

CAMT Newsletter

2020年5月29日 No.20

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. 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. 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2019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 (13MB) をご覧ください。

2. 受賞のお知らせ

 荒木 秀樹 教授研究グループの畠原 悠輔さん(M1)が、令和元年度軽金属学会関西支部 若手研究者・院生による研究発表会において、「ベストポスター賞」を受賞しました。

「陽電子消滅法によるAl-Mg-Si(-Sn,Ag)合金の室温時効過程における空孔-溶質原子のクラスタリング挙動の解析」

畠原悠輔, 尾崎政徳, 杉田一樹, 水野正隆, 荒木秀樹, 松本克史

この賞は、関西支部における若手研究者および若手技術者の育成を主眼にした活動の一環として開催される成果報告会で優秀な発表者に授与されるものです。

 藤原 邦夫 助教が船井情報科学振興財団「第19回2019年度船井研究奨励賞」を受賞しました。

「原子スケールの局所物理量に基づく界面輸送現象の解明に関する研究」

この賞は、情報科学、情報技術分野を中心に広く理工系分野において、顕著な研究業績のあった若手研究者に褒賞を授与し、わが国の科学技術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。



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



小西 彬仁 助教が日本化学会第100春季年会「第33回若い世代の特別講演賞」を受賞しました。
「ルイス酸金属を用いた非交互炭化水素骨格の構築と特異な電子状態の解明」

この賞は、日本化学会春季年会において、若い世代の研究者を励まし、次代の化学および化学技術をさらに活性化するために、意欲的に研究を行っている若手研究者による"若い世代の特別講演会"での講演者に授与されるものです。

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ



PiAI Seminar Series

機械学習を含むデータ駆動科学とAIのプラズマ科学への応用に関するWEBセミナーです。

日時：2020年4月20日(月) から 6月29日(月) 全9回

主催：Satoshi Hamaguchi (Osaka University), Sadruddin Benkadda (Aix-Marseille University)

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。

4月20日(月)

"Prediction of Physical Sputtering Yields for New Materials and an Understanding of Underlying Physics by Machine Learning"

"Machine learning for PWI and helium-induced nanostructures"

4月27日(月)

"How we can increase the data for the Materials Informatics -challenge for data sharing scheme-"

5月11日(月)

"Data Driven PDE Model Discovery : Applications to Surface Erosion Dynamics and Catalytic Reaction Kinetics"

5月18日(月)

"A Bayesian Approach to Artificial Neural Networks"

5月25日(月)

"Development of Surrogate Models for Divertor Power Load Prediction Based on Machine Learning Techniques"

6月8日(月)

"Data analysis demands in the investigation of instabilities and waves in high power impulse magnetron sputtering"

6月15日(月)

"Particle laden turbulence: Analysis of clustering using multiscale techniques including tools from machine learning"

6月22日(月)

TBA

6月29日(月)

TBA (the last one before summer)

4. 新論文のご紹介

 CAMT Newsletter No.19でご紹介した論文が、雑誌表紙でハイライト紹介されました。

Triazolecarbaldehyde Reagents for One - step N - Terminal Protein Modification

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

ChemBioChem, 21, 1274–1278 (2020), 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。



 Development of a sample holder for synchrotron radiation-based computed tomography and diffraction for analysis of extraterrestrial materials

M. Uesugi, K. Hirahara, K. Uesugi, A. Takeuchi, Y. Karouji, N. Shirai, M. Ito, N. Tomioka, T. Ohigashi, A. Yamaguchi, N. Imae, T. Yada, M. Abe

Review of Scientific Instruments, 91, 035107 (2020). doi: 10.1063/1.5122672

地球外試料の多くは脆くて不定形です。本研究では、そのような試料を安定に保持するために、カーボンナノチューブ (CNT) およびポリイミドからなる、放射光解析用試料ホルダーを開発しました。この試料ホルダーは複数の装置間を移送でき、試料上の同一箇所を複合的に解析できるだけでなく、輸送や試料脱着に伴う試料の欠損のリスクを大きく低減できます。また、地球上物質や雰囲気の影響を受けない試料解析が可能なこと、CNTが放射光解析においてほぼ”透明”とみなせること、解析時のドリフトがないことなど、試料支持体として理想的であることを実証しました。

