diffusion in 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）
菅沼　克昭	Electronics Goes Green 2005（国際諮問委員）

［ 国内学会 ］

日本金属学会	12 件
エレクトロニクス実装学会	5 件
その他	1 件

［ 科学研究費補助金 ］

基盤研究（A）　　単位：千円

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	11,870

基盤研究（C）

上野　俊吉	高次構造制御酸化物多孔体の生成メカニズム解明と触媒担体としての応用	2,500

［その他の競争的研究資金］

実用化のための可能性試験（JST）

玄　丞均	人体にやさしい新規な多孔質金属体の開発	1,000

平成 18 年度戦略的基盤技術高度化支援事業（JEITA）　　単位：千円

菅沼　克昭	電子実装の信頼性向上のためのウィスカ防止技術の開発	5,250

ソフト材料基盤研究グループ

教授	真嶋　哲朗（グループ長)、笹井　宏明
特任助教授	遠藤　政幸
特任助手	松井　嘉津也、坂本　雅典

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

機能性生体分子ナノスケール材料の創製

生体分子であるDNA及びタンパクの持つ分子集合と超分子形成の能力を活用し、構造の制御及び機能化、物性の検討を行った。ボトムアップ式のナノテクノロジーにおいて、人為的な情報にしたがって分子を並び替えるナノスケールの組み立て方法は必要不可欠である。明確な構造に組み上げることが可能なタバコモザイクウィルス(TMV)をフレームとして、自己集合により光機能性分子ピレンの規則的な集積を行った。その構造をAFMによって解析すると、2 μmを超えるロッド構造を形成し、ピレンが超分子構造の伸長を促進することが明らかとなった。ピレン間の相互作用は定常状態及び時間分解蛍光スペクトルによって検討し、ピレン間は一部が重なり、ピレンが超分子形成の際に予めスタックした構造をとることが明らかとなった。また、光捕集能を有するポルフィリン誘導体を導入したTMV超分子構造の構築を行った。超分子を形成させるとその内部でZn-ポルフィリンからポルフィリンへエネルギー移動が観測され、ポルフィリンの発光強度が増加することが明らかとなった。このことから、TMV超分子内へクロモフォアを集積することで光機能性材料を構築できることが明らかとなった。

・新規多機能不斉有機分子触媒の開発

分子内にルイス塩基であるホスフィン部位とブレンステッド酸として働くフェノール部位を有する有機分子触媒すなわち1,1’-bi-2-naphthol (BINOL)の3位にジフェニルホスフィノフェニル部位を導入した新規有機分子触媒の開発に成功した。α,β－不飽和カルボニル化合物類とトシルアルドイミン誘導体との不斉aza-Morita-Baylis-Hillman反応に本触媒を用いると、高収率・高選択的に付加体が得られることを見出した。触媒活性に関する知見を得るため分光学的手法による解析を行った結果、ナフチルーフェニル軸が有する動的軸性キラリティーがその反応性・選択性に寄与していることを明らかにした。

・新規スピロ型配位子の効率的調製法の開発

マロン酸エステルと多様なホモアリルハライド類との反応により多種多様な新規スピロ型配位子の効率的構築に成功した。調製した新規スピロ型配位子を有するパラジウム二価錯体は、アルケニルアルコールの触媒的不斉ワッカー型環化反応やタンデム環化反応において高い触媒活性と選択性を示すことが判明した。イソオキサゾリンとイソオキサゾールの特異的配位環境ならびに剛直なスピロ骨格が構築する不斉環境の有用性を明らかにした。

・ナノマテリアル生成のための励起ラジカルに関する研究

2種類の波長の励起光を照射する2色2レーザー技術を用いて、樹脂等の媒体中に金属ナノ粒子を三次元位置特異的に非破壊的に作成する方法を研究している。具体的には、前駆体および金属イオンを含む

媒体に、波長の異なる2つのレーザー光を照射することで、その交点に強い還元力をもつ活性ラジカル等の中間体を生成させ、金属イオンを還元して位置特異的に金属ナノ粒子を作成するものである。交点を動かすことによって三次元空間に自在に金属ナノ粒子アレイを作成し、微細配線を行うことができる。ポリビニルアルコール薄膜中に金ナノ粒子を作成し、2色2レーザー照射によってナノ粒子の生成効率が上昇することを確認した。これは、活性ラジカルが金イオンを効率的に還元するためである。同時に、単一波長（第1レーザー）のレーザー照射によっても、非効率的ながら金ナノ粒子が生成してしまうという問題点が生じているが、この問題はより提案に適した条件を選択することによって解決可能である。

[原著論文]

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks, Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T Majima, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 103[48] (2006) 18072-18076.

Temperature-Driven Oxygenation Rate Control by Polymeric Photosensitizer, H. Koizumi, Y. Shiraishi, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Majima, and T. Hirai, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[27] (2006) 8751-8753.

Rapid Long-Distance Hole Transfer through a Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[34] (2006) 11012-11013.

In Situ and Ex Situ Observations of the Growth Dynamics of Single Perylene Nanocrystals in Water, T. Tachikawa, H.-R. Chung, A. Masuhara, H. Kasai, H. Oikawa, H. Nakanishi, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[50] (2006) 15944-15945.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S.-C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Am. Chem. Soc. (Communication), 128[51] (2006) 16340-16341.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of the Intramolecular Dimer Radical Cation of Cyclophanes, M. Fujitsuka, D. W. Cho, S. Tojo, S. Yamashiro, T. Shinmyozu, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[17] (2006) 5735-5739.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[30] (2006) 9319-9324.

Properties and Reactivity of Xanthyl Radical in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[32] (2006) 9788-9792.

Solvent Effect on the Deactivation Processes of Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[42] (2006) 11800-11808.

S-S Bond Mesolysis in alpha,alpha'-Dinaphthyl Disulfide Radical Anion Generated during -Radiolysis and Pulse Radiolysis in Organic Solution, M. Yamaji, S. Tojo, K. Tahkehira, S. Tobita, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. A, 110[50] (2006) 13487-13491.

Intramolecular Exciplex and Intermolecular Excimer Formation of1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, K. H. Choi, M. J. Park, U. C. Yoon, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[10] (2006) 4576-4582.

Intramolecular Electron Transfer from Axial Ligand to S2-Excited Sb-Tetraphenylporphyrin, M. Fujitsuka, D. W. Cho, T. Shiragami, M. Yasuda, and T. Majima, J. Phys. Chem. B (Letter), 110[19] (2006) 9368-9370.

Photoinduced Electron Transfer Processes in 1,8-Naphthalimide-linker-Phenothiazine Dyads, D. W. Cho, M. Fujitsuka, A. Sugimoto, U. C. Yoon, P. S. Mriano, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[23] (2006) 11062-11068.

Singlet Energy Migration along Alternating Block Copolymer of Oligothiophene and Oligosilylene in Solution, M. Fujitsuka, D. W. Cho, J. Ohshita, A. Kunai, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[25] (2006) 12446-12450.

Visible Light-Induced Degradation of Ethylene Glycol on Nitrogen-doped TiO_2 Powders, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, H. Irie, K. Hashimoto, and T. Majima, J. Phys. Chem.B, 110[26] (2006) 13158-13165.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[26] (2006) 13296-13303.

Photoinduced Charge Separation in Titania Nanotubes, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, T. Sekino, and T. Majima, J. Phys. Chem. B (Letter), 110[29] (2006) 14055-14059.

Monitoring the DNA Binding and Dissociation Events by Observing the Local Structural and Environmental Changes in the Dimer Interface of BamHI Using a Solvatochromic Dansyl Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Phys. Chem. B, 110[42] (2006) 21311-21318.

Probing the Surface Adsorption and Photocatalytic Degradation of Catechols on the TiO_2 by Solid-State NMR Spetroscopy, T. Tachikawa, Y. Takai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir (Letter), 22[3] (2006) 893-896.

Acceleration of Laser Induced Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Langmuir, 22[14] (2006) 6361-6366.

Reactivity of Triaryphosphine Peroxyl Radical Cations Generated through the Reaction of Triaryphosphine Radical Cations with Oxygen, S. Tojo, S. Yasui, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Org. Chem., 71[21] (2006) 8227-8232.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of 9-Cyano-10-Phenylethynylanthracenes with Donor and Acceptor Substituents, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, H.-J. Liang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T.Majima, J. Org. Chem., 71[23] (2006) 8732-8739.

Detection of G-quadruplex-TMPyP4 Complex by 2-Aminopurine Modified Human Telomeric DNA,

T. Kimura, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 401-402.

Probing of Microenvironments in the Grooves of Z-DNA using Dan-modified Oligonucleotides
T. Kimura, K. Kawai, and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 1542-1544.

