



CAMT Newsletter

2020年1月31日 No.19

目次

1. 最新研究成果	1
2. 受賞・採択のお知らせ	1
3. WORKSHOP ON NANOTECHNOLOGY-DRIVEN TOPICSの報告	2
4. シンポジウム・研究会等の お知らせ	2
5. 新論文のご紹介	3

1. 最新研究成果

林 高史 教授らの研究グループは、全2工程であらゆるタンパク質のN末端へ選択的かつ簡単に分子をつなぐことができる新技術を開発しました。

タンパク質のN末端へ選択的に分子をつなぐ修飾剤は、これまで、多段階の製造工程が必要でしたが、今回の新技術によって、わずか1工程で製造することが可能になりました。そして、次の1工程で目的の分子をつなぐことができます。N末端に分子をつなぐ技術の中で、この新技術は、現在世界で最も簡単、そして実用性の高いもので、バイオ医薬品、検査試薬、タンパク質材料などへの応用が期待されます。詳細は、[大阪大学研究ポータルサイト「ResOU」](#)をご覧ください。

2. 受賞・採択のお知らせ



正岡 重行 教授に大阪大学栄誉教授の称号が付与されました。

この称号は、著名な賞を受賞するなど、本学の教育、研究及び社会貢献の推進に先導的な役割を担う本学の現役の教授及び大阪大学特別教授の称号付与者に対して付与されるものです。

正岡教授は、「金属錯体を触媒とする酸素発生反応」に関する業績で、平成28年度日本学術振興会賞を受賞しました。



小西 彬仁 助教が「有機合成化学協会 中外製薬 研究企画賞」を受賞しました。

「カゴ型配位子によるアルミニウムの高機能触媒化：反応活性種制御に基づく生物機能制御分子の高効率合成」

この賞は、有機合成化学分野における優れた萌芽的研究（研究企画）を提案した者に授与され、賛同企業の寄付をもとに賛同企業名を冠した研究企画賞により、その研究が助成されます。



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>



大阪大学工学部/大学院工学研究科
School/Graduate School of Engineering, Osaka University



今西 正幸 助教が、第80回 応用物理学会秋季学術講演会において、「第47回（2019年秋季）応用物理学会講演奨励賞」を受賞しました。

「Naフラックスポイントシード法により作製した大口径GaN結晶における転位の対消滅」

この賞は、応用物理学会の春秋講演会において応用物理学の発展に貢献しうる優秀な一般講演論文を発表した若手会員に授与されるものです。



藤原 邦夫 助教の研究提案が、科学技術振興機構（JST）の戦略的創造研究推進事業（さきがけ）の研究課題として採択されました。

「単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析」

「さきがけ」とは、国が直面する重要な課題の克服に向けて、独創的・挑戦的かつ国際的に高水準の発展が見込まれる先駆的な目的基礎研究を推進し、社会・経済の変革をもたらす科学技術イノベーションの源泉となる、新たな科学知識に基づく創造的な革新的技術のシーズ（新技術シーズ）を世界に先駆けて創出することを目的とするネットワーク型研究(個人型)です。

3. WORKSHOP ON NANOTECHNOLOGY-DRIVEN TOPICSの報告



大阪大学がJICAと契約を締結し、2015年から5年間進めてきた日越大学修士課程設立プロジェクトの中で、大阪大学が幹事校となっていますNanotechnology Programの研究テーマに関するワークショップが開催されました。

昨年12月10日に大阪大学吹田キャンパスで開催され、バイオセンサーの開発、半導体薄膜の創製、大気圧プラズマの応用、有機ガスセンサー開発のための第一原理計算や新規な材料創製のための原子シミュレーションの紹介があり、これらは当センター教員を含めた意見交換がなされました。