 Dynamical Quantum Filtering via Enhanced Scattering of para-H₂ on the Orientationally Anisotropic Potential of SrTiO₃(001)

Koji Shimizu, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Kotaro Takeyasu, Katsuyuki Fukitani, Ayako Yajima

Scientific Reports Volume 10, 5939-1-11 (2020)

Hydrogen plays an important role in a wide variety of applications, e.g., catalysis and metallurgy. H₂ occurs in two spin isomeric forms. Para-H₂ (p-H₂) have their two proton nuclear spins aligned antiparallel. Ortho-H₂ (o-H₂) have their two proton nuclear spins aligned parallel. Normal-H₂ (n-H₂) have a p-H₂ to o-H₂ ratio of 1/3, at room temperature. Its simplicity and ubiquity notwithstanding, hydrogen continues to defy understanding, much less control. Here, we show how surfaces could function as a scattering/filtering media to control the H₂ dynamics and realize rotationally state-resolved H₂. Indeed, we found increased p-H₂ to o-H₂ ratio of 4.96 and 16.1 for n-H₂ scattered along the SrTiO₃(001)[100] and SrTiO₃(001)[110] of the TiO₂- and SrO-terminated SrTiO₃(001), respectively. This could find significant applications not only in H₂ storage and transport, but also in realizing materials with pre-determined characteristic properties.



複雑系から見たハインリッヒの法則とリスクアセスメント

渋谷陽二, 山内賀喜, 小澤 守

社会安全研究, 10 43-52

労働災害を3つのカテゴリーに分類し, 重い災害, 軽い災害, 傷害のない災害の件数がおおよそ1:29:300の比率になる統計学的な法則をハインリッヒの法則と言います. この確率論的な割合について, 局所ルールのみで時間発展させるセルラーオートマトン法を用いたメタファーモデル(隠喩モデル)により解析し, その比率になる背景についてパターンダイナミクスの観点から検討しました.



Micropolarはりの均質化骨組構造体における巨視的非局所弾性特性

渋谷 陽二, 浜田 一駿, 増田 滉也, 田中 展

材料, 69巻・2号・157-164

物体点に回転の自由度を付加したmicropolar理論を2尺度均質化有限要素法に取り込み, 骨組構造の持つ非局所性について解析を行いました. ミクロな構造に非局所性を持たなくても, マクロな骨組構造体としてその特性が発現することを見出しました. これは, はり近似することによりはりのたわみ角をマクロでは物体点の回転として認識することにより生じます. 非局所性の特性は, マクロな構造体の剛性の変化や変形の多様性を引き出す可能性があることがわかりました.



Effect of metal ion substitution on the catalytic activity of a pentanuclear metal complex

Takuya Akai, Mio Kondo, Sze Koon Lee, Hitoshi Izu, Takafumi Enomoto, Masaya Okamura, Yutaka Saga, and Shigeyuki Masaoka

Dalton Trans., 2020, 49, 1384-1387.

有機架橋配位子とコバルトイオンとの自己集合により構成される新規コバルト五核錯体の開発に成功しました. また, このコバルト五核錯体が, 電気化学的/光化学的な二酸化炭素還元反応に対する触媒として機能することを見出しました. 再生可能エネルギーを利用した貯蔵可能燃料の創製や炭素資源の有効利活用につながる可能性があります.



Catalytic Cycloisomerization of Conjugated Bisbutatrienes into Pentalene Skeletons: Synthesis and Properties of Bisbutatrienes with an Acenaphthene Backbone

Akihito Konishi, Shoya Satake, and Makoto Yasuda

Chem. Lett. 2020, 49, 589-592. (Open Access)

sp²-炭素が集積したクムレン類はその特異な結合に由来した性質に興味を持たれる化合物群です. 今回, 新たな共役形式を持つクムレンオリゴマーを合成し, その基礎物性と化学反応性について明らかにしました. 共役の伸張が著しいこと, またガリウム(III)塩の作用で, 短工程で特殊な縮環化合物を与えることを見出しました. これらの知見は, 複雑な共役系化合物の合成前駆体として, クムレンの新たな可能性を拓いたものであり, この分野において興味深い結果となりました.