

CAMT Newsletter

2015年 4月21日 No.6

目次

1. 最新研究成果	1
2. 受賞のお知らせ	2
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	2
5. 耐震改修工事完了の お知らせ	5

1. 最新研究成果



林 高史教授らの研究グループは、国際科学技術共同研究推進事業(SICORP)「日本－フランス共同研究」において、「光および化学エネルギー利用のためのポルフィリンナノ構造体制御の分子技術」が平成26年度新規課題として採択され、フランスのチームとの共同研究が始まりました。本研究交流は、生体内に広く存在するヘムやクロロフィルの骨格として知られているポルフィリン分子を集積化し、光エネルギー獲得のデバイス開発や水素発生などの触媒開発を目指すものです。
詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



笠井 秀明教授らの研究グループは、NEDO (国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構)の平成26年度「エネルギー・環境新技術先導プログラム」に採択され、「量子ダイナミクス理論に基づく革新的省エネルギー水素社会実現の研究開発」について、東京大学、川崎重工業株式会社と共同で業務委託される事になりました。(～平成28年2月)
詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



笠井 秀明教授らの研究グループは、JAEA (国立研究開発法人日本原子力研究開発機構)を代表とする、ダイハツ工業株式会社との共同研究において、触媒の反応過程における電子の動きを、その場で詳細に観測するための測定技術開発に貢献しました。今回開発した、先端X線分光法の一つである共鳴非弾性X線散乱法を活用することで、自動車触媒や燃料電池電極触媒など、これからの触媒開発における新たな指針を提示できると期待されます。
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>

2. 受賞のお知らせ



井藤 幹夫准教授グループの研究成果を、粉体粉末冶金協会の平成26年度秋季講演大会で発表した川原賢太君(M2)が、優秀講演発表賞を受賞しました。

「直接通電焼結法を用いた反応焼結による Mg_2Si 系熱電変換材料の合成」

川原賢太, 井藤幹夫

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ



物理的ストレスによる活性酸素の役割を考える
ー特に大気圧プラズマの生物・化学作用についてー

講師：近藤 隆（富山大学学長補佐 同大学院医学薬学研究部(医学)放射線基礎医学講座・教授）

2015年4月23日(木) 14:00から15:30まで、大阪大学 大学院工学研究科 産学連携本部 A棟 B1研修室（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。

4. 新論文のご紹介



OCTを用いたレーザー凝固中における生体軟組織の減衰係数の高精度自動測定法の検討

大宮 孝太, 石井 克典, 近江 雅人, 粟津 邦男

日本レーザー医学会誌34巻1号3～8頁

✧✧ 日本レーザー医学会平成26年度論文賞を受賞しました。

本論文では、光コヒーレンストモグラフィー（Optical Coherence Tomography; OCT）と呼ばれる約5～10 μm の高空間分解能で深さ約1～2mmの断層像を観察することができる光イメージング技術を用いて、眼科などで行われているレーザー凝固治療における生体組織の凝固の様子をリアルタイム観察し、OCT画像から光学特性値（減衰係数）を算出し、その変化を定量的かつ経時的に観測することで凝固の程度を評価する技術を報告しました。近年発展の目覚ましい画像支援治療（Image-guided Therapy）へOCTを利用し定量的な知見を得る画期的な試みです。



Ex Vivo Efficacy Evaluation of Laser Vaporization for Treatment of Benign Prostatic Hyperplasia Using a 300-W High-Power Laser Diode with a Wavelength of 980 nm

J. Takada, N. Honda, H. Hazama, K. Awazu

Laser Therapy Vol. 23 (2014) No. 3 p. 165-172

✧✧ Laser TherapyのGood Paper Award 2014を受賞しました。

本論文では、前立腺肥大症（benign prostatic hyperplasia; BPH）と呼ばれる疾患に対する波長980 nm, 最高出力300 Wの半導体レーザーを用いたレーザー治療法の安全性・有効性を実験的に検証した結果を報告しました。臨床での治療状況を模擬してウシ前立腺組織へのレーザー照射実験を行い、レーザー照射条件とその影響との関係を網羅的かつ定量的に解析することで、本治療法が従来の治療法と比べて高い治療効率を実現できる可能性を示しました。この成果により、本治療法の短期間での実用化が見込まれ、ヒトに優しい低侵襲治療の実現・普及に向けた重要な役割を担いました。



