

CAMT Newsletter

アトミックデザイン研究センター

Center for Atomic and Molecular Technologies

2013年12月3日 No.2

目次

- 1. 最新研究成果 1
- 2. シンポジウム・研究会等のお知らせ 1
- 3. 新論文のご紹介 2

1. 最新研究成果

笠井 秀明教授らの研究グループは、世界に先駆けて確立した「量子ダイナミクス理論(Hyper-Naniwa)」を、固体酸化物形燃料電池(SOFC)に適用した知的設計手法「CMD(Computational Materials Design)」を構築し、低温作動型SOFCの知的設計に成功しました。真空10月号(Journal of the Vacuum Society of Japan Vol. 56, No. 10)にて発表されています。

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。

2. シンポジウム・研究会等のお知らせ



8th International Conference on Reactive Plasmas
31st Symposium on Plasma Processing
(ICRP-8/SPP-31)

2014年2月4日(火)から7日(金)まで、福岡コンベンションセンターで開催されます。

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



第24回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン
(CMDR) ワークショップ

2014年2月24日(月)から28日(金)まで、大阪大学大学院基礎工学研究科G棟(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。

大阪大学大学院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,
Graduate School of Engineering, Osaka University

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

〒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

3. 新論文のご紹介



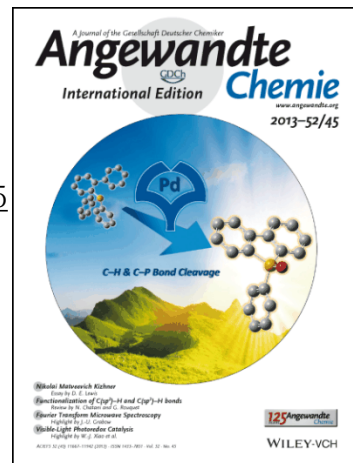
Palladium-Catalyzed Direct Synthesis of Phosphole Derivatives from Triarylphosphines through Cleavage of Carbon-Hydrogen and Carbon-Phosphorus Bonds

Baba, K.; **Tobisu, M.**; Chatani, N.

Angewandte Chemie International Edition, Volume 52, Issue 45 pages 11892-11895.

雑誌表紙でハイライト紹介されました。

有機エレクトロニクス材料としての応用が期待される環状リン化合物を、入手容易で安定な3級ホスフィンを原料に簡便に合成する手法を開発しました。パラジウム触媒を用いることで、通常不活性な炭素-リン、炭素-水素間の化学結合が切断され、反応が進行しました。



VisibleLight-Mediated Direct Arylation of Arenes and Heteroarenes Using Diaryliodonium Salts in the Presence and Absence of a Photocatalyst

M. Tobisu, T. Furukawa, and N. Chatani

Chemistry Letters, Vol. 42 (2013) No. 10 P 1203-1205

可視光の照射によって穏和な条件下でアリアルラジカルを発生する手法を開発しました。安定なジアリアルヨードニウム塩を用いることで、芳香族化合物を室温中性条件下、直接アリアル化することができます。



Cathodic photocurrent generation from zinc-substituted cytochrome b_{562} assemblies immobilized on an apocytochrome b_{562} -modified gold electrode

Akira Onoda, Yasuaki Kakikura, and **Takashi Hayashi**

Dalton Trans., 42, 16102-16107 (2013).

補欠分子ヘムを有するシトクロム b_{562} の中心金属を亜鉛に置換した光応答タンパク質を利用して、このユニットが超分子的に積層したバイオ電極界面を作製し、その光電変換特性を明らかにしました。




Surface modification of poly(methyl methacrylate) by hydrogen-plasma exposure and its sputtering characteristics by ultraviolet light irradiation

S. Yoshimura, K. Ikuse, **S. Sugimoto**, K. Murai, K. Honjo, M. Kiuchi, **S. Hamaguchi**

Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 52, No. 9, 090201-1-4, (2013).


本研究では、PMMAをフォトレジストのモデルポリマーとして、水素プラズマに曝露する前後でのポリマーの紫外線に対するエッチングギルドを測定する実験を行いました。その結果、水素プラズマ曝露によりポリマー膜の表面40nmがアモルファスカーボンに変化していること、およびエッチングギルドが低下していることが明らかになりました。

 Independent control of electron energy and density using a rotating magnetic field in inductively coupled plasmas

T. Kondo, M. Ohta, **T. Ito**, S. Okada

J. Appl. Phys., 114, 113303 (2013).

本論文では、設計に基づくプラズマ物性の高精度制御を目的として、プラズマ外部から印加する回転磁場を用いた手法の提案を行っております。回転磁場の回転周波数および磁場強度を用いることで、プラズマ中の電子エネルギーと電子密度を独立に制御可能であることを明らかにしました。

 Hydrogen absorption and hydrogen-induced reverse segregation in palladium-silver surface

Allan Abraham B. Padama, **Hideaki Kasai**, Yogi Wibisono Budhi

International Journal of Hydrogen Energy, Vol.38, No.34, pp.14715-14724 (2013).

