



CAMT Newsletter

2014年12月25日 No.5

目次

- 1. 受賞のお知らせ 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. 受賞のお知らせ



今出完助教らが、日本結晶成長学会第21回技術賞を受賞しました。

「Naフラックス法による大口径・高品質GaN結晶育成技術」

今出完，吉村政志，丸山美帆子，川村史朗，森勇介

本技術は、NHK教育テレビジョン「サイエンスZERO」の「おめでとう！ノーベル物理学賞 青色LED徹底解説」にて紹介されました。

2. シンポジウム・研究会等のお知らせ



第26回コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD®) ワークショップ

2015年2月23日(月)から27日(金)まで、大阪大学産業科学研究所および工学研究科（吹田キャンパス）で開催されます。

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



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>

3. 新論文のご紹介



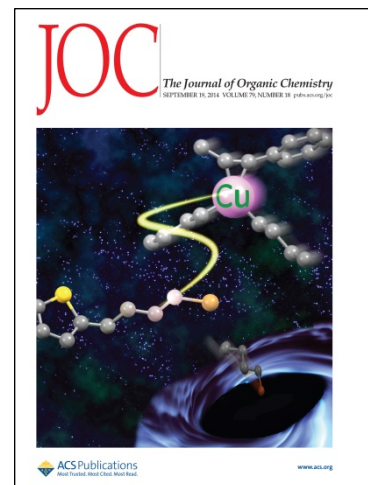
Copper-Catalyzed Alkyl-Alkyl Cross-Coupling Reactions Using Hydrocarbon Additives: Efficiency of Catalyst and Roles of Additives

Takanori Iwasaki, Reiko Imanishi, Ryohei Shimizu, Hitoshi Kuniyasu, Jun Terao and **Nobuaki Kambe**

J. Org. Chem., 79 (18), 8522-8532 (2014)

当該雑誌のMost Read Articles in Month Top 20に入るとともに、雑誌表紙でハイライト紹介され、Featured Articleに選ばれました。

遷移金属触媒によるクロスカップリング反応は、有機分子の基本骨格を構築する上で最も重要な反応です。これまでにベンゼン環等の不飽和化合物同士のクロスカップリング反応では極めて高い触媒回転数が達成されていました。一方、飽和炭化水素骨格を構築する反応は、飽和炭化水素鎖に起因する副反応や触媒の失活が問題となるため、触媒回転数は数百回に限られていました。本研究では、我々が独自に開発した銅触媒系について触媒の失活過程も含めて詳細な検討を行い、反応機構を明らかにしました。また、不飽和炭化水素配位子を添加することにより、触媒の失活や副反応を抑制し、百万回を上回る高い触媒回転数を達成しました。

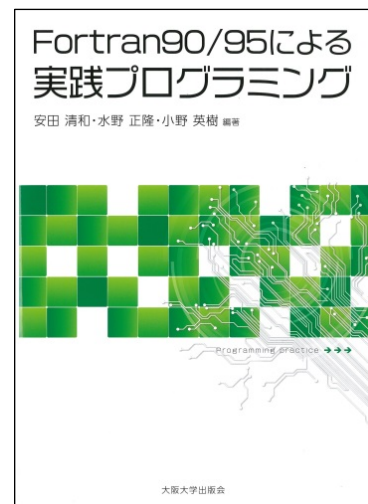


Fortran90/95による実践プログラミング

安田清和, 水野正隆, 小野英樹編著

大阪大学出版会 (2014).

初学生はもちろん、初歩的なC(あるいはFortran)プログラミングを習得し終えた大学学部学生を対象とした、理工学分野の科学技術計算のための実践的なプログラミングを目指す、Fortran言語によるプログラミングおよび数値解析の基礎・応用についての演習テキストで、工学部3回生の情報工学演習の教科書になっています。





Chemical Bonding, Point Defects and Positron Lifetimes in FeSi₂ from First-Principles Calculations

Masataka Mizuno, and Hideki Araki

The DV-X α Molecular-Orbital Calculation Method 2015, pp 303-323, 2014年10月

The chemical bonding and formation energy of Fe and Si vacancies in α , β and γ -FeSi₂ have been investigated using first-principles calculations. The positron lifetimes of those FeSi₂ are also calculated. The bonding and antibonding bands in β -FeSi₂ are completely separated, which leads to a gap at the Fermi level in β -FeSi₂. In γ -FeSi₂, the separation is not perfect and the Fermi level lines in the bonding band. Whereas the formation energy of a Fe vacancy in β -FeSi₂ is higher than that of the other phases, it steeply decreases going from the Fe-rich to the Si-rich condition and shows the lowest value, about 0.4 eV, at the Si-rich limit. In α and γ -FeSi₂, the Fe vacancy has a shorter positron lifetime than the Si vacancy. However, in β -FeSi₂, positron lifetimes of the Fe and Si vacancies are close to each other. This result suggests that it may be difficult to identify vacancy sites in β -FeSi₂ by positron lifetime measurement.



