

腸管上皮におけるWnt/Notchシグナル間規クロストーク機構の解明	2005年度 ～2006年度	渡辺 守(WATANABE, Mamoru) 東京医科歯科大学・大学院医学総合研究科・教授 (10175127)	Atoh1 Differentiation Hath-1 Notch シグナル Regenerative medicine Signal transduction Translational research Wnt Wntシグナル シグナル伝達 トランスレーショナルリサーチ ユビキチン-プロテソーム 再生医学 発生・分化 細胞内シグナル伝達 腸管分化 転写因子	消化器内科学	基礎研究(A)	東京医科歯科大学	49,920,000	本研究は腸管上皮細胞におけるWnt/Notchシグナルのクロストークを解析することによって腸管上皮の分化調節機構、幹細胞維持機構など腸管再生の根幹となる理論基礎を構築することを目的とする。本研究では当初の研究計画に示した項目につき、下記に示すごく大きな研究成果を得た。腸管上皮細胞分化に重要な役割を担うLH転写因子であるHath1遺伝子は転写後調節としてWntシグナル内のGSK3を介したβ-カドヘリンによるキチンプロテソーム系の質的分解機構によって制御されておりこれbeta-cateninの制御機構と同一であることからWntシグナルが細胞増殖にβ-カドヘリンを対等に蛋白安定性にて制御する機構であることが解明された。Wntシグナルの異常亢進している大腸癌由来細胞株においてはHath1の質的分解を認め、さらに実際にヒト大腸癌においてもHath1遺伝子の発現を認めるがHath1遺伝子の発現を認めないことから、Wntシグナルの増強が未分化の維持だけでなく分化誘導の積極的な阻害が発癌に関与することが示唆された。一方、Notchシグナルに関してβ-カドヘリン阻害剤の処理にて大腸癌細胞株のHath1遺伝子の増加とともに分化を誘導することに成功した。また個体レベルにおいてもマウスにNotch阻害剤の処理にて腸管上皮の幹細胞の増加を認め、分化誘導が確認できた。以上よりHath1遺伝子発現をNotchシグナルがHath1蛋白安定性をWntシグナルが抑制することで腸管上皮細胞の分化調節を行うことが示唆され、両者シグナルのクロストークによる調節機構を証明できるなど多大な成果を挙げた。		
遺伝子改変マウスのマイクロPETとヒトの探索的分子PETによる統合的薬理学研究	2005年度 ～2006年度	谷内 一彦(YANAI, Kazuhiko) 東北大学・大学院医学系研究科・教授 (50192787)	Acetylcholinesterase Alzheimer disease Antihistamines Histamine 1-11 receptors Molecular imaging PET Positron Emission Tomography (PET) amyloid Aβ proteins translational research アセチルコリンエステラーゼ アミロイドAβ アルツハイマー病 トランスレーショナルリサーチ ヒスタミンHI受容体占拠率 分子イメージング 抗ヒスタミン	応用薬理学	基礎研究(B)	東北大学	14,900,000	1.〔＜11C〕Donepezilを用いたアセチルコリンエステラーゼ(AChE)のPET分子イメージングをおこない、アルツハイマー病においてAChEの低下が明らかになった。またドネペジルによる治療前後で〔＜11C〕DonepezilのAChE結合活性は30-40%低下し、〔＜11C〕Donepezil-PETで治療効果の評価ができることが明らかになった。 2.第二世代抗ヒスタミン薬のベポタスタン、オロパタジン、鎮静性抗ヒスタミン薬であるジフェンヒドラミン、ケトフェンのヒスタミンHI受容体占拠率を健康成人男性において測定した。日本で開発された非鎮静性のベポタスタン10mg、オロパタジン5mgのHI受容体占拠率は20%以下であるのに対して、ジフェンヒドラミン30mg、ケトフェン1mgのHI受容体占拠率はそれぞれ50%、70%以上で、鎮静作用について客観的に評価できることが明らかになった。 3.マウスの全身アミロイドンモデルを作成して、小動物用PETを用いてアミロイドのイメージングを行った。小動物用PETにより脾臓に蓄積したアミロイドの検出に成功した。 4.アミロイドイメージングプローブ用〔＜18F〕標識benzoxazole誘導体を開発するために、新規〔18F〕-化合物の基礎開発を行った。脳からの排出が早くも脱フッ素の生じない〔＜18F〕標識化合物のスクリーニングについて小動物用PETを用いて行い、脳からの排出が早くも脱フッ素の生じない化合物のスクリーニングに成功した。 5.ヒスタミンHI受容体の認知機能への影響は状況依存性であり、通常の飼育下ではHI受容体遺伝子ノックアウトマウスでも認知機能が低下するが、社会的隔離ストレス下ではHI受容体-遺伝子ノックアウトマウスのほうがストレスの影響が少なく認知機能が保たれる。		
原因腸内細菌抗原特異的自己免疫性大腸炎モデルと発症抑制プロバイオティクスの開発	2005年度 ～2006年度	金井 隆典(KANAI, Takano) 東京医科歯科大学・医学部附属病院・講師 (40245478)	biological molecule immunology intestinal bacteria translational research トランスレーショナルリサーチ プロバイオティクス マウス大腸炎モデル メモリー細胞 免疫学 制御性T細胞 炎症性腸疾患 生体分子 細菌 自然免疫	消化器内科学	基礎研究(B)	東京医科歯科大学	11,400,000	炎症性腸疾患慢性化永続化における腸内細菌の関与を追究する目的にてCD4 <sup>+</sup> CD45RB <sup>+</sup> 細胞を免疫不全マウス(Rag-1 <sup>-/-</sup> マウス)へ移入する慢性大腸炎モデルを用いて追究した。 (1)炎症大腸炎所には腸炎惹起性CD4 <sup>+</sup> CD44 <sup>+</sup> CD62L <sup>+</sup> HL-7R <sup>+</sup> メモリー細胞が存在し、再びSPF-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスに移入すると大腸炎を再発した。無菌-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスでは発症しなかった。 (2)にて腸炎発症時の腸炎惹起性免疫メモリー細胞移入無菌-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスには、脾臓、リンパ節、骨髄にCD4 <sup>+</sup> メモリー細胞が腸炎発症(+)の移入SPF-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスに比し少数(20-35%)ながら存在していた。 (3)(2)にて腸炎発症(-)の腸炎惹起性免疫メモリー細胞移入無菌-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスをSPF環境下へ移行すると短期間に再び類似大腸炎を発症した。 (4)MyD88欠損CD4 <sup>+</sup> CD45RB <sup>+</sup> 細胞移入したSPF-Rag-1 <sup>-/-</sup> マウスは正常マウスCD4 <sup>+</sup> CD45RB <sup>+</sup> 細胞を移入したマウスに比し比位に腸炎の発症が軽度であった。 以上の結果より、腸炎惹起性CD4 <sup>+</sup> メモリー細胞は腸内細菌のTLR刺激による直接的なシグナルによって調整を受けるもので、無菌下においても生存し得ることを明らかにした。このことは腸炎惹起性免疫メモリー細胞は腸内細菌以外の因子(例えばIL-7)によって生体内で維持される機構の存在が示唆された。さらに、いかなる腸内細菌が大腸慢性化に関わり、いかなる腸内細菌が大腸炎抑制に関わるかを追究することにより今後の炎症性腸疾患の治療戦略において極めて重要と考えられた。		
Notchシグナルによる造血幹細胞制御-ヒトES細胞から造血幹細胞誘導を含む-	2005年度 ～2006年度	千葉 滋(CHIBA, Shigeru) 東京大学・医学部附属病院・助教授 (60212049)	cells, tissues development, differentiation translational research transplantation, regeneration medicine シグナル伝達 トランスレーショナルリサーチ 再生医学 発生・分化 移植 再生医療 細胞-組織	血液内科学	基礎研究(B)	東京大学	15,400,000	Notch受容体を介するシグナルにより、造血幹細胞の未分化性を維持したまま増殖することが可能である。しかし骨髄のnicheにおいて造血幹細胞が自己複製する際に、Notchシグナルが重要な役割を果たしていることが示唆されている。今回、Notch1及びNotch2遺伝子をそれぞれ欠損するマウス、あるいはNotch阻害薬であるY001027を投与した野生型マウスを用いて、この疑問へのアプローチを試みた。Notch1+/-Notch2-/-マウスに抗腫瘍薬である5-FUを投与、あるいは野生型マウスに5-FUを投与しその後Y001027を投与し、骨髄回復期に造血幹細胞濃度測定であるLin <sup>-</sup> Scal <sup>+</sup> Kit <sup>+</sup> (LSK)細胞またはCD34 <sup>+</sup> LSK細胞の絶対数を比較した。しかし期待に反し、これらの実験ではコントロールマウスあるいはY001027を投与しない野生型マウスとの間に明確な差は認められず、Notchシグナルが生理的に造血幹細胞維持に関与することは証明できなかった。一方、ヒトES細胞から造血幹細胞への分化誘導が可能となれば、臨床使用を目的とするES細胞由来血球の工業生産システム構築など、さまざまな応用が考えられる。本研究では、胎生期の造血幹細胞発生にNotchシグナルが重要な役割を果たすという我々自身の知見を応用し、Notchリガンドを用いることによりヒトES細胞から造血幹細胞への誘導が可能かを検討した。ヒトES細胞はKhes-3を用いた。種々の培養法でKhes-3を分化誘導させ、造血幹細胞のマーカー候補とされるCD34, CD133, KDR, CD90, CD150, CD105, PCLP-1, PECAAM1, and VEG-Cadherin.などの表面マーカーを組み合わせて分取し、造血活性を評価した。しかしながら、これらのマーカーで得られる細胞はいずれも血管内皮細胞やマクロファージへの分化能を示したものの、著明な造血幹(前駆)細胞活性を示す細胞を同定することはできなかった。		
子宮頸癌におけるオーダーメイド医療を目指した放射線治療効果予測システムの構築	2005年度 ～2006年度	播磨 洋子(HARIMA, Yoko) 関西医科大学・医学部・助教授 (80140276)	Radiotherapy cancer genome protein translational research ゲノム トランスレーショナルリサーチ トランスレーショナルリサーチ 子宮頸癌 放射線 放射線治療 治療効果予測因子 癌 蛋白	放射線科	基礎研究(B)	関西医科大学	11,800,000	放射線治療に対する応答には個体差が存在し、照射量やスケジュールが同一でも個々の症例で治療効果は明らかに異なる。治療効果を向上させるためには腫瘍の放射線治療に対する感受性を予測する必要がある。我々は従来から放射線治療を施行した子宮頸癌症例の放射線治療効果に關する遺伝子の予後予測因子を検討してきた。cDNAマイクロアレイによるゲノム解析では放射線感受性に關する遺伝子群としてALDH1, RBP1, XRCC5, HLA-DQA1, uPA, CD44, HIF1A, CA12, CTSL, CTSSB, p63, BIK, TEGT, SSI-3遺伝子などを抽出した(Int J Radiat Oncol Biol Phys.60:237-248,2004.Neoplasia 4:295-303,2002)。これらの遺伝子群からDNA2本鎖切替修復機能関連遺伝子(XRCC5)、アポトーシス関連遺伝子(BIK, TEGT, SSI-3)、低酸素誘導遺伝子(HIF1A, CA12)、腫瘍の浸潤や転移関連遺伝子(CTSL, CTSSB, PLAU, CD44)等の相互間関係や機能解析を行い、治療効果予測因子システムを構築し、新規の組織でシステムの感度や特異性を検証することを目的とした。今回、これらの遺伝子群と、実験的に放射線感受性について報告されている認知した機能を有する遺伝子群に焦点をあて、効果予測モデルの確立に向けて、動的強化-相互関係の整理と検証を行った。すなわち、抽出された遺伝子群に順位相関解析を行い、効果予測に重要な遺伝子群を選択した。次に、抽出した個々の遺伝子について治療効果良好群と不良群に絞って、Real-time PCR法を用いて生体サンプルから抽出したDNAを量解析-多量量解析で再現性を確認した。また、臨床検体を用いて遠隔転移に關する遺伝子群についてゲノム解析を行い、遺伝子不安定性に關するTTK/tp53遺伝子群を抽出した。個々の癌に最良の治療法を提供するオーダーメイド医療のための放射線治療効果予測システムの確立を目指した。		
活性化NKT細胞によるがん転移抑制治療	2005年度 ～2009年度	中山 俊憲(NAKAYAMA, Toshihiko) 千葉大学・大学院・医学研究院・教授 (50237468)	トランスレーショナルリサーチ 免疫 免疫学 癌 発生・分化 糖鎖 糖類	特定領域研究	千葉大学	46,200,000	NKT細胞の抗原受容体に特異的なリガンドの糖脂質αガラクトシルセラミド(αGalCer)は、マウスおよびヒトのNKT細胞を特異的に活性化する。マウスの実験系でがんの転移は完全に抑制された。本研究では、NKT細胞のもつがん転移の抑制能を利用した免疫細胞治療法の開発に關する研究を行う。これまでに、進行期および再発肺癌患者を対象にしたαGalCerをバリス樹状細胞を誘導する細胞治療のPhase I-IIに關する研究を終え、肺がんについては有意な生命予後の延長をみとめた。			
脂肪内分泌代謝学を基礎としたメタボリック症候群のトランスレーショナルリサーチ	2004年度 ～2008年度	中尾 一和(NAKAO, Kazuwa) 京都大学・医学研究科・教授 (00172263)	11β-HSD1 トランスレーショナルリサーチ メタボリック症候群 レプチン 創薬 脂肪細胞 視床下部 遺伝子操作マウス	内分泌学	基礎研究(S)	京都大学	114,400,000	脂肪蓄積症はメタボリック症候群の病態解明や新規治療法開発の足掛りとなる貴重なモデル疾患である。我々は脂肪蓄積症を対象とするレプチン補充療法の長期安全性と有用性を証明した。更に新しいマウス実験モデルを確立し、インスリン抵抗性-肥満を伴う2型糖尿病に對するレプチンの治療的有用性を検証した。または骨格筋AMPK活性を指標として用いることにより、レプチン抵抗性の分子メカニズムにおける視床下部メラノルチン系の意義を明らかにした。		



代謝異常症候群モデルマウスの病態解析	2003年度 ～2007年度	益崎 裕章(MASUZAKI, Hiroaki) 京都大学・医学研究科・助教 (00291899)	11β-HSD1 PPARγ adipomixis diabetes dyslipidemia hypertension internal medicine metabolic syndrome therapy translational research アディポミクス アディポステロイド トランスレシヨナルリサーチ マクロアミクス メタボリックシンドローム メタボリック症候群 伸血イベント 内臓脂肪 内臓脂肪症候群 心血管イベント 治療 糖尿病 脂肪細胞機能 遺伝子改変動物 高脂血症 高血	特定領域研究	京都大学	38,800,000	メタボリックシンドロームの中心的病態のひとつである脂肪組織機能異常の分子メカニズムの解明に焦点を絞り、種々の遺伝子操作病態モデルマウスの解析や新規の開発、ヒト脂肪組織の解析、培養脂肪細胞を用いた解析を行った。第一点は肥満の脂肪組織における細胞内グルコルチコイド活性化酵素、11β-HSD1の制御異常の分子メカニズムの解明であり、この酵素が担う脂肪組織グルコルチコイド作用の病的調節が脂肪細胞ホルモン、サイトカイン、ケモカインの分泌制御異常を惹起し、脂肪組織機能異常を引き起こすことが明らかとなった。本酵素が脂肪組織の炎症やセラミドシグナル、高血糖や過剰栄養の状態で亢進するペントースリン酸経路に関与する酵素群から供給される補因子、NADPHなど多彩な経路によって脂肪組織で活性化されること、遺伝子操作マウスや遺伝的資源マウスで観察される代謝異常がヒト肥満脂肪組織でも同様に観察されること(ヒト試料を用いた臨床研究:京都大学医の倫理委員会563、2004年より承認)、炎症脂肪組織においては脂肪組織のみならずマクロファージにおいても本酵素が病態形成に深く関与していること、PPARγ作動薬の作用機序に本酵素の抑制が寄与していることが本研究から新規に明らかになった。第二点はメタボリックシンドローム病態における脂肪細胞ホルモン、レプチン抵抗性の意義の解明と創薬への応用であり、視床下部マモノルチンシグナルの活性化が骨格筋脂肪酸酸化能に及ぼす効果を解析した結果、4型マモノルチン受容体のアンタゴニストやアゴニストの脳内投与が骨格筋AMPKおよびACCのリン酸化の減弱や亢進を惹起すること、高脂肪食でレプチン抵抗性を獲得したレプチン過剰発現マウスや遺伝的肥満マウスに対する受容体アゴニスト投与がAMPK再活性化をもたらし脂肪質代謝を改善することが明らかとなった。メモノルチンアゴニストがレプチン抵抗性を克服しメタボリックシンドローム治療に応用できる可能性を示す新規の成果である。			
消化器がん総論的治療戦略確立のためのトランスレシヨナルリサーチ	2003年度 ～2005年度	門田 守人(MONDEN, Morito) 大阪大学・医学系研究科・教授 (00127309)	DNA chip DNAチップ Digestive organ cancer Translational research gene expression profile オリゴヌクレオチド ドラッグ レシヨナルリサーチ ヒト全遺伝子型DNAチップ 予後予測診断 大腸癌 消化器癌 肝転移予測 遺伝子発現 遺伝子発現プロファイル 遺伝子発現プロファイル	外科学一般	基礎研究(A)	大阪大学	50,180,000	本研究の目的はDNAチップ技術を採用し、従来の病理組織診断ではできなかった消化器癌に対する悪性度・予後予測診断システムを確立し、臨床へ実践的に応用することである。本研究は、臨床フィールドとして、参加施設の協力体制のもと数千例の癌症例のサンプリングと登録を行い、統一された臨床病理学的データを整理すること、また基礎研究フィールドとして、共同研究契約を締結した実験施設と解析施設において、DNAチップなどを用いた網羅的な分子生化学的解析を行うことを2本柱とし、2006年4月現在、約4000例の消化器癌症例の登録を完了した。具体的には、1)大阪大学と関連病院で切除された各癌種の切除標本および臨床病理学的情報を収集し、標本、情報の整理・管理を行なうマルチセンターシステムを構築した。2)収集された各消化器癌切除標本からmRNAを抽出し厳密なquality checkをした後、target DNA(臨床標本を調整し、ヒト全遺伝子型DNAチップを用いて、各種の消化器癌で1000から10000例のヒト全遺伝子発現データを取得した。3)大腸癌、胃癌、肝臓癌、膵臓癌、肺癌など各癌種で癌の発生・進展に関連する遺伝子群の抽出し、新規腫瘍マーカーや治療薬を特定した。4)各疾患で転移・再発・予後、化学療法、放射線療法などの治療反応性に関する特徴的な遺伝子発現パターンを認識し、遺伝子発現プロファイルの応用による予後診断システムを確立した。		
食物質による免疫作動機構の解明と応用技術の開発	2001年度 ～2005年度	石川 博通(SHIKAWA, Hirochichi) 慶應義塾大学・医学部・教授 (20051667)	Heme oxygenase cryptopatch dietary substances immunology intestinal T cells intestinal flora isolated lymphoid follicles secretory IgA antibody γδ T cells γδ T細胞 インターロイキン15 クリプトパッチ トランスレシヨナルリサーチ 一酸化炭素 免疫学 分泌型IgA抗体 分泌型IgA抗体 孤立リンパ小節 樹状細胞 炎症性腸疾患 生体分子 経口免疫寛容	創成的基礎研究費一学術創成研究費	慶應義塾大学	395,330,000	平成13年(2001)より本研究はスタートしたが、ここ数年間で腸内常在細菌叢(腸内フローラ)と腸管上皮細胞(intestinal epithelial cells:IEC)や全身の免疫システム間に存在する機能的連結の実体が急速にみえてきた。すなわち腸管免疫応答の特殊性の基盤に腸内フローラが関与することは明らかであり、近年における潰瘍性大腸炎やクローン病など炎症性腸疾患発症増加傾向にも食生活の変化に伴う腸内フローラの変移が提唱されている。本研究の主たる成果は、食物質による免疫作動機構解明に必須である腸管免疫応答の特殊性に迫る重要な知見を得たことである。第一は、白濁病治療などで移植した骨髄細胞が患者の体を攻撃する移植片対宿主病(GVHD)の発端となる生体場所が腸管リンパ組織の中でも最大のハイリンパ組織であることが明らかとなったことである。次に、我々が新たに発見した腸管リンパ組織であるクリプトパッチ(cryptopatch:CP)の組織形成に関する新知見である。すなわち、腸管やすべらのリンパ節に存在するハイリンパ組織を構築するDNAチップを用いた結果、これらのリンパ節にCPの組織形成や腸管T細胞の発分化が十分みられることが確かめられた。さらに、抗原提示細胞である樹状細胞(dendritic cell:DC)の研究進展は著しいが、腸管粘膜に分布するDCの特殊性も明らかになつてきた。インターロイキン15を介した通常DCとブラスマサイトイドDCの機能的連結が自然免疫成立にとって重要であることが明らかになった。この様な研究成果は、今後の食物質/腸内フローラ/免疫応答作動機構解明に向けての基礎的知見として極めて重要である。			
研究開発における多重決定方式の活用	2006年度 ～2009年度	広津 千尋(HIROTSU, Chihiro) 明星大学・理工学部・教授 (80016730)	False Discovery Rate SNPデータによる遺伝子間相互作用解析 ゲノム解析 分割表の行の多重比較 副作用自発報告時系列 同等性検証 国際共同治験 国際共同臨床試験計画 多変量Tukey法 多変量多重比較法 多変量測定値データ 多変量経時測定データ 多重決定方式 大規模分割表 大規模分割表適応型計画 寿命分布の推測 新薬開発臨床試験 比較臨床試験 牛の月別判別 用量・反応パターン解析 用量反応パターン推測 用量反応解析 米国産牛月別判別 臨床試験 複合信頼区間方式 誤発見率 適応型臨床試験	統計科学	基礎研究(B)	明星大学	15,220,000	多重決定方式の活用に関し総合的に研究し、よく米国産牛月齢別方式、臨床試験における非劣性・優越性検証の統合的接近法、分割表の行の多重比較法、およびベイズ推測といふ新しい視点に立った用量・反応解析について研究開発が得られ、国際誌3件の論文が発表された。とくに分割表の行の多重比較法は筆者が独自に展開している交互作用多重比較法の研究を一歩進めるに同時に、薬剤副作用の臨床大元データデータベースから薬剤群に関する特徴的な副作用パターンを抽出するという新たな研究課題に繋がることとなった。さらに、共同研究者によって多変量多重比較法、ゲム配列解析における誤発見率の制御、および市販後信頼性データ活用に関する研究について一定の成果が得られた。		
ヒト心臓幹細胞移植療法の前臨床的確立と細胞組織工学によるハイブリッド療法の開発	2006年度 ～2007年度	王 英正(OH, Hidemasa) 京都大学・医学研究科・准教授 (50372579)	autologous transplantation cardiac stem cells heart failure stem cell growth factor tissue engineering 再生医療 幹細胞増殖因子 心不全 心筋幹細胞 心臓内幹細胞 生体吸収材料 生体組織工学 細胞移植 臨床試験 自家細胞移植	循環器内科学	基礎研究(B)	京都大学	17,050,000	ヒト心臓内幹細胞と幹細胞増殖因子を統合した心筋再生医療法の前臨床的確立に向けて、以下の2つの課題を明らかにした。1)幹細胞増殖因子の同定-activin型受容体拮抗薬であるfolistatinは骨格筋組織幹細胞において、幹細胞コロニーの自己増殖能を増加させる作用があることを確認した。activin型受容体発を介するGF-beta familyのリリンドを特定するGF-beta familyのリリンドを骨格筋組織より精製した心筋幹細胞の増殖能を培養細胞系へ移植し、骨格筋組織幹細胞は骨格筋幹細胞と異なり、myostatinの情報伝達を介さず、むしろ、GDF11/activin Aによる幹細胞の増殖調節を介していることが明らかとなった。一方、心臓内幹細胞の自己増殖因子増殖因子の認識抗原であるScav-1のノックアウトマウスを用いた検討で、bFGF/Aktを中心とする情報伝達経路が幹細胞の増殖過程を制御していることが確認された。2)ヒト心臓内幹細胞移植と幹細胞増殖因子の併用療法の実験的安全性は有効性の検証-大型動物を用いたランダム割り振り前臨床試験を行った。慢性心筋梗塞モデルを作成し、研究目的1)で確認したbFGFを生体吸収材料であるグラチンハイドロゲルを用いて、心筋組織内に徐放し、免疫抑制下でヒト心臓内幹細胞を移植すること、心エコー検査や心臓MRIによる心機能評価では、bFGFによる心筋微小血流の改善に伴い、細胞周囲環境が調節され、ヒト心臓内幹細胞の生着性が、通常の幹細胞単独移植に比べ2倍以上、さらにin vivoでの心筋細胞再生能が8倍以上と有意に向上した。本研究により、心臓内幹細胞とbFGFのハイブリッド療法は最も有効な心機能改善と実質的な心筋細胞再生をもたらす画期的な再生医療法として確立した。		
治験担当者のニーズに細かに対応できる多施設共同治験管理システムの開発	2005年度 ～2006年度	鳥谷部 真一(TOYABE, Shin-ichi) 新潟大学・歯学部 総合病院・助教 (20227648)	Clinical trial Database GIS Geographic information system Hospital information system Internet Multi-center trial インターネット データベース 地理情報システム 多施設共同治験 治験 病院情報システム	医療社会学	基礎研究(B)	新潟大学	13,900,000	新GCP施行後め治療の空洞化によって、治療の実施件数は思うように伸びていないのが実情である。この問題の解決方法として、多施設共同治験が有望視されている。本研究では、多施設共同治験を支援し、治験担当者の業務負担を軽減するシステムの構築を目指した。まず、多施設共同治験に参加するかどうかを決定する際に、十分な症例が確保できるかどうかを把握しておく必要がある。そのため、治療条件に該当する患者が治験に同意診療を受けているか否、インターネット上で把握できるようにするシステムを構築した(治験情報共有化システム)。このシステムは多施設で使用することを目的とし最小限の情報でシステムで把握するため、今後各医療施設で診療情報の電子化が進むことを見込んで、診療条件だけでなく詳細な診療情報を入力できるようにした診療システムを構築した(診療情報抽出システム)。これによって治療条件に適合する症例数が医療機関に届くようになり正確に把握できる。さらに、多施設共同治験に参加する施設から、インターネットを介して、治療へのエンリ情報を送受を行うシステムを構築した(電子申請システム)。今後、このシステムを拡充することで、登録患者の経過まで把握できるシステムを目指している。多施設共同治療への参加を呼びかける医療施設をどう選ぶかも難しい問題である。この問題に対して、地理情報システム(GIS)を用いた病診連携解析と診察原因解析をおこなった。GISを用いることにより、各地域の医療機関との連携が容易に把握でき、施設選定の際の参考になることがわかった。各病院の診療圏がどの範囲まで及ぶかについても、GISを用いると視覚的な把握が可能だった。		
絶対位相制御光周波数コムによるマルチ光周波数基準の発生と光周波数同期網への展開	2008年度 ～2010年度	古賀 正文(KOGA, Masafumi) 大分大学・工学部・教授 (60448545)	Carrier-Envelope Offset Lock Carrier-Envelope Offset Phase Lock f-2干渉計 オクターブ光 レーザ 光PLL 半導体レーザー 次世代フォトニックネットワーク 短パルス光 通信方式(無線、有線、衛星、光、移動) 量子エレクトロニクス	通信・ネットワーク工学	基礎研究(B)	大分大学	18,980,000	2030年に桁増加が予想される通信トラフィック需要を支えることのできる新しい光ファイバ通信ネットワーク技術として光周波数同期網の概念提案を行い、基礎をなす高周波数offset光周波数コム基準生成に取り組みした。光周波数がHz程度で確からしい10-14を目標として掲げ、それを可能とするCarrier-envelope offset phase制御光発生を目指し、半導体レーザー光源による最もハードルの高いオクターブ光発生を達成した。		





