

Ni基超合金の弾性歪測定によるタービン翼寿命予測	2003年度～2006年度	田中 克志(TANAKA, Katsushi) 京都大学・工学研究科・助教 研(30236575)	creep deformation elastic constants elastic strain energy phase stability raft structure superalloy クリーブ変形 ラフト構造 ラフト組織 弾性定数 弾性緩和 歪エネルギー 異方性の弾性歪 相安定性 超合金 非破壊検査	構造・機能材料	基盤研究(B)	香川大学 京都大学	13,500,000	クリーブ変形を考慮に入れた弾性歪エネルギーの計算をするにあたりこれまでに報告されてきた実験事実を踏まえ「クリーブ転位が移動するのはγ相内のみでありγ相内に転位は進入しない」,[001]引張応力に対して全ての(101)/(111)すべり系が等価に活動することでクリーブ変形が進行するの仮定を設定した。さらに計算の単純化のために「全てのクリーブ変形は転位によって生じた弾性歪である」[ラフト構造は理想的なγ相の平均の積算値となる]の2つの仮定を導入した。このような弾性歪を持つγ相と転位が転位位置に集った状態で貼り合わさることで格子定数マシアップとクリーブ歪の高さが存在するときの、γ相相対平均的弾性歪を再現することができる。内部応力状態の計算には完全なラフト構造を考えた。この構造には周期境界条件を適用し、かつ表面に垂直な応力成分は0に固定した。適当なクリーブ変形歪の値に対して、結晶軸方向に固定した状態でラフト層の法線方向を変化させ弾性歪エネルギーを計算した。クリーブ変形歪が0%の場合、ラフト法線方向が(100)方向で弾性歪エネルギーが最低になり外部応力が無い場合はいわゆるcuboidal組織が安定であることが確認された。γ相のクリーブ変形歪が0.2,0.4%と大きくなるとラフト法線方向が(001)方向の弾性歪エネルギーが急速に低下していくのに対して、(100)方向の弾性歪エネルギーは大きくなる。これは(001)ラフトが弾性的に安定化されていることを示しており、弾性理論に基づくラフトの機構に関する従来からの報告と一致するものである。しかしながらγ相のクリーブ変形歪が0.4%より大きい値(0.6,0.8%)となるとラフト法線方向が(001)方向では弾性エネルギーが極大値をとるようになり、(111)方向に大きく傾いた方向で最小値をとるようになる。つまり(001)ラフト構造は弾性的に不安定なものとなることが明らかとなった。
第一原理計算に基づく金属ガラスの相互作用エネルギーの解析と構造モデルの構築	2003年度～2007年度	星野 敏春 静岡大学・創造科学技術大学院・教授 (70157014)	2体,3体相互作用エネルギー AI高濃度Al(X=Sc-Zn)合金の原子間相互作用 EAM型相互作用模型(Non-coherent phase) Embedded-Atom-Method型ポテンシャル FPKKR Fe基規則合金 LSDAとGGA Screened FPKKR Screened KKR Screened full-potential KKR Screened-full-potential-KKR Zr-Cu金属ガラス中のicosahedron Zr高濃度Zr-Cu金属ガラスクラスター展開	特定領域研究	静岡大学	23,800,000	1.合金の内部エネルギーのクラスター展開の方法とその低次の項(1体,2体,3体)が合金の原子間相互作用の特徴をどれくらい表しているかを、Al系,Zr系,Fe系で調べた。A.高濃度AX合金の場合,1体はdilute-limitでのXの溶解エネルギー,2体はA合金中のX-X不純物エネルギー,3体は2体相互作用の符号と大きさとAX合金の相の特徴が説明可能である。また,X原子の3体まで含めれば,規則相の相対的安定性が予測できそうである(AIの規則相を調べた)。ナノマテリアルの原子構造安定化機構の解明に役立つことと考える。 2.1.0クラスター展開の各項を計算できるように,高精度第一原理電子構造計算プログラム(GGA-FPKKR)を整備した。規則合金の電子構造・原子配置,およびその中の不純物が扱える。規則合金の計算にはScreened-versionのFPKKR法を使用。 3.単元素Zr,Cuの基底状態(hcp, fcc),規則相Zr ₂ Cuの基底状態(trigonal-bcc),及びZr中のCu-Cuの相互作用エネルギーを再現できる Embedded-Atom-Method型ポテンシャルの作成(Mishin等の方法(Phys.Rev.B63(2001))を行った。分子動力学計算でその有効性を調べている。(大阪大学工学研究科分子動力学計算(渋谷)グループとの共同研究)	