Thermodynamic Properties of Branched DNA Complexes with Full-Matched and Mismatched DNA Strand, M. Endo and T. Majima, Chem. Commun., (2006) 2329-2331.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T Majima, Chem. Commun., (2006) 3918-3920.

Effects of Substituents on Aryl Groups during the Reaction of Triarylphosphine Radical Cation and Oxygen, S. Yasui, S. Tojo, and T. Majima, Org. Biomol. Chem., 4, (2006) 2969-2973.

Formation of Pyrene Dimer Radical Cation at the Minor Groove of DNA, K. Kawai, T. Kimura, H. Yoshida, A. Sugimoto, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T.Majima, Bull. Chem. Soc. Jpn., 79[2] (2006) 312-316.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Angew. Chem. Int. Ed., 45[1] (2006) 120-122.

Properties of Excited Ketyl Radicals of Benzophenone Analogues Depending on the Size and Electronic Character of Aromatic Rings, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[6] (2006) 1610-1617.

One-Electron Redox Processes during the Polyoxometalate-Mediated TiO_2 Photocatalytic Reactions Studied by Two-Color Two-Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[11] (2006) 3124-3131.

Pyrene-Stacked Nanostructures Constructed in the Tabacco Mosaic Virus Rod Scaffold, M. Endo, H. Wang, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem Eur. J., 12[14] (2006) 3735-3740.

α-Carbonyl Substituent Effect on the Lifetimes of Triplet 1,4-Biradicals from Norrish Type II Reaction, X. Cai, P. Cygon, B. Goldfus, A. G. Griesbeck, H. Heckroth, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[17] (2006) 4662-4667.

One-Electron Oxidation Pathways during beta-Cyclodextrin-Modified TiO_2 Photocatalytic Reactions, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Eur. J., 12[29] (2006) 7585-7594.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto,
T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 420[1-3] (2006) 90-94.

Photophysical and Photochemical Properties of Corannulenes Studied by Emission and Optoacoustic Measurements, Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis, M. Yamaji, K. Takehira, T. Mikoshiba, S. Tojo, M. Fujitsuka, Y. Okada, T. Majima, S. Tobita, and J. Nishimura, Chem. Phys. Lett., 425[1-3], 53-57 (2006).

Direct Fluorescence Measurement of Excited Radical Cations of 1,3,4-Trimethoxybenzene by ns-ps Two-color Two-laser Flash Photolysis, X. Cai, P. M. Sakamoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Chem. Phys. Lett., 432[4-6] (2006) 436-440.

Important Factors for the Formation of Radical Cations of Stilbene and Substituted Stilbenes during Resonant Two-Photon Ionization with a 266- or 355-nm Laser, S. Samori, M. Hara, S. Tojo, M. Fujitsuka, and T. Majima, J. Photochem. Photobiol. A, 179[1-2] (2006) 115-124.

Emission from Charge Recombination between Radical Cations and Radical Anions of 9-Cycano-10-(p-substituted phenyl)anthracene Generated during Pulse Radiolysis, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, J.-H. Lin, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, J. Chinese Chem. Soc., 53[6] (2006) 1225-1234.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka and H. Sasai, Org. Lett., 8[2] (2006) 227-230.

Conformational Lock in Brønsted Acid - Lewis Base Organocatalyst for the Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa and H. Sasai, Tetrahedron: Asymmetry, 17[4] (2006) 578-583.

A Brønsted Acid - Lewis Base Organocatalyst for the Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, S. Takizawa and H. Sasai, Synlett., [5] (2006) 761-765.

Development of Efficient Methods for the Immobilisation of Multicomponent Asymmetric Catalysts, D. Jayaprakash, S. Takizawa, T. Arai and H. Sasai, Journal of Experimental Nanoscience, 1[4] (2006) 477-510.

[解説、総説]

DNA 中の電荷移動と DNA ナノサイエンス、真嶋哲朗、現代化学、11 [11] (2006)25-29.

マルチレーザー励起で生じる高励起状態の化学、藤塚守、坂本雅典、真嶋哲朗、光化学、37 [3] (2006) 157-164.

[著書]

「電子線エネルギーの吸収と高励起状態」、「光応用技術・材料事典」（山岡亜夫編）、真嶋哲朗、㈱産業技術サービスセンター、(2006) 第 1 章光反応材料の基礎、 1 節励起状態からの反応、1.2.1 項、35-37 頁

「有機分子触媒の新展開」（柴崎正勝編集）、笹井宏明、滝澤忍、松井嘉津也、シー・エム・シー出版、(2006) 231-242.

[特許]

「金属ナノ粒子の形成方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-121694

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、立川貴士、藤塚守、特願 2006-142132

「DNA ナノブロックを利用した DNA ナノエレクトロニクス」真嶋哲朗、川井清彦、小阪田泰子、藤塚守、特願 2006-291734

「活性酸素種を単一分子レベルで検出する方法」真嶋哲朗、立川貴士、藤塚守、特願 2006-316047

「DNA 電荷移動を利用した DNA 一分子蛍光測定による一塩基多型の検出法」真嶋哲朗、高田忠雄、川井清彦、藤塚守、特願 2007-6829

「媒体中に金属ナノ粒子を形成する方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-28166

「修飾金属ナノ粒子およびその製造方法」真嶋哲朗、坂本雅典、藤塚守、特願 2007-095031

「新規バナジウム化合物」滝澤忍、笹井宏明、片山智美、特願 2006-240632

[国際会議]

Mechanism of Photosensitized DNA Damage: Hole Transfer in DNA and the Role of Oxygen (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Photochemistry of Amino Acid Derivatives: Stereoselective Synthesis of β-Lactames and Cyclobutanols (Invited), *A. G. Griesbeck, T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

TiO_2 Photocatalytic One-Electron Oxidation of Aromatic Compounds Studied by Laser Flash Photolysis, T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Rapid Energy Migration in Porphyrin Polypeptides, *M. Fujitsuka, D. W. Cho, N. Solladié, and T. Majima, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Transient Radical Pair in the Photoinduced Electron Transfer Mediated by the Double Strand DNA (Invited), *K. Akiyama, K. Kawai, T. Takada, T. Ikoma, T. Majima, S. Tero-Kubota, XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006.

Energy and Charge Transfer in Porphyrin Supramolecular Systems (Invited), *T. Majima, 209th ECS Meeting at Denver (The Electrochemical Society) Symposium on “Porphyrins and Supramolecular Assemblies”, Adams Mark Denver Hotel, Denver, May 7-12, 2006.

Photosensitized One Electron Oxidation of DNA towards Photodynamic Therapy (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Transport in DNA, T. Takada, K. Kawai (Invited), *T. Majima, International Symposium on Radical Ion Reactivity (ISRIR2006), Monteporzio, Rome, July 2-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Photochemical Control of a Restriction Enzyme BamHI Activity Using Azobenzene-Bearing Amino Acids, K. Nakayama, M. Endo, and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Monitoring the B-A Conformational Transition of Nucleic Acids by Dan-Modified DNA, T. Kimura, K. Kawai and *T. Majima, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006. Perspective on Interdsciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology, Icho-Kaikan, Japan, Sep 19-20, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts, Seminar in Instituto de Tecnología Química UPV-CSIC (Invited), *T. Majima, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, Spain, Oct 27, 2006.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, “CLUSTOXDNA Meeting on the Chemistry and Biochemistry of Oxidative DNA Damage,” in Gandia, Valencia, Spain, Oct 28-Nov 1, 2006.

Pyrene-Assmbled Nanostructures Constructed in the Tobacco Mosaic Virus Scaffold (Invited), *M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer in DNA and Photosensitized DNA Damage: Importance of Adenine Oxidation (Invited), *K. Kawai, Y. Osakada, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Energy Migration along Photofunctional Polymers (Invited), *M. Fujitsuka, D. W. Cho, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), T. Tachikawa, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Two-Color Two-Laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film (Invited), *M. Sakamoto, K. S. Sik, T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences (Invited), * T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Invited), *K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

DNA Nano-Structures Controlled by Branched DNA Connectors (Invited), *M. Endo and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Transannular Distance Dependence of Stabilization Energy of Intramolecular Dimer Radical Cation of Cyclophanes, *M. Fujitsuka, T. Shinmyozu, T. Majima, K. Kawai, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Hole Transfer Rates in A-from DNA/2'-OMeRNA Hybrid, *K. Kawai, Y. Osakada, A. Sugimoto, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photodissociation of Naphthalene Dimer Radical Cation during the Two-Color Two-Laser Flash Photolysis and Pulse Radiolysis-Laser Flash Photolysis, X. Cai, S. Tojo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Photochemical Regulation of BamHI Activity Using an Azobenzene Moiety Site-selectively Introduced into the Protein-Protein Interface, *K. Nakayama, M. Endo, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, *M. Sakamoto, K. S. Sik, X. Cai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Kinetics of Transient End-to-End Contact of Single-Stranded DNAs, *A. Sugimoto, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Charge Separation in Diphenylacetylene-Modified DNA, *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, 2006 Korea-Japan Symposium on Frontier Photoscience (2006KJFP), Sogang Univercity, Seoul, Nov 3-6, 2006.

