



CAMT Newsletter

2018年12月28日 No.16

目次

- 1. 受賞のお知らせ 1
- 2. 第9回材料のマルチスケールモデリングに関する国際会議(MMM2018)のご報告 2
- 3. シンポジウム・研究会等のお知らせ 2
- 4. 新論文のご紹介 3

1. 受賞のお知らせ



渋谷 陽二 教授が「JACM Computational Mechanics Award」を受賞しました。

この賞は、計算力学の広い分野での顕著な研究業績、ソフトウェア開発、計算技術開発に対して与えられるものです。



尾崎 雅則 教授らが「2018年度 日本液晶学会賞論文賞A部門(a分野)」を受賞しました。

“Planar optics with patterned chiral liquid crystals”
(Nature Photonics, vol. 10, pp. 389-382, 2016)

小橋 淳二, 吉田 浩之, 尾崎 雅則

この賞は、日本液晶学会討論会や他の液晶関連学会および学術雑誌等において発表された液晶科学技術に関連する最優秀論文を表彰するものです。



北野 勝久 准教授研究グループの横山 高史さん(D3)が、国際会議 ICPM7 (The 7th International Conference on Plasma Medicine) において、「The Best Student Paper Award, 2018」を受賞しました。

大気圧低温プラズマを用いた皮膚の消毒に関する研究のポスター発表

「Effective and safe plasma disinfection on contaminated skin model using porcine skin tissue by the reduced-pH method」

この賞は、同国際会議の口頭発表またはポスター発表を行った博士課程の学生の中から、優秀な発表者に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

2. 第9回材料のマルチスケールモデリングに関する国際会議 (MMM2018) のご報告

 材料の強度や変形・機能について、電子・原子論から連続体力学・統計熱力学までスケールを跨ぐ、材料のマルチスケールモデリングに関する国際会議が下記のように開催されました (<http://mmm2018.jp/>).

開催期間：2018年10月28日(日)から11月2日(金)

開催場所：大阪国際会議場（グランキューブ大阪）

参加登録者数：653名

共同議長：渋谷 陽二教授 (工学研究科), 尾方 成信教授 (基礎工学研究科)

この会議は、2年毎に欧州、米国、アジアの3地域で開催されています。当該分野を代表する6件の基調講演を始め、15のシンポジウムで計135名の招待講演が配置され、熱心な質疑応答とともに深みのある学术交流がなされました。また、160名を越えるポスター発表が2回に分けて行われ、参加登録者全員を対象にした投票により8名の発表者に優秀ポスター賞を授与しました。

日本での開催が今回ようやく実現し、世界40ヶ国からの参加者が全体の75%を超え、我が国の当該学術分野の活性化と学生を含めた若手人材育成の良い機会になりました。



3. シンポジウム・研究会等のお知らせ

 第34回コンピュータショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ

2019年2月18日(月)から2月22日(金)まで、大阪大学基礎工学研究科（豊中キャンパス）で開催されます。

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。

4. 新論文のご紹介



Planar optics with patterned chiral liquid crystals

小橋 淳二, 吉田 浩之, 尾崎 雅則

Nature Photonics, vol. 10, pp. 389-382, 2016



「2018年度 日本液晶学会賞論文賞A部門(a分野)」を受賞しました。

平面にもかかわらず透過光や反射光の波面を制御でき、集光、偏向、散乱、光渦生成など光を自在に操れるフラットオプティクスが近年注目されています。これまで、ナノ微細加工技術を駆使して作製したメタサーフェスに関する研究が精力的に行われていますが、特に可視光域での素子作製は容易ではないのが現状です。本論文では、コレステリック液晶で自己組織的に形成される螺旋周期構造形に着目して、光配向技術によりパターン配向させたコレステリック液晶を用いたフラットオプティクスを実現して、新しい概念のフラットオプティクスを提案しています。



Thermal conductivity of suspension fluids of fine carbon particles: Influence of sedimentation and aggregation diameter

Y. Ueki, K. Ueda, **M. Shibahara**

International Journal of Heat and Mass Transfer, 1 2 7 138-144

微粒子を流体に混合することで熱物性が変化することが知られています。しかしながら、凝集粒子径や沈殿による相分離によりどの程度変化するかについては十分な知見がありませんでした。そのようは背景を受け、グラファイトやカーボンブラックといった炭素材微粒子を水に混合させ、粒子表面電位、凝集粒子径や熱伝導率がどのように経時変化するのかを実験的に調査し、Hamilton-Crosserモデルで特徴付けられることを明らかにしました。



