

CAMT Newsletter

2014年8月7日 No.4


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 1
- 4. 新論文のご紹介 2
- 5. 耐震改修工事のための仮移転のお知らせ 5

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2013年度の研究成果報告として、6月にアニュアルレポートを発行しました。 [こちら](#)(9.3MB)をご覧ください。

2. 受賞のお知らせ

 神戸 宣明教授が、平成26年度大阪大学総長顕彰(※1) (研究部門)を受賞しました。

<http://www.osaka-u.ac.jp/ja/oumode/commendation/deed/h26achieve>


(※1)大阪大学に勤務する教員のうち、教育、研究、社会・国際貢献又は管理運営上の業績が特に顕著であると認められた者を顕彰し、大学の一層の発展を期することを目的として行われています。

 伊藤 剛仁准教授、北野 勝久准教授、吉村 智准教授が、平成26年度大阪大学総長奨励賞(※2) (研究部門)を受賞しました。

<http://www.osaka-u.ac.jp/ja/oumode/commendation/deed/h26encourage>

(※2)若手教員のうち、教育又は研究の業績があると認められるなど、同分野で将来活躍することが期待される者を顕彰し、奨励することを目的として行われています。

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ

 第25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

2014年9月1日(月)から5日(金)まで、公益財団法人 国際高等研究所 (京都府木津川市)で開催されます。

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



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>

4. 新論文のご紹介

 Finite-difference time-domain analysis of cholesteric blue phase II using the Landau-de Gennes tensor order parameter model

Y. Ogawa, J-i. Fukuda, H. Yoshida, and **M. Ozaki**.

Optics Letters, Vol. 38, Issue 17, pp. 3380-3383 (2013). doi: 10.1364/OL.38.003380

 *Advances in Engineering* のホームページで紹介されました。

三次元ナノ秩序構造を形成するコレステリックブルー相 (BP) 液晶は、高速応答性から次世代液晶ディスプレイの候補として注目されていますが、これまでその光学特性などは単純化された分子配向モデルを用いて解析されてきました。本論文では、BP液晶の配向状態を配向テンソルを用いて厳密に計算したLandau-de Gennesモデルを用いて表し、その光学特性を時間領域差分法により計算しています。その結果、これまで再現されていなかった実験事実の解析が可能となり、厳密配向モデルの必要性を示すことができました。

 Nickel-Catalyzed Reductive and Borylative Cleavage of Aromatic Carbon-Nitrogen Bonds in N-Aryl Amides and Carbamates

M. Tobisu, K. Nakamura, and N. Chatani

Journal of the American Chemical Society, 2014, 136, 5587-5590.


 有機合成化学分野の二次情報誌 SYNFORM 誌上で写真付きで紹介されました。

アニリン誘導体の炭素-窒素結合は極めて安定な化学結合であり、この結合を切断するには、化学両論量以上の試薬を使い、対応するアンモニウムやジアゾニウムといった反応性の高い中間体にあらかじめ変換しておく必要がありました。本研究では、アニリン誘導体の炭素-窒素結合を直接、しかも触媒的に切断し、水素やホウ素官能基を導入する反応の開発に成功しました。アニリンを基盤とする合成化学にC-N切断という新しい概念を提供するものです。

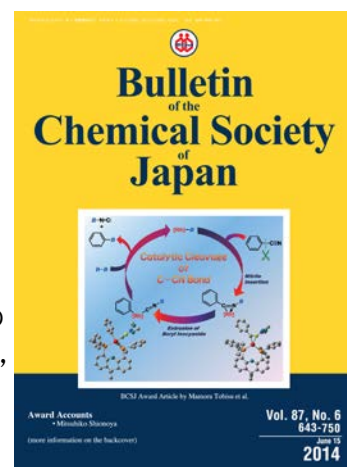
 Theoretical Studies of Rhodium-Catalyzed Borylation of Nitriles through Cleavage of Carbon-Cyano Bonds


H. Kinuta, H. Takahashi, **M. Tobisu**, S. Mori, and N. Chatani

Bulletin of the Chemical Society of Japan, 2014, 87, 655-669.