Laser-induced Molecular Chemistry and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo and T. Majima, International Symposium on "Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Recent Progress of Laser Chemistry, SANKEN, Japan, Nov 28-29, 2006.

Laser Chemistry of Nanomaterials and its Application (Invited), *T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

DNA Supramolecular Structures for the Creation of Functional Nannomaterials (Invited), *M. Endo

and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemistry of Short-lived Species using Multi-beam Irradiation (Invited), *M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Spectroscopic Investigation of Oxidative Hole Transfer in DNA (Invited), *K. Kawai and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photoinduced Charge Separation on the TiO_2 Surface (Invited), *T. Tachikawa and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Photochemical Formation of Gold Nanoparticles in a PVA Film during Two-color Two-laser irradiation (Invited), *M. Sakamoto and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Monitoring G-Quadruplex Structures and G-Quadruplex-Ligand Complex by 2-Aminopurine Modified Oligonucleotides (Oral), *T, Kimura, K, Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

High Yield Generation of Long-Lived Charge-Separated State in Diphenylacetylene-Modified DNA (Oral), *T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore (Oral), *K.Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Arylethynylpyrenes (Oral), *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka, S.-W. Yang, T.-I. Ho, J.-S. Yang, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Single-Molecule Detection of Airbone Singlet Oxygen (Oral), *K. Naito, T. Tachikawa, S.C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Charge Transfer through DNA Nanoscaled Assembly Programmable with DNA Building Blocks (Oral), *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and T. Majima, International Symposium on “Photochemistry of Nanomaerials, SANKEN, Dec 7, 2006.

Beam-Induced Molecular Chemistry (Oral), *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

One-Electron Oxidation Pathways during β-Cyclodextrin-Modified TiO_2 Photocatalytic Reaction,

Takashi Tachikawa, Sachiko Tojo, Mamoru Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Long-Distance Hole Transfer through Consecutive Adenine Sequence, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Solvent Effect on Benzophenone Ketyl Radicals in the Excited State, S. S. Kim, M. Sakamoto, X. Cai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Detection of the Local Structural Changes in the Dimer Interface of BamHI Initiated by DNA Binding and Dissociation Using a Solvatochromic Fluorophore, K. Nakayama, M. Endo, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, K. Naito, T. Tachikawa, S. C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Symposium of Fifth 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Yumebutai International Conference, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Charge Transfer in DNA (Oral), *T. Majima, Commemorative Workshop of Opening SANKEN USA Branch, San Francisco, Dec 15-16, 2006.

Development of New TiO_2 Photocatalysts (Invited), *T. Majima, The 8th International Conference on ECOMATERIALS, Kitakyusyu International Conference Center, Jan 11-14, 2007.

Single Molecule Fluorescence Imaging of TiO_2 Photocatalytic Reaction (Oral), *T. Majima, Second

SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, M. Sakamoto, X. Cai, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Emission from Charge Recombination during the Pulse Radiolysis of Organic Electrochemiluminescent Compounds, *S. Samori, S. Tojo, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Effects of Reaction Rate of Radical Anion of a Photosensitizer with Molecular Oxygen on the Photosensitized DNA Damage, *Y. Osakada, K. Kawai, M. Fujitsuka and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Single-Molecule Detection of Airborne Singlet Oxygen, *K. Naito, T. Tachikawa, S. -C. Cui, A. Sugimoto, M. Fujitsuka, and T. Majima, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology, Icho-Kaikan, SANKEN, Japan, Jan 25-26, 2007.

Charge Transport in DNA (Invited), *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Rapid Energy Migration along Photofunctional Polymers, M. Fujitsuka and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Charge Separation via Rapid Hole Transfer through Consective Adenine Sequences, T. Takada, K. Kawai, M. Fujitsuka, and *T. Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Two-color Two-laser Fabrication of Gold Nanoparticles in a PVA Film, M. Sakamoto, S. S. Kim, Takashi Tachikawa, Mamoru Fujitsuka, and *Tetsuro Majima, International Conference on Frontiers of Radiation and Photochemistry, PhotoRadChem-2007, KOTTAYAM, Feb 8-9, 2007.

Single-Molecule Fluorescence Imaging of the Remote TiO_2; Photocatalytic Reaction, *T. Tachikawa, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

Energy Levels of Oligothiophenes in the Higher Excited Triplet States, *Y. Oseki, M. Fujitsuka, and T. Majima, 233rd ACS National Meeting, Chicago, IL, March 25-29, 2007.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 8th International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development of Effective Enzyme Mimic for Urease, *D. Jayaprakash, R. N. Nadaf, H. Sasai, 8th

International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development and Applications of Novel Spiro-type Ligands, *P. Koranne, T. Tsujihara, K. Takenaka, K. Onitsuka, H. Sasai, 8th International Symposium on Organic Reactions, Kobe, Japan, Apr. 23-26, 2006.

Development of Catalytic Enantioselective Reaction Utilizing Chiral Spiro-type Ligands (Oral), *T. Tsujihara, P. Koranne, J. Yogo, K. Wakita, T. Shinohara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference, Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

Design and Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, International Molecular Chirality Conference, Toyama, Japan, May 18-19, 2006.

A Novel Bifunctional Asymmetric Organocatalysts for Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, S. Takizawa, H. Sasai, 7th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto, Japan, May 25-26, 2006.

Enantioselective Catalyses Using Novel Spiro-type Ligands, *P. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, J. Yogo, K. Onitsuka, H. Sasai, 7th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry, Kyoto, Japan, May 25-26, 2006.

Development of Novel Chiral Isoxazoline/Isoxazole Hybrid-type Ligands (Oral), P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, *H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Development of New Methods towards the Synthesis of Novel Chiral Spiro Ionic Liquids, *M. L. Patil, C. V. L. Rao, K. Yonezawa, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, *S. Takizawa, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, H. Sasai, 18th International Symposium on Chirality, Busan, Korea, Jun. 25-28, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman Reaction, K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, *H. Sasai, International Symposium on Organocatalysis in Organic Synthesis, Glasgow, UK, Jul. 5-7, 2006.

Development of Metal-bridged Polymers as Enantioselective Catalysts, S. Takizawa, *N. Inoue, H. Sasai, XXII International Conference on Organometallic Chemistry, Zaragoza, Spain, Jul. 23-28, 2006.

Enantioselective Catalysis Using Novel Spiro-type Ligands and Novel Spiro Isoxazoline-Isoxazole Hybrid Ligands (Oral), *P. S. Koranne, T. Tsujihara, S. Takizawa, K. Onitsuka, H. Sasai, 232nd ACS National Meeting, San Francisco, USA, Sep. 10-14, 2006.

Asymmetric Catalysis of Planar-Chiral Cyclopentadienyl-Ruthenium Complexes in Allylic Substitutions, *K. Onitsuka, H. Okuda, H. Sasai, 1st International Conference of Cutting-Edge

Organic Chemistry in Asia, Naha, Okinawa, Japan, Oct.16-20, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 1st International Conference of Cutting-Edge Organic Chemistry in Asia, Naha, Okinawa, Japan, October16-20, 2006.

Bifunctional Organocatalysts for Enantioselective Aza-Morita-Baylis-Hillman (Aza-MBH) Reaction, *K. Matsui, K. Tanaka, A. Horii, S. Takizawa, H. Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Asymmetric Allylation Catalyzed by Planar-Chiral Cyclopentadienyl-Ruthenium Complexes, *K. Onitsuka, H. Okuda, H. Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Dual Activation in an Enantioselective Homolytic Coupling Reaction, *T. Katayama, C. Kameyama, S. Takizawa, K, Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Enantioselective Synthesis of Heterocyclic Compounds Utilizing Pd(II)-SPRIX Catalyst, *G. B. Bajracharya, P. Koranne, T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Development of Oxidative Reactions Catalyzed by Ir Complex, *T. Suzuki, N. K. Mangu, T. Yamada, T. Matsuo, K. Watanabe, T. Katoh, H, Sasai, 10th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry, Kyoto, Japan, Nov. 13-17, 2006.

Applications of Novel Chiral Spiro Isoxazoline/Isoxazole, P. Koranne, G. B. Bajracharya, K. Onitsuka, *H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Chiral Isoxazoline/Isoxazole Ligands and Their Application in Enantioselective Catalysis, *P. Koranne, G. B. Bajracharya, M. L. Patil, T. Tsujihara, C. V. L. Rao, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Novel Asymmetric Cascade Reaction Catalyzed by Pd-SPRIX, *T. Tsujihara, K. Takenaka, S. Takizawa, K. Onitsuka, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

Development of Artificial Enzyme Utilizing Multiple Interactions in Catalytic Site, *T. Kawase, R. N. Nadaf. G. R. Kassem, D. Jayaprakash, S. Takizawa, H, Sasai, 5th 21st Century COE Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanosience International Symposium, Awaji, Japan, Dec. 8-9, 2006.