巨大ひずみ導入のダイナミクスと組織形成	2006年度～2008年度	大橋 鉄也(OHASHI Tatsuya) 北見工業大学・工学部・教授 (60312445)	phase field法 ひずみと組織の定量的関係 ひずみ勾配理論 ナノ材料 ハイモーター分布 マクロ変形解析 モンテカルロシミュレーション 仮想実験 再結晶粒の成長 加工ひずみと結晶組織の定量的関係 巨大ひずみ 巨視的力学特性 幾何学的に必要な転位 材料組織 格子欠陥 機械材料・材料力学 機械的性質 組織発展 結晶質解析 結晶粒界 結晶組織形成 背応力 解析・評価 計算力学 転位	特定領域研究	北見工業大学	30,300,000	ECAPなどの巨大ひずみ加工プロセスで材料中に生ずる塑性ひずみテンソルの空間分布を定量的に精度良く求め、実験的に得られた微視組織と比較することにより、巨大ひずみ導入と微細組織形成の関係を明らかにすると同時に、微視組織の熱的安定性を検討した。組織微細化によって材料の巨視的力学特性が大きく変化する現象については、転位と結晶粒界との相互作用に起因する様々な効果を取り入れた「ひずみ勾配結晶塑性理論」を構築し、微細化による降伏応力とひずみ硬化率が増大する機構を明らかにした。				
半導体表面二次元凝縮相における励起物性の研究	2005年度～2007年度	谷村 克巳(TANIMURA, Katsumi) 大阪大学・産業科学研究所・教授 (00135328)	2光子光電子分光 STM fs time-resolved spectroscopy low-dimensional systems low-energy electron beam photoinduced phase transition semiconductor surface two-photon photoemission spectroscopy フェムト秒時間分解分光低エネルギー電子線 低次元系 光誘起相転移 半導体表面 走査型トンネル顕微鏡	物性1	基礎研究(A)	大阪大学	46,930,000	多重安定性を内包する擬二次元凝縮相としての半導体再構成表面における電子励起状態が示す新規な物性現象を、時間・空間領域実験手法を有機的に結合させて研究し、直接的知見に立脚して、表面で発生する超高速現象を微視的・統一的に解明する事を旨とした。そのために、(1)励起状態の超高速緩和過程の直接的観察のためのフェムト秒2光子光電子分光法を用いたキャリア動力学の研究、(2)表面原子構造の直接的観察のための走査型トンネル顕微鏡(STM)を駆使した表面構造変化の研究、を中心として研究を展開した。電子系励起源としては、高分解能エネルギー電子線、STPチップからのトンネル電流、フェムト秒パルスレーザーを用いた。本研究期間における主要な成果を以下に列記する。 1)励起レーザー波長可変性を有する2光子光電子分光装置を駆使し、Si結晶内電子状態における緩和過程とその機構、および表面電子状態への遷移過程とその動力学を解明した。 2)レーザー一面電子励起によるSi表面での構造変化機構をSTMによって系統的に研究し、局所的バンド切断機構を微視的に解明した。 3)低エネルギー高分解電子線と半導体表面の相互作用素過程を、水素終端Si表面を対象として研究し、Si-Hバンド切断機構が結合性から反結合性状態への非弾性励起によるものである事を実証した。 4)トンネル電流励起が誘起する化合物半導体表面での構造変化機構が2正孔局在によるものである事を解明した。 5)フェムト秒レーザー励起により、グラファイト表面上で新規なダイヤモンド様構造への相転移が発生することを発見した。 本基礎研究のこれらの成果の展開として、平成19年に特別推進研究が採択された。光誘起構造相転移移動力学の解明を主眼としつつ、本基礎研究の最終目標である表面励起物性の解明を含めた精力的な研究を展開している。			
スピンギャップ磁性体の相互作用制御と多重制限環境下における量子相転移	2005年度～2007年度	田中 秀数(TANAKA, Hidekazu) 東京工業大学・大学院・理工学研究科・教授 (80188325)	Condensed matter experiment. High magnetic field High pressure Low-temperature Physics Magnetism Quantum phase transition Quantum spin systems Spin gap スピンギャップ 低温物性 強磁性物性 物性実験 磁性 量子スピン系 量子相転移 高圧物性	物性2	基礎研究(A)	東京工業大学	50,440,000	スピンギャップ磁性体とは、基底状態が非磁性のスピント重項状態で励起状態との間に有限のエネルギーギャップをもつ磁性体である。また、量子相転移とは磁場や圧力等の数々の連続的变化によって引き起こされる異なる量子力学的基底状態間の相転移である。スピンギャップ磁性体TiCuCl <sub>3</sub> の磁場誘起反強磁性相転移は、磁気励起マグノンのボース凝縮(BEC)として記述される。我々はTiCuCl <sub>3</sub> の磁化を70mKまでの極低温で詳細に測定して、マグノンの臨界密度と相転移温度の関係を求め、相互作用定数を決定した。また、この相互作用定数と実験で表されるというBEC理論の結果を定量的に検証した。 我々はKCuCl <sub>3</sub> においてギャップが静水圧を加えると減少し、臨界圧8.2kbarで反強磁性状態に相転移することを磁化測定と中性子散乱実験で発見した。この磁気量子相転移は磁気励起のソフト化によって引き起こされることが予測されている。我々は中性子透過率の高いメソスケールセルを開発し、これを用いてKCuCl <sub>3</sub> の圧力下中性子非弾性散乱を行い、明瞭な磁気励起の観測に成功した。得られた磁気励起の分散関係の圧力依存性から磁気励起のソフト化が確認された。 我々磁場中の素励起が量子sine-Gordon模型で記述できる1次元反強磁性体をKCuGaF <sub>6</sub> の純良単結晶育成に成功した。我々はKCuGaF <sub>6</sub> のESR測定を3He温度で行い、量子sine-Gordon模型が予言するsoliton励起3次元のbreather励起、及びbreather間の遷移をすべて観測することに成功した。そしてこれらの素励起が定量的に量子sine-Gordon理論と一致することを示した。 我々は新たにS=1/2積目格子反強磁性体Rb <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> SnF <sub>12</sub> を合成し、その磁性を磁化測定で詳細に調べた。そしてRb <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> SnF <sub>12</sub> の基底状態が理論が予言するスピンギャップをもつスピント重項状態になることを実験的に初めて示した。			
粒子・格子ハイブリッド法による原子炉気液二相流直接シミュレーション法の開発	2005年度～2007年度	岡 芳明(OKA, Yoshiaki) 東京大学・大学院・工学系研究科・教授 (40011225)	Annular mist flow Boiling Water Reactor Direct simulation Droulet entrainment ratio Droulet phenomena of liquid film Gas-liquid two phase flow Onset of droplet entrainment Particle-mesh hybrid method ドライアウト ハイブリッド法 フラッピング 格子・粒子ハイブリッド法 格子法 機構論的シミュレーション 気液二	原子力学	基礎研究(A)	東京大学	27,430,000	液膜ドライアウト現象は沸騰型軽水炉の安全と設計上の重要課題である。その定量的な予測には液膜流量の解析が必要であり、実験相関式に依存しない汎用性のある手法が強く求められている。平成17年度はまず、気相の流れと液膜流れ、およびそれらの相互作用を解析できる格子・粒子ハイブリッド法を開発した。本手法の妥当性を確認するために気液対向流のFlooding現象を解析した。最も液膜高さは気相相対圧力勾配の増加に伴ってほぼ線形に増加しており、従来の知見を再現できた。また、Flooding発生条件に関するWallisの実験式と本研究の計算結果がほぼ一致した。 ドライアウト発生後に再付着する液滴による燃料棒の除熱も安全上重要である。平成18年度は液滴の加熱壁面への衝突を格子法で解析し、除熱量を計算した。熱伝導モデルと蒸発モデルの妥当性を動的・動的なモデルで確認した。複数の接触角およびウェーバー数の条件下で液滴の加熱面への衝突を解析した。まず蒸発を考慮しない条件で各種パラメータが除熱量に与える影響を調べた。次に蒸発を考慮して解析し、壁面温度が比較的低い条件では実験結果と同様の液滴形状と滞在時間が再現できた。 平成19年度は、液膜から液滴が分離する現象(エントレインメント)を解析できる格子・粒子ハイブリッド法を開発した。液相を粒子、気相を格子で表現し環状流を解析した。気液の速度差に起因する界面の不安定性によるエントレインメント現象が初めて確認された。この発生限界を既存の実験相関式と比較し、良い一致を得た。液滴発生率をいくつかの実験相関式と比較したが、定量的に良い一致は得られなかった。計算体系および粒子数が小さすぎることが原因と考えられ、今後の課題である。			
神経機能解析用光波断層画像計測に関する基礎研究	2005年度～2007年度	佐藤 学(SATO, Manabu) 山形大学・大学院・理工学研究科・教授 (50226007)	Full Feid-OCT Low Coherence Optical Hilbert Transform Quadrature Phase Rat Brain Video-Rate in situラット脳ビデオ交換 フルフィールドOCT 低コヒーレンス 光学的ヒルベルト変換 直交位相	医用生体工学・生体材料学	基礎研究(B)	山形大学	15,420,000	本研究では、提案する直交位相干渉フルフィールドOCT(QF FF OCT)を脳組織に用いてその活動部位を測定し、脳神経分野にこのQF FF OCTが有効であることを示すのが目的であった。しかし、脳組織の鉛直断面画像内での活動部位に明確に対応したOCT断面画像が得られず、最終目標達成には至らなかった。しかしながらin vivo Zin situにて脳組織内部の光散乱特性が異なる可能性を示すデータが得られた。これは、脳組織の活動・活性状態に関する情報を三次元空間分解能で得られる可能性を示唆していると考えられる。 QF FF OCTの光源としては深部まで届く波長1.3 μmの光を用いており、頭蓋骨除去の代わりに、厚さ130 μm程度に削った「窓」を用いて光を照射し、ラット脳組織の断面画像をin vivo in situで測定・比較した。In situでの測定は、安楽死直後の測定であり、測定領域は、縦横4mm×4mm深さ2.8mmである。測定した三次元断面画像データをスライスして得られるin vivo Zin situの深さ方向強度プロファイルと比較するとin vivoに対してin situでは深さ1.8mm(±2.3mm/超解像)の厚さ1.4倍ほどに明らかにならぬピークが見られた。 この強度プロファイルの違いを見極め、光学測定により、脳皮質から時間・空間に依存する新しい情報を引き出す研究は、今後の重要な課題と考えられる。			
異時相4次元MDCTによる肺局所血流量の定量評価コンピュータ支援診断システム構築	2005年度～2007年度	木戸 尚治(KIDO, Shoji) 山口大学・大学院・医学系研究科・教授 (90314814)	CAD COPD Different time phase Diffuse lung disease MDCT Pulmonary blood flow Pulmonary function auscultation sounds びまん性肺疾患 コンピュータ コンピュータ支援診断 多列検出器型CT 慢性閉塞性肺疾患 支援診断 異時相 肺塞栓 肺機能 肺聴診音 肺血流	医用システム	基礎研究(B)	山口大学	15,770,000	1.肺局所血流量解析:肺の血流異常を診断するために、造影・非造影のMDCT画像を用いた肺血管ペーサーの非剛体レジストレーションによるサブトラクションアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムの開発のために肺のボリュームデータから肺血管を末梢に至るまで詳細に自動抽出できるアルゴリズムの開発をおこなった。この血管抽出アルゴリズムはびまん性肺疾患の診断をおこなうためのCADアルゴリズムにも適用した。また、肺の局所血流量異常の代表的な疾患である、急性肺塞栓症を対象とした血栓検出のためのCADアルゴリズムも開発した。 2.肺呼吸機能解析:肺呼吸機能解析は肺局所血流量解析とともに肺機能解析において重要であり、慢性気管支炎や肺気腫などのCOPD(慢性閉塞性肺疾患)をターゲットとして気管支の抽出をおこなった。さらにCOPDの診断をおこなうために気管支の径の測定をおこなった。また、肺気腫の定量評価のために肺を薬ごとに分割するアルゴリズムの開発をおこなった。吸気と呼気のCTデータにおける肋骨や横隔膜の変位量を求めることにより肺の動きを定量化するとおこなった。 3.びまん性肺疾患解析:本研究においては、HRCT画像を用いた特異性間質性肺疾患の鑑別を目的としたCADアルゴリズムの構築を最初に試み、その研究成果を基礎として、次に3次元のボリュームデータを対象としたびまん性肺疾患のCADシステムの構築を試みた。そして最終的には肺全体のびまん性増強を種類の「パターン」に自動的に分類可能なシステムを開発した。 4.肺聴診音解析:肺聴診音の解析は、肺の機能解析においては非常に重要である。われわれは、ラ音と正常音に関して90%以上の識別率が保たれており、実用性が十分に高いと考えている。			



半屈曲性星型高分子の精緻特性解析ならびに相挙動と秩序構造の解明	2005年度 ～2007年度	吉崎 武尚(YOSHIZAKI, Takenao) 京都大学・工学研究科・教授 (90230705)	Fine Characterization MC Simulation MCシミュレーション Mean-Square Radius of Gyration Phase Behavior Poly(n-hexyl isocyanate) SMIflexible Polymer Star Polymer Steady-State Transport Property ポリ(n-ヘキシルイソシアナート) 半屈曲性高分子 定常輸送係数 平均二乗回半径 星型高分子 星形高分子 相挙動 精緻特性解析	高分子化学	基礎研究(B)	京都大学	15,870,000	本課題は、ポリ(n-ヘキシルイソシアナート)(PHIC)を用いた半屈曲性星型高分子の分子形態と集合体構造の解明を目的としている。研究期間に得られた成果は以下の通りである。 1.星型のみず鎖を用いた定常輸送係数理論の構築。線状のみず鎖に対する3本腕星型のみず鎖の固有粘度の比をKirwood-Riseman法を用いて数値計算した結果を用いてデータ解析し有用な解を得た(公表済) 2.動的分散法を用いた並進拡散係数の決定。本補助金でEDL動散Cwレーザーを購入しこれまで使用していたアルゴインレーザーから光源を変更した。まず(1)レーザー発生装置の筐体の固定、本補助金でEDL動散Cwレーザーを購入しこれまで使用していたアルゴインレーザーから光源を再現性の確認を行い、次いで半屈曲性分子であるポリ(ジメチルプロピルアミン)の高分子特性解析(表済)と並進拡散係数の決定(論文準備中)を行った。 3.3本腕星型PHICの合成。3官能タンハムを開始剤に用いるGoodson-Novakの方法で種々の分子量の3本腕星型PHICを合成した。本課題遂行のためには、各腕の分子量の均一性を確認する必要があり、腕の付け根のエステル結合を選択的に加水分解し、各腕の分子量を決定することを行ったが有効な選択的加水分解を見出すことができなかった。そこで先に各腕をリビング重合し、最後にカップリング反応を行って3本腕星型PHICを合成することを検討したが現時点では未だ有効なカップリング反応を見出していない。			
外部電場印加により相安定関係を逆転させた大型ランガサイト単結晶の成長法	2005年度 ～2007年度	宇田 聡(UDA, Satoshi) 東北大学・金属材料研究所・教授 (90361170)	Chemical potential Crystal Growth Crystal technology Electric double layer Electric field imposition Floating zone method Langasite Phase equilibria ランガサイト 化学ポテンシャル 浮遊帯溶融炉 浮遊溶融帯 相平衡 結晶工学 結晶成長 電場印加 電気工重層	応用物性・結晶工学	基礎研究(B)	東北大学	12,640,000	[研究の目的]外部電場印加を用いた相平衡関係の操作により、異相析出の無いコングリュエント状態でランガサイト(La <sub>3</sub> Ga <sub>5</sub> SiO <sub>14</sub> :LGS)のバルク単結晶を育成する技術の確立を目標とした。 [研究の成果] 1.外部電場印加により融液及び固相の化学ポテンシャルに静電エネルギー項が追加され、固液相平衡関係が新しい組成・温度条件のもとで成り立つ。これを利用して、非コングリュエント性のLGSをコングリュエント化することに成功した。なお、LGS近傍の組成で誘電率の値がLa-richに向かい上昇するところがこの変換の必要条件となる。 2.上記の非コングリュエント性LGSのコングリュエント化には、実験では、600V/cmの外部電場により実現されるが、解析の結果、実効電場として10 <sup>4</sup> ・10 <sup>5</sup> V/cmの電場が必要であり、この巨大電場は、融液と白金容器の境界や固液界面近傍に形成された5nmオーダーの電場二重層に存在すると考えられる。 3.外部電場印加機構を取り付けた浮遊帯溶融炉を開発し、600V/cmの電場印加下でLGS組成の融液から異相を含まずに10mm径のLGSの単結晶を直接育成することができた。 4.液相+211相(Y <sub>2</sub> BaCuO <sub>5</sub> )の包晶反応によるYBCO123相(YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>7-x</sub> )の成長ダイナミクスに対し、外部電場の及ぼす影響を検討した。 5.211の溶解活性化エネルギーの減少が見られ溶解速度が上昇した。電気的導体の溶液内には電場はほとんど存在せず、イオン性溶質の輸送の電場による影響は見られない。核形成においては、臨界エネルギーが増大し、7°Cの過冷却増大が観察された。一方、付着キネティクスの大きさには、あまり電場の影響は見られていない。			
メートル標準に準拠し光路差を周波数から直接測定するピコメートル干渉測長法の開発	2005年度 ～2007年度	明田川 正人(AKETAGAWA, Masato) 長岡技術科学大学・工学部・准教授 (10231854)	external cavity laser diode frequency interferometer lock-in detection meter definition null method phase modulation picometer トレーサビリティ ナノメートル システムメートル ピコメートル ピコメートル、メートル標準 ロックイン検出 位相変調 周波数 周波数可変レーザー 干渉計 超精密計測 零位法	生産工学・加工工学	基礎研究(B)	長岡技術科学大学	15,810,000	メートル標準は光速度を介して周波数から長さ決定できることを示している。本研究では、この事を拠り所とし、周波数変化から長さ(変位)の精密計測を試みた。 電気光学素子(EOM)により位相変調を掛けた光を干渉計に導入し、干渉計出力光の光強度信号を、変調信号とロックイン検出すると、光路差が波長の整数倍のときに、ロックイン出力がゼロクロスする。従って零位法を用いて、光路差が波長の整数倍時の長さピコメートルオーダーで決定可能である。これが位相変調ホモダイン干渉計であるが、この光源として半導体周波数可変レーザー(ECLD)を用いると、光路差変化(すなわち変位)を、零位法と周波数測定により決定できる。ECLDの周波数変化は、周波数安定化レーザーとのピーン周波数で決定可能である。 この原理を用いて次の実験を行った。 (1)商用ヘテロダイン干渉計の位相補間誤差測定。商用ヘテロダイン干渉計の基本測定単位は、光源であるHeNeレーザーの波長であるが、位相補間によりサブナノメートル分解能まで計測可能なものが販売されている。提案する手法と商用ヘテロダイン干渉計を同時に基準並進ステージに組み込み双方を比較した。この結果、商用ヘテロダイン干渉計は波長の周りで変動する位相補間誤差があることが判った。 (2)光路差の自由スケール領域(FSO)の直接測定。台のECLDを単独干渉計(隣接ゼロクロス点)にロックし、光路差のFSOを直接測定した。 (3)空気屈折率変動の周波数変化による距離構造材料として低熱膨張ガラスセラミクスを用いた干渉計を製作し、空気屈折率変動をECLDの周波数変化から求めた。温度・湿度・圧力・二酸化炭素濃度から計算する理論式(Giddon)と良く一致した。			
低温環境適合型高性能PEM燃料電池のための気液・熱・電流移動分布の均一化研究	2005年度 ～2007年度	近久 武美(CHIKAHISA, Takemi) 北海道大学・大学院・工学研究科・教授 (00155300)	Freezing Fuel Cell Gas Diffusion Layer Observation PEFC Polymer Electric Membrane Two Phase Flow Water 二相流凍結 可視化 固体高分子 拡散層 燃料電池 生成水	熱工学	基礎研究(B)	北海道大学	14,980,000	セパレータ流路形状および拡散層(GDL)の空隙率や繊維構造等が電池性能に対して及ぼす影響について研究を行い、前年度においてガスが拡散層下層に滞り込むような現象仮説を提案した。今年度はこの仮説の検証を目的として、電池内の気体流動分布計測と電流密度分布計測を行った。その結果、GDL内をガスが流動する可能性は低い、触媒層近傍の凝縮水の排出には不安定な現象があり、これが上記仮説に類似した現象を生じさせているものと推察された。本現象は、凝縮水を適切に排出する手がかりを含んでおり、良好な電池性能を得るための知見を得た。 次に、低温起動特性を調べるとともに電池内の凍結現象を把握することを目的として、温度条件と起動特性に関する実験、ならびに凍結部の実態顕微鏡観察を行った。その結果、起動初期の電解質膜内への生成水逆拡散特性およびその後の凍結している現象を明らかにすることができた。また、困難な電池内の水蒸気挙動を可視化する技術を確認することができた。さらに本手法を用いて、凍結が主として触媒層とMPL層の間で生じており、またPLDに比べてチャネルにより多くの水層が形成されていることが示唆された。一方、格子ボルツマン法をベースとして、凝縮水挙動の数値シミュレーション法の開発を行い、壁面特性や多孔質構造が凝縮水の排出に及ぼす影響を解析した。 以上、GDL内の気液移動特性および低温起動時の凍結挙動に関する新知見を得たほか、水蒸気移動特性および気液挙動の数値シミュレーション技術を開発させることができた。			
気液相変化熱伝達過程におけるマイクロ液膜形成機構とその特性解明	2005年度 ～2007年度	宇高 義郎(UTAKA, Yoshio) 横浜国立大学・大学院・工学研究院・教授 (50114856)	boiling heat transfer laser extinction method micro-layer mini-channel nucleate boiling phase change heat transfer ミクロ液膜 ミニチャネル レーザー消光法 核沸騰 気液相変化 沸騰 熱伝達 熱電熱	熱工学	基礎研究(B)	横浜国立大学	15,910,000	気液相変化熱伝達過程における蒸気と液の相互干渉などに基づいて形成されるマイクロ液膜の厚さをもつ薄液膜の形成過程とその伝熱過程に焦点を当て非接触状態のまま薄液膜測定を行うことが可能な水の赤外線消光性質を利用するレーザー消光法を用いて、沸騰熱伝達過程において生成蒸気と伝熱面に形成されるマイクロ液膜の厚さ測定法を行い、マイクロ液膜の形成機構・変化特性をより一般的に理解するための研究を進めた。 はじめにミニチャネル沸騰系におけるマイクロ液膜特性測定実験をはじめに実施した。なおここでミニチャネルとは伝熱板間隔を狭めたプレート式蒸気発生器の蒸気発生体に入る間隙部を指しており間隙部寸法として0.15～1.0mmを用いた。その結果、主要な伝熱モードである薄液膜支配領域におけるマイクロ液膜の厚さ分布、厚さを決める支配因子等に関する検討を進め、狭隙間隔ミニチャネル系におけるマイクロ液膜構造を測定により明らかにした。さらにマイクロ液膜の存在期間における蒸発熱などのミニチャネル系の伝熱モデルを構築し、その熱伝達特性を解明した。 次にマイクロ液膜の厚さを水中測定用に適用することによる、沸騰伝熱の主要な素であるプレート沸騰系におけるマイクロ液膜特性測定実験のための主要な検討を実施した。 すなわち試験液体には、粘性が高(赤)赤消光性質が明らかなく水を用い、沸騰の主要因子と液膜厚さの関係を解明した。また従来から多くの研究で基礎として用いられている代表的なCooper-Levyの理論が不十分であることを示した。さらに比較的熱流束の孤立気泡域ではマイクロ液膜の熱伝達への寄与は大きくは比較的热流束の高い合体液膜域においては遷移沸騰領域においてはマイクロ液膜の寄与が大きいとの定性的説明が従来なされてきているが、その影響について定量的に検証した。それらの結果から、プレート沸騰の孤立気泡域ではマイクロ液膜蒸発の影響は15%程度まででありさらに熱流束の高い合体液膜域ではその影響が増大することを示した。			
気液相変化理論に基づくマイクロスケール乾燥技術開発	2005年度 ～2007年度	鶴田 隆治(TSURUTA, Takaharu) 九州工業大学・工学部・教授 (30172068)	DRYING FLUID DYNAMICS MICRO SCALE MICROWAVE VACUUM DRYING MOLECULAR DYNAMICS NANO PHASE CHANGE POROUS MEDIA THERMAL ENGINEERING ナノ・マイクロスケール マイクロ遠圧乾燥 三相界面 乾燥 凝縮係数 分子動力学 分子動力学シミュレーション 多孔質体 気液相変化 流体工学 濡れ性 熱工学	熱工学	基礎研究(B)	九州工業大学	16,130,000	被乾燥物を加熱昇温して蒸気乾燥機や逆に冷却する凍結乾燥機とは異なり、加熱や冷却のためのエネルギーを使わず、常温下で蒸発凝縮のみを供給する上で高効率な乾燥を可能とするマイクロ波蒸気乾燥機技術を開発し、その有効性を乾燥機内部に存在するマイクロチャネル内における気液相変化と水分輸送を考慮し、海産物の場合には気液界面抵抗が無視できチャネル内の粘性抵抗が支配的であることを明らかにした。一方、乾燥に依る固体面上の液膜についてのナノスケールの輸送現象を明らかにするために、アルゴ分子を用いた非平衡分子動力学シミュレーションによる解析を行ない、チャネル壁における付着水の濡れ挙動を検討した。この分子動力学解析により、固体面上の微細構造によって液体の濡れ挙動が変化し、接触角の变化によって液膜の蒸発挙動に変化が生じること、および接触角と表面粗さとの関係を示す相関式が得られた。また、液膜厚さが分子直径の4～6倍程度となると、固体壁の影響が顕れ、蒸発速度は減少することを示した。さらに、滴状凝縮法によって微液膜の熱伝達率を測定し、その値から凝縮係数を評価することを行い、水の凝縮係数として0.5～0.6の値を得た。ただし、薄層温度センサーによる微小液膜の成長過程の直接測定を行えば、凝縮係数の値が0.7～1.0に上昇する可能性があることがわかった。マイクロ波による水への選択的エネルギー供給と減圧環境における蒸発温度の低下を特長として高品質、高速乾燥のための新たな提案(大気導入法、温度制御法)を行い、乾燥速度を温風乾燥に比べて約1/25に短縮することに成功した。			