4. シンポジウム・研究会等のお知らせ



第36回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD®）ワークショップ

2020年2月17日(月)から2月21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。

5. 新論文のご紹介

Triazolecarbaldehyde Reagents for One - step N - Terminal Protein Modification

Akira Onoda, Nozomu Inoue, Eigo Sumiyoshi and **Takashi Hayashi**

ChemBioChem, in press, DOI: 10.1002/cbic.201900692

✧✧ 大阪大学研究ポータルサイト「ResOU」で紹介されました。

全2工程であらゆるタンパク質のN末端へ選択的かつ簡単に分子をつなぐことができる新技術を開発しました。具体的には、薬剤などの目的の分子を1工程で修飾剤である1H-1,2,3-トリアゾール-4-カルボアルデヒド誘導体に変換し、次の1工程でタンパク質のN末端へと化学修飾することが可能となり、バイオ医薬品、検査試薬、タンパク質材料などへの応用が期待されます。

Synthesis of α -Alkenyl α,β -Unsaturated Ketones via Dehydrogermylation of Oxagermacycles with Regeneration of the Germanium(II) Species

Yohei Minami, **Akihito Konishi**, and Makoto Yasuda

Org. Lett. 2019, 21, 24, 9818-9823

✧✧ 雑誌表紙でハイライト紹介されました。

環状ゲルマニウムエノラートから誘導されるゲルマサイクルを用い、従来合成が困難だったブタジエン誘導体の合成法を確立しました。ゲルマニウムの酸化数変化が重要で、単純な基質から様々な置換基や形状のブタジエン誘導体を短工程で与えるため、合成的価値が高い方法です。



Synthesis of Cage-shaped Aluminum Aryloxides: Efficient Lewis Acid Catalyst for Stereoselective Glycosylation Driven by Flexible Shift of Four- to Five-Coordination

Daiki Tanaka, Yuichiro Kadonaga, Yoshiyuki Manabe, Yoshiyuki Manabe, Koichi Fukase, Shota Sasaya, Hikaru Maruyama, Sota Nishimura, Mayu Yanagihara, **Akihito Konishi**, and Makoto Yasuda

J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 17466-17471.

✧✧ 雑誌表紙でハイライト紹介されました。

3座のトリフェノール配位子を用いカゴ型のアルミニウム錯体を合成しました。本錯体はルイス酸触媒として、2糖類の合成に高い活性を示しました。さらに、温和な反応条件で高い立体選択性を与え、従来制御が困難だった2糖類の合成法として画期的な成果となりました。





Atomic-scale thermal manipulation with adsorbed atoms on a solid surface at a liquid-solid interface

K. Fujiwara and M. Shibahara

Scientific Reports, 9, 13202 (2019)

本論文では分子動力学による数値解析により、固体結晶表面に吸着する固体原子が固体-液体界面の熱輸送状態に及ぼす影響を明らかにすることを研究目的としました。結果として、吸着原子近傍の1原子スケールの局所における顕著な熱流束の存在を明らかにし、吸着原子が固液界面における巨視的な熱輸送状態や界面熱抵抗に及ぼす影響の可能性を示しました。



Thermal conductivity of nanofluids: A comparison of EMD and NEMD calculations

K. Fujiwara, M. Daimo, Y. Ueki, T. Ohara, and M. Shibahara

International Journal of Heat and Mass Transfer, 144, 118695 (2019)

本論文では、ナノ流体（ナノ粒子を懸濁させた液体）の熱輸送機構を分子動力学解析により明らかにすることを目的としました。2つの計算手法に基づいてナノ流体の有効熱伝導率を算出し、ナノ粒子の濡れ性がナノ流体の有効熱伝導率に及ぼす影響を原子・分子間エネルギー輸送機構の観点から詳細に明らかにしました。



Coadsorption of hydrazine (N_2H_4) and OH on NiZn surface: A DFT-based T study

Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Ahmad Zainul Ihsan, Raihan Krishna, Fadjar Fathurrahman, Hermawan Kresno Dipojono, **Wilson Agerico Diño**

Surface Science Volume 691, 121505-1-11 (2020)