[国際会議の組織委員、外国雑誌の編集委員]

真嶋　哲朗　　2006 International Symposium on Frontier Photoscience （組織委員長）

真嶋　哲朗	Langmuir, American Chemical Society（Senior Editor）
笹井　宏明	ICOB-5 & ISCNP-25 IUPAC International Conference on Biodiversity and Natural Product（組織委員）

[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	19,240
特定領域研究		
真嶋　哲朗	光機能界面における有機物の反応機構の解明	10,200
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	2,100
萌芽研究		
真嶋　哲朗	ＤＮＡ自己組織化に基づくカーボンナノチューブアレイの構築	1,000
基盤研究（C）		
遠藤　政幸	癌治療を目指したアポトーシス関連タンパクの光機能化と応用	1,800
特定領域研究		
遠藤　政幸	修飾タバコモザイクウィルスコートタンパクの超分子集合による光機能性	2,000
若手研究(ｽﾀｰﾄｱｯﾌﾟ)		
坂本　雅典	2 色 2 レーザー技術を用いた三次元極微配線技術の研究	1,310

[受託研究]

真嶋　哲朗	IDEC 株式会社、株式会社サタケ	レーザー光を用いたプラスチックの種類判別方式の研究	4,510
笹井　宏明	科学技術振興機構（JST）	スピロ型不斉配位子の創製を基盤とする新規医薬品合成中間体の供給	3,250
松井　嘉津也	科学技術振興機構（JST）	二重活性化能を有する不斉有機分子触媒の開発と応用	2,000

[奨学寄附金]

真嶋　哲朗	旭硝子株式会社	1,000
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	500
笹井　宏明	日産化学工業	400
松井　嘉津也	池谷科学技術振興財団	1,500

[共同研究]

真嶋　哲朗	松下電器産業株式会社	チタニアナノチューブを用いた光触媒の高活性化に関する研究	1,155
真嶋　哲朗	三菱化学株式会社	高励起状態からの化学反応に関する基礎的研究	1,000

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、東北大学多元物質化学研究センターとの大学研究所間連携機構である、新産業創造物質基盤センターの２つのプロジェクトの一つである。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研究を目指し、医療基盤技術と、ヒューマンインターフェース技術の開発研究を推進している。医療基盤技術研究グループでは、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と、加速器量子ビームを応用したビーム医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・ソフトウエアシステムなどの開発を進めている。

成果

- 医薬品標的としての新規 ABC トランスポーターの生理機能解明と情報伝達分子の分泌を担う新規トランスポーターの同定
- 細菌薬剤耐性化と病原性発現における異物排出トランスポーターの役割を解明
- 加速器による濃淡電子ビームの動的な制御と強度変調放射線治療への応用
- 自己組織化材料を応用した高効率細胞膜穿孔法の大規模細胞集団への適用
- インターフェース統合運用ロボットの高性能化と高伸縮比マニピュレータ機構の開発
- 知識外化モデリング、機能概念および方式知識マイニングのツール化と解析プログラムへの統合
- 産業構造変化に伴う新産業予測・技術ベンチャー成功要因に関するモデル化と解析ツールの開発
- 人物行動追跡／燃料電池の健全性診断支援について、各種センサデータと機械学習による適応状況・解析インターフェースを具体化

医療基盤研究グループ

兼任教授	山口明人（グループ長)、吉田　陽一
特任助手（常勤）	西　毅、西野　邦彦、近藤　孝文、

a) 概要

本グループは、生体防御を担う異物排出輸送体発現制御機構と、新規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、放射線がん治療の高機能化を目指した次世代強度変調放射線治療のための加速器ビーム制御の技術開発等の研究目標を目指して研究を進めている。

b) 成果

・医薬品標的としての新規ABCトランスポーターの生理機能解明と情報伝達分子の分泌を担う新規トランスポーターの同定

オーファンABC輸送体の機能解析：脳・精巣・肺・甲状腺等に良く発現する機能未知のABCA5膜タンパク質のノックアウトマウスを作成して、その性質を解析すると共に、ABCA5の臓器分布、組織内分布等を特に甲状腺について詳しく観察した。ABCA5は甲状腺ホルモンが合成されるろ胞に面した細胞膜近傍の小胞上に局在しており、その局在が甲状腺ホルモンが合成されるのに必須であるThyroglobulinと一致し、また、甲状腺刺激ホルモンによって細胞膜近傍から細胞質全体へとその局在が変化することから、ABCA5が甲状腺ホルモンの放出に何らかの役割を果たしていると考えている。

血小板でのスフィンゴシン１リン酸排出輸送体の解析：スフィンゴシン１リン酸は血小板が分泌する重要な情報伝達分子だが、その分泌機構は未知であった。本年度は、スフィンゴシン１リン酸は血小板の多くの情報伝達物質が蓄積している細胞内小胞の内側ではなく、細胞質側に多く存在していることを明らかにした。また、様々な輸送体の阻害剤を用いて、その分泌がABCA型の排出膜輸送体によって担われていることを証明した。

・細菌薬剤耐性化と病原性発現における異物排出トランスポーターの役割を解明

本年度、私達は食中毒原因菌であるサルモネラ菌の異物排出蛋白質機能解析を中心に研究を進めた。細菌ゲノムに基づく薬剤耐性因子網羅的探索「レジストーム解析」を行った結果、サルモネラ菌には 9 個の異物排出蛋白質遺伝子が存在していることを明らかにした。いずれの異物排出蛋白質も発現量が上昇すると、サルモネラ菌を薬剤耐性化させることを明らかにした。一度にこれだけ多くの未知耐性因子が見つかるというのは、ゲノムに基づく検索の威力を示していると言える。また、異物排出蛋白質がサルモネラ病原性発現に関与していることを突き止めた。サルモネラ菌を経口摂取させるとマウスは約 6-10 日で死に至るが、異物排出蛋白質欠損株はマウスに対しての致死能が消失した。中でも、ABC 型排出蛋白質である MacAB の病原性への関与が高く、*macAB* の遺伝子発現は、サルモネラ菌病原性マスターレギュレーターである PhoP によって制御されていることを明らかにした。本研究により抗菌薬耐性と病原性という, 本来は結びつかなかった機構のつながりがみえるようになってきた。本研究を受けて、***Nature Review*** 誌にて特集が組まれ、異物排出蛋白質は薬剤耐性のためだけにあるのではなく、病原性発現や環境耐性に必要な因子であることが大々的に発表された。

Nature 誌の CEO David Swinbanks 博士からも、これら研究成果は異物排出蛋白質機能解明にとって画期的に重要な仕事であるばかりでなく、医療分野にも大きくインパクトを与える研究であるとの評価をいただき、***Nature*** 誌より Biotechnology Award を表彰された。異物排出蛋白質が抗菌薬耐性のみならず病原性発現に関与する点から考えると、異物排出蛋白質は新規薬剤の魅力的なターゲットである。よい阻害剤を見つけることができれば、細菌の多剤耐性化を克服しながら、病原性を軽減させることのできる全く新しい治療薬開発に役立つものと期待している。

・加速器による濃淡電子ビームの動的な制御と強度変調放射線治療への応用の研究

表皮や正常組織への線量を軽減し有効にガン治療を行う強度変調放射線治療のための、ビーム制御技

術の開発を産研のレーザーフォトカソードRF gun LINACで行った。本年度では呼吸同期などへの対応のための電子ビームの動的な光学変調の研究を行った。従来の電子ビーム制御では不可能な電子ビームの動的な制御に成功した。

[原著論文]

Crystal Structures of a Multidrug Transporter Reveal a Functionally Rotating Mechanism, S. Murakami, R. Nakashima, E. Yamashita, T. Matsumoto and A. Yamaguchi: Nature, 443 (2006) 173-179.

Sphingosine 1-phosphate is Released from the Cytosol of Rat Platelets with Carrier-Mediated Manner, N. Kobayashi, T. Nishi, T. Hirata, A. Kihara, T. Sano, Y. Igarashi
and A. Yamaguchi : J. Lipid. Res., 47, (2006) 614-621.

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Systems of Salmonella Enterica Serovar Typhimurium, K. Nishino, L. Tammy and E. A. Groisman, Mol. Microbiol. 59 (2006) 126-141.

Effect of Drug Transporter Genes on Cysteine Export and Overproduction in Escherichia coli, S. Yamada, N. Awano, K. Inubushi, E. Maeda, S. Nakamori, K. Nishino, A. Yamaguchi and H. Takagi, Appl. Environ. Microbiol. 72 (2006) 4735-4742.

