



CAMT Newsletter

2015年 12月24日 No.8


目次

- 1. 計算物質科学人材育成コンソーシアムへの参画 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 2


1. 計算物質科学人材育成コンソーシアムへの参画

計算物質科学人材育成コンソーシアムは、東北大学(主として金属材料研究所), 東京大学(主として物性研究所), 自然科学研究機構分子科学研究所, そして大阪大学(主としてナノサイエンスデザイン教育研究センター)の4者から構成される団体です。このプログラムは, コンソーシアム中の複数研究機関における滞在型共同研究の遂行等を通じて, 計算物質科学分野の広い領域に通じた次世代リーダーの養成を目的としています。12月16日にコンソーシアムに着任したNguyen Tien Quang特任助教が, 当センター内において, 計算科学に関わる研究活動を展開します。

2. 受賞のお知らせ

 尾崎 雅則教授が, 2015年度 日本液晶学会 業績賞を受賞しました。

「液晶材料における新機能性の探究, およびフォトニクス・エレクトロニクスへの応用」
この賞は液晶研究において特に優れた業績を挙げ, 学術或は産業の発展に貢献した個人を対象としたものです。

 伊藤 剛仁准教授研究グループの近藤 崇博特任研究員(現 東海大学勤務)が, 2015年応用物理学会秋季学術講演会で, 講演奨励賞を受賞しました。

「振動和周波発生分光による水表面O-H振動構造へのプラズマ由来ラジカル・イオンの効果」
近藤崇博, 伊藤剛仁



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



伊藤 剛仁准教授研究グループの近藤 崇博特任研究員（現 東海大学勤務）が，17th International Symposium on Laser-Aided Plasma Diagnosticsで，Poster awardを受賞しました。

「Disordering O-H vibrational structure at water surface by reactive species from plasma analyzed by vibrational sum-frequency generation spectroscopy」

近藤崇博，伊藤剛仁

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ



第28回コンピューショナル・マテリアルズ・デザイン（CMD[®]）ワーク ショップ

2016年2月29日(月)から3月4日(金)まで，大阪大学産業科学研究所（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



Compositional dependence of structures of NiTi martensite from first principles

Masataka Mizuno, Hideki Araki, Yasuharu Shirai

Acta Materialia, 95 (2015) 184-191.

NiTiのマルテンサイト相の安定性や結晶構造に及ぼす組成の影響を第一原理計算により調べました。B19相からBCO相への相変態における正確なエネルギー・プロファイルを求めることにより，エネルギー障壁や中間相が存在しないことを明らかにするとともに，実験で観察されるB19'相がエネルギー的には不安定であることを示しました。また，Ni濃度が増加すると，Ni不正位置原子の影響でBCO相が不安定になることにより，B19'相が安定に存在する領域が現れることが分かりました。これらの結果から，エネルギー的に不安定なB19'相が実験で観察される原因を明らかにすることができました。



Fragment ions produced from hexamethyldisilane in a Freeman-type ion source

S. Yoshimura, M. Kiuchi

Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 54, No. 10, 108001-1-3, (2015).

シリコンカーバイド（SiC）の成膜においては，通常はシランガスが用いられます。シランは爆発性の高い，極めて危険なガスです。そこで我々は，ヘキサメチルジシランを用いたSiC成膜プロセスを提案しています。ヘキサメチルジシランは，シランよりもずっと可燃性が低く，比較的安全な原料です。本研究では，フリーマン型イオン源内でヘキサメチルジシランを解離することによってできるフラグメント種を調べた結果を報告しました。



新規反応触媒開発を目指したゼオライトへのインジウム担持の試み

吉村智, 木内正人, 西本能弘, 安田誠, 馬場章夫, 空野由明, 杉本敏司, 浜口智志

スマートプロセス学会誌, Vol. 4, No. 4, pp. 228-233, (2015).

近年, インジウムとケイ素の相互作用によって発現する触媒が発見されました. そこで我々は, ケイ素を含有するゼオライトにインジウムを注入することにより新しい触媒の開発を試みています. ゼオライトは細孔構造を持ち内部比表面積が極めて大きいため, インジウムを担持したゼオライトにおいて触媒能を発現させることができれば, 触媒効率の向上が期待できます. 本研究では, 低エネルギーイオンビーム装置を用いて, インジウムをゼオライトに担持する実験に取り組みました. 粉末状のゼオライトをプレスによりペレット形状に加工し, これをビーム実験のターゲットとして用いました. 実験の結果, 実際にインジウムがゼオライトに担持されていることを確認しました.