Direct Hydrazine (N_2H_4) Fuel Cells possess several advantages compared to hydrogen fuel-cell counterparts, esp., the use of Pt-free (cheaper) catalysts. Development and design of more efficient catalysts require an atomic-level understanding N_2H_2 oxidation ($\text{N}_2\text{H}_4 + 4\text{OH}^- \rightarrow \text{N}_2 + 4\text{H}_2\text{O} + 4\text{e}^-$). We found that the presence of Zn induces trends in N_2H_4 adsorption strength on sites that can be correlated with ligand-effect. On a surface with adsorbed anti- or cis- N_2H_4 , we observe preferential OH adsorption of the bridge-sites, allowing for direct chemical interaction and subsequent N_2H_4 dehydrogenation. Stronger surface energetic corrugation found in OH coadsorption with cis- N_2H_4 that suggests some involvement of electrostatic interaction as well.



Quantitative Multilayer Cu(410) Structure and Relaxation Determined by QLEED

Rezwan Ahmed, Takamasa Makino, Jessiel Siaron Gueriba, Seigi Mizuno, **Wilson Agerico Diño**, Michio Okada

Scientific Reports Volume 9, 16882-1-8 (2019)

Industrially relevant catalytically active surfaces exhibit defects. Defects serve as active sites; expose incoming adsorbates to both high and low coordinated surface atoms; determine morphology, reactivity, energetics, and surface relaxation. These, in turn, affect crystal growth, oxidation, catalysis, and corrosion. Systematic experimental analyses of such surface defects pose challenges, esp., when they do not exhibit order. High Miller index surfaces can provide access to these features and information, albeit indirectly. Here, we show that with quantitative low-energy electron diffraction intensity analyses and density functional theory calculations, we can visualize the local atomic configuration, the corresponding electron distribution, and local reactivity. These results should aid us to further gain an atomic-scale understanding of the nature of defects in materials.



Vacancy formation enthalpy in CoCrFeMnNi high-entropy alloy

Kazuki Sugita, Naoki Matsuoka, Masataka Mizuno, Hideki Araki

Scripta Materialia, 176 (2020), 32.

ハイエントロピー合金は5種類以上の元素を等モルに近い割合で含む固溶体合金です。一般的な合金と比較して優れた機械的性質を示すことが知られています。Sluggish Diffusion（遅い拡散）効果は最も注目されており、その是非を含めて近年盛んに研究されています。固溶体合金中の原子拡散は原子空孔を介して行われると考えられるため、ハイエントロピー合金中の原子拡散の議論をするためには高温下での原子空孔の形成挙動について知ることが重要です。我々は典型的なハイエントロピー合金であるCoCrFeMnNi合金に対して陽電子寿命法を適用し、世界に先駆けて高温熱平衡下での空孔形成挙動を調査しました。高温熱平衡下で形成される原子空孔での陽電子消滅のしきい温度は1181 Kであり、CoCrFeMnNi合金中の空孔形成エネルギーは1.7 eVと評価されました。これは面心立方構造を持つ構成元素の純金属や一般的な合金と同程度の値でした。この結果はCoCrFeMnNi合金の高温での熱平衡空孔濃度が一般の合金と同程度であり、原子拡散を抑制する効果を持っていないことを示唆しています。



High efficient perovskite solar cell utilizing solution-processable tetrabenzoporphyrin hole transport material with p-type dopants

Q.-D. Dao, A. Fujii, R. Tsuji and M. Ozaki

Appl. Phys. Express, 12, 112009

有機-無機ハライドペロブスカイトは、近年、太陽電池の新規光吸収材料として注目されており、電子輸送材料、ホール輸送材料と組み合わせることにより、高いエネルギー変換効率を持った太陽電池を印刷プロセスにより実現できます。高効率でかつ安定な太陽電池を実現するために、特にホール輸送材料の開発が極めて重要です。本論文では、フタロシアニンとポルフィリンのヘテロ環状構造に柔軟な側鎖を導入したホール輸送有機半導体を開発し、添加するp型ドーパントの最適化により高い変換効率が実現可能であることを報告しています。