マイクロ熱工学領域の紹介

芝原正彦

大阪大学工業会誌 テクノネット(2014, Jul., No.565.)

マイクロ熱工学領域では、これまで一般的な熱力学や熱工学が問題としなかった、物質の構造や物質の状態と直接関係する電子・分子スケールのエネルギー輸送機構から組み上げていくエネルギー輸送現象論を確立することを研究目標にしています。研究中のテーマとして、炭素微粒子の燃焼合成、固液界面熱抵抗への微細構造の影響、微細構造内への液浸入現象、量子スケールのエネルギー伝達について概略を紹介しています。




Growth of bulk GaN crystals by the Na-flux point seed technique

M. Imade, M. Maruyama, M. Yoshimura, and Y. Mori


Japanese Journal of Applied Physics, Vol.53, No.5S1, pp.05FA06-1-5, (2014.4).

本技術は、GaN単結晶作製手法の一つであるNaフラックス法において、独自に開発した微小種(ポイントシード)を用いるものであり、これにより、結晶品質が理論値とほぼ同程度の極めて高品質なGaN単結晶成長を世界で初めて実現することができました。加えて、本技術を応用した結晶成長法により、欠陥が少なくかつ大口径・低歪なGaNウェハの作製が可能となることを示しました。

 Computed multiple tomography for translated field reversed configuration Plasma
S. Yoshimura, S. Sugimoto, and S. Okada

IEEE Transactions on Plasma Science, Vol. 42, No. 10, pp. 2510, (2014).

計算機トモグラフィー (CT) による断層像診断は、トカマクなどの超高温プラズマの内部構造を調べる強力な手段となっています。一方、非常に高いベータ値を持つために、将来のヘリウム3核融合の炉心形式として有望視されている磁場反転配位 (FRC) プラズマについては、CTを利用した実験研究はほとんど行われていません。また、トカマクにはトロイダル対称性があるため、ひとつの断面について断層像診断を行えば充分であるのに対して、FRCプラズマにおいては、その形状 (長楕円トーラス) を考慮すると1つの断面の計測では不十分と思われます。本研究では、プラズマ放射光を二つの断面で同時に測定することによって、FRCプラズマの動的挙動の変化を断層像により観測するシステムを開発しました。その結果、FRCプラズマの形態は典型的な3つのケースに分類できることがわかりました。

 Equilibrium surface magnetization of α -Cr₂O₃ studied through interfacial chromium magnetization in Co/ α -Cr₂O₃ layered structures

Kentaro Toyoki, Yu Shiratsuchi, Tetsuya Nakamura, Chiharu Mitsumata, Shotaro Harimoto, Yuichiro Takechi, Takashi Nishimura, Hikaru Nomura, and **Ryoichi Nakatani**

Applied Physics Express, 7巻, 11号, pp114201(4pp), 2014年11月

電気磁気効果を示す α -Cr₂O₃薄膜の(0001)表面に現れる平衡表面磁化の存在を実験的に示しました。また、電磁気効果を用いて反強磁性スピン方向を反転させることが出来、この効果を利用して、反強磁性Crスピンと界面交換結合した強磁性スピン方向の電界反転が可能であることを示しました。

 Co(II)/Co(I) Reduction-induced Axial Histidine-flipping in Myoglobin Reconstituted with a Cobalt Tetradehydrocorrin as a Methionine Synthase Model

Takashi Hayashi, Yoshitsugu Morita, Eiichi Mizohata, Koji Oohora, Jun Ohbayashi, Tsuyoshi Inoue and Yoshio Hisaeda

Chem. Commun, 50, 12560-12563 (2014).

メチオニン合成酵素は生体内のメチル基転移酵素の中の一つであり、補因子としてコバラミン (ビタミンB₁₂類縁体) を含む巨大な構造を有しています。本研究では、まだ構造と反応機序の不明な点が多いメチオニン合成酵素について、複雑な分子構造のコバラミンを単純なコバルトコリン錯体に替えて、ミオグロビンのヘムポケットのなかで、メチオニン合成酵素の反応の初期過程の再現を行いました。その結果、これまでタンパク質内で予想されていましたが、検出できなかった超求核性を示すコバルト1価状態について、結晶構造解析に成功し、4配位の錯体構造を明らかにすることが出来ました。



1,3-Dicyclohexylimidazol-2-ylidene as a Superior Ligand for the Nickel-Catalyzed Cross-Couplings of Aryl and Benzyl Methyl Ethers with Organoboron Reagents

M. Tobisu, A. Yasutome, H. Kinuta, K. Nakamura, and N. Chatani

Org. Lett., 16 (21). 5572-5575 (2014).

アニソール誘導体の炭素-酸素結合の活性化を経る有機ホウ素試薬とのクロスカップリングを可能にする新しいニッケル触媒系を開発しました。このN-ヘテロサイクリックカルベン配位子を用いることで、ベンジルメチルエーテルを用いる鈴木-宮浦型の反応を初めて達成しました。