ナノ構造組み込み型III族窒化物蛍光体粒子の開発	2005年度～2007年度	原 和彦(HARA, Kazuhiko) 群馬大学・電子工学研究所・教授 (80202266)	Aluminum nitride Cathodoluminescence Fine crystalline particle Gallium nitride Hetero-structure Photoluminescence Vapor phase synthesis X線回折 カソードルミネッセンス フォトルミネッセンス ヘテロ構造粒子 微結晶粒子 気相合成 窒化アルミニウム 窒化ガリウム	電気・電気材料工学	基礎研究(B)	東京工業大学・静岡岡大学	12,960,000	提案するナノ構造埋込型蛍光体粒子の形成に必要な気相合成の各プロセスについて、以下にまとめる成果を得た。 1.AINコア粒子の生成:加熱・蒸発させたAlと窒素原料のN <sub>2</sub> ガスを1100-1250°Cで反応させてAIN微結晶粒子の合成を行った。1100°Cの反応では、得られた試料はAIN粒子と金属Alの混合物であったが、1150°C以上にすることにより反応が促進され、AIN単一の試料を得ることができた。結晶性についても、反応温度の上昇に伴い向上し、1200°Cのとき最も良好なAIN粒子が得られることを明らかにした。 2.AINコア粒子周囲へのGaN層の形成:GaCl <sub>3</sub> ・NH <sub>3</sub> を原料として用いる第2段のプロセスにより、1で生成したAIN粒子表面へへのGaN層の堆積を行った。AINコア粒子の成長速度が昨年までの1/100の場合には、得られた試料の発光測定では、GaNのバンド端発光に加えて欠陥に起因すると考えられる青色発光が強く、結晶性の観点から最適温度1200°CでAINコア粒子を生成することにより、バンド端が支配的な発光を示すまでに特性を改善することができた。 3.GaN粒子周囲へのAIN層の被覆:最適化された条件で作製したGaN粒子表面へ、AlCl <sub>3</sub> とNH <sub>3</sub> を原料として用いる第3段のプロセスにより、AIN層の形成を試みた。作製したAIN被覆粒子は、GaNのバンド端発光が支配的であり、その強度は未被覆試料の約1.2倍まで増加した。またスペクトル形状から、AINの被覆により、不純物または欠陥に起因する発光が減少する傾向もみられた。これらの特性は、AIN被覆層が励起キャリアに対して、表面障壁および表面欠陥のランベーションの効果をもちつことを示唆している。一方、AIN被覆時に自発核生成が顕著であることから、この抑制が重要な課題であることも明らかになった。
数十ギガパスカル領域の超高温高圧下での新しい準結晶の探索と構造・電子物性の解明	2005年度～2007年度	長谷川 正(HASEGAWA, Masashi) 名古屋大学・大学院・工学研究科・教授 (20218457)	Complex compound Diamond Anvil Cell Electronic property Phase stability Phase transition Quasicrystal+approximant Super high pressure and temperature atomic arrangement ダイヤモンドアンビルセル ダイヤモンドアンビルセル(DAC) 原子配列 準結晶・近似結晶 相安定性 回転転移 複雑構造物質 超高温高圧 電子物性	金属物性	基礎研究(B)	東北大学 名古屋大学	16,360,000	本研究では、超高温高圧発生システムとしてダイヤモンドアンビルセルとレーザー加熱を組み合わせたシステム(LASER-DACシステム)を用いた。まずこれまで使用してきたLASER-DACシステムを改良したさらに、従来のLASER-DACシステムでは赤外レーザーとしてYAGあるいはYLFレーザーを用いてきたが、本研究ではこれらのレーザーとほぼ同じ波長でありながら機動性に勝り、より新準結晶探索に適しているファイバーレーザーを用いたLASER-DACシステムを開発することに成功し、このシステムの合成プロセス特性を調べた。さらに、放射光施設に設置されているYAG-LASER-DACにファイバーレーザーを組み込み、ファイバーレーザー-LASER-DACを用いた超高温高圧放射光線回折システムを構築し、その場測定に成功した。 超高温高圧で新しい準結晶を探索するには高価な至右用の天然ダイヤモンドアンビルは不利となるため、最近開発されたナノ多結晶ダイヤモンドアンビルを用いて超高温高圧材料作製を試みた。その結果従来のYAG-LASER-DACよりも、上述で新しく開発したファイバーレーザー-DACのほうが十分な加熱には適していることが明らかとなった。しかしながら、超高温高圧下でのその場X線回折実験の結果アンビルであるダイヤモンドからの回折ピークが非常に強いという問題も明らかになった。 開発したファイバーレーザー-LASER-DAC超高温高圧発生装置システムを用いて、新しい準結晶と関連物質の作製を試みた。新しい構造を有した物質が創製された可能性がある結果を得たが現在のところ粉末X線回折測定および透過型電子顕微鏡観察と相を決定するには至っていない。準結晶関連物質の相安定性をクラスターレベルで解明し、新しい準結晶を創製するための知見を得た。さらに、準結晶及び複雑構造物質の放射光高圧その場高精度粉末X線回折測定によって、高圧下での相安定性と圧縮特性および構造の高圧誘起欠陥について解析・解明した。
ナノ組織の不安定性を利用した超耐熱合金の組織制御	2005年度～2007年度	土井 稔(IDOJ, Minoru) 名古屋工業大学・工学研究科・教授 (60135308)	elasticity effect heat resisting alloy microstructure phase transformation precipitation structural materials 弾性効果 材料組織 析出 構造材料 相変態 相変態 耐熱合金	構造・機能材料	基礎研究(B)	名古屋工業大学	11,740,000	1.耐熱合金の基本的な組織であるγ+γ'(Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> 相組織の形成過程で生じる相分離の挙動は、同じ合金系でも、合金組成や熱処理条件の違いにより異なる。たとえばNi-Al-Ti合金では次の3種類がある。 (1)γ'面溶体相が相分離を起こし、γ中にγ'析出相が現れる(γ→γ'析出)。 (2)面溶体金属間化合物が相分離を起こし、γ中にγ'析出相が現れる(γ→γ'析出)。 (3)面溶体相が相分離で析出したγ'析出相に相分離が生じ、γ中にγ'析出相が現れる(γ→γ'析出)。 2.析出相が相分離を起こしマトリックス相と同じ相が析出するという現象は、面心立方構造だけではなく体心立方構造を基本とするA2+D <sub>3</sub> 相組織でも生じる(A2→A2/D <sub>3</sub> 、A2→D <sub>3</sub> /A <sub>2</sub> )。 3.相分離組織の相分離(析出相の相分離)が生じると、組織の粗大化は事実上進行しない。 4.Ni-V基合金を対象として、耐熱合金の組織を構成する相の基本となる立方晶Al(γ)およびL(β <sub>2</sub> γ')と、正方晶D <sub>3</sub> (2γ')の各相について、2相組織や3相組織の形成過程を実験的に調べ、実験状態図を描いた。 5.耐熱合金の基本組織であるNi-Al-Ti合金のγ+γ'組織の3次元立体観察にTEMトモグラフィの手法を適用し、この手法が、組織をあるがままに観察する実験的手法として有効であることを示した。 6.相分離組織の相分離(析出相の相分離)という本研究で明らかとなった現象は、相分離組織が有する準安定性ないし非平衡性を積極的に利用した組織制御の新しい考え方を示唆するものである。このような考え方は、単に耐熱合金の分野だけでなく、析出強化を利用した合金に対しても当てはまるものである。
フェムト秒レーザー照射による金属ガラス合成	2005年度～2007年度	小林 勉二郎(KOBAYASHI, Kojiro) 福井工業大学・工学部・教授 (70026277)	amorphous structure femtosecond laser high-pressure phase metallic glass non-equilibrium material shocked high-pressure ultra rapidly cooling アモルファス フェムト秒レーザー 衝撃波 衝撃超高温 超急冷 超高温 金属ガラス 非平衡材料 非平衡物質 高圧相	構造・機能材料	基礎研究(B)	大阪大学 福井工業大学	16,280,000	金属ガラスは、その3次元形状、ガラス構造、金属成分に基づく様々な新規特性を利用して、超高強度材料、超弾性伸び材料、超ソフト磁性材料、低減音響材料などへの応用が考えられており、新規金属材料として発展する大きな可能性を持っている。フェムト秒レーザーを金属に照射すると、格子系への局所的な影響により金属内部に衝撃波が発生する。これはバルス幅がナノ秒以上の従来のレーザーでは起こらない現象である。この時発生した衝撃波の強度は200-300GPaに達する。また、レーザー加熱の影響によって生じた溶融層は急激に冷却し、その冷却速度は10 <sup>10</sup> ℃/30Kと極めて大きい。 本研究では、上述の通り超急冷かつ超高温を同時に満たせるフェムト秒レーザー照射によって、金属ガラスを代表とする非平衡物質の創製を目的とした。具体的には、非平衡物質創製の為に2種類の効果を利用した。すなわち、超急冷効果を利用したアモルファス物質創製と、衝撃超高温を利用した高圧非平衡物質創製である。 結果として、下記の非平衡物質を創製することが出来た:γ-CuTi合金からCuTiアモルファス合金、α-Feから高圧相であるε-Fe、α-Tiから高圧相であるβ-Tiおよびω-Ti、高圧向性グラファイトから六方晶ダイヤモンド、ダイヤモンド構造Siから高圧相である単純六方構造Si。本研究結果によって、フェムト秒レーザーが非平衡物質創製するのに有効なツールであることが示された。非平衡物質には安定物質にはない機能を有することが期待でき、今後は創製した物質の特性評価が重要となる。また、フェムト秒レーザー駆動衝撃波の特性も調べられているので、その評価も重要となると考えられる。
中性子位相空間変換光学素子の開発	2005年度～2007年度	金子 純一(KANEKO, Junichi) 北海道大学・大学院・工学研究科・准教授 (90333624)	Doppler effect neutron optical device quartz single crystal transfer of phase space vibration ドップラー効果 中性子位相空間変換 光学素子 単結晶 振動 水晶	原子力学	基礎研究(B)	北海道大学	13,360,000	振動する結晶からの中性子回折を二次元中性子検出器と飛行時間法を併用することで、中性子回折角度ならびに強度変化を測定した。測定では3mm×120mm×14mmのXカット水晶を使用した。水晶はX軸方向に分極を起こすため、この軸に垂直なXカットの歪みも大きい。結晶上に製作したA電極に対して40Vの高電圧を印加し、22.7Hzの固有振動モードで振動させた。顕微鏡で観察した最大変位量は約9μmであった。中性子回折実験はJRM-4M-SiCにおいて4.7Åの中性子線を使用して行った。測定装置として低圧分極光電子増倍管と2次元検出器を組み合わせて使用した。結晶を22.7Hz、44μmの周波数で振動させて中性子回折像を測定した。その結果、中性子強度分布が時間とともに変化する事を観測した。中性子強度分布は大きく2つの成分からなることが分かった。4.7Åの中性子線の速度は約840m/sであり、半周期に当たる22μsで1.8cm進む。検出器を1.8cmもの位置から別の位置がずれることを確認し、回折中性子が結晶の振動周波数と一致した周期性を持つことを確認した。 測定データに対して、二重ガウスフィッティングを行い、ピーク位置ならびに中性子強度変化の時間変化を導いた上で、理論モデルと比較した。ドップラー効果による変位量が変形による変位量より大きい場合、回折中性子強度の時間変化は正弦関数を折り返した形である。測定した中性子ピークはこの形になることを確認した。位置の時間変化に関しては、一つのピークに関しては理論計算と概ね一致したが、他方は予測と異なる結果となった。
サイトカニンによる植物の細胞周期M期進行の制御に関する研究	2005年度～2007年度	町田 泰則(MACHIDA, Yasunori) 名古屋大学・大学院・理学研究科・教授 (80179596)	Cell Cycle M phase MAP Kinase MAPキナーゼ M期 Plant Cell myb Transcriptome Gene myb転写因子 myb転写遺伝子 植物細胞 細胞周期	植物生理・分子	基礎研究(B)	名古屋大学	15,780,000	本研究の目的は、タバコ細胞のM期の進行を、サイトカニンが制御している可能性を検討することである。具体的には、M期遺伝子の転写に必要なNtmybの発現(G2/M境界からM期前期)、CDK(サイクリン依存性キナーゼ)の活性化(G2/M境界)、サイクリンBの分解とCDKの不活性化(中期)、NACK/MAPKK複合体形成とMAPキナーゼの活性化(中期から後期への進行)をとりあげ、どれがサイトカニンの作用点であるかを解明することであった。のために、サイトカニンフリー培養の影響を検討した。また、サイトカニンを失活させるサイトカニンオキナーゼ遺伝子を導入した形質転換Y-2細胞を作り、その効果を調べた。しかし、サイトカニンオキナーゼを発現させた細胞周期の進行には変化がなかった。しかし、シロイヌナズナで発現させた、G2/M期遺伝子の低下が見られた(伊藤)。また、同調化したBY-2細胞をホルモンフリー増地、trans-zeatin添加増地で培養し、細胞周期の進行を検討したが、差は見られなかった。ODKの活性も調べたが、ホルモンの有なしに関わらず、同様の活性パターンを示した。しかし、ホルモンフリーで培養すると、MAPキナーゼの活性化因子であるNACK1タンパク質が、2倍以上蓄積していることがわかった(伊田)。これらの予期せぬ結果の意味は今後の課題である。このように、本研究ではサイトカニンの明確な作用点を見いだすことはできなかったが、M期の進行に関して以下のような知見が得られた。(1)M期の中期には、CDKがNACK1/MAPKKをリン酸化し、両分子の活性を抑制している。中期を過ぎると膜リン酸化が起こり、細胞分裂が進行する。(2)シロイヌナズナのM期特異的な転写を担っている正と負のMYB因子を同時に、未同定の因子の存在を見つけた。

病態モデルマウスを利用する血液悪性疾患の進展メカニズムの解明	2005年度 ～2007年度	原田 英根(HARADA, Mine) 九州大学・大学院・医学研究院・共同研究員 (00119521)	accelerated phase chronic myelocytic leukemia human T cell leukemia myelofibrosis transgenic mouse トランスジェニックマウス 免疫不全マウス 原発性骨髄線維症 急性転化慢性骨髄性白血病 成人T細胞性白血病 骨髄線維症	血液内科学	基盤研究(B)	九州大学	16,440,000	原発性骨髄線維症患者末梢血中のCD34 <sup>+</sup> 細胞と、さらに純化したCD34 <sup>+</sup> CD38 <sup>-</sup> 細胞を、新生仔NOD-scid/IL2rg <sup>-/-</sup> マウスに移植を行ったところ、レシビントマウスの末梢血・骨髄において良好なhCD45 <sup>+</sup> 細胞の生着を認めることが出来た。病型の進行や経過はDonor細胞により異なっていたが、多くのレシビントマウスにおいて患者末梢血と同様に骨髄球系細胞優位の生着を認めた。また、原発性骨髄線維症のレシビントマウスは病気の進行に伴い貧血の傾向を認めた。原発性骨髄線維症のレシビントマウスを長期に渡って観察を行ったところ、骨髄中に線維芽細胞の増生と異常な形態の巨核球の集積がみられた。それらの線維芽細胞の由来を調べるため、骨髄をヒトおよびマウス染色体プロブを用いたdouble FISH・免疫染色を行ったところ、それらの線維芽細胞のヒト染色体陽性の線維芽細胞であった。すなわち、原発性骨髄線維症において増加している骨髄線維芽細胞はこれまでの報告とは異なり、CD34 <sup>+</sup> CD38 <sup>-</sup> 領域の悪性幹細胞より直接分化・増殖している可能性が示唆された。現在、幹細胞の自己増殖能を可認するため二次移植を行っている。
微小系の固相合金における相平衡とその支配因子	2005年度 ～2006年度	森 博太郎(MORI, Hiroto) 大阪大学・超高圧電子顕微鏡センター・教授 (10024366)	Electron Microscope Materials Property Nano-particle Phase Equilibrium ナノ粒子 相平衡 金属材料 電子顕微鏡	金属物性	基盤研究(A)	大阪大学	32,110,000	合金ナノ粒子における固相度増加とその支配因子を明らかにすることは合金ナノ粒子の相平衡を理解するために不可欠である。このような観点から、2固相共存状態にある合金ナノ粒子の両相における固相度変化をAu-Ge合金ナノ粒子を用いて定量的に調べた。その結果、直径20nmより大きい粒子においては2固相共存状態にある粒子の各相での固相度増加は少なかった。しかし、サイズ低下とともに固相度は次第に増加することや粒子の直径が数nmまで小さくなると2相共存状態のかわりにアモルファス相が形成されることが確認された。また、粒子サイズ低下に伴う固相度増加の傾向はAu固相体の方がGe固相体に対して大きいことが確認された。次にこうした相互固相度の増大について理論的な検討を加えた。ナノ粒子においてはデバイ温度がバルクに比べて10~30%も低下することに着目して、ナノ粒子における弾性定数の低下がどの程度固相度増大に影響するかを調べた。具体的には、正則固相近似による自由エネルギー計算を行ない、相互作用パラメータ中に弾性エネルギーと一緒に固する項を入れた。この計算では、弾性定数がバルクに比べて1/2に減少する範囲内では追跡した。その結果こうした弾性定数の低下にもない、自由エネルギー組成曲線のエンタルピー由来分は大きく減少し、従って共通接線と与えられる固相度は顕著に増大することがわかった。計算結果は、この増大分の程度は温度にもよるが、実験と一致して数10%のほりうことを示している。以上より、微小系の固相合金における相平衡の支配因子として、弾性定数の減少が重要な役割を果たすことがわかった。
高分子網目をマトリックスとしたバイオミネラルゲルの創製に関する研究	2005年度 ～2006年度	岩坪 隆(WATSUBO, Takashi) 独立行政法人産業技術総合研究所・ナノテクノロジー研究部門・主任研究員 (30350539)	biomineralization cartilage hydrogen bond hydroxyapatite hyper complex gel inorganic solid solution organic phase transition skeleton バイオミネラルゼーション ヒドロキシアパタイト 有機無機固溶体 水素結合 相転移 超分子ゲル 軟骨 骨格 高分子マトリックス	高分子・繊維材料	基盤研究(B)	独立行政法人産業技術総合研究所	10,200,000	ポリアクリル酸(PAA)を含む塩溶液中に浸漬されたポリビニルアルコール(PVA)とPAAを架橋させたゲル内部にヒドロキシアパタイト(HAP)を形成する実験を行った。本方法により当該ゲル内部に隙間無くHAPを充填することが可能であり、ゲル外部にはHAPは形成されなかった。また当該塩溶液はHAPに關して不飽和であることが種結晶の成長実験から判明した。ゲル内部全域にHAPが形成されるまでの途中段階ではHAPが充填された固体状領域とHAPが形成されていないゲル状領域が共存しており、ゲル状領域の減少に伴い固体状領域が増加してやがて全領域が固体状態(平衡状態)となった。塩溶液の濃度を変化させたところ、或る塩濃度以下では平衡状態はゲル状態であり、或る濃度以上では平衡状態が固体状態となった。 上記知見と線粉末分析、ICP(Inductively Coupled Plasma atomic emission spectroscopy)、EDAX(Energy Dispersive Analysis of X-ray)による分析結果から以下のよう実験結果を説明した。ゲル状領域はPVA/PAAゲルにCa <sup>2+</sup> 、HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> がイオン結合と水素結合により吸着している分相ゲルである。固体状領域はPVA/PAA網目とHAPの固溶体である。それら超分子ゲルと有機無機固溶体は相転移(開放系の)の関係で結ばれる。さらにこの超分子ゲルは軟骨の基本構造を与えるものであり、有機無機固溶体は骨格の基本構造を表している。即ち軟骨が開放系の相転移により骨格となる。 このメカニズムはCaCO <sub>3</sub> 骨格やSiO <sub>2</sub> 骨格の形成にも適用される。いずれの場合にも骨格は軟骨の開放系相転移によって形成されると結論できる。
半導体擬位相整合波長変換素子を用いた超小型赤外線光源の開発	2005年度 ～2006年度	近藤 高志(KONDO, Takashi) 東京大学・大学院工学系研究科・助教 (60205557)	Compound Semiconductor Difference-Frequency Generation Infrared Light Source Microchip Laser Molecular Beam Epitaxy Nonlinear Optics Optical Parametric Effect Quasi Phase Matching マイクロチップレーザー 光パラメトリック効果 分子線エピタキシー 化合物半導体 差周波数発生 差周波発生 擬位相整合 赤外線光源 非線形光学	応用光学 量子工学	基盤研究(B)	東京大学	15,200,000	1. GaAs/Ge/GaAs(100)副格子交換エピタキシー法に基づくAlGaAs系調波器型QPMデバイスの作製プロセスの最適化をおこなった。伝播損失の低減を阻んでいる段差がGa原子の異方性拡散に起因するものであることをあらかじめ、成長温度を下げることによって表面拡散を抑制し、再成長時の平坦性を確保することができることを見出した。 2. 1 μm帯高出力レーザーによる2光子吸収に起因する短面破壊を回避できるAlGaP系QPMデバイスを作製するために必要なGaPの副格子交換エピタキシーの実現に成功した。これは、Si中間層上のGaPエピタキシャル膜中のAPB自己消滅にサポートされているものである。 3. 高屈折率差AlGaAs導波路における波長変換の高効率化について初めて理論的な検討をおこなった。その結果、基本波長1.5 μmでのSHG規格化変換効率にして40,000%/W/cm <sup>2</sup> にも及ぶ高効率波長変換が可能であることがあきらかとなった。 4. 半導体結晶の方位を周期的に反転90° 回転させるのではなく、光の伝播方向を周期的に90° 曲げることによって同様にQPMが達成するという新規QPM法を新たに提案した。 5. 周知特性反転CaOの作成法について検討をおこなうとともに、GaNの極性判定法について種々検討を加えた。また、GaNとSiCについて、いずれも高品質単結晶資料を用いてその非線形光学特性に関する詳細な評価をおこなった。 6. Yb : YAGレーザーの高出力化に取り組み、単結晶Yb : YAGとセラミックYAGのハイブリッド系エッジ励起レーザーで300WのCW増幅を実現した。また、レーザーキャビティ構成を変更することで横モード特性を大幅に改善し、M <sup>2</sup> =17(CW)レーザー出力230W時)を達成した。
液滴内屈折を考慮した潜熱蓄熱スラリの光学的凝固度計測	2005年度 ～2006年度	工藤 一彦(KUDO, Kazuhiko) 北海道大学・大学院工学研究科・教授 (40142690)	Monte Carlo method measurement of solidification ratio palaphine droplet phase change slurry radiative transmittance in droplets reflectance transmittance パラフィン微粒子 モンテカルロ法 反射率 固化率測定 潜熱蓄熱スラリー 粒子群ふく射透過 透過率	熱工学	基盤研究(B)	北海道大学	12,300,000	本研究では、パラフィンを界面活性剤により水中に微粒子として多数懸濁させた潜熱蓄熱スラリー(PCM媒体)を対象とし、「潜熱蓄熱スラリー中のパラフィン微粒子の固化率を光学的手段を用いて定量的に計測する手法を確立すること」を目的としている。 研究期間中に、粒径分布を有し、光学特性の異なる粒子が混在するパラフィン微粒子を懸濁したスラリー層に、670nmのレーザー光を当てた時の、層の透過率と反射率を求める、モンテカルロ法を用いた、解析手法の開発と、このようなスラリー層のレーザー透過・反射特性の測定実験を行い、当該解析手法の開発と並行して、これに用いるための、実験結果を説明できる粒子形状モデルを確立した。この結果、以下の結論が得られた。 1. 本解析手法による粒子充填層の透過・反射特性解析結果は、他の文献値と10%以内の精度で一致し、解析手法の検証がなされた。 2. パラフィン固化率増加に伴う透過光強度減少および反射光強度増加は、固化に伴う微粒子表面の反射特性の変化が大きく関与していることが示された。 3. 実際の実験で固化に伴い粒子表面にくぼみができることから、くぼみをつけた粒子の反射特性モデルを作成し、実験結果と一致する反射・透過特性を得ることができた。 以上、本研究で開発した解析手法と粒子モデルを使用することにより、パラフィン微粒子懸濁スラリー層でのレーザー光の透過率と反射率計測結果から、パラフィン微粒子の固化率を定量的に計測することが可能となった。
高遮蔽性コーティング技術駆使した実用酸化チタン金属伝熱面の開発	2005年度 ～2006年度	高田 保之(TAKATA, Yasuyuki) 九州大学・大学院工学研究院・教授 (70171444)	Heat Exchanger Heat Transfer Enhancement Phase Change Superhydrophobicity Titanium Dioxide 伝熱促進 凝縮 凝結交換器 超親水 酸化チタン	熱工学	基盤研究(B)	九州大学	15,600,000	光触媒の一種である酸化チタン(TiO <sub>2</sub> )は、紫外線による光分解反応で環境浄化を行なう有用な物質として、最近非常に注目を浴びている物質である。本研究では、溶剤により金属表面に酸化チタンのコーティングを実施し、面積、高耐久性の酸化チタン被覆伝熱面の開発を試みた。具体的には溶剤によるコーティングで作成した表面を用いて、以下に示す4種の実験を行った。 1) プール沸騰実験では、超親水性伝熱面における熱伝達係数と限界熱流束が通常面より高い値を示した。2) 流下液膜式蒸発実験では、伝熱面を超親水性にすることで熱伝達率を最大40倍に増大させることができた。3) 浸漬冷却(焼き入れ)実験では、超親水性のサンプルでは、膜蒸騰から核沸騰への遷移が高温で生じ、結果として冷却時間が大幅に短縮された。4) 液滴の蒸発実験では超親水性伝熱面の場合は低温で蒸発時間が大幅に短縮された。これは原因が不明であった。 プール沸騰実験 溶射被覆表面を用いてプール沸騰実験を行った。比較のためにスリットした伝熱面 鏡面仕上げた伝熱面を用いた。 - 限界熱流束は、鏡面仕上げ面に比べ溶射面No.2(Si-01)は1.5倍高くなっているが、熱流束東域では、熱伝達係数は低下している。 - 高熱流束域では、溶射被覆の厚さが大きく影響する。 流下液膜蒸発実験 流体による直接加熱の実験1.実験2.および電気ヒータによる間接加熱の実験3において、溶射管、スリット管、鏡面仕上げ管を用いた実験より次のことがわかった。 - 実験1(低温領域)では、溶射管がもっとも熱伝達が良好である。 - 実験2(高温領域)では、溶射被覆の厚さが伝熱に大きく影響することがわかった。 - 実験3(高温領域)より被覆表面の構造が伝熱に大きく影響することがわかった。
重イオンがん治療用超小型直接プラズマ射線加速器の研究	2005年度 ～2006年度	飯野 俊幸(HATTORI, Toshiyuki) 東京工業大学・原子核工学研究部・教授 (50134648)	APF収束 Alternating Phase Focusing Method Direct Plasma Injection Scheme Heavy Ion Beam Heavy Ion Source Laser Ion Source Linear Accelerator Particle Cancer Therapy Proton Beam がん治療 がん粒子線治療 レーザーイオン源 直接プラズマ入射法 線形加速器 重イオンビーム 重イオン源 陽子ビーム	放射線物理学	基盤研究(B)	東京工業大学	15,300,000	既存の粒子線がん治療装置は、20世紀に開発された加速器技術により建設されて利用に供されている。そのため装置全体が大規模かつ複雑化しているのが現状である。2000年代初めに開発された最新の加速器技術である直接プラズマ入射法(Direct Plasma Injection Scheme)とドリフトチューブ線形加速器におけるAPF(Alternating Phase Focusing)法を積極的にがん治療装置に取り入れ、その入射線形加速器への利用を試みた。直接プラズマ入射レーザーイオン源については、気体と固体をターゲットとした場合の開発研究をおこなった。YAGレーザーとクワイアオーターの組み合わせにより良好な結果が得られたため、各種の国際会議で報告した。また、既存の2MeV/40 MeV電子加速試験線AFPIH(放射線治療用)の超小型直接プラズマ入射法による実験を試みた。動向計算を詳細にシミュレーションを高くするに必要となるパラメータを必要とすることが分かったが、予算の関係で改訂にとどめた。直接プラズマ入射法の利用によって入射エネルギーが低い場合APF+H収束による大強度加速では大きなアクセラントスを期待出来なことを明らかにした。その改善策として、低エネルギー領域での入射加速線型RFQ型と中エネルギー領域での加速に優れたAPF収束ドリフトチューブ型2つの加速構造を1台のIH(Interdigital H)空間に挿入する新しい線形加速器を考案した。この複合加速構造型単一IH空間線形加速器について、各種の国際ジャーナル誌および国際会議で報告した。

