

CAMT Newsletter

2018年5月30日 No.15

目次

- 1. アニュアルレポート発行のお知らせ 1
- 2. 受賞のお知らせ 1
- 3. 新論文のご紹介 2

1. アニュアルレポート発行のお知らせ

アトミックデザイン研究センターの2017年度の研究成果報告として、アニュアルレポートを発行しました。 [こちら](#) (8.6MB)をご覧ください。

2. 受賞のお知らせ



今西 正幸助教が船井情報科学振興財団「船井研究奨励賞」を受賞しました。

「低欠陥・大口径・厚膜GaN結晶を実現するハイブリット成長法の開発」

この賞は、情報技術、情報科学に関する研究について顕著な功績のあった者を褒賞し、わが国の情報技術、情報科学に関する研究の向上発展に寄与することを目的としています。



小西 彬仁助教が日本化学会第98春季年会(2018)「優秀講演賞(学術)」を受賞しました。

「 π 拡張ジベンゾ[a,f]ペンタレン類の合成と物性：縮環が開殻性と反芳香族性に及ぼす効果について」

この賞は、発表内容、プレゼンテーション、質疑応答などにおいて優れた講演で、講演者の今後の一層の研究活動発展の可能性を有すると期待されるものに対して授与されるものです。



工学研究科附属

アトミックデザイン
研究センター

Center for Atomic and Molecular Technologies

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

TEL:06-6879-7917

FAX:06-6879-7916

E-mail: info@camt.eng.osaka-u.ac.jp

<http://www.camt.eng.osaka-u.ac.jp>

3. 新論文のご紹介



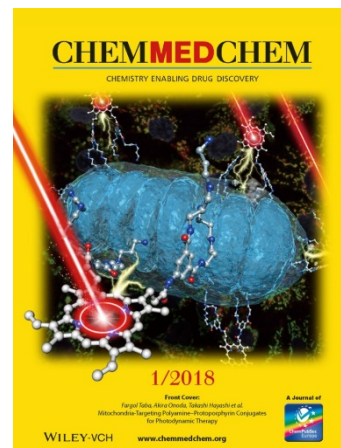
Mitochondrial-targeting Polyamine-Protoporphyrin Conjugates for Photodynamic Therapy

Fargol Taba, Akira Onoda, Urara Hasegawa, Toshiaki Enoki, Yousuke Ooyama, Joji Ohshita and **Takashi Hayashi**

ChemMedChem, 13, 15-19 (2018), DOI:10.1002/cmdc.201700467.

雑誌表紙でハイライト紹介されました。

光線力学的療法 (Photodynamic Therapy : PDT) は、腫瘍親和性のある光感受性物質である薬剤を投与した後、腫瘍組織にレーザー光を照射することにより光化学反応を引き起こし、腫瘍組織を変性壊死させる選択的治療法です。PDTは、レーザー光照射部位のみに高い抗腫瘍効果を示す局所療法であり機能温存な治療法ですが、光感受性物質により光線過敏症を起こす事があります。本提案者は、より低濃度で抗腫瘍効果を得ることを目的として、ミトコンドリア標的型の光線力学的療法用剤の開発をめざしています。すでに、本提案技術では、一般的な光増感剤にミトコンドリア標的分子を連結した薬剤が、標的能力のない薬剤に比べて、より低濃度で抗腫瘍効果を示すこと、同濃度では約8倍の光細胞毒性効果を示すことをin vitroの細胞実験にて確認しています。

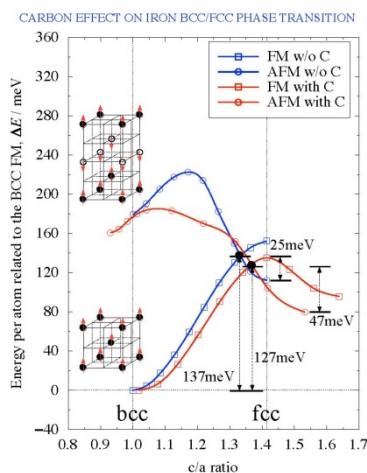


First-Principles Study of BCC/FCC Phase Transition Promoted by Interstitial Carbon in Iron