超並列計算機CP-PACSを用いた格子上的素粒子標準理論の探索	2003年度～2005年度	宇川 彰(UKAWA, Akira) 筑波大学・大学院・数理物質科学研究所・教授 (10143538)	Monte Carlo methods lattice gauge theory lattice quantum chromodynamics numerical simulation perturbation theory phase transition quarks and gluons strong interactions クォーク クォークとグルオン クォーク-クォーク相互作用 モンテカルロ法 強い相互作用 摂動展開 数値シミュレーション 格子QCD 格子ゲージ理論 格子次元色力学 相転移	素粒子・宇宙物理	基盤研究(A)	筑波大学	47,450,000	本計画では,自然界の3種類の軽いクォーク, d, s全ての動的効果を取り入れたNf=2+1格子QCDシミュレーションを,非摂動的にO(a)改良されたWilson-cloverクォーク作用と繰り込みにより改善されたグルオン作用を用いてa=0.071fm,0.1fm及び0.12fmの3つの格子間隔で行い連続極限への外挿を行って,連続極限でのハドロン質量スペクトル,クォーク質量,重いクォークの物理的研究を行った。実験値は以下のとおりである。 (1)dクォーク質量スペクトル 中間子の質量スペクトルの微細構造について,クォーク近似では10%にも及ぶ系統的ずれがあるのに対し,実結果は1%水準の一致が得られた。本計算では,dクォーク質量の値が現実値より重いのを,カイル外挿には多項式に加えてカイル摂動論から予想される式を用いて系統差を評価する必要がある。系統的解析の結果は多項式による結果を整合している。 (2)クォーク質量 上記解析より連続極限において,up,downクォーク質量の平均値(MSスキーム,μ=2GeV)として,3.49(15)MeV,またstrangeクォーク質量として90.9(3.7)MeVという最終結果を得た。これらは現象論的に用いられていた値の約2/3という軽い値である。 (3)重いクォークの物理 相対論的でないクォークの定式化をbクォークに適用した場合をクォーク近似により検討し,Bメソン諸量が良いスケールリングを示すことを見出した。これに力を得て,MRに1位位でのチャーム及びボトム粒子の計算を開始した。本計算については今後引き続き解析を行う予定である。 (4)成果発表及び平成18年度以降 以上の成果は,2003年度～2005年度格子上での理論国際会議等で発表された。現在ハドロン及びクォーク質量結果について論文を準備中である。これと平行して,平成18年度以降の研究計画の検討を行い,領域分割HMC法により,特に,dクォーク質量を大幅に下げることが重点に,平成18年度に稼動開始が予定されるPACS-CS計算機上での研究実施準備を進めた。
リサイクルできる内視鏡下手術のためのロボットシステムの開発	2003年度～2005年度	遠山 茂樹(TOYAMA, Shigeki) 東京農工大学・大学院・共生科学技術研究所・教授 (20143381)	High power MRI compatibility MRIコンパチビリティ MRIコンパチブル MRI対応性 Master-slave Miniaturization Phase difference control Spherical motor Surgical assist robot ステータ マスタスレーブ ロータ 位相差制御 光ファイバセンシング 圧電素子 小型サードリッチ型モータ 小型化 手術支援ロボット 手術用ロボット 球面モータ 高出力化	設計工学・機械機能要素・トライボロジー	基盤研究(A)	東京農工大学	32,110,000	球面モータを用いた手術用ミニロボットならびにそのロボットシステム(制御方法,モータドライバ,マスタスレーブロボット)の開発・性能評価を行った。 1.球面モータを用いた手術用ミニロボットの開発と性能評価について φ20ロータの手術用ロボット用球面モータの開発を行った。