<p>多重光機能システムと次世代フォトニック信号処理への応用</p>	<p>2005年度～2008年度 小館 香穂子(KODATE, Kashiko) 日本女子大学・理学部・教授 (20060668)</p>	<p>BER評価 Binary Phase Shift Keying符号 OSS VBS VPHQリリズム スペクトル信号処理 ビットエラーレート フォトニックネットワーク フォトニック信号処理 マルチポートOSS マルチポート光波シミュレーション 位相符号 位相符号・復号化 光コム 光コム生成器 光ラベルスイッチング 光機能システム 光符号・復号化 可変波長セレクトシステム 多波長ラベル信号 多波長光符号ラベル 多重光符号ラベル 多重光符号ラベル生成 多重光機能システム 多重光機能デバイス 導波路型光波シミュレーション</p>	<p>特定領域研究</p>	<p>日本女子大学</p>	<p>65,500,000</p>	<p>本研究では、平成19年度までに得られた多重光機能システムと次世代フォトニック信号処理への応用に関する研究成果をふまえて、導波路型光波シミュレーション(Optical Spectrum Synthesizer : OSS)・自由空間可変スペクトルシミュレータ(Variable Bandwidth Spectrum Shaper)を用いたスペクトル領域における位相制御技術の展開と超高速フォトニックネットワークにおける実用システムへの適用に関する検討を行った。</p>	
<p>極低温・超高压発生装置の開発と強相関物質における精密物性測定の研究</p>	<p>2004年度～2007年度 上床 英也(UWATOKO, Yoshia) 東京大学・物性研究所・准教授 (40213524)</p>	<p>Cubic Anvil Cell Diamond Anvil Cell Heavy Fermion High Pressure Apparatus Piston Cylinder Cell Pressure Induced Phase Transition Strong Correlated System Superconductor キュービックアンビルセル ダイアモンドアンビルセル ピストンシリンダーセル 圧力効果 圧力誘起相転移 圧力誘起超伝導 強相関 超伝導 超高压 重い電子 重い電子系 高压力</p>	<p>物性2</p>	<p>基盤研究(A)</p>	<p>東京大学</p>	<p>47,710,000</p>	<p>高压を用いた低温物性研究では、圧力を物理パラメータとして、種々の低温物性測定が行われ、圧力誘起の超伝導、磁性秩序、金属-絶縁体転移などの圧力誘起相転移現象の起源の解明を主目的としている。これまでに多くの研究成果が報告されているが、その発生起源についてはあまり明らかとなっていない。これは、これまで、静水圧性の良い測定があまり行われず再現性の良い報告があまりなされていないことと起因している。これを克服するためには、以下に静水圧性の良い高压環境を実現するかにかかっている。 本研究では、10GPa程度の圧力範囲で高圧下での精密良い物性測定を目指し、圧力発生装置の開発、その装置を用いた精密物性測定法の開発および新しい圧力誘起相転移物質の探索を行った。その結果、超小型ダイアモンドアンビルセル圧力発生装置(約φ4mm)を開発し、静水圧下での40kbar電子電気抵抗測定を14GPaまで測定することに成功した。この装置と希釈冷凍機、20超電導磁石を用い、超1次元有機物質(TMTTF)2F<sub>2</sub>・G(T=Sn, As, P)の多重環境下での物性測定を行い、圧力誘起超伝導体の超伝導特性を明らかにした。また、この装置を用い6GPa程度までの高压下で磁化測定もできる。また、超小型のキュービックアンビル圧力発生装置を開発し、<sup>3</sup>He冷凍機と組み合わせ、8GPa、0.5Kまでの測定が可能となった。新しい圧力誘起相転移物質としては、圧力誘起超伝導体ZrTe<sub>3</sub>、圧力誘起超伝導体(TMTTF)<sub>2</sub>XF<sub>2</sub>(X=Sn,As)および圧力誘起磁性秩序物質、YbCo<sub>2</sub>Zn<sub>2</sub>・C<sub>20</sub>を発見した。これらの物質について、詳細な圧力相図を完成し、それぞれの相転移の起源を明らかにした。</p>
<p>メゾスケールに制限した高分子混合系への光誘起階層構造の計測</p>	<p>2004年度～2006年度 宮田 貴章(GUJ, Tran-Cong-Miyata) 京都工芸繊維大学・工学部・教授 (50189827)</p>	<p>Computer-Assisted Irradiation(CAI)法 Hierarchical structures Laser-scanning confocal microscope Mach-Zehnder Interferometry Mach-Zehnder干渉計 Multicomponent Polymers Phase separation Photopolymerization and photocross-link Reaction-induced elastic strain Re</p>	<p>特定領域研究</p>	<p>京都工芸繊維大学</p>	<p>22,900,000</p>	<p>本プロジェクトは、メゾスケールにおける高分子の凝集構造を光反応で発見・制御し一連の研究である。化学反応のみでは、オングストローム(Å)の構造までしか制御できないが、化学反応を臨界現象と結合(カップリング)させると、化学反応の効果は長距離に変わり、高分子のメゾスケールにおける凝集構造を発生・制御できる。本特定領域研究助成により、以下に述べる研究成果が得られた。 1) 新しい計測法の開発：バルク状の高分子における反応誘起弾性ひずみを光照射下でin situ観測するためにMach-Zehnder干渉計を設計して、この弾性ひずみの遅延過程を観測・解析した。 2) コンピュータ支援光照射(CAI)法の開発：コンピュータを用い、2次元光パターンをデザインして、デジタルプロジェクタを通して、顕微鏡下に設置された試料を照射して、非一様な条件下で引き起こした高分子混合系の相分離をin situ観察・計測を行った。 3) 高分子の階層構造の設計・制御：光照射で二成分高分子混合系の相分離を引き起こすには、混合系をその相図上において光で移動させることに対応する。光反応のこの利点を利用して、光照射過程にON/OFFを導入して「相分離構造の中の相分離」を引き起こすことができ、数十ミクロンと数ミクロンの相分離の構造を同一の混合系に実現することができた。また、その形成動力学についても明らかにした。その形成過程のモニタリングを有する高分子材料の設計：相分離によってできた構造の周期は過冷却度に依存することに注目して、上記したコンピュータ支援光照射(CAI)法により、固体高分子中に様々な凝集構造や傾斜構造をもたらし、その構造・物性の相関関係を明らかにした。</p>	
<p>希土類磁性における四極子・八極子相互作用の実験的検証</p>	<p>2004年度～2006年度 小野寺 秀也(ONODERA, Hideyo) 東北大学・大学院理学研究科・教授 (50005972)</p>	<p>Antiferro-octupolar Order Antiferromagnetic Order Antiferroquadrupolar Order DyB<sub>2</sub>C<sub>2</sub> Magnetic Phase Diagram Magnetic Phase Transition Magnetic Structure Orbital Order TbB<sub>2</sub>C<sub>2</sub> Van Vleck Magnetic Transition ヴァンフレック転移 八極子相互作用 反強八極子秩序 反強四極子相互作用 反強四極子秩序 反強磁</p>	<p>物性2</p>	<p>基盤研究(A)</p>	<p>東北大学</p>	<p>46,410,000</p>	<p>本研究は、多極子間相互作用をtuningしてそれぞれの役割を明らかにすること、RB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>系の異常に高い四極子転移温度と反強磁性の異常な磁気構造の由来の解明を目的とし、本年度は下記の成果を得た。 1. 典型的な反強四極子秩序・反強磁性秩序の逐次転移が生じるDyB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>で、新たな相転移を発見し、その複雑な磁気相図を決定した。また、磁場下の単結晶中性子回折によって全ての相の磁気構造を決定した。 2. Y希釈DyB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>の単結晶の中性子散乱により、その四極子秩序はc軸方向に強い反強四極子相互作用、c面内の弱い強四極子相互作用からなる擬一次元的相互作用によるものとなった。また、<sup>161</sup>Dyメソスワア一分光から、反強四極子・反強磁性相互作用が強くfrustrateし、隣接層子への置換によってDyの内部磁場が増加するという異常を発見した。 3. DyB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>の20%Gd希釈によって磁気転移が高温で四極子転移が低温で生じるという逐次転移の逆転を見出し、20%以上の基底状態は反強磁性であることを確認した。 4. 磁場誘起反強四極子秩序を示す反強磁性体TbB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>はY希釈によって、4f電子の基底状態と40K上の第1励起状態がともに二重項であること、そのため磁気双極子・電気四極子・磁気八極子の自由度由来するその特異な物性は150K付近の励起状態も関与したVan Vleck型転移として発現することを見出し、それによって得られた磁気相図のY濃度依存性も理解できる。 5. Gd希釈によってさまざまな磁性異常を示す磁場誘起反強四極子秩序物質であるTbB<sub>2</sub>C<sub>2</sub>の基底状態は単純な反強磁性対ではなく、反強磁性と反強八極子秩序が共存している特異な相であることを見出し、反強八極子秩序と反強四極子相互作用が強く結合することが物性異常の原因として理解できるという結論を得た。</p>
<p>モット半導体物理の構築</p>	<p>2004年度～2006年度 高木 英典(TAKAGI, Hidenori) 東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授 (40187935)</p>	<p>High-Tc superconductor Impurity state Interface Nano-scale electronic phase Resistive memory Strongly Correlated semiconductor Thermistor サーマスター ナノ電子相 不規則状態 強相関半導体 抵抗メモリー効果 界面高温超伝導</p>	<p>物性2</p>	<p>基盤研究(A)</p>	<p>東京大学</p>	<p>50,050,000</p>	<p>本研究課題では、強相関エレクトロニクスへの展開を念頭に置き、モット絶縁体における半導体物理を構築することを目的とした。具体的にはモット絶縁体中の不純物状態、界面障壁、トランジスタ動作の研究を進め、それらが通常の半導体物理からどのような修正を受けるのかという点について実験的検証を進めた。その結果、以下のような成果を得ることに成功した。 1. STM/STSを用いた真空空間局所電子状態観察を行い、強相関系特有の磁気軌道境界状態にある遷移金属酸化物Sr<sub>3</sub>Ru<sub>2</sub>O<sub>7</sub>を対象として不純物状態および界面状態の観察を進めた。意図的に導入したMn不純物の影響の長さスケールが数nmに及ぶことや表面での電子再構成・強磁性境界性由来する低エネルギーでの電子状態密度の異常を発見した。 2. 有機ゲート薄膜を用いた酸化物トランジスタの構築を考案し、そのペロブスカイト酸化物SrTiO<sub>3</sub>への適用を試みた。その結果、低温で世界初の電界誘起金属-絶縁体転移を実現し、その状態において1000cm<sup>2</sup>/Vsを凌駕する移動度を達成した。また、磁気抵抗の異方性の評価からSrTiO<sub>3</sub>表面において厚さ数nm程度の二次元金属層が生じていることを明らかにした。 3. 遷移金属酸化物の抵抗変化メモリー効果がNiOやCuOなどの単純な二元系遷移金属酸化物で普遍的に観測されることを見出した。そして、平面型素子の作製、その表面状態の直接観察や電圧電流特性の系統的な評価から、抵抗スイッチングが酸化物バルク領域の伝導フィルム形成に由来していること、伝導フィルム-金属電極界面における障壁がメモリー評価を生じていることを実験的に明らかにした。</p>
<p>ナノ構造に閉じこめられたヘリウムが示す新しい量子現象の研究</p>	<p>2004年度～2006年度 白濱 圭也(SHIRAHAMA, Keiya) 慶應義塾大学・理工学部・助教授 (70251486)</p>	<p>Bose System Helium Nanoporous Material Quantum Fluid Quantum Phase Transition Quantum Solid Superfluidity Supersolid ナノ多孔体 ヘリウム ボース-アインシュタイン凝縮 ボース粒子系 超流動 超流動固体 量子固体 量子液体 量子相転移</p>	<p>物性2</p>	<p>基盤研究(A)</p>	<p>慶應義塾大学</p>	<p>46,410,000</p>	<p>本研究は、ナノ多孔体構造に閉じこめられたヘリウム(<sup>4</sup>He)が極低温で示す特異な量子物性を多様な実験により明らかにし、「強相関ボース粒子系」の新しい物理を開拓・追求するものである。助成期間中の3年間に研究が大きく進展し、以下のような多くの重要な発見・成果が高圧・(1)ナノ多孔質ガラス中<sup>4</sup>He(A)定積圧力測定による固液相境界の確定と、熱容量の極大を発見し、これらにより超流動相より高温で局在ボース-アインシュタイン凝縮状態が出現することを最終的に確認した。(B)ねじれ振子・超音波の同時測定法を開発し、超流動特性に周波数依存性がないこと、強い試料依存性があることを発見した。(C)多孔体にKr原子を吸着させて細孔柱を制御し、超流動転移温度を制御することに成功した。 (2)ナノ多孔体中水素の量子効果探索ナノ多孔質ガラスに閉じこめられた水素の固液転移を定積圧力測定で調べ、大部分の過冷却液体水素は9K程度で固化するが、少量の水素は7K近くまで液体で存在することがわかった。これはナノ多孔体中水素の超流動観測に期待を持たせる成果である。 (3)1次元ナノ細孔<sup>4</sup>Heの超流動孔徑2.8nmの1次元細孔を持つFSM多孔体中<sup>4</sup>Heの超流動が約20気圧以上で消失し、量子相転移的挙動を示すことを発見した。 (4)周期的ナノ多孔構造中<sup>4</sup>Heの実験を準備し、超流動・固液転移の測定を進めている。 (5)固体<sup>4</sup>Heの超流動的挙動の追試実験に成功し、超流動性の試料依存性が発見した。またナノ多孔質ガラス中固体<sup>4</sup>Heにおいても超流動探索を行った。</p>