 *BCSJ* 賞を受賞するとともに、当該雑誌の表紙でハイライト紹介されました。

ロジウム触媒と有機ホウ素試薬を用いるニトリルの炭素-炭素結合の活性化反応のメカニズムをDFT計算により検討しました。その結果、系中で生成するボリルロジウム種によるホウ素とロジウムが協働的に作用する新しい2段階活性化機構の関与を明らかにしました。




 Effect on pH on elementary steps of dopachrome conversion from first-principles calculation

Ryo Kishida, Yohei Ushijima, Adhitya G. Saputro and **Hideaki Kasai**

Pigment Cell and Melanoma Research (2014)

動物の皮膚・眼球・毛髪等に広く分布し、紫外線や活性酸素から細胞を守る役割を果たしている生体色素ユーメラニンは、ドーパクロムと呼ばれる分子が変化して生じる2種類のインドール系分子によって構成されています。このドーパクロムの変換反応の速度はユーメラニンの生成量に直結する因子であり、pHの低下に伴って減少するということが知られていましたが、pHがなぜ反応速度に影響するのか分かっていませんでした。本論文では、ドーパクロム変換の反応機構を第一原理計算を用いて解析し、ドーパクロムの分子内プロトン移動の一つが律速段階になっていることを示しました。このようなプロトン移動は低pH条件下で遅くなるため、pH低下と反応速度減少の物理的起源はこのプロトン移動にあることが明らかになりました。

 Tilt orientationally disordered hexagonal columnar phase of phthalocyanine discotic liquid crystals

M. Yoneya, T. Makabe, A. Miyamoto, Y. Shimizu, Y. Miyake, H. Yoshida, A. Fujii and **M. Ozaki**

Physical Review E, 89, 062505, 2014年06月


本論文では、我々がこれまで開発してきた有機半導体である液晶性フタロシアニンの分子配列状態を分子動力学計算により明らかにしたものです。液晶性フタロシアニンは、カラム構造を形成していますが、その各カラム内で分子のチルト方向が無秩序であることを初めて指摘しています。揺らぎのある有機半導体で高い電子性移動度を示すメカニズムに迫れればと考えています。

 Low energy indium or gallium ion implantations to SiO₂ thin films for development of novel catalysts

S. Yoshimura, M. Kiuchi, Y. Nishimoto, M. Yasuda, A. Baba, **S. Hamaguchi**

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 12, pp. 197-202, (2014).


我々は、イオンビーム技術を用いた化学触媒の新規開発に取り組んでいます。これまでに、酸化ケイ素にインジウムを注入した基板が、ベンズヒドロールとアセチルアセトンの間の炭素-炭素結合形成反応の触媒として機能することを報告しています (S.Yoshimura et al., Appl. Surf. Sci. 257, 192 (2010))。本研究では、触媒能発現のために必要なインジウムの注入エネルギーについて調査を行いました。その結果、400eV以下の場合には反応は起こらず、触媒能発現のためには470eV程度のエネルギーが必要であることが明らかになりました。また、同じ反応について、インジウムと同族のガリウムを注入したサンプルでも測定を行って見ましたが、今回行った注入パラメータの範囲 (エネルギー: 100-470eV, イオンドーズ: 10¹⁶-10¹⁸ ions/cm²) では触媒能の発現は観測されませんでした。

 In-vitro study about selective removal of bovine demineralized dentin using nanosecond pulsed laser at wavelengths around $5.8\ \mu\text{m}$ for realizing less invasive treatment of dental caries

T. Kita, K. Ishii, K. Yoshikawa, K. Yasuo, K. Yamamoto, **K. Awazu**

Lasers in Medical Science, Epub ahead of print (10.1007/s10103-013-1517-9), 2014年04月