N-Acetyl-D-glucosamine Induces the Expression of a Multidrug Exporter Gene, mdtEF, via Catabolite Activation in Escherichia coli, H. Hirakawa, Y. Inazumi, Y. Senda, A. Kobayashi, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi, J. Bacteriol. 188 (2006) 5851-5858.

The Growth Phase-Dependent Expression of Drug Exporters in Escherichia coli and Its Contribution to the Drug Tolerance, A. Kobayashi, H. Hirakawa, T. Hirata, K. Nishinio and A. Yamaguchi, J. Bacteriol. 188 (2006) 5693-5703.

Identification of the Lipopolysaccharide Modifications Controlled by the Salmonella PmrA/PmrB System Mediating Resistance to Fe(III) and Al(III), K. Nishino, F. F. Hsu, J. Turk, M. J. Cromie, M. M. Wösten and E. A. Groisman., Mol. Microbiol. 61 (2006) 645-654.

Femtosecond Single Electron Bunch Generation by Rotating Longitudinal Bunch Phase Space in Magnetic Field, J. Yang, T. Kondoh, K. Kan, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 556 (2006) 52-56.

Pulse Radiolysis Based on a Femtosecond Electron Beam and a Femtosecond Laser Light with Double-Pulse Injection Technique, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, Radiat. Phys. Chem. 75 (2006) 1034-1040.

[解説、総説]

抗菌薬耐性および病原性発現における多剤排出トランスポーターの役割、西野邦彦、Jpn. J. Chemother.、54 [A] (2006) 53.

N-Acetyl-D-glucosamine induces the expression of a multidrug exporter genes, *mdtEF*, in *Escherichia coli*, Y. Senda, A. Kobayashi, H. Hirakawa, T. Hirata, K. Nishino and A. Yamaguchi, Journal of the Pharmaceutical

Society of Japan, 126 [4] (2006) 134-135.

[特許]

飯野亮太、西野邦彦、仲田昌義、榊原昇一、山口明人、野地博行、特願 2006-294558

[国際会議]

Structure and Function of Bacterial Xenobiotic Exporters (invited), *A. Yamaguchi, Second SANKEN- CNU Joint Symposium on Nanoscience and Nanotechnology SANKEN and SANKEN 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Osaka Univ., Japan, Jan. 25-26, 2007

Synthesis of Autoinducer-2 Antagonists in Bacterial Quorum-sensing, *M. Hiraoka, Y. Yano, T. Kawano, H. Hirakawa, A. Kobayashi, T. Hirata, A. Yamaguchi, J. Ohkanda and N. Kato, 5th 21COE International Symposium, “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006

Bacterial Multidrug Exporters -From the Molecular Structure to the Biological Funciton (invited), *A. Yamaguchi, The 6th Awaji International Forum on Infection and Immunity, The Hyogo Prefectual Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Sep. 4-8, 2006

Membrane Topology of EmrB, an Outer Membrane Channel-Coupled Multidrug Efflux Transporter, in *Escherichia coli*, *Y. Hisano, N. Tamura, S. Murakami and A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology, Kyoto, Japan, Jun. 18-23, 2006

Fur Negatively Regulates Drug-exporter Genes of *mdtABC* and *acrD* in *Escherichia coli*, T. Masaki, H. Hirakawa, *T. Hirata and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May 21-25, 2006

Studies on the Substrate-Recognition Site of AcrB using Chimeric and Site-Directed Mutagenesis, *N. Kobayashi, S. Murakami and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May 21-25, 2006

Topological Analysis of EmrB, a TolC-coupled Multidrug Efflux Protein in *Escherichia coli*, *Y. Hisano, N. Tamura, S. Murakami and A. Yamaguchi, American Society of Microbiology, 106th General Meeting,, Orlando, Florida, May 21-25, 2006

Virulence and Drug Resistance Roles of Multidrug Efflux Pumps, *K. Nishino, Sanken Workshop on Nano-Bioscience at Berkeley, University of California, Berkeley, CA, USA, Mar.21, 2007.

Regulatory Networks of Multidrug Transporters Reveal Their Biological Functions in Cellular Physiology, *K. Nishino, Commemorative Workshop of Opening Sanken USA Branch in San Francisco “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience”, San Francisco, USA, Dec16, 2006.

Biological Functions of Bacterial Multidrug Efflux Pumps (Invited), *K. Nishino, 10th Western Pacific Congress on Chemotherapy and Infectious Diseases, Fukuoka, Japan, Dec.5, 2006.

A Biological Function of Multidrug Transporters in Iron Homeostasis, *K. Nishino, T. Hirata, A. Yamaguchi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industies Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Island, Dec.8-9, 2006.

Single Cell Measurement of Drug Efflux by RND Family Transporter in Femtoliter Chamber Array, *R. Iino, M. Nakata, K. Nishino, S. Sakakihara, S. Takeuchi, A. Yamaguchi, H. Noji, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industies Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji Island, Dec.8-9, 2006.

Lipopolysaccharide Modifications Mediating Bacterial Resistance to Fe(III) and Al(III), *K. Nishino, E. A. Groisman, A. Yamaguchi, International Union of Biochemistry and Molecular Biology 20th Congress, Kyoto, Jun.21, 2006.

The Induction of Bacterial Xenobiotic Exporter, MdtEF, by N-acetyl-D-glucosamine is mediated via PTS Systems in Escherichia coli, *Y. Senda, A. Kobayashi, H. Hirakawa, T. Hirata, K. Nishino, A. Yamaguchi, International Union of Biochemistry and Molecular Biology 20th Congress, Kyoto, Jun.20, 2006.

MdtABC and acrD Drug-exporter Genes are Suppressed by a Ferric Uptake Regulator, Fur, in Escherichia coli, T. Masaki, H. Hirakawa, K. Nishino, *T. Hirata, A. Yamaguchi, International Union of Biochemistry and Molecular Biology 20th Congress, Kyoto, Jun.19, 2006.

Fur Negatively Regulates Drug-Exporter Genes of mdtABC and acrD in Escherichia coli, T. Masaki, H. Hirakawa, *T. Hirata, K. Nishino, A. Yamaguchi. American Society for Microbiology 106th General Meeting, Orlando, FL, U.S.A., May 22, 2006.

Insights into Acquisition of Multidrug Resistance (Invited), *K. Nishino, Invitrogen Nature 2006 Biotechnology Award Presentation at Bio Expo Japan, Tokyo, Japan, May 18, 2006.

How Bacteria Resist Killing by Fe(III) and Al(III), *K. Nishino, The 8th Japan-Korea International Symposium on Microbiology, Kanazawa, Japan, Mar.29, 2006.

Plasma Membrane Transporters Participate the Sphingosine 1-phosphate Secretion from the Rat Platelet, *T. Nishi, N. Kobayashi, T. Hirata, A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, June 22, 2006

Cellular Localization of Mouse ABCA5 Proteins in Mouse Tissues, *M. Ohigashi, T. Nishi, A. Yamaguchi, 20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress, Kyoto, June 22, 2006

Tissue Specific Expression of the Splicing Variants of the Mouse Vacuolar Proton Translocating ATPase a4 Subunit, *S. Kawasaki-Nishi, A. Yamaguchi, M. Forgac, T. Nishi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, December 8, 2006

Characterization of Mouse ABCA5 Protein, *M. Ohigashi, T. Nishi, A. Yamaguchi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International

Symposium, Awaji, December 8, 2006

Intracellular Localization and Tissue Distribution of Novel RND-type Proteins in Mice, *S. Hashimoto, Y. Kubo, T. Nishi, T. Hirata, A. Yamaguchi, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, December 8, 2006

Electron Beam Pulse Processing toward the Intensity Modified Radiation Therapy (IMRT), *T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida and S. Tagawa, 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006

Higher-order Effect Compensation in Magnetic Compressor for <50fs Electron Bunch, *K. Kan, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006

Development of Double-decker Electron Beam Accelerator for Femto/attosecond Pulse Radiolysis, *Y. Kuroda, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006

Equivalent Velocity Spectroscopy Based on Femtosecond Electron Beam Accelerator, *S. Takemoto, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006,

Femtosecond Single-bunch Electron Linear Accelerator Based on a Photocathode RF Gun, *J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, 2006 European Particle Accelerator Conference, Edinburgh, Scotland, 26-30 June, 2006

Generation of 98-Femtosecond Single Electron Bunch in Photocathode Linear Accelerator, *Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

Generation of a Gradation Electron Beam Pulse Toward the Intensity Modified Radiation Therapy (IMRT), *T. Kondoh, J. Yang, A. Yoshida, T. Yamamoto, Y. Yoshida and S. Tagawa, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

Study of Beam Dynamics in photocathode RF Linac and Magnetic Bunch Compressor for Femtosecond Electron Bunch Generation, *K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