従来の球面モータのサイズと比較し,1/3～1/4程度である。性能評価を行った。周波数応答試験では電磁モータを駆動源とするものと比べて5～10倍程度の,優れた応答性能を示した。位置決め精度は0.05°,球ロータ表面距離にして8.7μmという結果を得た。最大トルクは3.7mNm,最大回転数は6.2rpmである。また光ファイバを用いたセンシングを開発した。センシング精度は現在まで±0.1mm以下である。 2.ロボットシステム(制御方法,モータドライバ,マスタスレーブロボット)の開発について 制御方法,ドライバの開発を行った。手術ロボットの安定性向上と誤動作防止のため,共振周波数の自動追従と位相差制御の可能なドライバの開発を行なった。共振周波数の自動追従機能により,トルク制御を行うことが可能になった。位相差制御によってロボット関節などの位置決めの際の問題となっていたオーバーシュートや振動を取り除くことが可能になった。バイテラマスタスレーブロボットの試作を行なった。マスタ側にも超音波モータを使用しており,術具の先端の力覚を素早く正確にダイレクトドライブで伝えることが可能になった。またMRIコンパチビリティの開発を行った。MRI撮像中心において球面モータを駆動させたときでも,診断に使用できる程度の良質な撮像画像が得られた。
次世代セラミックレーザー	2003年度～2005年度	平等 拓範(TAIRA, Takunori) 分子科学研究所・分子制御レーザー開発研究センター・助教 研(50216595)	Ceramic lasers Diode pumped solid-state lasers LD励起固体レーザー Microchip lasers Mode-locked laser Nd:YAG Nd:Y ₃ Sc _x Al _(5-x) O ₇ Nonlinear wavelength conversion Quasi phase matching Yb:YAG Yb ₂ Y ₃ Sc _x Al _(5-x) O ₇ Li ₂ セラミックレーザー ホットバンド直接励起 マイクロチップレーザー モードロック	無機材料・物性	基盤研究(A)	岡崎国立共同研究機構・分子科学研究所	49,530,000	本研究では,新材料の創出とこれを利用した次世代セラミックレーザーを提案,研究開発する事を目的とし実施した。以下に得られた知見を示す。 (1)セラミック材料の高透過プロセスのためのグレイン界面制御法の開発グレイン界面制御法を検討しNd ₂ Y ₃ Sc _x Al _(5-x) O ₇ に加え,超短パルス化が期待されるYb ₂ Y ₃ Sc _x Al _(5-x) O ₇ の $\langle 112 \rangle$ の開発に成功した。 (2)セラミックの高分解分光解析と複合セラミックスによるスペクトル設計法の検討開発したセラミック材料の詳細な分光特性評価を行い,良好なレーザー発振が期待できる事を明らかにした。 (3)広断面積OPMのための分域界面制御法及び多機能波長変換チップの開発セラミックレーザーの可能性を拡大できる波長変換について検討した。これまで困難とされてきたMgLNにおけるOPM増倍作製法を開発,5mm厚のPPMgLN開発に成功した。光バリエーション発振により100μm以上の中赤外光をローパスを達成した。 (4)ホットバンドレーザーと準位遷移励起した新材料・共振器の検討従来問題とされていた量子雑音を改善できるホットバンドレーザー上準位励起法を見出した。これを上記セラミックレーザーに適用し有用性を確認した。 (5)セラミックレーザー発振器モジュールの構築と高精度マイクロチップレーザーの開発,希土系添加Yb ₂ Y ₃ Sc _x Al _(5-x) O ₇ による超短パルス発生に成功,Yb添加により最短の280fsを記録した。また,エッジ励起方式においてCW出力340W,パワーステアブルにして57kW/cm ² と極めて高い性能を達成した。 これらの成果は,30件を越す査読付き論文,7件の国際会議招待講演等により内外に報告を行った。また,期間中に文部科学大臣賞(第30回研究功績者賞),(社)レーザー学会業績賞(進歩賞)を頂くなどの評価を得た。