歯科のミニマルインターベンション（最小限の侵襲で虫歯の治療を行う概念および方法）を実現するためには、虫歯だけを切削できる技術が必要不可欠ですが、現在のところそのニーズを十分に満たす治療デバイスはありません。本論文では、快適な切削を提供できるレーザーを用いて虫歯を選択的に切削することを目的として、虫歯の光吸収特性に着目した新しい波長域 $5.8\ \mu\text{m}$ 帯の可能性を検討しました。非線形光学技術の一つである差周波発生を利用した中赤外波長可変ナノ秒パルスレーザーを用い、波長 $5.70\sim 6.00\ \mu\text{m}$ での虫歯切削の選択性をウシ歯象牙質を用いた基礎実験で検討した結果、波長 $5.80\ \mu\text{m}$ で健全歯質に低侵襲に虫歯を切削可能なことが分かりました。

 波長 $5.85\ \mu\text{m}$ ナノ秒パルスレーザーを用いたウシ歯象牙質の選択的な除去；硬さと切削特性の関係

北哲也，石井克典，吉川一志，保尾謙三，山本一世，**栗津邦男**

日本レーザー歯学会誌，25(1) 2-7, 2014年04月

波長 $5.85\ \mu\text{m}$ のナノ秒パルスレーザー照射によりヒト虫歯を選択的に切削可能なことが分かってきています。本論文では、虫歯の進行度と関連する要素の1つである「硬さ」と切削深さの関係を検討しました。虫歯を含むヒト象牙質においてダブルブラインドテスト的に硬さと切削深さの関係を調査した結果、波長 $5.85\ \mu\text{m}$ における最適エネルギー条件で、硬い箇所は切削されず柔らかい箇所は切削されること、すなわち硬さにより切削を制御可能なことが分かりました。また、この「切削される／されない」の関係と臨床医の「切削したい／しない」の関わりに相関があることが分かり、波長 $5.85\ \mu\text{m}$ のナノ秒パルスレーザーは治療すべき虫歯を選択的に切削できるということが示されました。

 Energy-Saving Sintering of Electrically Conductive Powders by Modified Pulsed Electric Current Heating Using an Electrically Nonconductive Die

Mikio Ito, Kenta Kawahara and Keita Araki

Metallurgical and Materials Transactions A, Vol.45, (2014), 1680-1683.

パルス通電焼結法において、導電性黒鉛ダイを用いる従来法に対し、新たに絶縁性の石英ダイを用いた直接通電焼結プロセスを提案し、Cu粉末および熱電変換材料である $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 粉末の焼結を試みました。本手法により、従来法に比して50-60%の低消費電力にて焼結処理が可能となること、また電気抵抗率の高い $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 粉末では著しく緻密化が促進されることを明らかにし、本手法が導電性粉末の焼結において優れた新規プロセスとなりうる可能性を見出しました。



Photoinduced Hydrogen Evolution Catalyzed by a Synthetic Diiron Dithiolate Complex Embedded within a Protein Matrix calculation

Akira Onoda* Yoshihiko Kihara, Kazuki Fukumoto, Yohei Sano and **Takashi Hayashi**

ACS Catal., 4, 2645-2648 (2014). DOI: 10.1021/cs500392e.

ヒドロゲナーゼのモデルとして、鉄硫黄クラスターを β バレル構造のアポニトロバインディンタンパク質に埋め込むことにより、光駆動型電子移動を介して、水中のプロトンから水素ガスを触媒的に発生させることを示しました。



Photochemical Property of a Myoglobin-CdTe Quantum Dot Conjugate Formed by Supramolecular Host-Guest Interactions

Tomoki Himiyama, Akira Onoda and **Takashi Hayashi**

Chem Lett., 43, 1152-1154 (2014). DOI: 10.1246/cl.140321.

CdTeナノ粒子と酸素貯蔵タンパク質であるミオグロビンを、ホスト-ゲスト相互作用を介して複合化させました。さらに光照射により、CdTeからミオグロビンへのスムーズな電子移動反応を観測しました。

5. 耐震改修工事のための仮移転のお知らせ

2014年10月～2015年3月の予定で、アトミックデザイン研究センター A12棟の耐震改修工事が行われます。A12棟の研究室は、キャンパス内で仮移転します。

事務局の仮移転先は、A1-219室です。電話番号、メールアドレスの変更はありませんが、移転作業中等つながらなくなることがあります。

詳細は、事務局、または各研究室にお問い合わせください。

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