First-principles study of nitric oxide oxidation on Pt(111) versus Pt overlayer on 3d transition metals

Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escano, **Hideaki Kasai**

J. Vac. Sci. Technol. A 33 (2015) 021402(1)-021402(8)(2015)

The conversion of NO into NO₂ is important for improving the quality of air through exhaust gas purification systems. In this work, the oxidation of NO to NO₂ on pure Pt and Pt overlayer on 3d transition metals was studied using kinetic Monte Carlo simulations coupled with density functional theory based first principles calculations. It was found that on the Pt(111) surface, NO oxidation proceeds via the Eley-Rideal mechanism, with O₂ dissociative adsorption as the rate-determining step. The oxidation path via the Langmuir-Hinshelwood mechanism is very slow and does not significantly contribute to the overall reaction. However, in the Pt overlayer systems, the oxidation of NO on the surface is more thermodynamically and kinetically favorable compared to pure Pt. These findings are attributed to the weaker binding of O and NO on the Pt overlayer systems and the binding configuration of NO₂ that promotes easier N-O bond formation. These results present insights for designing affordable and efficient catalysts for NO oxidation.



Oxygen reduction reaction on neighboring Fe-N₄ and quaternary-N sites of pyrolyzed Fe/N/C catalyst

Adhitya Gandaryus Saputro, **Hideaki Kasai**

Phys. Chem. Chem. Phys. Vol. 17 (2015)

In this study, we discuss about the interplay between the neighboring iron-nitrogen (Fe-N_x) and quaternary-N-doped active sites and its effect on the ORR mechanism on these active sites using density functional theory-based calculations. The interaction between these neighboring active sites is important, since it might influence their local ORR activity. Our results suggest that the interaction of the Fe-N₄ site and the quaternary-N-doped site at the zigzag edge of graphene enhances the ORR free energy profile of the quaternary-N-doped active site. However, the ORR free energy profile on the Fe-N₄ site is not affected by this interaction. This finding infers that the interplay between these two active sites does not worsen the ORR free energy profile on both of the active sites. Instead, it improves the ORR free energy profile of one of the active sites.



Surface Magnetism in α PbO Induced by Fe Interstitials

Elvis F. Arguelles, Shuichi Amino, Susan Aspera, Hiroshi Nakanishi, **Hideaki Kasai**

Journal of the Physical Society of Japan 84, 045002 (2015)

The electronic and magnetic properties of α PbO with Fe interstitial are theoretically investigated using first-principles calculations based on density functional theory. Upon bonding with the host's oxygen atom located at the surface layer, the d states of Fe interstitial spin split inducing spin polarisation in the slab. In addition, we predict a ferromagnetic order stabilised by double exchange mechanism in the system with a high Curie temperature in both mean-field approximation and Monte Carlo simulation. These findings have important implications not only in designing DMS for spintronics applications but also in studying magnetism in surfaces. Finally, aside from substitutional doping, we introduce a new way of inducing magnetism in DMS through interstitial defects.

 Anisotropy of the electro-optic Kerr effect in polymer-stabilized blue phases

Yuto Kawata, Hiroyuki Yoshida, Shu Tanaka, Anucha Konkanok, **Masanori Ozaki**, and Hirotosugu Kikuchi

Physical Review E *91* (2015) 022503.