Indium implantation onto zeolite by pulse arc plasma process for the development of novel catalysts

S. Yoshimura, Y. Nishimoto, M. Kiuchi, M. Yasuda

Chemistry Letters, Vol. 44, No. 10, pp. 1292-1294, (2015).

上記の実験とは別に, アークプラズマ装置を用いてインジウムをゼオライトに担持する実験にも取り組みました. この実験では, 粉末状のゼオライトを容器に入れ, これを攪拌しながらインジウムを注入することにより, インジウムがゼオライトサンプルに均一に照射されるようにしました. 実験の結果, このサンプルに実際にインジウムが担持されていることを確認しました. また, このサンプルがFriedel- Crafts alkylationの触媒として機能することも確認しました.



Size-controlled sub-micrometer spheroidized ZnO particles synthesis via plasma-induced processing in microdroplets

Masanao Tsumaki, Yoshiki Shimizu, Tsuyohito Ito

Materials Letters, 166 81, 2015年12月

本論文では, ミクロ液相内部でのプラズマ誘起反応によるZnO球状粒子合成を行った結果を報告しています. 大気圧非平衡プラズマ内部に, 酢酸亜鉛水溶液からなるミクロ液相を供給することにより, ZnOナノ粒子がアモルファス母体に組み込まれた特徴的なサブ μm 粒子の合成が可能であることを示しました. また, 溶液濃度の変化による粒子サイズの制御を実現しました. ミクロ液相が疑似的に閉じた反応空間となり, 一つのミクロ液相から一つの粒子が生成されていることを支持する結果です.



Ideal efficiency of photon-enhanced thermionic emission energy converter driven by blackbody radiation

Haruki Takao, Kazunobu Kobayashi, **Tsuyohito Ito**

Japanese Journal of Applied Physics, 55 018003, 2015年12月

本論文では、熱と光両者を用いた光子援用熱電子（PETE）発電に対し、黒体放射の理想変換効率計算を行った結果を報告しています。500-2000Kの黒体からの放射に対し、太陽光で最大効率を与える約1.4eVよりもはるかに小さな0.3-0.8eV程度のバンドギャップを用いることで最大理想変換効率が得られることを示しました。また、変換効率と動作温度には関係があり、高効率動作の実現には、低バンドギャップかつ高融点材料の開発が必要であることを示しました。



Evaluation of fatty acid oxidation by reactive oxygen species induced in liquids using atmospheric-pressure nonthermal plasma jets

Atsushi Tani, Satoshi Fukui, Satoshi Ikawa and **Katsuhisa Kitano**

Journal of Physics D: Applied Physics 48 (2015) 424010 (9pp)

大気圧低温プラズマを用いたプラズマ医療の反応基素過程として、プラズマが作り出した活性種と各種生体高分子の化学反応は重要であり、これまでアミノ酸、タンパク質との相互作用を研究してきましたが、本論文では脂質酸化に関する研究を進めました。生成される活性種を作り分けできる各種のプラズマ源を用いて、液中に誘起される活性種を電子スピン共鳴法などにより、一重項酸素、スーパーオキシド、ヒドロキシカルラジカル、オゾンの計測を行い、TBA試験により脂質酸化の評価を行った結果との考察を行いました。



Plasma Sterilization of Caries-infected Dentin Model with Reduced-pH Method

USUI Emi, **OHSHIMA Tomoko**, YAMAZAKI Hiromitsu, IKAWA Satoshi, **KITANO Katsuhisa**, MAEDA Nobuko, MOMOI Yasuko

The Japanese Journal of Conservative Dentistry Vol.58, No.2, 101-108 (2015)

大気圧低温プラズマを用いた液体の殺菌に関して、低pH条件で殺菌力が2桁高まる低pH法を用いて、歯科治療への応用研究を進めています。ヒト抜去歯を用いて感染象牙質モデルを構築し殺菌実験を行ったところ、180秒で菌数が6桁減少して、無菌化することに成功しました。このような高い殺菌力は低pH条件でのみ見られ、中性pH条件下でのプラズマ照射によるコントロール実験では菌数が変化しませんでした。う蝕のプラズマ治療において低pH法は重要である事がわかりました。