100-Femtosecond Electron Beam Generation and Ultrafast Reaction Analysis in Nano-space, *J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, A. Yoshida, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

Generation of Femtosecond Electron Beam for Ultrafast Reaction Analysis in Nanospace, *J. Yang, K. Kan, T. Kondoh, A. Yoshida, T. Kozawa, Y. Yoshida and S. Tagawa, Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka Univ, Jan.30-Feb.1, 2006

A New Picosecond Pulse Radiolysis Based on a Photocathode Linear Accelerator, *A. Asano, J. Yang. T. Kondoh, A. Yoshida and Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

A Concept of Double-decker Electron Beam Accelerator for Att/femtosecond Reaction Analysis, *Y. Kuroda, J. Yang, T. Kondoh, A. Yoshida, Y. Yoshida, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

3D-Measurement for Short Electron Bunch, *A. Yoshida, Y. Jinfeng, T. Kondoh, Y. Yoshida, A. Ogata, SANKEN International Symposium 2006 (SIS-2006), Osaka, Japan, Feb.8-9, 2006

Spatial Modulation of Electron Beam for the IMRT, *T. Kondoh, J. Yang, T. Yamamoto, Y. Yoshida, S. Tagawa, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka, Sep. 19-20, 2006

Ultrashort Electron Beam for Reaction Analysis in Nanofabrication, J. Yang, K. Kan, Y. Kuroda, *T. Kondoh and Y. Yoshida, SANKEN International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006 (SISNN-2006), Osaka, Sep. 19-20, 2006

Femtosecond Pulse Radiolysis Based on Photocathode Electron Accelerator,*Y. Yoshida, J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, S. Tagawa, The 1st Asian-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006

Pulse Radiolysis Study on Solvated Electrons in Ionic Liquid with Controlling Water Content, *J. Yang, R. Nagaishi, T. Kondoh, Y. Yoshida, The 1st Asian-Pacific Symposium on Radiation Chemistry, Shanghai, China, Sep. 17-21, 2006

Processing of Incident Light by the DMD for the Photocathode RF gun, *T. Kondoh, H. Kashima, J. Yang, T. Yamamoto, Y. Yoshida, S. Tagawa, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006

Collective Ionization by Attosecond Electron Bunches, *Ogata, T. Kondoh, J. Yang, Y. Yoshida, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006

Simulation Study on Sub-femtosecond Electron Bunch Generation, *K. Kan, J. Yang, T. Kondoh, Y. Yoshida, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006

Femtosecond Electron Beam and Femtosecond Pulse Radiolysis for Reaction Analysis in Nano-space, *J. Yang, T. Kondoh, T. Kozawa, Y. Yoshida, S. Tagawa, 5th 21st Century COE ‘’Towards Creating New Industries Based on Inter- Nanoscience’’ International symposium, Awaji Yumebutai International Conference Center, Japan, Dec. 8-9, 2006

[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]

日本細菌学会総会	6件
日本薬学会年会	3件
日本分子生物学会	2件
日本化学療法学会総会	1件
微生物シンポジウム	2件
生体膜と薬物の相互作用シンポジウム	2件
大腸菌研究会	2件
生体エネルギー研究会	1件
感染症沖縄フォーラム	2件
排出トランスポーターから創薬を考える研究会	1件
電気学会･バイオ･マイクロシステム研究会	2件
日本生化学会	2件
日本原子力学会	2件
日本放射線化学会	5件
日本加速器学会	5件
高周波電子銃研究会	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

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	14,400
基盤研究（C）		
西　毅	脂質メディエーターの細胞外放出機構の解明	1,800
若手研究（ｽﾀｰﾄｱｯﾌﾟ）		
西野　邦彦	情報伝達による細菌の病原性および薬剤耐性印紙調節機構の解明	1,420

[受託研究]

山口　明人	科学技術振興機構 CREST	異物排出トランスポーターの構造機能解析と多剤耐性機構の解明	6,240
山口　明人	新興・再興感染症研究拠点形成プログラム	細菌の病原性と多剤排出蛋白質発現制御の網羅的、系統的解析と創薬の新戦略	1,000
西野　邦彦	科学技術振興機構 さきがけ研究	異物排出トランスポーターによる細胞機能制御の解明	650
西野　邦彦	農林水産省人獣共通感染症プロジェクト研究助成金	大腸菌の薬剤耐性獲得に関する分子制御機構解明	3,000

[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技術開発センター	フォトカソードRF電子銃と高品質電子ビームの開発	
吉田　陽一	日本原子力研究開発機構・高崎研	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	
吉田　陽一	日本原子力研究開発機構関西光科学研究所	レーザー駆動フェムト秒電子ビームの応用に向けた基礎	
西野　邦彦	平成 18 年度 産研・原子力工学専攻 21 世紀 COE 若手研究(A)研究助成	マイクロ加工技術を駆使した異物排出遺伝子の網羅的スクリーニング	1,000

[その他の競争的研究資金]

山口　明人	科学技術振興機構 CREST	異物排出トランスポーターの構造機能解析と多剤耐性機構の解明	43,400
西　毅	武田科学振興財団	新しい創薬の標的としてのオーファン輸送体の輸送機室の同定と機能解析	2,000
西野　邦彦	科学技術振興機構 さきがけ研究	異物排出トランスポーターによる細胞機能制御の解明	6,000
西野　邦彦	井上科学振興財団 井上研究奨励賞	ゲノム情報に基づく薬剤排出蛋白質遺伝子資源の解析とその発現制御機構に関する研究	500
西野　邦彦	大川情報通信基金研究助成	病原細菌の薬剤耐性制御ネットワーク解析と動的システムモデルの構築	1,000
西野　邦彦	臨床薬理研究振興財団研究奨励	細菌多剤耐性化制御システムを標的とした阻害剤検索系の確立	2,000
西野　邦彦	加藤記念バイオサイエンス研究振興財団 研究助成	多剤耐性菌をターゲットとした新規抗菌薬スクリーニングデバイスの開発	1,000
西野　邦彦	大山健康財団 学術研究助成	細菌薬剤耐性と病原性発現における多剤排出トランスポーター役割の解明	1,000
西野　邦彦	ノバルティス科学振興財団 研究奨励金	細菌ゲノム生存戦略解析による新しい薬剤耐性機構の解明	1,000

ヒューマンインターフェース研究グループ

教授（兼任）　田畑　仁（グループ長、平成 18 年 11 月 30 日退職)、
　　吉田　博（グループ長、平成 18 年 12 月 1 日選任)、沼尾　正行、溝口理一郎
特任教授(常勤)　高藤　淳
特任助教授(常勤) 齋藤　敬
特任助手(常勤)　中澤　誠、福井　健一、関　宗俊（平成 19 年 3 月 31 日退職）

a) 概要

人に関する生体情報や、行動情報、さらには社会情報を的確に認識し、用途に応じて解析対処するシステムを構築するため、検出ハードウエアとなるセンサやその運用機構、また得られた情報を的確・高速に処理するソフトウェアに関する研究を行っている。以上に加え、広義の社会情報とその解析の産業応用として、産業構造変化に伴う新産業予測と知的財産の創出運用システムに関する研究を行っている。本年度の主な研究項目と成果概要は以下の通りである。

b) 成果

・新規ナノ材料の生体応用およびインターフェース統合運用に関する研究（田畑・齋藤、関）

1）レーザー誘起 VLS 法を開発し、生体親和材料の ZnO ナノロッドをボトムアップナノ構造制御形成によって作製することに成功した。

2）1)で作製したナノロッドを利用して、細胞への低侵襲穿孔法を開発し、ハイスループット細胞ナノ加工技術の基礎技術を確立した。

3）インターフェース統合プラットフォームロボットの運用耐久性を向上し、加えて適用範囲を大幅に拡大する新規マニピュレータ機構を開発した。

・知識外化モデリング、機能概念および方式知識マイニングに関する研究（溝口・高藤）

1）オントロジー工学に基づく知識外化モデルは機能概念の洗練、制御構造の導入など深化している。最新の成果を任意の第三者の評価が可能なツールとして具現化した。

2）知識外化ツールを利用する際に機能概念に関する語彙について適切に示唆するため、技術文献から言語資源を抽出し整備する研究を完結、知識外化ツールに搭載した。

3）予め典型的な方式知識を構築するため特許文書を解析し方式知識を抽出する研究を開始した。本年度は基本的な解析プログラムを完成した。

・産業構造変化に伴う新産業予測・技術ベンチャー成功要因に関する研究(吉田、中澤)

1）企業の業績と（株主）ネットワーク構造との相関から成長戦略に関する分析を行い、分析に基づく知財マップを新産業予測ツールとして活用するシステム作りを進めている。

2）半導体製造用材料企業の事例分析から、①市場、②テクノロジー、③コスト、④未来予測、⑤人・組織、⑥ファイナンスの６つを成功要因とする新規モデルの提唱を行った。

・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（沼尾、福井）

1）複数人同時行動下やセンサー感知漏れに対して頑健な人物追跡法を提案し、データ累積により、かなり正確に習慣的な各人の行動経路を抽出可能であることを確認した。

2）新規燃料電池の健全性診断支援に、アコースティック・エミッション法による大規模データのクラスタリングと可視化を同時に行う自己組織化マップの有効性を確認した。

[原著論文]

遅順応 I 型機械受容ユニットへの刺激信号と生成感覚強度に関する基礎的研究、鈴木隆文、齋藤 敬、國本雅也、満渕邦彦、日本バーチャルリアリティ学会論文誌、11[1](2006),95-100.