Tien Quang Nguyen, Kazunori Sato, **Yoji Shibutani**

Materials Transactions, Volume 59 (2018) Pages 870-875

In this work, by using first-principles calculations in combination with the generalized solid-state nudged elastic band (SS-NEB) method and taking into account different magnetic configurations, the effect of carbon on the phase transition between body centered cubic (BCC) and face centered cubic (FCC) in iron along Bain pathway was investigated. We found that, for pure iron system, an energy barrier of 137 meV per atom is needed for the BCC-to-FCC transition process, while 25 meV per atom is needed for the opposite process (FCC-to-BCC). When carbon is present in the iron and resides at the octahedral interstitial site of iron BCC/FCC lattice, an energy barrier of 127 meV per atom is needed for a transition from BCC to FCC and 47 meV per atom is needed for the transition from FCC to BCC, along the Bain path. Thus, carbon promotes the transition from BCC to FCC while it prevents the phase transition in opposite direction, from FCC to BCC. This is due to the local stress field formed around carbon atom which pushes the iron atoms aligning with carbon along [001] away to maintain the Fe-C equilibrium distance (about 1.78 Å and 1.91 Å for FM and AFM states, respectively).





Development of Fe-C interatomic potential for carbon impurities in α -iron

Tien Quang Nguyen, Kazunori Sato, **Yoji Shibutani**

Computational Materials Science, Vol.150, 510-516

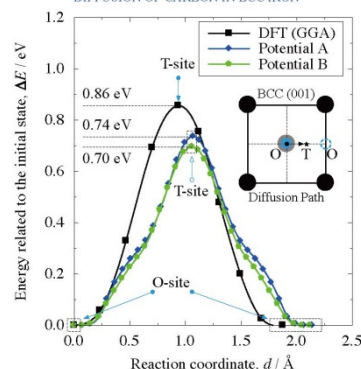
In this work, two versions of interatomic potentials for the Fe-C system (potentials A and B) were developed based on the analytic bond-order potential (ABOP) formalism by using the genetic algorithm to fit to the first-principles database. These potentials were constructed from the dissolution, substitutional and trapping energies of carbon in iron at different lattice sites as well as the atomic forces of all atoms. By defaults, these potentials give excellent description for the stability of carbon in body centered cubic (BCC) iron

structure. In addition, the transferability of the potentials was checked for the diffusion process of carbon in BCC iron and the effect of carbon on the body centered cubic/face centered cubic (BCC/FCC) phase transition. We found that the potentials reproduce correctly the diffusion paths of carbon with energy barriers of 0.74 and 0.70 eV for potentials A and B, respectively. They also show a good description for the enhancement of the energy barrier in the BCC/FCC transformation process due to carbon. These findings are consistent with the density functional theory (DFT) results. Thus, the new potentials can be good candidates for modeling carbon diffusion and the transformation processes in iron-carbon alloys.

INTERATOMIC POTENTIAL FORMALISM

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_{ij}^c(r_{ij}) [V_{ij}^a(r_{ij}) - b_{ij} V_{ij}^b(r_{ij})]$$

DIFFUSION OF CARBON IN BCC IRON



ナノ凹凸構造が凝縮核生成に及ぼす影響に関する分子動力学的研究

宇野 元気, 藤原 邦夫, 植木 祥高, 芝原 正彦

日本機械学会論文集, 17-00409

蒸発や凝縮といった相変化を伴う熱輸送は、潜熱により多量の熱を運ぶことができるため、発電産業や空調システム、電子機器の冷却など幅広い分野で応用されています。しかし伝熱面にナノ構造がある場合の凝縮過程の詳細なメカニズムは明らかになっておりません。本研究では、凝縮熱伝達率の高い微細構造形状の予測を目的として、非平衡分子動力学を用いてナノ構造が凝縮過程や核生成速度に及ぼす影響を調査しました。その結果、クラスターはナノ構造側壁近傍に生じ、ナノ構造間で成長することが分かりました。また、凝縮過程時に生じる熱流束と核生成速度は正の相関があることも明らかとなりました。



第一原理計算によるAl合金中の空孔-溶質原子クラスターの構造解明

水野正隆, 杉田一樹, 荒木秀樹, 白井泰治

陽電子科学, Vol. 10, Page 13-19.