衝撃圧縮実験に基づく圧力スケールの確立と地球内部構造への応用	2004年度～2006年度	真下 茂(MASHIMO, Tsutomu) 熊本大学・衝撃・極限環境研究センター・助教授 (90128314)	Earth Interior Ga <sub>3</sub> Ga <sub>50</sub> <12> Gold High pressure Hugoniot MgO Phase transition Pressure scale Shock compression ユゴニオ 圧力スケール 圧力スケール 地球内部 相転移 衝撃圧縮 超高温 金 銅	岩石・鉱物学・鉱床学	基礎研究(A)	熊本大学	50,310,000	本研究は最新の測定装置を用いて標準物質のユゴニオを精密に測定することによって、圧力スケールを根本的に再検討し、ひいては地球内部構造を見直すことを目的としている。衝撃実験は火薬衝撃銃と二段式銃ガス銃を用い、ユゴニオの測定には傾斜鏡法を用いた。ロングパルス色素レーザーと国産最速の回転鏡式カメラと組み合わせることにより、時間分解能1ns以上で世界最高精度を達成し、衝撃銃の利点などから測定精度をロスアラモスデータに比べて一桁程度向上させた。本研究ではロスアラモスデータを全く使わずにユゴニオを決定するために、圧力校正物質であり、衝撃板や駆動板に用いる銅(Cu)や tantalum (Ta)、tungsten (W)のユゴニオを100GPa以上で測定した。金(Au)、および、Cu、Taは、ロスアラモスデータに比べて衝撃波速度が少し大きな結果を得た。Taではロスアラモスデータと矛盾しない結果を得た。MgO単結晶についてユゴニオを測定した結果、塑性域のUp<sup>1/2</sup> km/s以上ではロスアラモスデータに比べて衝撃波速度が少し高い結果が得られた。この結果、これまで圧力校正物質のユゴニオは書き換えられることによる。その他、ルビースケールの代わりに期待されているGd <sub>3</sub> Ga <sub>50</sub> <12>(GGG)のユゴニオを計測し、65GPaでの相転移と共に、170GPa以上でダイヤモンド以上のインピーダンスを持つことを見出した。学外の静的圧縮的共同研究では、岡山大学では圧力定として期待されるGaOの相転移、東北大学では圧力スケールとして用いられるPt<sub>10</sub>Fe等の金属と水の反応性、兵庫県立大学ではMD法を用いてNaClの高信頼性のT-M状態方程式などの成果が得られた。現段階で、本研究で得られたユゴニオを用いて地球内部構造を議論するまでに至らなかつたが、基本物質のユゴニオの再検討と状態方程式の議論を行うことができた。また、シンポジウムや高圧討論会を議論によって、今後の研究の方向性が得られた。			
単層・多層カーボンナノチューブ複合系における量子位相コヒーレント制御	2004年度～2006年度	落合 勇一(OCHIAI, Yuichi) 千葉大学・工学部・教授 (60111366)	CNT combined system CNT manipulation CNTマニピュレーション CNT複合系 Coherent control of quantum phase Fano effect Multi Wall CNT Nano device SPM fabrication SPM加工 Single wall CNT ノノデバイス Fano効果 単層CNT 多層CNT 量子位相コヒーレント 量子位相コヒーレント制 量子位相コヒーレント制御	応用物性・結晶工学	基礎研究(A)	千葉大学	48,490,000	最終年度である平成18年度は、単層CNTと多層CNTを複合させ、ナノスケールのCNT複合系デバイスを構築し、それらの量子伝導特性を詳細に調べた。このために、スキャニングプローブ顕微鏡(SPM)なる微細加工法を用いて、CNTデバイスを作製した。CNT単層や多層をSiO <sub>2</sub> 被覆された単結晶Si衬底基板上に置いて、原子力顕微鏡(AFM)によるナノスケールマニピュレーションにより、望みのデバイス形状・構造のための位置合わせ操作を行い、従来の電子ビーム露光法による電極設置を併用して、多種のCNTナノデバイスを創製した。電気特性評価の概略としては、細い本の多層CNTの上に単層CNTのリングや細線が交差する形式でそれらノデバイスが構成されている。金属電極を多層CNTの両端等に設けることにより、低温電気伝導を観測している。特に磁気伝導において、数ナノ領域での負の磁気抵抗の観測に成功するとともに、AASやAB効果によると思われる量子伝導現象の観測にも成功した。これらの低温磁気伝導観測の結果を解析することにより、量子伝導における基本パラメータの推定を行い、CNTの電子状態の詳細な状況を知る上での情報が得られ、応用上重要な電気特性を定量的に評価することが出来る。特に、ある複合デバイスにおいては、低温で非常に大きな正の磁気抵抗が観測され、スピントロニクスと関連した量子伝導現象である可能性が高く、従来から観測されているFano効果との関係が注目される。また、ゲート電圧を変化させることにより量子位相コヒーレントの制御を試みることに成功し、これによりスピントロニクスとの関連も強いFano効果と近藤効果の適用可否についても議論を行うことが出来るであろう。以上、2年間の実験によるCNT複合系ナノデバイスを創製しその応用の基礎となる多くの成果が得られたとともに、近未来の量子コンピュータ実用のために必要な基礎的データを得ることが出来た。			
生体微細構造観察用ウルトラミラー軟X線位相差顕微鏡の開発	2004年度～2006年度	青木 貞雄(AOKI Sadao) 筑波大学・大学院数理学部理学研究科・教授 (50016804)	Wolter mirror X-ray imaging optics X-ray microscope X線結像光学 X線顕微鏡 biological specimen laser-produced plasma phase contrast microscope phase plate soft X-ray ウルトラミラー レーザープラズマ 位相差顕微鏡 位相板 生体試料 軟X線	応用光学工学	基礎研究(A)	筑波大学	44,200,000	生体試料の微細構造観察用として軟X線位相差顕微鏡の開発を行った。 (1)高分解能・高倍率での構造観察 (2)高分解能の高倍率を実現するために高倍率光学系の設計製作を行った。従来の考え方は倍率に比例して光学系の長さが長くなる。本研究では、2階のウルトラミラーを軸はずりレーザ光学系によって配置し、光学系の長さが2倍で倍率32倍向上させることが出来た。得られたシステムの倍率32倍は1024倍に達した。X線CCDカメラの画素サイズが24μmなので、システムとしての分解能は50nm以下が得られた。 (2)大気・溶液中試料の観察 真空の中の光学系、大気中の溶液試料の保持のために0.1μm厚のSiN薄膜窓(約500μm角)を利用した。含水試料の観察には一枚のSiN膜をサンドイッチ状に組み込んだ試料室を作成し利用した。この試料室をおよそ2mmの大気の層の間に挿入して実験を行った。本光学系では試料交換が容易に行える。3mm近辺に連続スペクトルを持つターゲットを利用し含水赤血球の軟X線顕微鏡像の撮影に成功した。 (3)軟X線位相差顕微鏡光学系の構築 低吸収コントラスト物体の観察用としてウルトラミラー型軟X線位相差顕微鏡光学系を構築した。輪帯状(シタル薄膜)および帯状(マイラ薄膜)の位相板の導入によって軟X線位相コントラスト像(試料2.8μm径×ラックアップ、波長5nm付近)のアルミニウムターゲット線スペクトルを得ることに成功した。			
高出力青色LED用パルシウムGaN単結晶基板の研究開発	2004年度～2006年度	佐々木 孝友(SASAKI, Takatomo) 大阪大学・大学院工学研究科・教授 (60029237)	GaN GaN single crystal GaN単結晶 LED LPE Na flux Na フラックス bulk light emitting diode liquid phase epitaxy low dislocation density ナバルク フラックス法 低転位 半導体レーザー 単結晶 基板 液相エピタキシャル 発光ダイオード 発光デバイス	応用光学工学	基礎研究(A)	大阪大学	45,500,000	本研究において、大型結晶育成装置開発、育成条件探索、結晶評価、発光ダイオードの試作を行った。その結果、断熱材からの不純物汚染を防止しながら60気圧・850°Cという条件で2インチGaN結晶を育成可能な装置を開発した。この装置によって世界中で初めて2インチGaN結晶のLPE成長を行った結果、転位密度2.3×10 <sup>5</sup> cm <sup>-2</sup> という極めて低転位のGaN結晶育成に成功した。さらに、高速育成が可能となる条件探索を進めた結果、転位密度3×10 <sup>5</sup> cm <sup>-2</sup> というレベルを維持しながら、成長速度約30μm/分の超高速育成可能なレベルの値を達成した。この結晶に含まれる不純物のレベルを二次イオン質量分析装置(SIMS)を用いて測定した結果、最も懸念されていたNaの取り込み量は10 <sup>-12</sup> <sup>4</sup>cm <sup>-3&lt;sup&gt;3&lt;/sup&gt;&lt;sup&gt;3&lt;/sup&gt;オーダーであり、デバイス製作上問題ないレベルであることが判明した。また、その他の不純物としては酸素等が検出されたものの、いずれもデバイス製作上問題にならないことが分かった。これらの結果を踏まえて、短波長発光ダイオードを試作し、HVPE基板上に作製したものや、サファイア基板上に作製したものと比較して、大電流注入時における発光特性の向上が確認された。これらの結果は、別表にまとめられたように、多数の論文、学会発表でも公表されている通り、学術的にも大きく取り上げられるに至っている。以上のように、本申請による研究によって、大型・高品質の窒化ガリウム単結晶基板が可能となった。</sup>			
大気中フミン様物質の有害有機化学物質と重金属イオンの大気圏動態に及ぼす影響評価	2004年度～2006年度	大河内 博(OKOUCHI, Hiroshi) 早稲田大学・理工学術院・助教 (0241117)	Henry's law atmospheric humic-like substances dew water fog water hazardous organic pollutants rainwater solid phase microextraction volatile organic compounds エアロソール ヘンリー則 マイクロ抽出 固相マイクロ抽出 増感光分解 二環芳香族炭化水素 大気中フミン様物質 富士山 揮発性有機化合物 有害有機大気汚染物質 表面張力 重金屬 降水 降水洗	環境影響評価・環境政策	基礎研究(B)	東京都立科学技術大学・首都大学東京・第一早稲田大学	15,700,000	本研究期間中に以下のことを明らかにした。 1)ヘンリー法による固相抽出・ガスクロマトグラフ質量分析法による降水中VOCsの迅速定量法を検討した。その結果、0-50nmの範囲で線性が得られ、0.01-0.14nmの検出限界が得られた。また、降水試料からのVOCs抽出効率も良好であることを明らかにした。 2)大気中でハルゲンとナフタレン類が高濃度であり降水中ではトルエン、キシレンが高濃度で明らかにした。大気中では低い傾向が見られたのに対し、降水中VOCs濃度は夏に低く冬に高くなる傾向があった。 3)降水中VOCs濃度の実測値は、大気中VOCs濃度と温度補正したヘンリー定数から求めた計算値より明らかに高いことを明らかにした。 4)降水中全フミン様物質の増加に伴い、二環芳香族炭化水素がヘンリー則からの予測値以上に溶解することが分かった。大気中フミン様物質のモデル物質として市販の試薬フミン酸を用いた室内実験を行ったところ、水相フミン酸濃度の増加に伴い、二環芳香族炭化水素の気液分配係数が増加することが明らかになった。しかし、雨水および降水中VOCsの高濃度を説明することはできなかった。 5)水圏フミン物質は増感剤としての作用が指摘されていることから、降水中VOCsの増感光分解の可能性を検討した。その結果、フミン酸存在下の方が非存在下よりもナフタレン類濃度の光分解速度が大きいたことが分かった。予備的検討ではあるが降水中VOCsのフミン様物質による増感光分解の可能性が示された。			
結晶性物質の界面運動を記述する数理モデルの研究	2004年度～2006年度	小林 亮(KOBAYASHI, Ryo) 広島大学・大学院理学研究科・教授 (60153657)	SO(3) grain boundary manifold-valued function phase field polycrystal rotation group singular diffusivity ドメイン成長 フェーズフィールド フェーズフィールドモデル 回転群 多様体 植間数 多結晶 数理モデル 特異拡散 等長埋め込み 粒界	数学一般(含確率論・統計数学)	基礎研究(B)	北海道大学・広島大学	12,500,000	研究代表者は多結晶構造に関する問題にJ.A.Warren, W.G.Carterとともに90年代なかばから取り組んでおり、空間2次元(結晶方位も2次元)のモデルまで完成していた。本研究の第一の目的は小林・Warren・Carterによって開発されてきた多結晶構造の形成と時間的変化を記述するモデルのKWモデルを2次元モデルに拡張することである。この拡張は既に定義域の次元化をともなは比較的可能性は低く、領域の3次元化(すなわちSO(3)からSO(3)への拡張)を伴うために、大きな困難を伴うものである。(1)3次元モデルの定式化 (2)これに関連した数学的理論の整備 (3)数値計算法技術の開発等が本研究のテーマであった。本研究では、まず低次元空間(1次元、2次元空間)で定義されたSO(3)に値をとる特異拡散方程式を構築し、その数値シミュレーションを開発した。局所座標(Rodrigues vector)による表現と3次元ユークリッド空間への埋め込みによる表現の2通りの表現法と比較を行い、埋め込み表現の優位性を確認した。次に、この埋め込み表現を採用することにより、多結晶構造の時間発展を記述するモデル方程式の2次元コードを3次元コードに拡張した。SO(3)を3次元ユークリッド空間に埋め込み、正射影とペンタリ関数を用いることでSO(3)に変数値を制限するという方法を開発した。この方位方程式をフェーズフィールドの方程式とカップルすることにより、核生成から凝固、粒界の形成、多結晶の成長(コarsening)という一連の過程の3次元シミュレーションが可能となった。結晶構造の対称性を考慮に入れるために、SO(3)を結晶構造の持つ対称性を表す有限部分群で割った等質空間をユークリッド空間に等長に埋め込みを幾何学専門家でともに追求した。対称群が小さい場合は等長埋め込みを構築すること自体が困難であることが明らかになった。本研究で開発されたモデルをベースに、分割の過程を表現するモデルを提案しシミュレーションを行った。			

強相関電子系における光励起状態の位相緩和ダイナミクス	2004年度～2006年度	岩井 伸一郎(IWAI, Shinichiro) 東北大学・大学院理学研究科・助教 (60395624)	Charge order Correlated electron system Mott insulator Photoinduced phase transition Polarization dephasing モット絶縁体 位相緩和 光誘起相転移 強相関電子系 縮退4光波混合 超高速分光 電荷秩序	物性1	基盤研究(B)	東北大学	16,300,000	高い感度と高速応答性を両立する光スイッチング動作原理として、強相関電子系の光学応答が注目されはじめてきた。しかし、この機構は未だ解明されていない。本研究では、1.高い3次元非線形光学特性を有する低次元強相関絶縁体において、光スイッチング動作の動的性質を決定する位相緩和時間の詳細な測定(縮退4光波混合)を行った。その結果から、強相関電子系における高速応答性が、通常の半導体とは異なる励起状態の乱れ機構によって支配されていることが明らかにされた。また、上記の研究を遂行する過程で、高効率かつ超高速な光誘起絶縁体金属転移を、二次元薄膜伝導層において実現した。この光誘起相転移は、光学特性のみならず、伝導、超気特性をも同時に高速、高感度スイッチングできる動作原理として注目されている現象である。本研究では、この有機複合相関物質における光誘起相転移に関しても、その高感度応答性の起源を、中赤外ポンププローブ分光を用いて探索した。これらの結果から、光スイッチングの応答時間の特徴付ける緩和過程において、強相関電子系特有のスピン自由度の寄与と高圧緩和や、光誘起相転移の自視的性質を反映する臨界緩和など新たな現象を実験的に捉えることができた。これらの知見は、今後、多数の強相関電子系物質の光応答のダイナミクスの類型化に役立ち、さらに、高速スイッチング材料の設計指針を与えるものと期待できる。時間分解構造解析や時間分解光電子分光など、最新の新しい実験手法の導入によって、強相関電子系における光励起状態や光誘起相転移のダイナミクスの研究は、基礎、応用両面からますます発展が期待される。我々も、今後テラヘルツポンププローブ分光などの新たな手法によって、より詳細な描像をもとめていきたい。
高誘電率絶縁薄膜の応力に起因する高圧相への構造相転移の研究	2004年度～2006年度	秋本 真一(AKIMOTO, Koichi) 名古屋大学・大学院工学研究科・助教 (40262852)	Crystal structure High-k film Phase transition Synchrotron radiation X-ray diffraction X-ray photoelectron spectroscopy X線 シンクロトロン放射光 光電子分光 構造相転移 結晶構造 高誘電率絶縁膜	物性1	基盤研究(B)	名古屋大学	16,100,000	トランジスタの微細化は、LSIの機能あたりのコスト低減、低消費電力化、高速化に寄与するため、1970年以來一定のペースで進んできた。しかし、半導体に従来使われている材料を用い続ける限り、近い将来、LSIの性能向上には大きな壁にぶつかると。その1つが、さらに微細化が進むと、MOSトランジスタの絶縁膜の膜厚は1nm以下になり、トンネル効果で電流が通り抜け、消費電力の増大に結びつくことである。この問題を解決するために、物理的障壁は厚でできる新材料、高誘電率(High-k)材料を採用する必要がある。その中でHfO <sub>2</sub> は有力な候補であるが、熱処理で結晶化しその境界に濡れ液が流れるという課題がある。そこで、この結晶化過程をシンクロトロン放射光を利用した表面X線回折測定によりその場観察した。研究の結果、ALD(Atomic Layer Deposition)法によって成膜したHfO <sub>2</sub> は、常温常圧で通常観測されるMonoclinic構造ではなくTetragonal構造もしくはOrthorhombic構造を形成していることがわかった。また、ALD法によって成膜したHfAlO <sub>x</sub> は、900°Cで結晶化しCsF型Cubic構造を形成することがわかった。この構造はICDDカードには報告されていない構造であるが、2700Å以上で出現する高温相であるとの報告もある。結論として、通常の条件下では、出現しない構造が、極薄膜であることに伴う応力によって出現したといえる。また、HfO <sub>2</sub> 膜の欠陥や格子歪みの測定を極端に非対称なX線回折法を用いて行い、界面付近で格子歪みが0.1-0.3%程度圧縮され、歪および歪が10-20nmであること定量的に明らかにした。さらにPDA(Post-Deposition Annealing)を施すとその格子歪みは変化することがわかった。次に、より実用材料に近いHfAlO <sub>x</sub> (N)/SiO <sub>2</sub> /Si界面について研究を行った。極端に非対称なX線回折法を用いて界面の格子歪みの評価を行い、また、X線光電子分光法を用いて、局所的誘電率を求めた。研究の結果、PDAなしの試料は、0.2nmの基板温度850°CでのPDAありの試料に比べて圧縮歪が導入されていることがわかった。また各試料について求められた格子歪みが原子の周囲の局所的誘電率と相関があることもわかった。
結晶表面を利用して作製した低次元金属の電子状態とフォノン物性	2004年度～2006年度	有賀 哲也(ARUGA, Tetsuya) 京都大学・大学院理学研究科・教授 (70184299)	angle-resolved photoemission charge density wave phase transition surface イジング模型 バイエルス転移 低次元金属 振動分光 相転移 臨界散乱 表面 角度分解光電子分光 電荷密度波	物性1	基盤研究(B)	京都大学	16,100,000	低次元金属においては、電子-電子、電子-フォノンなどの相互作用の効果が顕著にあらわれ、密度波、超伝導などの興味深い現象が起こる。光電子分光は、一粒子スペクトル関数を直接与えることから、低次元系の物性研究における最も有効な手法の一つである。本研究の目的は、固体表面を利用して作製された二次元および三次元金属を対象として、角度分解光電子分光(ARPES)によりその電子状態を、また超高分解能電子エネルギー損失分光(UELS)によりそのフォノン分散を明らかにすることにある。これらを通して、低次元系の興味深い物性が顕著に表れる磁性的、相転移などの新現象を探索し、その機構を解明することを狙った。本実験者が発見した、金属表面電荷密度波相転移系であるCu <sub>2</sub> O(001)についてARPESによるフェルミエネルギー、CDWギップの温度依存性などを測定したところ、弱結合転移的な特徴が観測された。ところがこれとはさまざまな実験事実と符合しない。そこで高輝度シンクロトロン放射光を用いた表面X線回折により臨界散乱の測定を行った。これにより得られた格子の相関長の温度変化をARPESから得られたCDW相関長と比較することを通して、この系はこれまで認識されていない強結合長一ローレンス系に分類すべきものであることを明確にし、そのような系におけるバイエルス転移の特徴を明らかにすることができた。これが、本研究を通して最大の成果であるといえる。この他に、数層からなるMn-Pd規則表面合金の磁性、Bi/Ag(001)表面における特異な相転移のメカニズム等について成果を得た。また、Bi/Ag(001)において、従来知られていないより一桁大きなRashbaスピン軌道分裂を観測し、引き続き研究を展開しつつある。
液体金属・半導体の圧力誘起相転移の研究	2004年度～2006年度	辻 和彦(TSUJI, Kazuhiko) 慶義塾大学・理工学部・教授 (10114563)	X線回折 high pressure liquids phase transitions synchrotron radiations x-ray diffraction 放射光 構造 液体相転移 高圧力	物性2	基盤研究(B)	慶義塾大学	10,900,000	本研究は、液体の構造と電気的性質の圧力変化を、種々の結合をもつ液体金属・半導体について系統的に調べ、圧力誘起の相転移の様相が結晶とどのように違うのか、転移後の構造がどのように異なるのか、また転移に伴って物性がどのように変化するかを調べたいことを目的とし、高圧力下の実験を行った。X線回折実験は、放射光X線マリアンダー型高圧力発生装置を用いてエネルギー分散法により行った。液体Agにおいて加圧による構造の急激な変化が、液体Cu、液相Cu <sub>2</sub> 、液体Cu <sub>2</sub> において連続的な変化が見出された。液体Cuの局所構造は、いずれも常にほぼ四面構造であり、加圧により八面体へ変化する。転移後の構造はCuCl、CuBr、CuIの順に高くなっており、この順序は結晶と同じである。結合のイオン性、大きな液体銅ハライドの局所構造の圧力変化は結晶と類似しており、イオン性の大きいIV-VI化合物のCuTeの結果と同じである。また、結晶での構造が共有結合のネットワークが2次的で、原子間の結合に強い結合と弱い結合が共存していると考えられる液体IV-VI化合物の圧力変化を調べた。液体GeSe、液体GeTe、液体SnTe、液体PbTeについて測定を行い、異方な構造変化を観測した。また、液体GeTeの局所構造は1.8GPaと4.0GPaの間で、液体PbTeは2.6GPaと4.0GPaの間で、液体SnTeは1.6GPaと3.3GPaの間で、急激な構造の変化が起こり、収縮の様子が変化することを見出した。また、高温高圧力下での電気的測定を行うために、対向アンビル装置で高圧力高温発生装置の技術開発を行い、高圧力下で液体GaSbと液体CuTeの融解温度までの測定に成功したが、圧力変化の詳細な測定には至らなかった。これらの結果から、結合のイオン性の大きいIV-VI化合物の液体の構造の圧力変化は、結合のイオン性の小さい液体III-V化合物の構造変化が、結晶の圧力超転移と大きく異なるのと対照的であること、局所構造の異方性の大きいIV-VI化合物の液体では、結晶とは異なる圧力誘起構造変化が起こることが結論された。
高分子系のマクロな粘弾性特性に対する動的自己無撞着場理論の展開	2004年度～2006年度	川勝 年洋(KAWAKATSU, Toshihiro) 東北大学・大学院理学研究科・教授 (20214596)	dense polymeric system- dynamic self-consistent field theory inhomogeneous systems mesophase path integral reptation structural phase transition viscoelastic property ジャイロイド ブロック共重合体 メンフェーズ レプテーション レプテーション 不均一系 動力学 動的自己無撞着場理論 協同現象 構造相転移 流動 相分離 相転移 粘弾性 粘弾性	生物物理/化学物理	基盤研究(B)	東北大学	12,000,000	1.ブロック共重合体のメンフェーズ間の構造相転移: ブロック共重合体メルトのジャイロイド構造にわずかな変形を加えた場合に生じるシリンダ構造への構造相転移の動力学を、拡散ダイナミクスに立脚する動的自己無撞着場理論を用いてシミュレートした。実空間でのモデル化と系のサイズを可変とするシミュレーション手法の導入により、これまででは再現できなかったジャイロイド構造からシリンダ構造への一次相転移にもなる核生成と成長過程を観察することに成功した。また、この転移の過程において、転移前後の構造の間の結晶構造の整合性(エピタキシー)性の成立および従来の散乱実験等で報告されてきたダイナミクスとは異なるミクロなダイナミクスを発見した。 2.流体力学相互作用によるブロック共重合体のメンフェーズ形成の動力学: 流体力学相互作用をexplicitに取り入れた動的自己無撞着場理論の開発を行い、流体相互作用の下で相分離の動力学が受ける影響を調べた。流体力学相互作用の存在により相分離が加速されることや、ドメイン構造のトロポロジーの種類によっては流体力学効果がなければ平衡状態が生じることがわかった。 3.自己無撞着場理論による粘弾性特性のシミュレーション: 自己無撞着場理論から計算される応力分布を流体方程式に取り入れることで、粘弾性特性をモデル化する手法を開発した。また、この理論において、鎖同士の間からみ合いに起因する応力を計算する部分が、イギリスの研究グループの最新のレプテーション理論と等面であることを理論的に証明した。 4.これらの成果の他に、ゲルのクラスター形成、ブロック共重合体の相分離構造の制御、高濃度コロイド粒子系の空間秩序構造の形成などを理論とシミュレーションによって研究し、成果を上げた。
高分子メソスコピック構造の転移キネテックス-ジャイロイド構造を中心にして	2004年度～2006年度	太田 隆夫(OHTA, Takao) 京都大学・大学院理学研究科・教授 (50127990)	gyroid phase lamellar structure mesoscopic structure mode expansion method surfactant mixtures water キネテックス ジャイロイド ジャイロイド構造体 ジャイロイド相 ミクロ相分離 メソスコピック構造 モード展開法 ラマラ構造 密度汎関数法 構造転移 構造間転移 水・界面活性剤系 水・界面活性剤系 標準安定構造 計算機シミュレーション 転移キネテックス 電子線トモグラフィ- 高分子 高分子共重合体	生物物理/化学物理	基盤研究(B)	広島大学 京都大学	16,500,000	高分子共重合体を対象にした実験(長谷川)・水・界面活性剤系を対象にした実験(今井)と理論グループ(太田・野々村)が共同で研究を行った。太田・野々村はメソスコピック構造に対して多重モード展開を適用して構造転移の基本的性質、特に、ソフトマター系で最大の特長的構造であるジャイロイド相の形成と安定性に関する数値シミュレーションと理論解析を行った。高分子共重合体のミクロ相分離構造の静的動的性質および構造間転移のキネテックスに関する理論的研究を行った。モード展開法によって得られた新しい結果として2元共重合体として、BOC球構造、ヘキサゴナル円柱構造、ジャイロイド構造、ラマラ構造が安定な構造として得られ、さらに、Fddd構造も熱平衡安定構造であることを確認した。また6次対称ラマラ構造は標準安定であることも示した。また構造転移のキネテックスでは共連続キュービク構造であるジャイロイドと、一般異方性のラマラ構造の間の転移は途中で、共連続一般構造であるFddd構造を標準安定状態として経由すること明らかとなった。これらの結果は共同研究者である長谷川、今井の実験と密接な関係があることを強調する。まず、熱平衡安定構造の存在は長谷川らによって2元共重合体のX線散乱実験で観測されている。また特記すべきことは、これまで既に研究し尽くされたと思われてきたポリスチレン-ポリイソブレンジブロック共重合体について、温度の上昇とともにラマラ、Fddd構造(斜方晶系に属する共連続構造)、Gyroid構造(六方晶系に属する共連続構造)の試料を発生させたことである。この実験は2元共重合体メルトに対するものであるが、今井の実験系である水・界面活性剤では転移のキネテックスはかなり様相が異なることが明らかとなった。