In this study, first principles calculations were performed to investigate the absorption of H atom in Pd(110) and Pd₃Ag(110) surfaces. By doing atomic-scale analysis, the experimentally observed good permeation of H in PdAg membrane was theoretically verified. The influence of Ag atom toward H absorption and the tendency of H to induce segregation of subsurface Pd atoms to the topmost layer of the surface are equally discussed.


 Magnetic domain patterns on strong perpendicular magnetization of Co/Ni multilayers as spintronics materials I: Dynamic observations

 *IOP SELECT*に選ばれました。

Masahiko Suzuki, Kazue Kudo, Kazuki Kojima, Tsuneo Yasue, Noriko Akutsu, **Wilson Agerico Diño**, **Hideaki Kasai**, Ernst Bauer, Takanori Koshikawa

Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 25, No.40, pp. 406001 (2013).


The evolution of the magnetic domain structure of multilayers consisting of pairs of 2 or 3 monolayers (ML) of Ni and 1 ML of Co on W(110) was investigated during growth with spin-polarized low-energy electron microscopy. In the early stages of the growth the magnetization alternated between in-plane upon Co deposition and out-of-plane upon Ni deposition. Above 3–4 Co/Ni pairs it stayed out-of-plane. The results indicate clearly that the Co–Ni interfaces play the important role of enhancing the perpendicular magnetic anisotropy.

 Magnetic domain patterns on strong perpendicular magnetization of Co/Ni multilayers as spintronics materials II: Numerical simulations

Kazue Kudo, Masahiko Suzuki, Kazuki Kojima, Tsuneo Yasue, Noriko Akutsu, **Wilson Agerico Diño**, **Hideaki Kasai**, Ernst Bauer, Takanori Koshikawa

Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 25, No.39, pp. 395005 (2013).

Magnetic domains in ultrathin films form domain patterns, which strongly depend on the magnetic anisotropy. The magnetic anisotropy in Co/Ni multilayers changes with the number of layers. We provide a model to simulate the experimentally observed domain patterns. The model assumes a layer-dependent magnetic anisotropy. With the anisotropy parameter estimated from experimental data, we reproduce the magnetic domain patterns.

 Effects of Stacking Fault Energy on Fundamental Deformation Modes in Single Crystalline Magnesium by Molecular Dynamics Simulations

Daisuke Matsunaka, Yasuaki Ohnishi, **Yoji Shibutani**

Materials Transactions, Vol. 54, No. 11, pp. 2093-2097 (2013)


本論文ではマグネシウムの基本的なすべり変形と双晶変形に対して分子動力学シミュレーションによる解析を行っており、積層欠陥エネルギーの異なる原子間ポテンシャルを用いた結果から、基本変形における積層欠陥エネルギーの影響について議論しています。

 Explicit Distinctions between 2D MPF Grain Growth Simulations and EBSD Analyses to Determine Driving Mechanism of Grain Growth

Tomoyuki Hirouchi, **Yoji Shibutani**

Materials Transactions, Vol. 54, No. 10, (2013), pp.1884-1893.

2次元のマルチフェーズフィールド法の数値解析による結晶成長と、EBSDによる実材料の結晶方位解析の比較から、結晶成長の駆動力メカニズムについて検討し、結晶成長のモデリングに重要な観点を明らかにしました。

 不純物・欠陥制御を用いた非線形光学結晶CsLiB₆O₁₀の紫外レーザー損傷耐性向上

高千穂 慧, 吉村 政志, 増田 一稀, 高橋 義典, **今出 完**, 佐々木 孝友, 森 勇介

レーザー研究, Vol.41, No.10, pp.830-834 (2013.10).

CsLiB₆O₁₀(CLBO)を用いて高繰返しパルスの266nmレーザー光を発生させた場合、ビーム形状が経時変化し、出力が低下する問題があります。本研究では、紫外光経時劣化現象を詳しく調べた結果、紫外光励起の局所的な屈折率変化がCLBOの経時劣化を引き起こしていることを明らかにしました。加えて、結晶中の光散乱源を低減することで、紫外光劣化耐性が向上することを発見しました。