From Point to Filament Defects in Hybrid Nematic Film

C. Chiccoli, P. Pasini, C. Zannoni, G. Skačej, H. Yoshida, T. Hiroshima, K. Sunami, T. Ouchi and M. Ozaki

Scientific Reports, 9 (2019) 1794

結晶内の欠陥は、好ましく無いものとして極力排除する努力がなされます。液晶においても分子の方位に対するトポロジカル欠陥が存在し、ディスプレイなどの応用では、欠陥を取り除いた一様分子配向が求められます。一方、近年、このトポロジカル欠陥の生成や配置を積極的に制御して、新しい応用を目指す研究が盛んになってきました。本論文では、液晶を挟む基板上の配向秩序度を光配向技術により制御し、トポロジカル欠陥の安定性や制御性などを明らかにしています。ナノ微粒子や超分子などを液晶内に導入すると、それらは欠陥位置に局在化します。この性質を活用することにより、液晶トポロジカル欠陥の制御により、ナノ微粒子や超分子などの三次元配列制御が可能となります。



Design and Emulation of All-Digital Phase-Locked Loop on FPGA

Saichandrateja Radhapuram, Takuya Yoshihara, **Toshimasa Matsuoka**

Electronics, Vol. 8, No. 11, p. 1307, Nov. 2019.

IoT機器やウェアラブル機器に搭載される集積回路には、低電源電圧動作が望まれます。このため、周波数シンセサイザにおいて用いられるPhase-Locked Loopにおいては、アナログ電圧制御による発振周波数制御からデジタル制御によるものへの移行が進められています。本研究では、この比較的規模が大きいアナログ・デジタル混載集積回路の設計における効率的な検証手法の1つとして、Field Programmable Gate Array (FPGA)を用いることを提案しています。この検証手法に適した回路構成をFPGAに実装し、リアルタイムで動作確認できることも実証しています。



Primitive Rotation Mechanism of Periodic Stellated Octahedron Units with Sharing Edges

H. Tanaka, K. Suga, **Y. Shibutani**

International Journal of Solids and Structures, Vol.185-186, pp.485-499

本論文では、負のポアソン比などの特殊な非線形力学特性を示す直交異方性多面体の構造クラスを提案しました。これらは稜共有型四面体が連結した周期構造を成し、各四面体の連動した回転によって新しい変形機構が発現されます。一様引張負荷において本構造は2自由度の3次元変形モードを持ち、初期形状と内部剛性の2つのパラメータを用いた数理モデルによってポアソン比の解析解を導出しました。本結果より、面外のポアソン比は負の定数となる一方、面内のポアソン比は-1を初期値として引張変形に伴い単調増加します。また、内部剛性に依存して変化する応力-ひずみ曲線の定式化も行い、全ての平衡経路が必ず同一の点を通過する特殊な非線形挙動を明らかにしました。



Size-dependent Yield Function for Single Crystals with a Consideration of Defect Effects

B. Pan, H. Tanaka, C. Ling, **Y. Shibutani**, S. Li

Acta Mechanica Vol.230, pp.4259-4271

本論文では、転位の堆積や転位／転位源の枯渇などの格子欠陥の影響を考慮した降伏関数の物理モデルを構築し、単結晶マイクロピラーを対象としたサイズ効果について評価しました。具体的には、単軸応力状態に加えて複合応力状態の降伏挙動も表現できるsingle arm sourceモデルの拡張に成功し、提案する降伏関数が実験結果とよく一致することを証明しました。本モデルによって、積層欠陥エネルギー、結晶方位、およびすべり系が降伏曲面の詳細な形状を決定する重要な因子であることを定量的に示しました。さらに、単結晶マイクロピラーに対して統計的な転位長さを取り入れることで、サイズに依存した降伏曲面の定式化を行い、塑性変形に基づく新しい降伏関数とサイズ効果の関係を議論しました。