A Multi-purpose Eight-legged Robot Developed for an Evaluation of a Neural Interface, T. K. Saito, I. Saito, N. Nemoto, K. Takiura, T. Ozeki, N. Kakuta, T. Tohyama, T. Isoyama, T. Chinzei, Springer Tracts in Advanced Robotics, 24 (2006) 385-394.

Influence of Microstructure on the Complex Permeability of Spinel Type Ni-Zn Ferrite, S.T. Mahmuda, A.K.M. Akther Hossain, A.K.M. Abdul Hakim, M. Seki, T. Kawai, H. Tabata, J. Magnetism & Magnetic Materials, 305 (2006) 269-274.

Visualization Architecture Based on SOM for Two-Class Sequential Data, K. Fukui, K. Saito, M. Kimura, M. Numao, Lecture Notes in Artificial Intelligence, 4252, (2006) 929-936.

[特許]

「マニピュレータ機構」齋藤 敬、特願 2006-226099

[国際会議]

Getting Daily Human Habitual Behaviours from Infrared Sensor Network, *S. Kurihara, S. Honda, K. Fukui, K. Moriyama, M. Numao, K. Fukuda, T. Hirotsu, T. Takada, T. Sugawara, Proc. 3rd International Conference on Networked Sensing Systems (INSS2006). Chicago, Illinois, U.S.A.. May 31-Jun. 2, 2006.

Towards a Reference Ontology of Functionality for Interoperable Annotation for Engineering Documents, *Y Kitamura, N. Washio, M. Ookubo, Y. Koji, M. Sasajima, S. Takafuji, R. Mizoguchi, Proc. of the European Semantic Web Conference, ESWC2006, Budva, Montenegro, Jun. 11-14, 2006.

Room Temperature Weak Ferromagnetism in Ferroelectric $Pb(Fe,Ta)_{0.5}O_3$ & $Ba(Fe,Ta)_{0.5}O_3$ Thin Films, A. K. M. Akther Hossain, *M. Seki, T. Kawai, H. Tabata, The 17th International Conference on Magnetism, Kyoto, Japan, Aug. 20-25, 2006.

High-efficiency Cell Membrane Perforation Technique Based on Self-organized ZnO Nanorods, *M. Seki, T. Saito, H. Tabata, SSDM2006, Yokohama, Japan, Sep. 13-15, 2006.

Animal Mimic Robot as a Prototype Artificial Body for Nano Integrated Neuro-machine Interface Devices, *T. K. Saito, H. Tabata, Sanken International Symposium on Nanoscience and Nanotechnology 2006,Osaka, Japan, Sept. 19-20, 2006.

Synthesis of Oxide Nanorods by Laser-induced VLS Technique, *M. Seki, T. Fujimura, T. K. Saito, H. Tabata, The 13th International Workshop on Oxide Electronics, Ischia, Italy, Oct, 8-11, 2006.

Evaluation of Sequential AE Signals in SOFC Utilizing SOM, *N. Imanaka, K. Fukui, K. Sato, K. Moriyama, S. Kurihara, M. Numao, Proccedings of the 5th 21st Century COE "Towards Creating New Industry Based on Inter-Nanosicence" International Symposium. Awaji, Japan, Dec, 8-9, 2006.

Self-assembled Oxide Nanorods and Their Applications to Bio Systems, *M. Seki, T. Saito, H.

Tabata, 5th 21st Century COE “Towards Creating New Industries Based on Inter-Nanoscience” International Symposium, Awaji, Hyogo, Japan, Dec. 8-9, 2006.

An Ontology-based Annotation Framework for Representating the Functionality of Engineering Devices, *Y. Kitamura, N. Washio, Y. Koji, M. Sasajima, S. Takafuji, R. Mizoguchi, Proc. of IDETC/CIE 2006 ASME 2006 Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, Philadelphia, Pennsylvania, USA, Sept. 10-13, 2006.

Photodynamic Perforation of Cell Membrane on Micro Channel Array Toward Intra Cellular Technology, *K. Iso, T. K. Saito, H. Muguruma, H. Tabata, S. Konishi, Proc. of 20th IEEE International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS2007), Kobe, Japan, Jan.21-25, 2007.

［ 国内学会 ］

応用物理学会	4 件
計測自動制御学会	1 件
産学連携学会	1 件
人工知能学会	2 件
電気化学会	1 件
電子情報通信学会	1 件
日本物理学会	1 件

［ その他の競争的研究資金 ］

単位：千円

齋藤　敬（分担）	富山県元気な雪国づくり事業	雪上作業ロボットの開発	2,000
齋藤　敬	大阪大学産業科学研究所リーダーシップ支援経費	特別設備要求	1,500

〔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　　磯山　悟朗
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。昭和５７年（１９８２年）に産業科学研究所に金木工場とガラス工場が統合して試作室となった。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し貢献している。

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の製作を行なっている。近年は超高真空や極低温等用実験装置の依頼が多く、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、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。

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、刻印や針金細工の体験を実施した。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、ハンドワーク加工の実演および体験を実施した。また、８月２～４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「ガリレオ温度計をつくろう！」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コンターマシン（帯鋸盤）とガラス工作室の歪検査器とハンドワーク作業台を更新した。また、金属工作室の精密加工用マシニングセンタの周辺装置と工具を整備した。

技術の研鑽としては全国の技術職員が集う技術研究会やガラス工作技術シンポジウムに参加、運営した。

また、神戸大学、京都大学、大阪府立大学、福井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。

[年間依頼処理件数]

金属工作室　２２８件（前年度１４８件）　ガラス工作室　２４０件（前年度２１６件）

[オープンショップ利用件数]

金属工作室　５５件　　ガラス工作室　２５件

[いちょう祭見学者数]

金属工作室　約７０名（刻印等体験６０名）　　ガラス工作室　約１１０名（細工体験１００名）

[実技指導受講者数]

金属工作室　８名　　ガラス工作室　８名　２５件（内　所外　４名　１０件）

情報ネットワーク室

室長（兼任）　　谷村　克己
教授（兼任）　　菅沼　克昭
助教授（兼任）　村上　聡
助手（兼任）　　大原　剛三
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　　デイビス　千明（平成 18 年 10 月 1 日採用）

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てインターネットライブを提供しているかたわら、研究所入館管理システムや電子掲示板の運用・管理も行っている。

b） 成果

[インターネットライブ関連]

- 産研・ナノテクノロジーセンター国際合同シンポジウム 2006「Perspective on Interdisciplinary Nanobiology and Industrial Nanotechnology」 (06 年 9 月)
- 産業科学研究所　第 62 回学術講演会「高度産業科学と国際連携」 (06 年 11 月)
- 第 5 回 21 世紀 COE プログラム国際シンポジウム「新産業創造指向インターナノサイエンス」 (06 年 12 月)

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 ^{3}H, ^{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。本実験室では、上記の元素で標識された化合物の合成や、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など生化学や分子生物学の研究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　　吉田　陽一
事務職員　　古田　泰子

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、第二閲覧室、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。平成 19 年 3 月には時間外利用について産研 IC カード管理に変更した。図書、雑誌の発注、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　１２，５８８冊　　和雑誌　２９２種　　新聞　５種
欧文図書　４４，５８７冊　　洋雑誌　９６６種
（平成１９年４月１日現在）

産学連携室

室長　特任教授　　千田　一貴
室長代行　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）と産業界との連携を行うオフィスで、産研と２つのセンター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た。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、大学発ベンチャー企業への橋渡しや創出に向けた準備・支援・啓発活動を行った。

b） 成果

・産学連携活動

産研における研究成果や保有する技術シーズを産業界に公開し、産業界のニーズとの整合を図ることによって成果の早期実用化の促進を行った。主な活動は以下の通りである。

（１）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。

（２）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：産業界の支援団体である産研協会との協力のもとに産研テクノサロンを開催し、産研の研究成果、技術シーズを紹介。
②新産業創造研究会：技術シーズの紹介・技術移転の場である産研協会が主催する新産業創造研究会の新テーマを設定。
③外部の講演会・セミナー等において研究成果、技術シーズを紹介。
④Ｗｅｂ紹介：産学連携室のホームページを開設し、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。
⑤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。
⑥展示会・イベントでの紹介：技術情報交流展、国際ナノテクノロジー展で紹介。
⑦米国ブランチワークショップで活動紹介。