Adsorption of H on Cs/W(110): Impact of H on the Stability of Cs on the Surface

Allan Abraham B. Padama, **Wilson Agerico Diño**, Motoi Wada, Katsuyoshi Tsumori, Masashi Kasaki, Hideaki Kasai, Hiroshi Nakanishi, Mamiko Sasao, Nozomi Tanaka

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology Volume 16, 391-395 (2018)

Negative hydrogen ions (H^-) are essential sources for magnetic confinement in fusion research and as particle sources in high energy accelerators. H^- can be produced by scattering particles (ions/atoms) from low work function surfaces, e.g., Cs-decorated surfaces, which facilitate charge transfer from the surface to the impinging particle. On W(110), we found that the adsorption energies of both H and Cs decrease in the presence of the other. Due to the greater electronegativity of H as compared to Cs, increasing the H coverage further weakens Cs adsorption on the W surface. As a result, Cs need to be replenished continuously in the system, which may lead to Cs leakage, voltage breakdown, and other damages to the acceleration system. Thus, it is necessary to reevaluate the design and/or find alternatives for the current Cs/W systems used in H^- production applications.

 Spin-Dependent O₂ Binding to HemoglobinDaiichi Kurokawa, Jessiel Saron Gueriba, **Wilson Agerico Diño**

ACS Omega Volume 3, No. 8, 9241-9245 (2018)

Being able to correctly determine the reaction/activation barriers is imperative if we are to be able to have full control of reactions. This involves mapping the whole energy landscape. Using the oxygenation and deoxygenation of hemoglobin as a test system, we showed that reactions do not necessarily follow “the path of least resistance”. Coupling between the internal degrees-of-freedom, e.g., spin, translation, orientation, result in activation barriers, that agree with experimental measurements, but completely different from those determined by conventional methods of system relaxation.

 CH₃Cl/Cu(410): Interaction and Adsorption GeometryTakamasa Makino, Siti Zulaehah, Jessiel Saron Gueriba, **Wilson Agerico Diño**, Michio Okada

Journal of Physical Chemistry C: Volume 122, No. 22, 11825–11831 (2018)

The Rochow process is the most common technology used to prepare organosilicon compounds on an industrial scale, and yet the mechanism is still not well understood. It involves the reaction of methyl chloride (CH₃Cl) with silicon, catalyzed by copper. However, it is still not clear how Cu catalyzes the (direct) reaction. Using experimental techniques, and supported by DFT-based total energy calculations, we showed that Cu catalyzes the reaction through molecular adsorption of CH₃Cl at the step-edges.

 Growth of high-quality transparent SrB₄O₇ single crystals with high degradation resistance for DUV laser applicationY. Tanaka, K. Shikata, R. Murai, Y. Takahashi, **M. Imanishi**, T. Sugita, Y. Mori, and M. Yoshimura

Applied Physics Express, Vol.11, No.12, pp.125501-1/3

本研究では、次世代光学硝材SrB₄O₇ (SBO) の結晶育成及び光学特性評価に取り組みました。シードクーリング技術の導入により1 mm/dayという低速成長を実現し、完全透明かつ大型なSBO結晶の育成に成功したことに加え、得られたSBO結晶が合成石英ガラスやCLBO結晶に比べ優れた266 nmレーザー損傷耐性を有することが確認できました。

 Thermal conductivity of GaN single crystals: Influence of impurities incorporated in different growth processesR. Rounds, B. Sarkar, T. Sochacki, M. Bockowski, **M. Imanishi**, Y. Mori, R. Kirste, R. Collazo, and Z. Sitar

Journal of Applied Physics, Vol.124, No.10, pp.105106-1/7

本論では様々なHVPE法, アモノサーマル法, 及びNaフラックス法で得られたGaN結晶の熱伝導率について評価した結果が掲載されています。我々が提供したNaフラックス法で作製したGaN結晶の熱伝導率が最も高く, 高い放熱性を持った電子デバイスを作製可能であることが分かりました。

 Identification of fragment ions produced from hexamethyldisilazane and production of low-energy mass-selected fragment ion beam

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

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 430, pp. 1-5, (2018).