第一原理計算によりAl合金における空孔-溶質原子クラスターの安定性を評価しました。Al-Zn合金では空孔の近接位置を全てZnが置換した状態が安定に存在しますが、Al-Mg、Al-Si合金では4原子置換した状態が最も安定となりました。Al-Mg-Siの3元系合金の場合は、空孔の近接位置を全てMgとSiで置換した状態が安定に存在し、空孔-Mg₄Si₈が最も安定となりました。SiとZnが陽電子寿命を短くするのに対して、Mgは陽電子寿命を長くし、Al-Mg-Siでは構造緩和によりMgの陽電子消滅への寄与がSiより大きくなる傾向があることが分かりました。



Origin of pseudoelasticity by twinning in D0₃-type Fe₃Ga

Masataka Mizuno, Hiroyuki Y. Yasuda, Hideki Araki

Computational Materials Science, Vol. 145, Page 154-162

D0₃型構造のFe₃Gaで発現する双晶擬弾性の起源を解明するため双晶界面の移動過程の第一原理計算を行いました。その結果、D0₃型構造のFe₃Gaにおける双晶界面の移動過程ではエネルギー障壁が生じないことが明らかとなりました。双晶界面の移動過程における構造変化の詳細を解析した結果、双晶界面近傍では母相と擬双晶の格子定数の差を緩和するためにせん断ひずみが生じており、そのせん断ひずみに起因して複数の層が連動して双晶界面の移動が起こるためエネルギー障壁が生じていないと考えられます。



A software level calibration based on Bayesian regression for a successive stochastic approximation analog-to-digital converter system

Keiji Tatsumi, Toshimasa Matsuoka

IEEE Transactions on Cybernetics, in press, DOI: 10.1109/TCYB.2018.2795238

IoT機器やウェアラブル機器に搭載される低電力センシング用アナログ集積回路には、低電源電圧動作が望まれます。しかし、このような回路では、わずかな製造ばらつきでも回路の精度に影響します。本研究では、これを克服するために提案した新規高精度A/D変換器において、ベイズ回帰を用いた誤差推定とこれを用いた補正の有効性を示しました。



Improvement of metastable crystal of acetaminophen via control of crystal growth rate

K. Nii, M. Maruyama, S. Okada, H. Adachi, K. Takano, S. Murakami, H. Y. Yoshikawa, H. Matsumura, T. Inoue, M. Imanishi, K. Tsukamoto, M. Yoshimura, and Y. Mori

Applied Physics Express, Vol.11, pp.035501-1/035501-4

アセトアミノフェンのII型結晶は薬剤多型の1つであり、準安定相であることから即効性が期待されています。しかしながら、当該結晶は不安定であることから安定相であるI型に転移してしまうことが問題となっていました。本研究では微小な結晶を種にすることに加え、過飽和度を最適化することでII型結晶の高品質化に成功し、安定性を向上することに成功しました。

 Injected ion energy dependence of SiC film deposited by low-energy SiC_3H_9^+ ion beam produced from hexamethyldisilane

S. Yoshimura, S. Sugimoto, T. Takeuchi, K. Murai, M. Kiuchi

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 420, pp. 6-11, (2018).


シリコンカーバイド (SiC) の成膜においては、通常はシランガスが用いられます。シランは爆発性の高い、極めて危険なガスです。そこで我々は、ヘキサメチルジシランを用いたSiC成膜プロセスを提案しています。本研究では、ヘキサメチルジシランを解離してできた各種のフラグメントのなかでは最も数多く生成される SiC_3H_9^+ を質量分離により抽出し、イオンビームを作成しました。また、このイオンビームを 800°C のシリコン基板に、エネルギー20, 100, 200eVで照射しました。得られたサンプルを分析した結果、20eVの場合には3C-SiC膜が堆積しますが、100eVと200eVでは、3C-SiCにダイヤモンドライクカーボンが混入してしまうことが明らかになりました。

 Low-energy mass-selected ion beam production of fragments from tetraethylorthosilicate for the formation of silicon dioxide film

S. Yoshimura, S. Sugimoto, T. Takeuchi, K. Murai, M. Kiuchi

Thin Solid Films, Vol. 655, pp. 22-26, (2018).