熱損傷シミュレーションに基づく皮膚良性色素疾患治療用ナノ秒パルスレーザー装置の計算機臨床試験

西村隆宏, 下条裕, 間久直, **栗津邦男**

日本レーザー医学会誌, 2020 年 40 巻 4 号 p. 301-308

本論文では、迅速かつ低コストに新規レーザー治療装置を評価する手法として、レーザー治療における計算機臨床試験を提案しています。レーザー光照射により生じる生体組織内の光熱伝搬とそれに伴う熱損傷過程の数理モデルを用いて、シミュレーションによりレーザー治療における安全性を評価します。皮膚良性色素疾患治療用ナノ秒パルスレーザー装置の承認申請機器を対象とし、パルス幅の異なる既承認機器と比較して熱損傷の観点から安全性が同等であることを、計算機臨床試験により評価可能であることを示しました。



Singlet oxygen model evaluation of interstitial photodynamic therapy with 5-aminolevulinic acid for malignant brain tumor

Atsuki Izumoto, Takahiro Nishimura, Hisanao Hazama, Naokado Ikeda, Yoshinaga Kajimoto, **Kunio Awazu**

Journal of Biomedical Optics, 25(6) 063803-1-063803-13

5-アミノレブリン酸 (ALA) を用いた組織内光照射による光線力学療法 (iPDT) は、悪性脳腫瘍に対する有効性が示されています。ALA-iPDTの光物理プロセスの計算シミュレーションは、iPDTの治療条件パラメータと治療結果の定量理解のツールとして期待されています。本論文では、細胞死を誘導する一重項酸素モデルに基づき悪性脳腫瘍のALA-iPDTの臨床シミュレーション手法を提案しています。本手法では、光増感剤の光退色係数と一重項酸素の量子収率を使用して、組織内の一重項酸素生成分布を計算します。臨床MRIデータを使用したシミュレーションの結果から、ALA-iPDT治療効果は光照射位置、光フルエンスのレベルを腫瘍ごとに決定する必要があることを示しました。また、ALA-iPDT治療の結果は光退色と閾値の組み合わせに大きく依存することが示されました。



Construction of a Hexameric Hemoprotein Sheet and Direct Observation of Dynamic Process of its Formation

Koji Oohora, Shota Hirayama, Takayuki Uchihashi and **Takashi Hayashi**

Chem. Lett., in press, DOI: 10.1246/cl.190855

本研究では、ヘムタンパク質六量体を構成単位と、短いペプチドと環状分子 (Cucurbit[8]uril) の間に働く可逆な弱い相互作用を利用し、二次元の巨大シート状集合体を構築しました。高速原子間力顕微鏡を用いて、直接観察し、二次元状にタンパク質が並んでいることを明らかにしました。またその形成過程についても同観察法を用いて評価し、これまで報告されている二次元状タンパク質集合体はその形成に数時間から数日かかることに対し、本系では2分ほどで迅速に形成していることを発見しました。今後、色素集合体として人工光捕集系等への展開が期待されます。



Bidentate Directing Groups: An Efficient Tool in C-H Bond Functionalization Chemistry for the Expedient Construction of C-C Bonds

S. Rej, **Y. Ano**, and N. Chatani

Chem. Rev., in press.

金属中心に対してキレート配位可能な配位性官能基を利用した、炭素-水素結合の位置選択的な変換反応の開発が過去10年間で急速に進展しました。本総説では、それらの触媒反応を網羅的にまとめて解説しています。



Nickel-Catalyzed Reductive Defunctionalization of Esters in the absence of an External Reductant: Activation C-O Bonds

Y. Iyori, K. Takahashi, K. Yamazaki, **Y. Ano**, and N. Chatani

Chem. Commun., 55 (90) , 13610-13613 (2019)

ニッケル触媒を用いた芳香族エステルの還元脱エステル化反応が、外部還元剤を用いることなく進行することを見出しました。本反応ではエステル基のオルト位に配位性官能基を必要としますが、含窒素複素環やカルボン酸誘導体だけでなく芳香族炭化水素も配位性官能基として作用することが明らかになりました。