ペプチドを基盤とする人工酵素創成を目指す反応場および分子認識場の設計と合成	2004年度～2006年度	土井 隆行(DOI, Takayuki) 東京工業大学・大学院理工学研究科・助教 90212076	N-アルキル化 combinatorial synthesis cyclic amines cyclic peptides intramolecular Diels-Alder reaction polyzamacrocycles solid phase synthesis theoretical calculation アジリジン カルボニル化 コピナトリアル合成 パラジウム触媒 ペプチドテザー ポリアザ環状化合物 位置選択的合成 分子内Diels-Alder反応 固相合成 理論計算 環状アミン 環	合成化学	基盤研究(B)	東京工業大学	15,700,000	(1)「ペプチドを基盤とする反応場の設計と合成ペプチドテザーを用いる分子内Diels-Alder反応の開発」では、アスバラギン酸トシエニンのジペプチドをペプチドテザーとして選定し、分子内Diels-Alder反応を検討した。その結果、通常の分子間の反応では位置選択性が全く発現しないメチレン-2-メチル-2-プロペノールエステルとアルクリルエステルとの系において、このジペプチドテザーは位置および立体選択性を高く制御することを見出した。この結果は、MM2遷移状態モデルおよびPM3とDFT法を組み合わせた遷移状態構造の計算による予測と非常によく一致し、これらの計算手法がフレキシブルなペプチドテザーの設計に利用できることを示した。計算化学を主導とするジペプチドテザーの分子設計を行い、位置および立体化学を制御した分子内Diels-Alder反応の開拓に成功した。 (2)「ペプチドを基盤とする分子認識場の設計と合成」において、 (1)「光学活性なポリアザ環状化合物の設計と合成」では、分子認識場を有するアザ環状化合物を設計し、N-置換アジリジンに対する位置選択的なアルキル化を基盤とした合成法を開発した。特に大環状化合物の環化においてはN-置換アルキル化の分子内アルキル化が有効であることを明らかにし、12,15員環のポリアザ環状化合物の合成に成功した。 (2)「RGD様を有する環状ペプチドのコンピナトリアル合成」では、分子認識能を有する環状ペプチドライブラリーを設計し、合成した。固相上に担持したヨウ化ベンジルアミンに対し、Fmoc-アミノ酸を順次縮合し、固相上でカルボニル化反応を行い環状ペプチドの合成に成功した。この固相合成法を用い、3種類のヨウ化ベンジルアミン、4種類のペプチド、4種類の直鎖アミノ酸ペプターシーの組み合わせからなる48化合物のコンピナトリアル合成を達成した。
水表面における2分子膜層構造の自発的形態	2004年度～2006年度	荒殿 誠(ARATONO, Makoto) 九州大学・大学院理学研究科・教授 (20175970)	X-ray reflectivity X線反射率 external FTIR fluorocarbon alcohol interfacial tension ionic liquid multilayer formation phase transition of adsorbed films sugar surfactant イオン液体 フルオロカーボン フルオロカーボン/フルオロカーボンアルコール フルオロカーボンアルコール ベンゼン ミセル 二分子膜 偏光解析 外部反射FTIR 多重膜形成 状態図 界面吸着顕微鏡	機能物質化学	基盤研究(B)	九州大学	15,400,000	(1)didodecyltrimethylammonium halideとdodecyltrimethylammonium halideの混合系では、溶液の混合組成と界面活性剤濃度を制御することで、より、溶液中で単量体状態、小会合体状態、ベシクル状態、ミセル状態、さらにそれらの共存状態が実現することを、詳細な熱力学を作成して明らかにした。またある範囲の混合組成では表面で積層構造が形成されることが示唆された。しかしその領域では表面張力の再現性は他の領域に比べて著しく悪く、現段階で吸着量などから積層構造の結論をえるに至っていない。しかし、逆に、この領域では表面張力の時間依存性が極めて長く再現性が悪く、通常の傾向が異なる表面現象がおきていることを示していないか、今後の課題である。 (2)アルマイト/アルマイトのような糖系界面活性剤やアルキルアミンがシリウム塩の表面張力-溶液濃度曲線には、折れ曲がりが見られる。熱力学からはこの折れ曲がりには吸着量の相転移を表すものであり、しかも折れ曲がりによる濃度範囲の吸着量は少なくとも数層以上の単分子膜が形成していることを示す数値が得られた。また油/水界面におけるフルオロカーボン系アルコールでも積層構造を示す結果が、少なくとも熱力学の解析からは得られている。これらの実験結果、精密な表面張力測定が現在進んでおり、またX線反射率、外部反射FTIR、偏光解析などの分光学的手法も同時進行している。近い将来に、水表面(界面)における2分子膜層構造の自発的形態に関する熱力学および構造化学的結論が得られると思われる。
ナノ素構造体の動的階層構造を電位で可逆制御することによる界面機能化	2004年度～2006年度	相楽 隆正(SAGARA, Takamasa) 長崎大学・工学部・教授 (20192594)	Dendrimer Dynamics Electrode surface Metal nanoparticle Phase transition Surface and Interfacial Properties Ultrathin films Viologen ダイナミクス テンドリマー ナノ材料 ビオロゲン 両親媒性長鎖分子 吸着層 相転移 蛍光性テンドリマー 表面・界面特性 赤外反射分光法 超薄膜 金属ナノ粒子 長鎖分子集合組織 電極表面	機能物質化学	基盤研究(B)	長崎大学	15,100,000	1.ナノ素構造体の電極表面での吸着状態、配向、ミクロ化学環境、分子組織や、それらの電位駆動ダイナミクスの精密な把握を in situに可能にすることが、本研究の基礎的な手法として重要であった。この目的に、以下の成果を得た。(1)電位制御系・可視反射分光法を高度化し、巨大分子の吸着配向を決定する方法を確立するとともに、不可逆過程をステップ法で高感度長時間追跡することを可能にした。(2)赤外反射分光法を構築した。(3)ラングミュア-ブロッカー配置の電極において、蛍光スペクトル測定のみならず、蛍光顕微鏡イメージングに成功した。 2.液体アルカン、両親媒性分子組織、ビオロゲン吸着層、蛍光性テンドリマー、表面修飾ナノ粒子などに関し、研究題目を目標とした研究を推進することによって得た主な成果は以下のようである。 (1)アルマイトのみであっても、Au(111)電極上で可逆電位応答すること、変化は電極表面から長距離にまで及ぶことがわかった。 (2)末端に眼鏡着け基としてビニル基やイタザリル基を持つ一群の長鎖分子組織のAu(111)電極上でのナノレベル電位応答性を体系的に把握できた。 (3)種々のビオロゲン分子のHOPG電極表面における2次元相転移において、分子間相互作用の挙動決定因子としての意味を解明し、2成分混合系の挙動階層性を明らかにした。 (4)吸着テンドリマーの電子移動反応への特異的影響を発見した。また、電位応答挙動を追跡した。 (5)表面修飾ナノ粒子の電位駆動吸着層のダイナミクス、充放電のダイナミクスと共存アニオン効果、修飾分子や粒子密度の電位応答性への効果などが明らかになった。 3.以上の成果は、分子メカニクスにさらに踏み込んで階層性を究明すれば、ナノダイナミクスを設計し、新しい機能性を発現する系の開発に確実に展開できることを示したとも言える。
刺激応答性を有する有機無機ハイブリッド分離膜の創成に関する研究	2004年度～2006年度	矢澤 哲夫(YAZAWA, Tetsuo) 兵庫県立大学・大学院工学研究科・教授 (30347522)	Light response Phase separation Porous glass Response to stimuli Separation membrane Temperature response organic-inorganic nanohybrid pH response pH応答性 光応答性 相分 分離膜 刺激応答性 多孔質ガラス 有機無機ナノハイブリッド 温度応答性	無機工業材料	基盤研究(B)	兵庫県立大学	13,400,000	細孔径4nmの多孔質ガラス膜の細孔表面を光、pH、温度の刺激に応答する有機分子を導入することにより、これらの刺激に応答する刺激応答膜の創成を検討した。多孔質ガラスは、SiO <sub>2</sub> B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Na <sub>2</sub> Oを成分とするホウケイ酸ガラスより得た。この多孔質ガラスを使用して、可逆的付加-開裂連鎖移動(RAFT)型のリビングラジカル重合を行うことで、温度に応じて組成の大きく変化するポリ(N-イソプロピルメタクリルアミド)(PNIPAM)のグラフを行った。その結果、ポリマーの精密合成の方法として、さまざまな官能基を含むモノマーをリビング的に重合可能な可逆的付加-開裂連鎖移動(RAFT)型グラジカル重合法を用いることで、イオン強度、温度などに応答性を示すポリマーの精密合成が可能であることを確認した。PNIPAMをグラフトした多孔質ガラスは25℃で細孔のゲートが閉じたポリマー鎖により封鎖され、物質の透過を抑制するが、40℃でポリマー鎖が熱水和起して収縮するため、細孔ゲートが開き、物質の透過が可能となることを、ベンジルアルコールを使用した水中での透過実験により確認した。光応答性については、多孔質ガラスの表面に塩化金酸の還元によって金微粒子をコーティングし、金微粒子を極めて反応性の高いチオールを有するアゾベンゼン(HS-(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> -COHN-pH-N=N-nh)を合成し、これを金修飾多孔質ガラス表面へ導入した。6a <sub>2</sub> IOOCH <sub>3</sub> 改質膜による蒸気透過特性では、紫外線照射非照射によって完全な気体透過のON-OFFが実現できなかったが、本方法で初めて刺激光照射非照射によって気体透過ON-OFFのスイッチングが実現できた。pH応答性については、4-トリエチルシリルプロピルトリメチル多孔質ガラスの細孔内に導入し塩酸性の条件下でトリメチル基の加水分解を行うことによりカルボン酸基を導入した。当該カルボン酸は、約pH4程度で親水性が変化する。即ち、pH4以下では疎水性のために水溶液中では分子鎖が収縮し、pH4以上では、分子鎖が膨潤するのと、こうした有機分子で改質した膜はpH応答性を有することが確認された。
コヒーレンス変換による非共振媒質中の周波数位相共役波発生	2004年度～2006年度	西岡 一(NISHIOKA, Hajime) 電気通信大学・レーザー新世代研究センター・助教 70180586	Diffraction optics Freequency domain phase conjugation Group-delay compensation Lasers Time-reversal Ultrashort pulse lasers diffraction optics group-delay-dispersion group-delay-dispersion nonlinear optics phase conjugation phase correction ultrashort pul	応用光学・量子光学	基盤研究(B)	電気通信大学	15,100,000	本研究の目的は、光波のコヒーレンス変換によって周波数位相共役波を発生させ、パルス位相ひずみの自動補償や相関演算を実現しようとするものである。2光子ゲート法によるフェムト秒パルスの位相記録、周波数位相共役波発生法を考案し、実験的に10fsパルスに群遅延分散を与えて記録し、周波数位相共役波を発生させて全光学的時間位相補償を実現した。得られた主な結果を以下に示す。 1.10fsパルスに群遅延分散を与えて35fsに伸長し、その周波数位相共役波の発生、位相再生実験を行った。80THzの帯域で全光学位相補償に成功した。 2.OAPシステム中の高次群遅延分散を独立して記録し、位相誤差を前置補償する事によりフォーエリク限界パルスを出力させる方法を考案し、数値解析コードを開発し、その有効性を示した。 3.高屈折率変換材料として、フタリフラグタイプ結晶に注目し、2光子吸収によりチャープ光の位相構造を書き込み、位相補償・数サイクルパルスの光のコヒーレンス増幅が可能であることを実証した。増幅帯域幅32THzが得られた。
中性子を用いた飛行時間法による高精度疲労損傷評価システムの開発	2004年度～2006年度	秋庭 義明(AKINAWA, Yoshiaki) 名古屋大学・大学院工学研究科・助教 (00212431)	Angle dispersive method Fatigue damage Neutron Phase stress Profile broadening FTQ 中性子 回折線幅 疲労損傷 相対応 角度分散法 飛行時間法	機械材料・材料力学	基盤研究(B)	名古屋大学	13,300,000	(1)格子ひずみから応力を求めるために必要な回折弾性定数を、種々の材料について測定し、回折強度の観点から、測定精度を明らかにした。 (2)SiO <sub>2</sub> 粒子強化アルミニウム合金複合材料の平滑材を用いて、静的負荷下における応力測定を行った複合材料では、各構成相の相対応力を測定し、測定に際する回折強度・回折線の観点から明らかにした。また、回折線幅の変化から疲労損傷の評価が可能であることを示した。 (3)ステンレス鋼SUS316NGの疲労試験を行い、繰返しともなう回折線幅の変化を検討した。初期に大きな引張残留応力が導入された場合、比較的高負荷が大い場合には、初期に残留応力の減少があり、その後はほぼ一定であったこれに対して低負荷条件下は、変化量は小さかった。 (4)溶接部が大きい場合には、マクロな残留応力決定時に第二種の格子ひずみが問題となる。そのため、応力分布を除去した数少ない小片を基準として、平板突合せ溶接接ぎ手の残留応力分布の測定が可能であることを示した。 (5)EoAP法によってナノオーダーの結晶粒徑に調整した銅では、塑性変形によって回折線幅が増加するものの、除荷時には初期の値まで減少することを示した。疲労による変化は小さいことがわかった。 (6)測定領域を1mmまで限定するラジアルコルメータを試作して性能評価を行った実測によって得られたプロフィールはシミュレーション結果とよく一致し、十分な精度で測定可能であることを示すことに成功した。

ガラス基板表面の核形成点制御による大粒径多結晶薄膜形成法の開発	2004年度～2006年度	安武 達彦(YASUTAKE, Kiyochi) 大阪大学・大学院工学研究科・教授 (80166503)	Ge nano-crystal Ge微結晶 Si thin film crystal nucleus glass substrate large-grain nano-imprint polycrystalline Si solid phase crystallization ガラス基板 固相結晶化 多結晶Si薄膜 大粒径 核形成 結晶核 自己組織化	生産工学・加工学	基礎研究(B)	大阪大学	10,400,000	TFTや太陽電池などの大面積電子デバイスの特性向上を目指して、多結晶Siを用いる試みがなされている。これまで、多結晶Si薄膜の形成方法として、非晶質Si(a-Si)薄膜のレーザーアニールや固相熱結晶化、低温でのCVD成長等の技術が開発されているが、より効率的で大粒径のpoly-Si薄膜形成技術の確立が望まれている。多結晶Si薄膜の形成には、ガラス基板上での結晶核形成および結晶核からのSi結晶成長プロセスを独立に制御することが重要と考えられる。そこで本研究では、Si結晶の成長核となる微細なGe結晶を、ガラス基板上に密度と大きさを制御して配列し、これを結晶核として大粒径多結晶Si薄膜の作製法を開発を目的とした。まず、ガラス基板上の結晶核として、a-Geの固相結晶核により自己組織化される微細なGe結晶に注目し、その直径と密度を原子モテックによる方法で確立した。次に、Ge結晶核からa-Si薄膜の固相熱結晶化に及ぼす影響を明らかにした。一例に、a-Siの完全な結晶化には600℃で50時間程度のアニールが必要となるが、Ge微結晶を用いることで、より、480℃8時間で完全に結晶化させることに成功した。また、50%結晶化したSi薄膜のSEMおよびマイクロプロブ用EDX観察から、SiがGe微結晶核から結晶化することを確認した。種々の作製方法で形成したa-Si薄膜の結晶化過程を速度論的に解析した。Ge結晶核からのSi結晶成長速度の活性化エネルギーは、a-Si薄膜の構造によって大きく変化し、特にSi-H結合濃度が高く、緻密性が低い場合に、Si結晶成長速度が大幅に向上することを見出した。また、結晶Geテップアップレイを用いたナノ印刷法により、Ge結晶核の位置制御の可能性を示した。		
リラクサー-強誘電体の光バルブ作用-誘電率制御と光メモトリクス素子への展開	2004年度～2006年度	安田 直彦(YASUDA, Naohiko) 岐阜大学・工学部 教授 (90021625)	PMN-PT engineered domain configuration high permittivity hydrostatic pressure effect morphotropic phase boundary optical valve property piezoelectric property relaxer ferroelectric エンジンアトドメイン エンジンアトドメイン構造 リラクサー-強誘電体固溶体単結晶 リラクサー-強誘電体固溶体単結晶 リラクサー-強誘電体固溶体単結晶 光バ	電子・電気材料工学	基礎研究(B)	岐阜大学	10,100,000	最近の地球環境問題温暖化等京都議定書発効に見られる様に温室効果ガス等環境負荷ゼロを目指し、高効率化、省エネルギー化が益々進展していく状況にある。我々はリラクサー-強誘電体の特徴(1)光バルブ機能(2)圧電機能(3)高誘電率制御機能を活かし、1素子だけで同時に機能を出現させ、従来の3個の素子からなるデバイスで済ませ、身近なところから省エネルギー化、更にヒステリシスフリーなエネルギー消費・疲労効果の少ない、高効率化による排気ガス規制量削減に貢献するものである。電気光学特性ではリラクサー-強誘電体はドメインサイズが200nm以下と偏光顕微鏡のハロゲン光源の波長より短く従来の素子よりコントラスト(消光比)が良くメモリ効果を有し、電界誘起高・低誘電率転移を利用して発振・選周波数制御を実現でき、電子化における入・出力回路への応用が可能とわかってきた。更に圧電特性ではリラクサー-強誘電体表面体積(100)板を高い、エンジンアトドメイン構造を利用して、電気機械結合係数が高く、負荷特性にも強い特徴を明らかにした。これらの特性はエンジニアードの大きな成分比が必要な構造をしていると明らかとし、圧力効果から非線形共振機構を解明した。またこれらの機能を利用し、リラクサー-強誘電体固溶体単結晶Pb(M <sub>1</sub> /3)Nb <sub>2</sub> /3)-PbTiO <sub>3</sub> を作製して、素子で同時に出現させることに成功し、これらの成果の一部は原稿としてSpringer-Verlag社からFerroelectric Thin Film -Basic and Device Physics-として、出版されている。論文(雑誌論文の欄参照)ばかりでなく、JSTIにより採択され、PCT特許出願「リラクサー-強誘電体固溶体単結晶、デバイス及びデバイスの使用方法」して国際出願(特開2005-517538(日本)/filing number:101587,543(米国)、現在進行中である。		
確率微分方程式を用いた地震動位相のモデル化と非正常地震動模擬法の確立	2004年度～2006年度	佐藤 忠恒(SATO, Tadanobu) 神戸学院大学・学際教育機構 教授 (00027294)	Design Seismic Motion Group Delay time Hilbert Transformation Modeling Group Delay time Phase Modeling Response Spectrum Compatible Motion ウェーブレット解析 非線形モデル変換 位相のモデル化 位相スペクトル 位相準拠地震動 位相特性 帰帰式 因果性 地盤の非線形特性 地震動シ	構造工学・地震工学 種管理工学	基礎研究(B)	京都大学一 早稲田大学・神戸学院大学	14,900,000	本研究は地震動の位相特性の合理的なモデル化手法を確立することを第一の目的とした。さらに、モデル化された非正常位相特性の情報を用いてフーリエ振幅スペクトルを決定するための理論を確立し、非正常な時系列の新しいシミュレーション法を確立することを第二の目的とした。地震動の位相特性をモデル化することは、地震動の非正常特性をモデル化することと密接に関連している。そこで、時間-周波数領域における分解能の定義が明確でないウェーブレット変換を用いて、地震動の非正常位相特性を抽出した上で、位相のモデル化に関する一回積分で定義される群遅延時間を用いた。まず、観測地震動データベースを用いて周波数帯域ごとの群遅延時間の平均値と分散を含め、平均値と分散を階層破壊過程のパラメータと断層から観測点までの距離の関数として表現した。次に、群遅延時間の確率的な特性が群遅延帯域ごとに正規分布で表現できることを明らかにしたうえで、確率過程として群遅延時間を模擬するための方法論を構築した。さらに、群遅延時間の周波数領域の変動特性を確率微分方程式によって表現するための理論展開を行い、確率微分方程式の係数値を、断層破壊過程のパラメータと断層から観測点までの距離の関数として表現した。最後にモデル化された群遅延時間を用いて地震動のフーリエ振幅スペクトルを決定できるアルゴリズムを開発し、都遅延時間から地震動のシミュレーションを可能にするアルゴリズムを開発した。		
ケイ酸塩ガラスの安定不混和現象を利用した高輝度発光材料の作製	2004年度～2006年度	安達 数雄(YASUMORI, ATSUO) 東京理科大学・基礎工学部・教授 (40182349)	CRYSTALLIZATION IMMISCIBIRITY LUMINESCENCE METASTABLE PHASE MICRO STRUCTURE MULTIPLE LIGHT SCATTERING PHASE SEPARATION SILICATE GLASSES アノサイト ウェルサイト ケイ酸塩ガラス フレスノイト ニューロピドム 不混和現象 分相 多重光散乱 安定不混和現象 微細組織 準安定相 溶解熱 発光 結晶化	無機材料・物性	基礎研究(B)	東京理科大学	12,600,000	近年、次世代型ディスプレイの開発が進み、高輝度画像実現などのために、蛍光体の高性能化の要望が高まっている。本研究では、紫外線耐性および長期安定性を持つ高輝度発光材料を実現することを目指し、安定不混和領域を有するケイ酸系である、Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 系、CaO 含有、SiO <sub>2</sub> 系、ZnO-SiO <sub>2</sub> 系、BaO-TiO <sub>2</sub> -SiO <sub>2</sub> 系と、準安定不混和領域を有するNa <sub>2</sub> O-B <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 系の5種類について、不混和領域内の組成・温度で相分離させたことにより、ナノ・マイクロ領域の相構造を有するガラスを作製した。その結果、いずれの試料でも分相組織を持つガラスおよび結晶化ガラス材料が得られた。また、これらの組成系において相組織の大きさや組成、相分離の温度・時間などで制御が可能であることを明らかにした。一方、蛍光賦活剤のドーパまたは、熱処理による結晶化により、高輝度発光する材料の作製を試み、その発光挙動に対する微細組織、生成結晶相、光散乱の影響について調査した。その結果、発光に対して以下の3項目の影響による発光強度の増大が認められた。1)ガラス相の結晶化により特徴的に生成する結晶相(準安定相、構造変化など)による発光強度の増大(特にY <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -SiO <sub>2</sub> 系、CaO-SiO <sub>2</sub> 系、BaO-TiO <sub>2</sub> -SiO <sub>2</sub> 系) 2)分相による微細組織を起源とした結晶の生成・成長によると思われる、発光強度の増大(特にZnO-SiO <sub>2</sub> 系、BaO-TiO <sub>2</sub> -SiO <sub>2</sub> 系) 3)分相による微細組織を起源とした多重光散乱に基づく励起光の散乱によると思われる、発光強度の増大(すべての系) これらの結果から、分相を起源とするガラス内部の微細組織により、ガラス、結晶化ガラスを問わず発光強度の増大がもたらされる可能性が示唆された。この結果は今後の高輝度発光材料の設計指針となると考えられる。		
強磁性形状記憶合金膜における磁場誘起形状記憶効果の評価とその機構解明	2004年度～2006年度	大塚 誠(OHTSUKA, Makoto) 東北大学・多元物質科学研究所・助手 (30241582)	Curie temperature constraint aging treatment ferromagnetic shape memory alloy magnetic-field induced phase transformation magnetic-field induced shape memory effect martensitic transformation mechanical property sputtered film キュリー温度 スパッタ膜 マルテンサイト変態 マルテン	構造・機能材料	基礎研究(B)	東北大学	14,800,000	強磁性形状記憶合金は、強磁性と形状記憶効果(SME)の2つの機能を併せ持つ多機能材料であり、磁場駆動アクチュエータ材料への応用が期待される。磁場誘起SMEは、高速応答と速縮復帰を可能にする。本研究では、組成の異なるNi <sub>2</sub> MnGa合金スワッチ膜を作製し、SMEを発現させるために拘束時効処理を施し、SME及び拘束組成の影響を調査した。なお合金膜のマルテンサイト(M)変態温度は室温以上にかつキュリー温度(T <sub>C</sub> )以下に制御した。また、合金膜を実用化する際に重要な機械的特性に及ぼす温度および磁場の影響を調査した。さらに実用的な磁場駆動する強磁性形状記憶合金を開発するために、磁気性質の向上が期待される強磁性元素であるFeを添加したNi <sub>2</sub> MnGa合金スワッチ膜を作製し、その構造ならびにSMEに及ぼす磁場の影響を調査した。次に、Fe添加に伴い合金膜のM変態温度は低下し、T <sub>C</sub> は上昇した。得られたFe添加膜はいずれも無添加膜と同様に温度変化に伴い2方向SMEが発現した。Fe添加膜に対して強磁場でX線回折を行った結果、磁場誘起M変態が生じることを直接的に確認した。さらに冷却過程のM変態温度近傍に温度を保持した場合、温度一定でT <sub>C</sub> の磁場印加に伴うひずみ変化は、無添加膜では5Tの磁場印加の20%程度であったが、Fe添加膜では約40%と増大することがわかった。このことから、Fe添加により磁場誘起M変態が起こりやすくなり、低磁場でより大きな変形ひずみを得ることが明らかとなった。		
大容量セラミックスコンデンサ用ランタノイド硫化合物の開発	2004年度～2006年度	平井 伸治(HIRAI, Shinji) 室蘭工業大学・工学部・教授 (10208795)	Dielectric material Electrical resistivity Figure of merit Phase transformation Rare earth sulfide Thermoelectric material Thermal conductivity Thermopower ゼーベック係数 不純物 希土類硫化物 希土類酸化物 熱伝導率 熱電電性指数 熱電材料 相変態 組織制御 脱酸剤 誘電体材料 電気抵抗 高誘電体材料	金属生産工学	基礎研究(B)	室蘭工業大学	14,300,000	La <sub>2</sub> S <sub>3</sub> やGd <sub>2</sub> S <sub>3</sub> のβ相は正方形に属しており、高温でナローギャップ半導体である立方晶のγ相へと相変態する。一方では特有なサイトに存在する硫黄は酸素と置換できるため、その組成はLn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> X <sub>1.5</sub> X <sub>2</sub> O(X <sub>1</sub> O≤X <sub>2</sub> ≤1)となる。β相のLa <sub>2</sub> S <sub>3</sub> 3相結体をバルブ電機集結法により作製し、比誘電率を測定したところ、500Hz〜1MHzの周波数域において常温で10 <sup>6</sup> に達する巨大な比誘電率を確認した。しかし、顕微鏡分光分析による光学フォノンモードのソフト化は観察されず、巨大な比誘電率の発現は強誘電相に起因したのではないことが確認された。一方、酸素濃度の分相に起因するものも推定されるランタン濃度の変化が観察され、誘電特性が焼結条件にも敏感であることから、導電性のあるβ相と絶縁体であるγ相の二相が存在し、境界層コンデンサのような機構により大きな誘電率が発現するものと推定した。次に、La <sub>2</sub> S <sub>3</sub> やGd <sub>2</sub> S <sub>3</sub> のβ相は、高い融点、低い格子熱伝導と縮退半導体的な振る舞いを示し、さらに広い固溶範囲がキャリア濃度の最適化を可能にすることから、高温熱電材料としての可能性を調査した。従来、La <sub>2</sub> S <sub>3</sub> では不純物酸素がβ相を安定化するため、硫酸を目的に金属Tの添加によりβ相を安定化がなされた。ZTは1000Kで0.21まで達している。本研究ではβ相においてZTが向上することを初めて見出し、この強電熱機構がアンダーソン局在に由来するものと察された。また、β相が存在しないGd <sub>2</sub> S <sub>3</sub> については、キャリア濃度の最適化を図るためにGd <sub>2</sub> を添加したところ、ZTはGdS <sub>1.5</sub> 0.04からGdS <sub>1.4</sub> 0.15まで増加することを明確にした。最後に、従来の希土類硫化物のCS <sub>2</sub> ガス硫化法に対し、NH <sub>4</sub> SCNの分解ガスによる硫化を試み、La <sub>2</sub> S <sub>3</sub> とGd <sub>2</sub> S <sub>3</sub> において不純物酸素の含有量は不変であったものの、不純物酸素の大幅な低減を可能にした。このγ相のGd <sub>2</sub> S <sub>3</sub> 3相結体では、焼結体の多孔質化により熱電能と電気抵抗が増加したが、これらの細孔は真空加熱により次第に消滅することを確認された。		