酸化ケイ素 (SiO_2) の成膜においても、通常はシランガスが用いられます。我々は、シランよりもずっと可燃性が低く安全なオルトケイ酸テトラエチル (TEOS)を用いた、低エネルギーイオンビームによる SiO_2 成膜プロセスを提案しています。本研究では、TEOSを解離してできた各種のフラグメントのなかから $\text{Si}(\text{OH})_3^+$ を質量分離により抽出し、50eVのイオンビームを作成しました。また、このイオンビームを 320°C のシリコン基板に照射しました。得られたサンプルを分析した結果、基板上に膜厚88nmの SiO_2 膜が堆積していることを確認しました。

 Deposition of indium nanoparticles on powdered material by pulse arc plasma to synthesize catalysts for Friedel-Crafts alkylation

S. Yoshimura, Y. Nishimoto, S. Sugimoto, M. Kiuchi, M. Yasuda

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 16, pp. 105-110, (2018).

近年、酸化インジウムの触媒能が注目されています。しかしながら、市販の酸化インジウムパウダーは、溶媒に溶けにくいという問題点があります。我々は、別のパウダー状の材料を担体として用いることとし、プラズマ技術を活用し、この担体の表面上に酸化インジウムのナノ粒子を均一かつ分散して担持するという触媒合成法を考案しました。今回は、触媒効率のナノ粒子径への依存性を調査しましたが、ナノ粒子径の大小で触媒効率にほとんど違いは見出せませんでした。

 Highly Selective Photodynamic Therapy with a Short Drug-Light Interval Using a Cytotoxic Photosensitizer Porphyrus Envelope for Drug-Resistant Prostate Cancer Cells

Youngsoon Hong, Mizuho Inai, Norihiro Honda, Hisanao Hazama, Manjusha A. Joshi, Hiroyuki Nakamura, Tomoyuki Nishikawa, Yasufumi Kaneda, Kunio Awazu

International Journal of Clinical Medicine, Vol.9 No.1, PP. 8-22



Synthesis of Co-doped β -FeSi₂/Si composites through eutectoid decomposition and its thermoelectric properties

Farah Liana Binti Mohd Redzuan, **Ito Mikio**, Takeda Masatoshi

Journal of Materials Science vol.53, Issue 10, pp 7683-7690

α -Fe₂Si₅の共析分解により合成したナノSi/ β -FeSi₂コンポジット熱電変換材料では、Si相の微細分散により、従来の β -FeSi₂単相材料に比較して優れた熱電性能を得ることができます。一方、Si相の高い電気抵抗率および熱伝導率を低減させることによりさらなる高性能化が期待されることから、その実現に向けて本研究ではPのドーピングを試みました。その結果、PはナノSi相に優先してドーピングされ、P添加量をコントロールすることにより通常は困難とされる、電気抵抗率と熱伝導率の同時低減に成功し、P無添加材に比較して熱電性能を大きく向上できることを明らかにしました。



Construction of Polycyclic π -Conjugated Systems Incorporating an Azulene Unit Following the Oxidation of 1,8-Diphenyl-9,10-bis(phenylethynyl)phenanthrene

Akihito Konishi, Atsushi Morinaga, Makoto Yasuda

Chem. Eur. J. 2018, in press, DOI:10.1002/chem.201801915

近年、2次元的に π 共役を拡張した縮合多環芳香族化合物群が注目されています。本論文では、その π 共役中に'アズレン'とよばれる特殊な骨格を簡単に埋め込む方法について報告しました。鍵となるのは、基質と銀(I)イオンとの錯形成で、アセチレンと銀イオンとの相互作用がアズレン環形成を促進することを明らかにしました。得られた分子は特異な光吸収と酸化還元挙動を示し、機能性材料としての展開が期待されます。