（３）企業との共同研究や実用化プロジェクトのコーディネイト
①共同研究、受託研究等のコーディネーション。
②共同研究講座の設立準備。

（４）技術移転に関する支援
①新産業創造研究会立ち上げ支援。
②新規ベンチャー立ち上げに関する支援。
③保有特許の活用先の調査を実施。

（５）知財創出活動
①知財の発掘：技術シーズの特許化を検討し特許出願。
②特許出願に関するコンサルティング。
③発明ヒアリング：知財本部と協力し内容拡充。

（6）その他

産研協会企画戦略会議を実施し産学連携事業を企画。スーパー産学官連携機構会議に出席し大学本部機構との情報交換、協力関係を構築。

・新産業創造に向けた啓発活動

異分野の連携・融合による新産業創造に向けた活動を活発にするため、異文化（異分野）の理解と交流を促進する以下の講演会を中心とした啓発活動を実施。

＜新産業に向けた知的財産マネージメント講演会＞

目的：異分野（異文化）との交流や知的財産の創出、活用、管理等の活動の活性化のため、グローバルに産業界などで活躍する研究者や管理者との交流の場を作ることは、意義深い。具体的な活動として、招待講演会を企画、開催し、交流の場を提供するとともに新たな産業や知の創造に向けた最新の動向の把握と今後の進むべき方向を明確にする試みを行った。

第一回講演「産学連携と知財マネージメントー新事業とベンチャーのために役だつ考え方ー」

（株）テクノインテグレーション、東北大学・早稲田大学・島根大学客員教授出川通氏より産学連携の基本とアライアンスの重要性について講演。

第二回講演「米国における知財活用の現状ー米国大学の活動から」

米国 Ocean TOMO, LLC 弁護士、弁理士藤森涼恵氏による知的財産流通・活用に関するサービス、米国大学による戦略的な知財活用の状況について講演。

第三回講演「競争力を強める知財マネージメントー紛争を意識してー」

早稲田大学客員教授、キャノン株式会社顧問丸島儀一氏より事業を強くする知財、連携のあり方について講演。

広報室

室長（兼任）　　山口　明人
派遣職員　　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

- いちょう祭一般公開広報
  一般公開来場者　279 名
  新聞掲載　1 件（産経新聞平成 18 年 4 月 25 日朝刊）
  テレビ取材　2 件（ケーブルウエスト「情報スロット 999」、「日刊すいた情報局」）
- ものづくり教室広報
  参加者　66 名（申込者 200 名超）
  新聞掲載　2 件(読売新聞平成 18 年 7 月 18 日・朝日新聞平成 18 年 7 月 22 日朝刊)
  冊子掲載　2 件(朝日ファミリーニュース 9 月 1 日号・教育大阪 Vivo la Vita 12 月号)
  テレビ取材　2 件(ケーブルウエスト「北摂ニュース」(平成 18 年 8 月 3 日放映)
  ケーブルウエスト「日刊すいた情報局」(平成 18 年 8 月 3 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
- 施設見学受け入れ（広報委員会確認分）
  見学件数　10 件 （高等学校 7 校、団体 3 団体）
  見学者数　307 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、パネル更新
- ニュースレター表紙の刷新
- 産研ロゴマーク作成

技術室

	室　長	山田　等
工作班	班　長	角一　道明
機械回路工作係	係　長	山本　保
ガラス工作係	係　長	松川　博昭
技術専門職員		小川　紀之、大西　政義
計測班	班　長	石橋　武
計測・情報システム係	係　長	田中　高紀
	係　員	奥村　由香
分析・データ処理係	係　長	谷畑　公昭
	係　員	松崎　剛
技術専門職員		馬場　久美子、相原　千尋

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。技術室長は技術室を統括すると共に、材料解析センターにおいて業務を行ってきた。

工作班長は工作班を統括すると共に、試作室の金属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及び機械回路工作係所属技術職員は、産業科学ナノテクノロジーセンター（加速器量子ビーム実験室）及び試作室の金属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及びガラス工作係所属技術職員は、試作室のガラス工作室において業務を行ってきた。

計測班長は計測班を統括すると共に、産業科学ナノテクノロジーセンター（電子顕微鏡室）において業務を行ってきた。計測班所属技術専門職員及び分析・データ処理係所属技術職員は、産業科学ナノテクノロジーセンター（加速器量子ビーム実験室・ナノ加工室）及び材料解析センターにおいて業務を行ってきた。計測班所属技術専門職員及び計測・情報システム係所属技術職員は、材料解析センター及び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。特に産研シンポジュウムや COE 国際会議などのインターネットライブや映像記録、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も 19 回目を数え、「技術室報告」No.19 (2006) 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。さらに昨年に続いて、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。また新しい試みとして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、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.19 (2006)

技術室主催、所内講習会及び報告会等

・安全講習会　　2006 年 5 月 19 日開催　参加人数 30 名
・ものづくり教室　　2006 年 8 月 2 日～8 月 4 日開催　参加人数 66 名

・第 1 回大阪大学産業科学研究所技術室－東北大学多元物質科学研究所技術室「合同技術シンポジウム」
2006 年 9 月 21 日～9 月 22 日開催　参加人数 40 名　（以下の名が発表）

「全方位カメラ試作にあたる新技術の習得」	工作班	大西　政義
「技術室として安全衛生への取り組み」	室　長	山田　等
「多元研－産研テレビ会議システムを構築するにあたって」	計測班	相原　千尋
「ものづくり教室開催にあたって」	計測班	石橋　武

・第 19 回産研技術室報告会　　2006 年 12 月 12 日開催　参加人数 35 名　（以下３名が発表）

「出張ガラス細工教室のノウハウ」	工作班	小川　紀之
「USB－A/DC を用いた簡易測定システム開発の試み」	計測班	田中　高紀
「シリコンウェハーホルダーについて」	工作班	松川　博昭

技術研究会、学会等の参加、発表

・第 73 回日本分析化学会有機微量分析研究懇談会－徳島文理大学香川薬学部 (06,5 月)
・情報システム統一研修（九段合同庁舎）－東京都 (06,8 月)
・第 2 回情報技術研究会－九州工業大学 (06,8 月)
・第 31 回リニアック技術研究会－仙台市 (06,8 月)
・平成 18 年度機器・分析技術研究会－広島大学 (06,10 月)
・第 4 回ガラス工作技術シンポジウム－広島大学 (06,10 月)・・・口頭発表
・東北大学多元物質研究所技術室－仙台市 (06,10 月)・・・技術研修
・日本放射線安全管理学会（第 5 回学術大会）－名古屋大学 (06,11 月)・・・ポスター発表
・ネットワーク管理担当者研修－大阪市 (06,11 月)
・大阪大学技術職員研修（第 23 回）－大阪大学 (06,12 月)
・21 世紀 COE プログラム「新産業創造指向インターナノサイエンス」新産業創造指向融合型研究における男女共同参画の推進セミナーー阪大・産研 (07,1 月)・・・ポスター発表
・第 13 回国立大学附置研究所技術室長会議－九州大学 (07,3 月)
・総合技術研究会－名古屋大学 (07,3 月)

視察、研修等による技術室への来訪者

・鳥取大学　工学部 技術部　　丹松　美由紀氏－技術室報告会への招待講演
・東北大学　多元物質研究所　　柴田吉郎、佐々木俊明、加賀谷孝三郎、菅野洋一、荒井彰、朝倉和也
以上 6 名－産研・多元研　合同シンポジュウムへの参加

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 4 類免許）（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）

事務部　（平成１９年３月３０日現在）

		（部長）	田部　信重
総務課		（課長）	水口　修
		（専門職員）	村尾　眞理子
	庶務係	（係長）	川添　勝仁
		（主任）	山咲　和久
		（事務職員）	俊成　謙介
		（事務補佐員）	長谷川　尚子
		（事務補佐員）	北浦　恵美子
		（事務補佐員）	小島　慶子
		（事務補佐員）	前川　瑠里
		（事務補佐員）	光森　幸子
		（事務補佐員）	林　和美
		（事務補佐員）	西田　彩
経理課		（課長）	佐藤　淳郎
		（専門職員）	今村　康雄
		（事務職員）	日高　由希
	経理係	（係長）	白井　政行
		（主任）	花木　信夫
		（主任）	反橋　雄二
		（事務補佐員）	清水　実佐子
		（事務補佐員）	澤路　真希
		（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
	研究助成係	（係長）	小野田　紀文
		（主任）	中原　洋一
		（事務職員）	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

平成１９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