疑似速度整合超高速電気光学変調器によるテラヘルツ帯時空融合型光制御	2004年度～2005年度	小林 哲郎(KOBAYASHI, Tetsuro) 大阪大学・大学院 基礎工学研究科・教授 (10029522)	domain inversion optical frequency shifter optical streak camera quasi-velocity matching ultra fast optical beam deflection ultra fast phase modulator モリリツク光パルス生成器 光ストリークカメラ 光ビームの時軸回転 光周波数シフター 分極反転 分極反転光デバイス 広帯域光偏向 疑似速度整合型電気光学変 疑似速度整合型電気光学変調器 時空融合型光制御 超高	応用光学・量子光学	基礎研究(B)	大阪大学	15,000,000	本研究は、電気光学効果による光位相変調において、光ビーム断面内での変調指数、変調位相、変調周波数帯域の複合的な分布を創意工夫することで時空融合型光制御デバイスの新しい機能を創成し、新規デバイスを開発することを目指している。研究期間では、新規デバイスと同時並行して、疑似速度整合型電気光学変調器の高速性、広帯域サイドバンド生成の特長に着目した新しい光制御の手法を理論的に検討した。本研究助成金交付期間内で得られた主たる成果の概要を以下に示す。 1. 超高速電気光学偏向器とそのパルス生成への応用 分極反転形状を光波とマイクロ波の速度非整合を考慮に入れた上で理論的に設計し、世界最速(周期:61.5ps)で大きな解像度を有する超高速光偏向器を実現した。 2. 光ストリークカメラ 1)で開発した超高速光偏向器と回折格子とを一つの電気光学結晶に集積化した、モリリツク光パルス生成器の設計と試作を行い、所期の動作を確認した。 3. 電気光学定在波位相格子によるピコ秒光パルス生成 ひし形状の分極反転をすることで、パルス出力ビーム断面内に定在波の位相分布を与える新しい変調器を考案した。実験では16.25GHzの変調周波数でデバイスを駆動し、パルス幅1ps、繰り返し周波数32.5GHzの超短光パルスを直接生成できることを確認した。 4. 超高速光偏向による光ビームの時軸回転 高速光偏向器による光信号の時間空間変換と回折格子の時間遅延機能を組み合わせた光ビームの時軸回転の手法を新たに提案し、理論的に検討した。 5. 多段位相変調と分散制御による大振幅可変光周波数シフト/変換 多段位相変調とサイドバンド成分間の相対相制御により、変調周波数で離散化されるが、1THz以上に亘り連続的にシフト量が可変な新しい光周波数シフターを考案し、動作を数値解析により確認した。			
フィン効率100%の微細ピン群を有する超高性能ヒートシンク	2004年度～2005年度	望月 貞成(MOCHIZUKI, Sadanar) 東京農工大学・大学院 共生科学技術研究部 教授 (10013715)	Boiling Flow visualization Heat pipe Heat transfer Heat transfer enhancement Multiphase flow Phase change ヒートパイプ 伝熱 沸騰 流れの可視化 混相流 熱輸送促進 相変化	熱工学	基礎研究(B)	東京農工大学	13,200,000	CPUの発熱密度は増加の一途をたどっている。そこで従来ない新しい原理に基づく超高性能ヒートシンクの開発が必要である。本研究はフィン内部に沸騰による流体駆動機構を有する熱輸送システムを提案し、吸熱・熱輸送、放熱の各過程に生ずる物理現象を把握・解析することにより、その実現可能性を明らかにすることを目的とする。 伝熱実験では、加熱・冷却部ヘッダ間を一路の細管で接続した銅製2次元テストセクションを用いた。作動流体は $\sim$ 134 $\mu$ mパイプ内径は0.51 $\sim$ 2mm、長さ100mmである。ヘッダ間温度差、ヘッダ径(1mm,6mm)、パイプ本数(2,3,6,12)を変化させた。実効伝導率のピークは管径が小さい程大きく、銅に比べ最大200倍となった。また、本研究の並列細管型は従来の蛇行閉ループ型に比べ、数倍から数十倍高い実効伝導率を示した。さらに実験のヒートシンクを模擬した3次元テストコップ(内径0.51mm)での実験も行い、液封入により熱抵抗を最大80%減少させることができた。 流れの可視化実験では、ガラス製2次元テストセクション(内径1.0,2.4,4.4mm、細管本数1 $\sim$ 6本)を用い、高速ビデオで撮影した。作動流体は水またはエタノールである。ヘッダ間温度差の増加により、気泡移動速度も増加した。細管本数が2 $\sim$ 6本では、テストコア内を気相と液相が上下・下降する内部流動があり、潜熱・顕熱輸送の両方を行うことがわかった。また、細管内径1mmの場合には上昇流での液輸送は見られず、蒸気のみが上部ヘッダに流れ込むように細管内容の影響が見られた。 数値計算では、気圧増減、気泡-相流の解析を行った。CFD法を用い、相変化が無い場合にはラプラグの移動を再現でき、相変化モデルとして温度回復法を用いたが、相変化界面位置の捕捉を十分な精度で行うには至らず、蒸気による液駆動を再現することは出来なかった。			
沸騰蒸発条件の最適化による超蒸熱密度対応小型冷却システム開発のための基礎研究	2004年度～2005年度	大田 治彦(OHTA, Haruhiko) 九州大学・大学院・工学研究科 教授 (50150503)	boiling critical heat flux heat transfer marangoni microlayer narrow channel phase change self-wetting センサー マランゴニ ミクロ液膜 局所熱伝達 沸騰 危険路路 相変化 自己浸潤性	熱工学	基礎研究(B)	九州大学	12,500,000	超蒸熱密度に対応の小型冷却システムを開発するために、冷却手段として除熱能力の高い沸騰・蒸発現象の適用を考えた。本研究では、この冷却方法に関する基礎的、普遍的、系統的な考え方を見出すことを目的に、基礎現象の解明から実際の応用形態までの各種実験を行った。まず、超蒸熱蒸騰沸騰と問題となる気泡底部の液膜現象に着目し、薄液膜挙動の詳細観察と気液二相流に沿った熱流分布を詳細に計測するために、8個の温度センサーからなる透明伝熱面を開発した。さらに、フーリエック制御システムを導入して、最も単純な条件である伝熱面表面温度一定条件下での加熱を実現した。水平下向きでの沸騰実験により、沸騰気泡付着部において沸騰気泡底部の薄液膜蒸発による伝達促進効果を確認することができた。 自己浸潤性混合媒体の使用による限界熱流束の増大を目的として、気泡底部のマイクロ液膜挙動に影響するマランゴニ効果を検証するために、基礎実験として最も基本的なフル・膜沸騰実験を冷却媒体としてアルコール水溶液を使用し、その熱伝達特性と限界熱流束を明らかにした。その結果、熱伝達特性、限界熱流束ともに濃度依存性を有することが分かった。また、限界熱流束に関して純水を上回る結果が得られ、自己浸潤性混合媒体を使用することの有用性が示された。加えて、混合媒体の沸騰に対して影響する物性・現象の整理を行い、必要な相平衡データおよび物性データを推算した。 危険路路内強制流動沸騰は、実際の冷却システムでの応用形態の一つであるが、本研究では危険な主流路と非加熱副路路から構成される新しい構造の冷却システムを開発した。副路路からの液体供給によって、限界熱流束を2倍程度以上に増大させることが可能であることを確認した。			
新しい酸化スズ系機能材料の理論設計と創出	2004年度～2005年度	田中 功(TANAKA, Isao) 京都大学・工学研究科・教授 (70183861)	first-principles calculation solid solution phase molecule adsorption colloid solution surface thin film tin oxide ガスセンサ 分子吸着 固溶体 準安定相 第一原理計算 薄膜 表面 酸化スズ	無機材料・物性	基礎研究(B)	京都大学	15,100,000	酸化スズ(SnO <sub>2</sub> )の高感度・高選択性ガスセンサ特性を開拓するため、温度と酸素分圧という2つの重要な因子を精確に取り入れた理論計算とパルスレーザー堆積法による薄膜合成を行った。 まず、第一原理フォノン計算、クラスター展開法、モンテカルロ法を併用し、酸化物多元素系の表面について有限温度・圧力下での構造とエネルギーを理論予測するための手法を開発した。この手法の精度をMgO-ZnO等の酸化物モデル系を用いてテストした結果、相境界の温度および圧力依存性を良く再現することがわかった。また、表面については安定な構造および偏析量を温度の関数として定量的に算出できることが示された。次に、この手法をSnO <sub>2</sub> 表面上の分子吸着シミュレーションへ応用した。具体的には第一原理PAW計算とそれに基づいたフォノン計算を連携させ、酸素分子や水分子の吸着サイトおよびエネルギーを酸素分圧、水蒸気分圧、温度の関数として算出した。この吸着シミュレーションを様々な表面構造について系統的に行った結果、酸化エネルギーは表面構造や空孔気圧に大きく依存することが判明した。また、この計算結果に基づいて良好なセンサ特性を示す表面構造の設計指針を示した。 さらに、SnO <sub>2</sub> の型I-II半導体の可能性を探るため、SnO <sub>2</sub> 中の様々なドープメントについて系統的な第一原理計算を行い、ドープメントの形成する電子構造を評価した。その結果、サイズミスマッチの大きなドープメントをSn位置に高濃度に置換溶解させることにより、バンドギャップ内に新たな不純物由来のバンドが形成され、これにより伝導性を制御できることが示唆された。また、この計算結果を指針として、パルスレーザー堆積法によるドープメント添加SnO <sub>2</sub> 薄膜の合成を行った。			
水環境の健全な維持に貢献する有機-無機ナノ構造を備えた浄水処理中空糸膜の設計開発	2004年度～2005年度	松山 秀人(MATSUYAMA, Hideto) 神戸大学・工学部 教授 (50181798)	Hollow Fiber Membrane Organic-Inorganic Composite Membrane Porous Membrane Thermally Induced Phase Separation Water Treatment ナノ粒子 中空糸膜 多孔膜 有機-無機コンポジット膜 水環境維持 浄水処理 熱誘起相分離 熱誘起相分離法 相分離法	化学工物性・移動操作・単位操作	基礎研究(B)	京都工芸繊維大学 神戸大学	12,200,000	本研究では、ポリフッ化ビニレン(PVDF)/ジエチルフタレート系について、膜中に有機化クレイを添加し、有機-無機コンポジット膜の作製を試みた。得られた構造は二層連続構造であり、液-液相分離による構造の可能性が示唆されたが、DSGによる詳細な検討の結果、相分離構造はあくまで固-液型であり、溶液中のクレイが結晶格となつて構造が形成されることがわかった。得られた中空糸膜が、従来の2倍程度の透水性を有することが明らかになった。 TiO <sub>2</sub> を含む膜では主に光触媒反応による膜表面付着物の分解について検討されたが、ここではTiO <sub>2</sub> の超親水性に着目し、ポリサルホン(PS)/TiO <sub>2</sub> コンポジット膜の作製と膜特性評価を行った。用いたTiO <sub>2</sub> は粒子径180nmのナノ粒子である。TiO <sub>2</sub> をPSに対して2倍量添加した場合にも良好な中空糸膜が得られた。XPS測定により表面には有効にTiO <sub>2</sub> が存在することが確認された。また、TiO <sub>2</sub> の添加により、膜の親水性は向上したものの、透水性はほとんど影響を受けなかった。得られた中空糸膜にUV照射後、その膜表面接触角を測定したところ、TiO <sub>2</sub> 添加による膜の親水性は16日以上に亘って維持されることが明らかとなった。さらにUV照射TiO <sub>2</sub> 含有膜をブラウニング照射下で保存したところ、7日中には接触角は約10°と顕著な親水性を示した。中空糸膜をタンク質(BSA)溶液に浸漬することにより、膜の劣化特性の評価を行った。UVを照射しない場合においてもPS/TiO <sub>2</sub> コンポジット膜は、PS膜と比べ低劣化性を示した。UV照射後ではコンポジット膜の劣化特性はさらに抑制されることを見出した。従って、低フーリング特性を有する膜の開発に成功したと言える。			
レーザー駆動パルステネーションエンジン用固相爆薬混合物の製作と応用	2004年度～2005年度	永山 邦仁(NAGAYAMA, Kunihiro) 九州大学・大学院 工学研究科 教授 (20040446)	DDT bar coater method condensed phase explosive detonation detonation failure laser ignition limiter diameter thin film テナーション パーコーター法 レーザー起爆 固相爆薬 爆轟中断 炸薬 限界薬性	航空宇宙工学	基礎研究(B)	九州大学	14,100,000	本研究では取り扱やすくかつ安全性も考慮した薄膜状の爆薬を製作した。膜作製方法、条件を変えた一連の実験を行った。具体的には超爆薬物質DDNP(ジアジニロアジニロフアノール)を主体とし、バインダーとしてCTA(カルロス-Tリアセート)を追加する。溶解してシロメタンを用いた。パーコーター法もしくは、手フロンテーで隔壁を製作して流し込む方法を用いることにより50 $\mu$ mから500 $\mu$ mにおよぶ膜厚の混合物膜を製作した。製作した膜はパルスレーザー照射による反応試験を行った。バインダー物質の質量分数が小さいと膜厚性のあるDDNPの最大質量分率は90%程度であった。製作した膜を観察すると、DDNPの粒子が下方に沈みCTAが上に集まる構造となっていた。厚い膜を製作する場合は繰り返し溶液を足して作るため、上に塗った構造が繰り返し塗り返され周期構造となると推測された。本研究で検討した条件の範囲では爆轟性を失い爆発となつた。密閉した条件では大気中で行った実験と比較すると、反応速度が速く破壊力、音響とも激しくなる。したがってたとえ爆薬でも境界条件による反応過程の影響は多大である。本研究で行った大気中の実験からきわめてユニークな燃焼過程が観察された。すなわち、パルスレーザー照射によるナノ秒のエネルギー投入により膜のレーザーアブレーションが生じる。大気中であるので、空気中の強い衝撃波、ブラスマブル、膜上面を上方向へ流れ始める。レーザー投入後100ms以内この過程の後、アブレーションで膜からはがれた微粒子が散らばると同時に燃焼が始まる。(レーザー投入後1ms程度)最後に膜面が加熱されて着火する。この着火はレーザー照射点ではなく広範囲の表面が反応を始める。以上の段階燃焼過程は本研究の目的である。当初のレーザー照射法を用いた比較的薄い膜を製作試験していたが、反応過程が膜厚に依存することの考慮、厚く、厚くは限界薬性効果が薄れるとの考えから厚い膜の試験へと写った。結果的には厚い膜の方がかつて反応持続が容易でなくなる。今後も詳細な検討が望まれる。			

放射光粉末構造解析による光励起状態の構造決定	2003年度～2007年度	守友 浩(MORITOMO, Yutaka) 筑波大学・大学院・数理物質科学研究科・教授 (00283466)	Electronic phase diagram Electrostatic potential imaging MEM charge density MEM電子分布解析 Photoinduced phase transition SPring-8 Synchrotron-radiation X-ray Time-resolved spectroscopy Transition metal complex Valence-control フォト秒時間分解分光 価数制御 光誘起相転移 放射光X線 時間分解	物性I	基礎研究(S)	名古屋大学一筑波大学	114,270,000	本研究の目的は、時間分解分光等により遷移金属錯体の光誘起現象を探索するとともに、第三世代放射光X線を利用して、構造物理の立場から遷移金属錯体の光誘起現象を明らかにすることである。そのため、偏向電磁石ビームラインでは照射下での構造解析を行い、アンジュラタービームラインでは時間分解X線回折装置を建設した。主要な研究成果を以下に列挙する。 (1) [Fe <sub>2</sub> (bz) <sub>2</sub> ](BF <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> において、動的平衡状態(光励起と熱緩和が釣り合った定常状態)の一次相転移を発見した。さらに、この動的相転移の時間発展を詳細に解析し、光誘起された高スピンサイトの化学圧力が重要な役割を担っていることを明らかにした。 (2) [Fe(ph <sub>en</sub> ) <sub>2</sub> ](NCS) <sub>2</sub> において、オン/オフスイッチの実現した。さらに、それぞれの状態の電子レベルでの構造解析に成功した。 (3) 層状反強磁性体LaMnO <sub>3</sub> にスピンの光学応答を調べ、臨界緩和現象の確認した。 (4) BL40Xビームラインに時間分解X線回折装置を建設した。 (5) RuMn[Fe(OH) <sub>6</sub> ]の電子レベルの構造解析に成功した。さらに、静電ポテンシャル法により励起状態を明らかにした。 (6) 価数制御されたCo-Fe-As架橋金属錯体膜を合成し、電子相図を完成した。 (7) フォト秒時間分解分光により、OT状態の寿命増大効果を発見した。
スピン・電荷・光結合系の新機能開拓	2003年度～2007年度	五神 真(GONOKAMI, Makoto) 東京大学・大学院・工学系研究科・教授 (70161809)	nonlinear optical response oxide electronics photoinduced phase transition quantum system quantum spin Hall effect spin-charge-photon coupled system strongly correlated electron system time resolved magneto-optical spectroscopy スピン・電荷・光結合系 光誘起相転移 強相関電子系 時	物性2	基礎研究(S)	東京大学	102,700,000	固体において電子間の相関によって発現する磁性と光学応答の結合などの特異機能の探索とその応用について、メンバーの連携の下で以下のような研究を進めた。 (宮野)光誘起相転移などの特異物性の応用を念頭に、薄膜試料作製技術の開拓を進め、薄膜中で構造相転移を許容できる事実を証明し、永続的光誘起絶縁体・金属転移や新しいタイプの超巨大磁気抵抗効果を見いだした。(十倉)スピンの幾何学配置が誘電応答に与える効果に着目し、物質開拓を進め、特異な分極やスピンの構造によって生じる光学的電気磁気効果や巨大非線形カー効果効果を見出した。サイクロイド型磁気構造を持つ物質で、ジャロシンスキー-守谷相互作用の逆効果を通じて分極が生じた磁性誘起強誘電性を発見した。これらの効果がトイダルモーメントやスピントラフィックという概念によって特徴づけられることを示した。(鹿野)分子性結晶を用いて、三角格子量子スピン液体のモット転移近傍で発現する特異なスピン-電荷結合相と超伝導の特異性を明らかにすると共に、電荷-格子強結合現象である中性-イオン性転移の量子臨界点らでの観測に成功した。(永坂)スピンの物理現象に即して理論的に開拓し、熱の発生を本質的には伴わないスピニオン流が波動現象の特異物性の一例に相当し、観測されることを発見した。スピンと電場、光の結合をターゲットとしてスピントロニクス効果と絶縁体への拡張、光のホール効果の予言、マルチフェロイック物質の基本的機構を記述する理論を確立した。(五神)多体の電子相関に起因する光機能の開拓を行った。磁性半導体において、磁気カー効果と中赤外過渡分光を組み合わせて、強磁性が磁気ポーロンを媒介して発現していることを見いだした。テラヘルツ領域の高感度エリブトメリー法による、非接触ホール効果測定法の開拓、強磁性半導体から磁化に起因する高効率テラヘルツ放射を観測した。
ミュオン物理学の新展開を狙うスーパー・ミュオン・ビームの研究	2003年度～2007年度	久野 良孝(KUNO, Yoshitaka) 大阪大学・大学院・理学研究科・教授 (30170020)	3次元コードTOSCA FFAG FFAGリング PRISM RF RF加速電場 beam cooling magnet monoenergetic muon muon collider neutrino factory phase rotation α線 トリムコイル ニュートリノファクトリ ビーム冷却 ビーム高輝度化 ファインメット オーブロン振動条件 ミューオン ミューオンコライダー ミューオン蓄積リング 位相空間回収 位相空間回転法 単粒子トラッキング 厚板 固定磁場強収束加速器 固定磁場強		学術創成研究費	大阪大学	513,500,000	現在利用できるミュオン・ビームでは、その強度や性質はともに不十分であり、実験条件に厳しい制約を課している。そこで、我々は、ミュオン科学を飛躍的に発展させるために、ミュオン・ビームの強度を従来の約1万倍程度に増加し、かつ位相空間回転法という高輝度化の方法を施すこと、および非常に広いエネルギー分布を持つミュオン・ビームをエネルギーの幅が、いわゆるスーパー・ミュオン・ビームという名のミュオン・ビームを実現することを目指している。特に、大阪大学グループは、ミュオンを用いた素粒子物理学の研究を推進しており、本研究で開発されるスーパー・ミュオン・ビームを使って、背散乱トンのレプトンフレーバー保存の破れを現在の実験精度を10 <sup>6</sup> 倍ほど上回る精度で探索するPRISM/PRIME実験などを計画している。 本学術創成研究費では、位相空間回転法という新しい高輝度化手法に必要な要素技術開発と同手法の原理検証を目的とした。まず、本手法に不可欠である超高電圧勾配高周波加速器システム、及び大口径固定磁場強収束型ミュオン蓄積リングの開発に成功した。さらに、これらを組み合わせ位相空間回転法試験リングを建設し、位相空間回転法の原理検証実験を行った。これにより位相空間回転法に必要な基礎技術の開発が完了し、このリングでの試験により設計通りに荷電粒子が高輝度化されることを実証された。 これにより、次世代ミュオン科学の計画が大幅に推進した。また、新しく考案したα線によるビーム光学評価手法も、加速器性能を簡単に正確に評価できる重要な技術として高い評価を得た。これらの研究開発は、ミュオン科学の発展のみならず、将来の加速器計画(例えば、ニュートリノファクトリ計画やミュオンコライダー計画など)への波及効果も大きく、多大な技術的貢献をなすものであり、本研究計画の成功は広く賞賛されている。
強磁場によるナノ自己構築構築と機能操作	2003年度～2005年度	尾関 寿美男(OZEKI, Sumio) 信州大学・理学部・教授 (60152493)	calcium carbonate corrosion fluctuation magnetized water mesoporous silica organo-metal complex vesicle volume phase change-gel ゆらぎ カーボンナノチューブ ゲル シリカ ナノ空間 ナノ粒子 ベンカル メンボラスシリカ 体積相転移ゲル 有機金属錯体 炭酸カルシウム 相分離 磁化水 磁場磁気吸着 脂質2分子膜 腐食 金属樹 非線形化学反応 高分子ゲル		特定領域研究	信州大学	39,000,000	非磁性のナノドログル、脂質ベシクル、コアセルベート、トリブロックポリマー/シリケートハイブリッド、メンボラスシリカや弱磁性の有機金属錯体のコロイド系集合体を磁場下で組織化および機能化した。磁場応答性部位に注目して、細孔性固体や生体関連物質を中心に磁場の作用を探索的に研究した。 構造の磁場による自己組織化、磁気異方性添加物による機能の磁場感応性を検証し、これらによって、弱磁性系の異方性ナノテクスチャーやナノ構造を、磁性をベースに簡便に、内部から組み上げた新しい方法論の確立を得た。その例として、有機金属錯体を磁場下で調整し、同じ溶液組成から異なる3つの結晶構造が誘起されることを実証した。これは結晶構造に由来する磁化の異方性に原因があると推定した。また、溶液中の濃度から異なる磁気力制御を動的および静的光散乱によって検証するとともに、非線形化学反応に伴う構造形成の磁場応答を時空構造を追跡した。体積相転移ゲルに添加物を加えて、外部磁場によって極めて大きな体積変化が誘起できることを、初めて実証した。 磁場中を通過した水の機能が変化するという説の真偽を検証した。超純水を真空蒸留するなど極めて慎重に検討した結果、酸素を溶存した純水は磁束変化によって構造および機能を変化させることがわかった。その原因を理解することは現在の理論的枠組みでは容易ではないので、なお、慎重に検討を継続している。
分子磁性体における双安定性の構築とその制御	2003年度～2006年度	阿波賀 邦夫(AWAGA, Kunio) 名古屋大学・物質科学国際研究センター・教授 (10202772)	Magnetic bistability Molecular magnetism Nanomagnet Photo-induced phase transition ナノ磁石 光誘起相転移 分子磁性体 双安定性		特定領域研究	名古屋大学	83,000,000	無機物と有機物の中間に位置するような環状テラジラジカルを研究対象に選び、新規物性開拓に努めた。その結果、誘導体TTTAにおいて常磁性-反磁性双安定性の光および圧力制御に成功し、高い転移温度をもつ有機磁性体BBDTA塩を得ることができた。研究期間の後半には、局在と非局在電子系の狭間で見られるような、BDTA塩において配位子-対イオン変換を伴う電荷移動相転移の発見し、NT塩では電荷秩序状態における非線形電気伝導の発現を見出した。そのほか、テラジラジカル環をもつボルフィラジン化合物において、自己集積薄膜の作製に成功し、電気化学センサーとしてシリカ/ポリピロリジンや電気伝導度の高い上昇を見出した。 一方、単分子磁石の研究では、Mn12の化学修飾によってその磁気異方性の起源に對して分子論的な洞察を与えたほか、研究を大きく展開し、このようなクラスター錯体や二次電池の活性物質とすることで実証した。 さらに、サブミクロン中空球磁性体の合成に挑戦し、800nm程度のポリスチレン-ピーズをテンプレートとし金属風酸化物を表面に均一沈着させ、その後水素下あるいは真空中で焼すことによって、hcpおよびfcc-Co <sub>3</sub> O <sub>4</sub> 、α-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (ヘマタイト)、Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> (マグネタイト)など、様々な磁性体においてこの構造を実現した。温度に著しく依存する保磁力など、特異な磁性を見出すことができた。
ナノチューブ中での水とシリコンの構造と相転移ダイナミクス	2003年度～2006年度	田中 秀樹(TANAKA, Hideki) 岡山大学・大学院自然科学研究科・教授 (80197459)	Nanotubes Phase Transition Simulation Water フォルマス水 カーボンナノチューブ グラス/スレート シミュレーション シリコン ナノチューブ 一次元 包接水和物 多重占有 水 永準一次元空間 相挙動 相転移	ナノ構造科学	基礎研究(A)	岡山大学	37,180,000	球の詰め込み問題は古くから存在し、近年になって三次元空間における最密充填構造の「証明」がなされたことは有名だが、円筒への剛体球の詰め込み問題が取り上げられたのはごく最近である。この研究は準一次元系の相転移についての統計力学の問題としても興味深く、カーボンナノチューブに代表されるナノ細孔内に導入された物質の結晶構造の解明とも関連する。特に興味深い結果は、第一に、最密構造には複数の結晶構造と螺旋構造が存在すること、第二に、筒の直径の関数として最大充填率の一次関数に不連続性が現われること、である。この剛体球で予測された構造のうちいくつかは、カーボンナノチューブ内の0.6nmのシミュレーションでも確認され、その後、実験でも観測された。0.6nmのモデル系において、われわれのモデル系においても、液体状態から自発的に形成するいくつかの準一次元秩序構造と二次元空間に開いた、三角格子があらわれ、最大直径の範囲内で三角格子を折って得られるすべての構造を組み立て、最急降下法によって圧力一定の元でのポテンシャルエネルギー極小構造を計算し、各構造の熱力学的安定性を自由エネルギー(この場合はOKIに対応するのでエンタルピー)で評価した。三角格子の区別可能な折り方とその結果得られる準一次元構造を直径順に並べると、ある所定の順序で結晶構造と螺旋構造があらわれる。最初の10構造については円筒直径の関数としてエンタルピーをプロットすると9個の交点がえられ、この直径範囲内に実際10個の相が安定存在して共存する可能性が示唆される。この計算を様々な圧力下で行うことにより、直接圧力平面上に9本の相境界線が得られる。次に分子動力学計算を行い、予想した構造が予想した直径領域で自発的に形成されることを確認した。