窒素含有シリコンカーバイド (SiC-N) は、フレキシブルメディアの保護膜、低誘電率材料、パッシベーション膜などへの応用が期待されています。SiC-Nは、スパッタリングデポジションやプラズマCVDなどの成膜プロセスに、アンモニア等を原料ガスに混合することによって作成されています。我々は、ヘキサメチルジシラザンを解離することにより生成される SiCH_5^+ と SiNH_3^+ というフラグメントイオンに着目し、この両者の混合イオンビームを基板に照射することによるSiC-N成膜プロセスを実現しました。従来の方法は、手順がやや面倒であり、また、取り扱いに注意を要する原料ガスを使用しているのに対して、我々の方法では容易かつ安全にSiC-Nを成膜することができます。

 Effects of Hydrogen on the Chemically Enhanced Etching of Tin-doped Indium Oxide (ITO)

Hu Li, Kazuhiro Karahashi, Pascal Friederich, Karin Fink, Masanaga Fukasawa, Akiko Hirata, Kazunori Nagahata, Tetsuya Tatsumi, Wolfgang Wenzel, and Satoshi Hamaguchi

Jpn. J. Appl. Phys. 57 06JC05 (2018).

本研究では、ITOエッチング反応における水素の効果をイオンビーム実験と第一原理計算を用いて検討しました。イオンビーム実験により、水素イオン照射後に不活性原子であるNeイオンによるITOの物理的スパッタリング収率が增加することを示し、さらに、第一原理計算から In_2O_3 中の水素原子がOH基を形成することでIn-O結合を弱められ、 In_2O_3 膜の物理的スパッタリングに対する耐性が低下することを示しました。これらの結果より、 CH_4 プラズマに含まれる CH_x^+ イオン照射により水素原子がITOに注入されることで、イオン衝撃による物理的スパッタリング効率が低下し、ITOのエッチング収率向上していることを明らかにしました。

 Synthesis of Cyclopropane Fatty Acids by C(sp³)-C(sp³) Cross-coupling Reaction and Formal Synthesis of α -Mycolic Acid

Takanori Iwasaki, Shohei Terahigashi, Yufei Wang, Arisa Tanaka, Hanqing Zhao, Yukari Fujimoto, Koichi Fukase, and Nobuaki Kambe

Adv. Synth. Catal., 2018, 360(19), 3810-3817.

 Ni-catalyzed Dimerization and Hydroperfluoroarylation of 1,3-Dienes

Takanori Iwasaki, Xin Min, Asuka Fukuoka, Longzhi Zhu, Renhua Qiu, Tao Yang, Masahiro Ehara, Arumugam Sudalai, and Nobuaki Kambe

J. Org. Chem., 2018, 83(16), 9267-9277.



Cross-coupling reaction of alkyl halides with alkyl Grignard reagents catalyzed by Cp-iron complexes in the presence of 1,3-butadiene

Takanori Iwasaki, Ryohei Shimizu, Reiko Imanishi, Hitoshi Kuniyasu, ; **Nobuaki Kambe**
Chem. Lett. 2018, 47(6), 763-766.



Stereocontrolled Synthesis of Triols Containing Four Asymmetric Centers: Application of C,O-Chelated Germyl Enolates to a Diastereoselective Aldol Reaction

Yohei Minami, **Akihito Konishi**, Makoto Yasuda
Org. Lett. 2018, 20, 4148-4152.

トリオール類の効率的かつ立体選択的合成法の開発は、新規な配位子や機能性物質の合成へとつながるため注目されています。本論文では、キレート型ゲルミルエノラートという特殊な構造を持った反応試剤を活用し、高い立体選択性でトリオール類の合成が達成できることを見出しました。



Supramolecular Hemoprotein Assembly with a Periodic Structure Showing Heme-Heme Exciton Coupling

Koji Oohora, Nishiki Fujimaki, Ryota Kajihara, Hiroki Watanabe, Takayuki Uchihashi, and **Takashi Hayashi**

J. Am. Chem. Soc., 140, 10145-10148 (2018), DOI: 10.1021/jacs.8b06690.

本論文は、新しいタイプのバイオ材料を指向した補因子として鉄ポルフィリン（ヘム）を含むヘムタンパク質の超分子集合化に関する研究の成果です。これまでに我々のグループではヘムタンパク質表面に共有結合を介してヘムを修飾したユニットが、ヘムとヘムポケット間の相互作用で自発的に連なり、超分子集合体を形成することを報告しています。今回、さらに、ユニット間の界面においてアミノ酸側鎖間の相互作用を誘起し、剛直ならせん状の周期構造の構築を達成しました。その構造は分子動力学計算で予測し、3 nmほどのピッチを持つならせん構造であることを示し、実験的に原子間力顕微鏡や各種分光法を用いてその妥当性を証明しました。特に、タンパク質集合体の中でならせん状に配置されたヘム分子同士は溶液中で励起子カップリングを起こし、特徴的な円二色性スペクトルを示すことが明らかになりました。