高分子安定コレステリックブルー相(PSBP)液晶は、三次元周期構造を自己組織的に形成し、しかも、電界に対して高速な屈折率変化すなわちKerr効果を示すことから、高速応答光デバイスやディスプレイへの応用が期待されています。しかしながら、Kerr係数の異方性については、これまで明らかになっていませんでした。我々は、結晶面方位(110)と(200)が基板に対して平行となるPSBP液晶のKerr効果を測定し、その異方性を初めて明らかにしました。その結果、(110)配向PSBP液晶のKerr係数が、(200)配向のものに比べて20%大きいことを見出しました。これは、高性能ディスプレイを設計するうえで重要な知見となります。

 Selective removal of carious human dentin using a nanosecond pulsed laser operating at a wavelength of 5.85 μm

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

Journal of Biomedical Optics, 20 (5): 051023(2015.5)

歯科のミニマルインターベンション実現に向けて、健全歯に無侵襲に虫歯を選択的に除去できる技術が求められています。虫歯の中赤外域の光吸収特性に着目し研究を行ってきた結果、波長5.85 μm がヒト虫歯象牙質を選択的に切削可能なことが分かりました。「臨床歯科医による虫歯の診断（その虫歯を除去すべきか温存すべきかの判断）」、「象牙質の硬さ（ビッカース硬さおよびカルシウム含有割合）」と「波長5.85 μm のナノ秒パルスレーザーによる切削深さ」の関係を検討したところ、波長5.85 μm における最適エネルギー条件で、硬い健全に近い象牙質は切削されず、柔らかく虫歯に近い象牙質は切削されることが分かりました。すなわち、波長5.85 μm 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。

 Highly accurate scattering spectrum of strongly absorbing sample obtained using an integrating sphere system by considering the angular distribution of diffuse reflection light

D. Fukutomi, K. Ishii, **K. Awazu**

Lasers in Medical Science, e-pub ahead of print (DOI 10.1007/s10103-015-1734-5) (2015)

光伝播シミュレーションに必要な生体組織の光学特性値を決定する代表的手法に、積分球光学系による計測と逆モンテカルロ法による計算を組み合わせた方法がありますが、この方法で高吸収な生体組織の光学特性値を正確に求めることは困難です。本研究では、試料の吸収媒体濃度と拡散反射光の方向に着目し、積分球光学系による拡散反射光測定の精度が最終的に計算される光学特性値にどのような影響を与えるかについて検討を行いました。

**Artificial hydrogenase: biomimetic approaches controlling active molecular catalysts**Akira Onoda, **Takashi Hayashi**

Curr. Opin. Chem. Biol. Vol.25, pp.133-140

人工ヒドロゲナーゼの総説が掲載されました。

ヒドロゲナーゼは、鉄やニッケルを活性中心として有し、水（プロトン）と電子から水素ガスを、あるいはその逆反応をつかさどる重要な酵素です。この酵素を理解し、本反応を触媒する人工酵素を作成するために、これまで様々なモデルが提唱されています。本稿では、ヒドロゲナーゼの代表的な構造・機能モデルをいくつか紹介し、本分野の今後の期待される展開を論じています。

**Rhodium-Catalyzed Borylation of Aryl 2-Pyridyl Ethers through Cleavage of the Carbon-Oxygen Bond: Borylative Removal of the Directing Group**H. Kinuta, **M. Tobisu**, and N. Chatani

J. Am. Chem. Soc., 137 (4). 1593-1600 (2015)

電気陽性なホウ素を含む配位子を持つロジウム錯体を触媒として用いることにより、push/pull型の協奏的相互作用に基づいた新しい結合活性化を達成しました。従来、その変換に多段階を要していたピリジルエーテルを一段階かつ触媒的に変換することが可能となり、ピリジルオキシ配向基の合成化学的利用を可能にしました。

**Nickel-Catalyzed Alkynylation of Anisoles via C-O Bond Cleavage****M. Tobisu**, T. Takahira, A. Ohtsuki, and N. Chatani

Org. Lett., 17 (3). 680-683 (2015)

アニソールは基幹有機化合物であり、そのメトキシ基を直接、他の官能基へと変換できれば、既存のハロゲン化アリールを原料とする物質変換プロセスの革新につながります。本研究では、ユニークなカルベン配位子を持つニッケル触媒を用いることにより、アルキニル基を導入する初めての例を達成しました。メトキシ基を持つ医薬品分子や π 共役系の有機材料分子への直接アルキニル基の導入が可能となりました。

5. 耐震改修工事完了のお知らせ

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完了しました。A12棟の研究室は、4月中に仮移転先から戻ります。移転作業中は、電話やメールが繋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。