<p>ミクロ不均一性制御による高温超伝導体の光学スペクトル操作</p>	<p>2003年度 ～2006年 度</p>	<p>内田 慎一(UCHIDA, Shin-ichi) 東京大学・大学院理学系研究科・教授 (10114399)</p>	<p>Josephson plasma STM STS T<sub>c</sub>向上 competing orders disorder in crystalline lattice high-T<sub>c</sub> superconductivity microscopic heterogeneity optical response pseudogap phase ジョセフソン・プラズマ ストラップ秩序 ノード準粒子 ボルテックス ミクロ不均一性 光学スペクトル 光学応答 反ノード準粒子 擬ギャップ 擬ギャップ相 準粒子干渉 相結合 磁場誘</p>	<p>物性2 基盤研究(A)</p>	<p>東京大学</p>	<p>49,270,000</p>	<p>Cu酸化物の高温超伝導は反強磁性モット絶縁体への化学ドーピング操作により実現する。ドーピング操作あるいは酸素ノストイキオメリーは必然的に高温超伝導体結晶に乱れを導入することになる。この乱れがCuO<sub>2</sub>面の電子状態と超伝導特性に与える影響は超伝導の基礎・応用の両面で重要であるが、系統的に調べた研究はこれまでになかった。本研究では、乱れを制御可能な形で導入した高温超伝導体単結晶試料の作製を行い、サブミリ赤外の光学スペクトル、走査型トンネル電子顕微分光(STM/STS)、そして角度分解光電子分光様々なスペクトルスコピーを観測して、乱れが電子構造、超伝導特性そして光学スペクトルに与える影響を明らかにした。 主な研究成果は、 (1)高温超伝導状態では、性質の異なる2種類の準粒子が存在する。ノード準粒子は乱れの影響は本質的に小さく、長い寿命を保つため量子力学学的に電子状態の局所的変動を起すことを行った。一方、アンチノード準粒子は乱れの影響を強く受けてインコヒーレントになり、高温超伝導状態のミクロ不均一性の要因となっていることが明らかになった。 (2)結晶の様々なサイズに存在する乱れのうち、頂点酸素を含む隣接層の乱れがCuO<sub>2</sub>面の電子状態に大きな変化をもたらした。境界温度T<sub>c</sub>を減少させていることを示した。CuO<sub>2</sub>面では超伝導秩序とは別の秩序が共存・競合しており、この乱れが別の秩序を増強させること、またこの秩序が擬ギャップと密接に関連しており、乱れのために一種の「電子ガラス」状態を形成していることをSTM/STSで観測することに成功した。 (3)アンチノード準粒子は、軸光学応答を支配している。高温超伝導体はジョセフソン接合が軸方向に積層したジョセフソン超格子とみなされたため、光学応答はジョセフソン・プラズマモードで特徴づけられる。磁場をCuO<sub>2</sub>面に平行に印加し、ジョセフソン接合を変調させると新たな光学活性なプラズマモードが現われ、その周波数や強度を磁場の強さで制御できることを示した。</p>	
<p>超高圧下の精密な固体物性研究による圧力誘起量子相転移機構の解明</p>	<p>2003年度 ～2006年 度</p>	<p>清水 克哉(SHIMIZU, Katsuya) 大阪大学・極限量子科学研究所・教授 (70283736)</p>	<p>heat capacity high pressure lithography metal-insulator transition quantum phase transition superconductivity thermal expansion ひずみゲージ リソグラフィー 比熱 比熱測定 熱膨張 超伝導 超高温 量子相転移 金属絶縁体転移</p>	<p>物性2 基盤研究(A)</p>	<p>大阪大学</p>	<p>50,180,000</p>	<p>超高圧発生技術と微細加工技術を融合させることによって、近年の物理学の中心的研究課題のひとつである量子相転移現象(超伝導転移・磁気相転移・絶縁体-金属転移等)の機構解明を目的として期間中を通して開発研究およびそれらを用いた物性研究を行ってきた。以下に各測定技術開発と研究成果を示す。 1.電気抵抗測定 リソグラフィとリフトオフプロセスを応用した方法(以下リソグラフィ)によって電極間隔5μm以下の微細電極を作成可能になった。これにより150万気圧を超える超高圧下の測定を可能にしてCaの高温超伝導の検出に至った。 2.比熱測定 SQUID振動コイル型磁束計を用いたDAC中の精密磁化測定装置の改良を行った結果、SN比の良い信号が常に安定して得られるようになった。広い温度範囲にわたって測定精度が向上した。 3.比熱測定 電気抵抗測定用の電極に加えて金鉄-クロム熱電対を微細に試料に取り付けて交流比熱測定と電気抵抗測定の同時測定を可能にした。これによりスクリューダイヤモンド化合物PrRu<sub>4</sub>AP<sub>12</sub>の圧力下の金属絶縁体転移の機構の解明を進めた。 4.熱膨張 リソグラフィによって100μm長さ程度の試料への取り付けを可能にした。圧力中の測定には至っていないが常圧下でMnの反強磁性転移にも十分な感度で検出できることを示した。 5.構造解析 リソグラフィによる電気抵抗測定と放射光X線構造解析の同時測定を低温高圧下で可能にした。これにより、単体金属リチウムの超伝導転移温度と結晶構造変化および100万気圧の超高圧力に至るまで対応させることに成功した。成果報告会を開催し、本研究期間において分担者によって達成された研究成果の報告と今後の研究協力について議論を行った。</p>	
<p>マントル及び海洋地殻構成鉱物の高压平衡相とマントル深部の化学的不均質</p>	<p>2003年度 ～2006年 度</p>	<p>赤坂 正樹(AKAOKI, Masaki) 学習院大学・理学部・教授 (30126560)</p>	<p>calorimetry high-pressure experiment high-pressure phase equilibrium mantle oceanic crust perovskite post-perovskite post-spinel エンタルピー エンタルピー カルシウムフェライト スピネル ペロプスカイト ホランダイト ポストスピネル ポスト・ペロプスカイト マントル ラマン分光 ラマン分光測定 六方晶系相 変型スピネル 核磁気共鳴 格子振動モデル 海洋地殻 熱測定 熱測定実験</p>	<p>岩石・鉱物・鉱床学 基盤研究(A)</p>	<p>学習院大学</p>	<p>50,570,000</p>	<p>1.MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>系、MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-NaAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub>系及びKAlSi<sub>3</sub>O<sub>8</sub>の高压平衡関係を調べ、カルシウムフェライト相、六方晶系相、ホランダイト相の安定性を高压実験、熱測定、ラマン分光に基づく格子振動モデルにより決定した。 2. (2)7Al-NMFS成分と核磁気共鳴測定による、MgSiO<sub>3</sub>-MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>系ペロプスカイト型固溶体では、Mg<sup>2+</sup>&lt;2&gt;&gt;Si<sup>4+</sup>&lt;4&gt;&gt;2Al<sup>3+</sup>&lt;3&gt;の置換と2Si<sup>4+</sup>&lt;4&gt;+O<sup>2-</sup>&lt;2&gt;→2Al<sup>3+</sup>&lt;3&gt;+V<sup>0</sup>の置換(V0は酸素欠陥)の両方が起こることを解明し、酸素欠陥の無秩序分布を明らかにした。 3. CaMgSi<sub>2</sub>O<sub>6</sub>、CaSiO<sub>3</sub>及びCa<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>SiO<sub>7</sub> 5-CaSi<sub>2</sub>O<sub>5</sub>系の詳細な高压相関係を高压実験によって決定し、さらに新たに開発した高温熱測定法によりそれらを精密化した。Ca<sub>2</sub>同族元素であるSrのケイ酸塩Sr<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>の高压相関係も決定し、Sr<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>三方晶系ペロプスカイト、BaGe<sub>2</sub>O<sub>5</sub>Si型Sr<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub> 2.5高压相の存在を明らかにした。 4. 種のA<sup>2+</sup>&lt;2&gt;B<sup>4+</sup>&lt;4&gt;O<sub>3</sub>型ペロプスカイト型高压相の安定領域を高压実験で決定し、同時に生成エンタルピーを測定した。その結果、生成エンタルピーとA<sup>2+</sup>&lt;2&gt;、B<sup>4+</sup>&lt;4&gt;のイオン半径間に明確な相関関係があることが明らかになり、未知のペロプスカイト高压相の生成エンタルピーと生成圧力の予測が可能になった。 5. Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>変型スピネル、スピネル相の標準エンタルピーを測定し、オリビン-変型スピネル-スピネル転移の相境線を経験的に算出した。ポストスピネル転移は深さ660kmの圧力下で1900K程度の温度で起こることが示され、660km不連続面がポストスピネル転移に対応するという説の正当性が確認された。 6. Ca<sub>2</sub>O<sub>3</sub>のポストペロプスカイト転移の高压平衡関係を高压実験、熱測定実験で決定し、相境線がMgSiO<sub>3</sub>と同様に強い正の勾配を持つことを確立した。</p>	
<p>複合機能有機材料(超伝導・スピン液体・新規相転移等)の開発</p>	<p>2003年度 ～2006年 度</p>	<p>齋藤 重治(SAITO, Gunzo) 京都大学・大学院理学研究科・教授 (40132724)</p>	<p>Amphoteric Compound Fullerenes Ionic Liquid Metal-Insulator Transition Nucleobase-Conductor Organic Superconductor Photo-Induced Phase Transition Uniaxial Strain イオン性液体 イオン液体 スピン液体 フラーレン 一軸性重み 光誘起相転移 分子性超伝導体 双性化合物 核酸塩基導電体 金属-絶縁体転移</p>	<p>機能物質学 基盤研究(A)</p>	<p>京都大学</p>	<p>51,220,000</p>	<p>κ型BEDT-TTF塩に対する一軸性ひずみの影響を調べる事により、超伝導転移温度と二次元伝導面内で局在スピンの形成する三角格子構造の異質性との相関関係を明らかにした。ほぼ正三角形のスピンの格子を持つ物質においてスピン液体状態を発見し、さらに超伝導転移温度が一軸性ひずみによって2倍に上昇する事を見出した。 EDO-TTFとその誘導体の構造修飾を行い、(EDO-TTF)2PF<sub>6</sub>塩において光子当たり約500分子が1.5ps以内に準安定状態に移る超高速・高効率の光誘起相転移を起こすことを見出した。また、TP-EDOから特異な磁気構造を持つ2-Mott絶縁体を得た。 MDABO<sub>2</sub>Co-ポリピリジンを含む三成分イオン性Co<sub>60</sub>分子において、Co<sub>60</sub>分子に結合した二量体の存在を明らかにした。また、同じ成分を持つ別物質でCo-ポリピリジンMDABO<sub>2</sub>とCo<sub>60</sub>の両方が配位し、常磁性-反磁性転移を伴ったCo-O(Co<sub>60</sub>)<sup>2-</sup>結合の可逆的解離-生成を起こす物質を得た。 1-アルキル-9-メチルミダゾリウム(C<sub>n</sub>NM)とFe<sup>2+</sup>&lt;III&gt;X<sub>4</sub><sup>2-</sup>(X:Cl,Br)やTEMPOラジカル部位を含む陰イオンからなる常磁性イオン液体を開発した。ブチル基以上の長鎖アルキル基を持つC<sub>n</sub>NM陽イオンとAu<sup>3+</sup>(CN)<sub>2</sub>陰イオンを用い、液体状態で青色蛍光を呈する室温溶融塩を得た。また、ピロリ骨格を含む陰イオンを用いて、液体状態で約500nmに蛍光を示すCo<sub>4</sub>MI塩(融点43°C)を合成した。 インドリンとTCNQの部分骨格を持つD<sub>4</sub>h<sub>22</sub>分子に系統的に置換基を導入し、その詳細な物性解析の結果から電荷移動度の制御や見積り法を確立した。ドドミド縮環型TTFに様々な化学修飾を行い、有機単一成分としては高導電性の分子を得た。シントンとTCNQ誘導体からなる電荷移動結晶を作製し、高い自己集合能や高導電性を示す結晶を得た。</p>	
<p>液相析出法による高次セラミックスナノ構造体の構築</p>	<p>2003年度 ～2006年 度</p>	<p>出来 成人(DEKI, Shigehito) 神戸大学・工学部・教授 (10101065)</p>	<p>Deep-RIE法 Deep-RIE process Deep-RIE法 High dimensional structured Inverse-opal structure Liquid phase deposition method Metal oxide thin films ceramics Metalliferous complex equilibrium Nano-arrayed ceramics Photonic crystals セラミックスナノアレイ セラミックス高次構造体 フोटオニクス結</p>	<p>無機工業材料 基盤研究(A)</p>	<p>神戸大学</p>	<p>50,960,000</p>	<p>数10～100nmの構造周期性を有する高次構造制御を施したセラミックスナノ構造体を液相析出法(Liquid Phase Deposition)LPD法により生成し、その光学的・物理化学的物性について評価することを目的とした。サブマイクロレベルのパターニングを施したシリコン基板やポリスチレンコロイド3次元結晶等をテンプレートとして用いることにより、液相析出法による酸化物薄膜の成膜と高次構造を構築させることに成功した。テンプレート材料としてDeep-RIE法を用いてサブマイクロレベルのパターニングを施したシリコン基板を製作し、その基板をテンプレートとして液相析出法により酸化物薄膜を製作した。最大アスペクト比30程度のランダム構造およびピラー構造が作製可能となり、その形状を転写することによって、高次構造を有するナノスケールの酸化物構造体の作製が可能となった。この手法は任意の形状を有する高次構造体の作製も可能であり、その形状を転写することによって、高次構造を有するナノスケールの酸化物構造体の作製が可能となった。一方、単分散ポリスチレンテンプレートを用いて得られた反転オーレール構造を有する金属酸化物の様々な角度での可視絶対反対ベクトル測定により、反転オーレール構造に起因するストップバンドによる反射ピークが確認され、角度の増加に伴って低波長側へシフトすることから、三次元において周期性が保持されているとともに、テンプレート構造と同等のフォノンバンドギャップを有する薄膜が合成可能であることが明らかとなった。</p>	

大規模相互作用系における相境界の揺らぎの確率的理論的研究	2003年度 ~2006年 度	樋口 保成(HIGUCHI, Yasunari) 神戸大学 理学部・教授 (60112075)	2次元Widom-Rowlinson model Dobrushin-Hrynivの定理 Gibbs分布 Percolation Pirogov-Sinaiの定理 Sierpinski carpet lattice Widom-Rowlinson model Widom-Rowlinsonモデル central limit theorem conditional limit theorem percolation phase boundary sharp transition シェルピンスキーカーベット格	数学一般 (含確率論・統計学) 一般数学一般 (含確率論・統計学) 一般数学一般 (含確率論・統計学)	基礎研究(B) 神戸大学	15,300,000	<p>本研究は相転移の数理モデルの多くに現れる相境界の挙動、特に揺らぎについての確率的な理解をできるだけ抽象的な形で得ることを主目標として行ってきた。その中でも相境界の揺らぎについて、中心極限定理、条件つき極限定理としての揺らぎについての理解を得ることを目標に掲げて来たが、この問題については研究の初期段階で得られた2次元Widom-Rowlinsonモデルの相分岐線の条件つき極限定理として、境界相がフラウン運動を使った簡単な確率微分方程式の解として得られたガウス型確率過程を得る事を示すに至った。目標としてはかなり一般のクラスのモデルを含む一般論として同様の極限定理を示す事を目指していたが、一方で自由エネルギーの解析性を示す段階でパラメータに関する制限をはずせなかつたこと、他方でIoffe, Bodineau等による抽象論の展開により、より抽象度を深めた形で一般論の展開がなされ、この種の問題の数学的な本質は非常に良好理解される事となった事が、我々の扱っているクラスのモデルがこの抽象論の条件を満たすかどうかをチェックするいう技術的な問題が残っているのが現状である。もちろん我々の定式化の利点もあるけれども、この問題については完全に遅れをとった事を認めざるを得ない。</p> <p>かわつて副次的な研究テーマとして平行して研究して来たパーコレーションの問題について新しい知見を得る事ができた。もともと相転移モデルの多くはその基底となるグラフに平行移動の群グラフ自己同型群として作用している事が多く、パーコレーションの問題ではさらに考えられている確率法則が平行移動の詳細作用を別としてエルゴード的である事が相転移現象の解析の重要な鍵となっている。本研究では、平行移動のないグラフとしてフラクトグラフを考へて、そこでのパーコレーションの相転移の問題を研究した。良く知られているのはfinitely ramifiedと呼ばれるフラクトグラフでは臨界確率が1という自明値になることが分かっている。このクラスを離れると、まだ良く知られていないのが現状である。唯一まとまったクラスで扱われているのはシルピンスキーカーベット格子のクラスで、やや技術的と思われる条件のもと、相転移が1点を境として起こり、臨界点以下では連続関数が指數的なdecayを有する事が示されている(いわゆる鋭い相転移:熊谷[1])。ところが、シルピンスキーカーベット格子としてしてもと知られているグラフについてこの技術的条件が成立しているかどうかは1997年以来openな問題であった。本研究では分枝過程の議論を使う事で、このグラフについても同様の鋭い相転移が起こる事を証明した。この結果は学術雑誌に投稿中である。</p> <p>文献 [1]T.Kumagai, in : New trends in Stochastic Analysis, (Eds.K.D.Elworthy et al.) 1997, 288-304.</p>
微視的理論による原子核の熱力学性質の研究と宇宙核物理学への応用	2003年度 ~2006年 度	中田 仁(NAKADA, Hitoshi) 千葉大学・理学部・助教授 (80221448)	Hartree-Fock-Bogolyubov近似 Hartree-Fock-Bogolyubov approximation Hartree-Fock-Bogolyubov近似 Nuclear level density Quantum-number projection Shell model Monte Carlo method Superfluid-to-normal phase transition Thermo field dynamics Finite-temperature mean-f	素粒子・原子核・宇宙核・宇宙物理	基礎研究(B) 千葉大学	13,600,000	<p>理論的立場から、原子核の熱力学性質及びそれに関連したテーマについて研究を行い次のような成果を得た。</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1.殻模型モンテカルロ法において角運動量射影を行う比較的簡便な方法を開発し、それを応用して核準位密度のスピン依存性を調べた。Fe-Ni領域核に対する数値計算により、両方核では低エネルギーで対称の影響が現れること、それがエネルギーの増加と共に見えなくなること、核核においてはこのような効果は見られないことを見出した。</li><li>2.殻模型モンテカルロ法を用いた数値的立場から(162)Dyのような希土類領域の変形核について単位密度の計算を実行し、広いエネルギー領域にわたって実験データを再現することに成功した。</li><li>3.有限温度平均場理論における量子数射影を再定式化し、さらにカノニカル集団におけるBCS型理論を初めて定式化した。これらを用いて有限系の温度変化に伴う相転移、特に超流動・常流動相転移における保存則の役割を調べ、最近の実験により超流動・常流動相転移の痕跡であると示唆されていた原子核のS型熱容量が粒子数保存の影響により現れること等を指摘した。</li><li>4.不安定核領域の殻構造、特に対称相の効果と注目されているN=16及びN=32領域で有効相互作用により殻構造に違いが見られるが、HFB計算を実行するとshell gapとpairing gapがほぼcompensateすることが分かった。</li></ol>
超高温熱測定システムを用いた圧力下における $\alpha$ -Fe有機伝導体の特異な相転移の研究	2003年度 ~2006年 度	西尾 豊(NISHIO, Yutaka) 東邦大学・理学部・教授 (20172629)	1価-2価転移 Charge Ordering DTA DTA法 Hydrostatic Pressure Latent heat Organic Metal Phase Transition Specific heat Super conductivity Uniaxial Pressure エントロピー スピン-バイエルズ転移 一軸性圧力 圧力有機伝導体有機伝導体 比熱 潜熱 熱測定 相転移 超伝導 金属-絶縁体転移 電可秩序 電子相関 電荷整列 電荷秩序 静水圧 静水圧熱測定	物性2	基礎研究(B) 東邦大学	16,300,000	<p>電荷移動錯体を中心とする、有機伝導体はその低次元性と強い電子相関から、電荷秩序、Mott転移、電荷密度波、超伝導、反強磁性スピンドバイエルズ転移などの相転移が狭い温度、圧力、磁場範囲で発生する特異な物質群であり、その結晶性の良さから多くの研究者の対象となっている。また有機伝導体の格子系の柔軟さより、相転移近傍での比熱が著わて大きく、相転移温度の低い比熱測定システムの誕生が待ち望まれてきた。本研究室では、高圧測定を用いた熱測定をこなし、今まで測定の出発点であった低温上昇時および低温降下の比熱測定と、0.1mg程度の微少試料を用いた格子比熱の大きな高温領域における相転移の研究が相対精度0.1%以内で可能となった。このシステムを用いて次のことを行った。</p> <ul style="list-style-type: none"><li>●特徴的な電荷秩序の相転移をみせる<math>\kappa</math>-ET<sub>2</sub>Rb<sub>2</sub>(Zn)4系では試料温度掃印速度を変化させながら一次相転移を探り、追加により相転移を抑制しながら熱測定が可能となった。</li><li>●ET<sub>2</sub>Me<sub>2</sub>Sb(Pdmit)<sub>2</sub>2系のスピン-フラクレーションと構造変態を伴った相転移時に200-300J/molにも及ぶ大きな比熱異常を観測した。また相転移より高温部に小さなながらも前駆現象による比熱の小さなピークを発見し、x線を用いて前駆現象の機構を明らかにした。</li><li>●<math>\kappa</math>-BETS 2FeBr<sub>4</sub>4系の反強磁性と超伝導の共存がどのようになされているのかエントロピーを定量的に吟味し、超伝導形成にともないスピンの相互作用の次元性に変化する結果を得た。</li><li>●比熱測定用新型の超小型圧力セルを製作し、10mg程度で相転移に伴う比熱異常が測定可能なシステムを開発し、Pd(dmit)<sub>2</sub>系の相転移を測定した。この圧力セルの圧力媒体をオイルから試料とほぼ同じ同軸性を有するスタイクキャストに替え、一軸性圧力により相転移を抑制しながら熱測定が可能となった。</li></ul>
地球深部鉱物の物性と水の影響	2003年度 ~2006年 度	井上 徹(INOUE, Toru) 愛媛大学・地球深部ダイナミクス研究センター・助教授 (00291500)	elastic wave velocity high pressure apparatus high pressure hydrous phase hydrous magma mantle mineral ultrasonic measurement water in the mantle water partitioning マントル鉱物 含水マグマ 地球内部の水 弾性波速度 水の分配 焼結体 相転移 超音波速度測定 超音波音速測定 高圧含水相 高圧発生装置	固体地球惑星物理学	基礎研究(B) 愛媛大学	16,400,000	<p>本研究では高温高圧実験という手段を用いて、地球深部鉱物の物性と水の影響について明らかにした。実験は急冷回収実験とともに、放射光X線その場観察実験により行われた。我々の研究により、olivineの高圧相であるwadsleyiteやringwooditeには2-3wt%の水が結晶構造中に含まれることが明らかになっているが、その分配については明らかにされていない。そこで、相転移が起こる圧力下での実験を行うことによって、これらの相間の水の分配を明らかにした。これによりマントル遷移層に極めて卓越的に水が分配されることが明らかになった。</p> <p>これに加えて、これらの含水鉱物hydrous wadsleyite, hydrous ringwooditeの熱弾性的性質を求めると、熱膨張測定、及び弾性定数の測定も行った。これらのデータを用いて、410km不連続面の地震波速度ジャンプ量と比較して、マントル遷移層中の含水量を見積った。このマントル中の含水量を推定する研究はさらに地圏学者との共同研究という形で進展した。</p> <p>さらに放射光線を用いた研究では、高圧含水鉱物の弾性的性質やその融液分解反応を見るために、カプセルに封入した状態でデータの収集を試みた。これには貴金属でも比較的原子番号の小さいAuPd合金を用い、十分分解に耐えらるスペクトルが得られることを確認し、superhydrous phase Bの実験に適用した。しかしながら、このカプセルでは、まだ線の吸収が大きくなり、更なる含水系の実験カプセルとして、単結晶ダイヤモンドスリブと貴金属カプセルという複合カプセルを考案し、含水マグマの構造解析の実験に用いるとともに、最近では融液分解反応の時分測定にも威力を発揮することを示してきている。</p>
液晶プラストレート相の発現温度幅の拡大	2003年度 ~2006年 度	菊池 裕嗣(KIKUCHI, Hirotsugu) 九州大学・先端物質化学研究所・教授 (60198201)	blue phase electric field-induced birefringence electro-optic effect frustrated phase polymer-stabilized blue phase プラストレート相 ブルー相 電気光学効果 電界誘起超屈折 高分子安定化ブルー相	高分子・繊維材料	基礎研究(B) 九州大学	15,200,000	<p>光学波長オーダーの三次元周期構造を自己組織的に形成する液晶ブルー相を広範囲の温度域で安定化した高分子安定化ブルー相の調整条件を検討した。定温光重合によりブルー相(BPII)の安定化が可能な条件について、液晶中に添加する光重合性モノマー(GMA/RM257)の組成を変えて調査した。高分子安定化BPを調整するためには、BPII発現温度領域内の光重合性モノマーの重合が必要不可欠であり、最適な一官能性/二官能性モノマー比を選択する必要性が示唆された。</p> <p>次にBPIIを示す液晶に光重合性モノマーを添加し、温度勾配下で光重合を行い、BPIIの安定化に及ぼす温度条件を1℃の精度で調査した。その結果、BPIIを示す温度範囲内から0.3℃の温度範囲内において光重合した場合のみBPIIの安定化が確認された。温度勾配ユニットを用いたBP安定化の判別は、温度に幅を持たせて評価でき、相の判別も容易であることから非常に優れた手法であることが示された。重合温度の最適化によりブルー相IIの安定化に初めて成功した。</p> <p>In-plane電界に対する高分子安定化BPの電気光学特性を、偏光顕微鏡観察、反射可視スペクトル測定および光スイッチング測定に基づき評価した。In-plane電界に対して、高分子安定化BPの相構造が安定に保たれることが明らかとなった。電界印加により誘起された電気屈折率から算出した見かけのカー係数は、トルエンと比較して100倍以上非常に大きな値を示した。これは、高分子安定化BPがその構造上光学的に等方向であるが液晶の秩序を有しており、等方向性液体のトルエンと比較して誘起される配向分極が非常に大きいためであると考えられる。また、光スイッチング測定より評価した293.5Kにおける高分子安定化BPの電気光学応答時間は、10<sup>-5</sup>~10<sup>-4</sup>オーダーであった。液晶分子の熱運動性が上昇する高温領域では、10<sup>-6</sup>オーダーの非常に高速な応答が観測された。</p>