生命機能を制御する鍵反応タンパク質アセチル化に関する化学遺伝学的研究	2003年度～2005年度	吉田 彬(KINOSHITA, Hiroo) 独立行政法人理化学研究所・吉田化学遺伝学研究室主任研究員 (80191617)	OBP Defect Inspection EUV Lithography Extreme Ultraviolet HDAC Hsp90 Hsp90 Interferometer Multilayer coating PKC PML body Phase defect SIRT SUMO Trichostatin A X-ray microscope transcription	応用生物化学	基盤研究(A)	特殊法人理化学研究所・独立行政法人理化学研究所	43,290,000	タンパク質アセチル化に関与するHDAC酵素のうち,核内の特定の構造体(HDAC4/Bach2 body)に存在するHDAC4と細胞質に局在し,微小管の脱アセチル化に関与するHDAC6の機能解析を行った。その結果,HDAC4はBach2とともに酸化ストレスに反応して核移行し,核内で点状構造に局在すること,この点状構造はPML bodyを取り囲むものであること,HDAC4/Bach2がPML body周辺に集合することにより,PML bodyにおける転写活性が著しく阻害されることなどを明らかにした。また,HDAC6がエンドサイトーシスを抑制することを見出した。HDAC6の安定なタックダウンは細胞死を誘起した。このEGF刺激に発したEGF受容体のダウンレギュレーションが阻害され,EGF受容体の量が低下するとともに,下流のERKが高発現しCEGF-βグナリンの低下を補償することが明らかになった。このことはHDAC6がエンドサイトーシスの制御を通じて受容体シグナル伝達系を調節することを示している。さらにHDAC阻害剤を用いた新たなアセチル化タンパク質を探索した結果,動物細胞培養にHsp90,SV40 large T抗原,ポリオメラーゼ(PAP)など多数のタンパク質を同定した。同様に分裂母から10数個のタンパク質を同定した。その機能解析により,Hsp90はアセチル化により機能が低下し,T抗原は分解が促進され,PAPは核移行が低下することを発見した。以上の結果からタンパク質アセチル化は予想以上に広く分布し,タンパク質の基本的な機能に大きく影響することが明らかになった。

超音波による血管内皮細胞のナノイメージング	2003年度 ～2005年度	西條 秀文(SAJJO, Yoshifumi) 東北大学・加齢医学研究所・助教 (00292277)	acoustic microscopy attenuation biomechanics cell phase sound speed ultrasonic tissue characterization バイオメカニクス 位相 減衰 細胞 血管内皮細胞 超音波組織性診断 超音波顕微鏡 音速	医用システム	基盤研究(B)	東北大学	12,600,000	従来、細胞の高精度イメージングとして用いられてきた電子顕微鏡、蛍光抗体法を用いたレーザー走査顕微鏡などの方法では、細胞に対する前処理や抗体投与などが必要であり、様々な条件下での繰り返し計測のためには、細胞に無処置、非接触で繰り返し高精度に細胞のナノイメージングが実現される必要がある。本研究の目的は、高周波数超音波パルスを用いて、サブミクロンの方位分解能およびナノレベルの厚み計測を実現し、細胞の音速、超音波減衰、音響インピーダンスなどのパラメータを高精度に計測可能な、超音波ナノイメージングシステムを開発することである。さらに、本システムによって得られた血管内皮細胞内の音響特性分布を、細胞内骨格であるアクチンフィラメントおよびチューリンの分布と比較検討し、超音波ナノイメージングのバイオメカニクス計測システムとしての有用性を証明することである。		
医療用高性能大面積半導体放射線画像検出器の開発	2003年度 ～2005年度	安田 和人(YASUDA, Kazuhito) 名古屋工業大学・大学院・工学研究科・教授 (60182333)	Cadmium Telluride CdTe CdZnTe Imaging detector MOVPE Metalorganic Vapor Phase Epitaxy Radiation detector X線検出器 γ線検出器 テルル化カドミウム 放射線検出器 有機金属成長 画像検出器	医用システム	基盤研究(B)	名古屋工業大学	16,000,000	医療用高性能大面積半導体放射線画像検出器の開発を目的として研究を実施し、下記3項目の成果を得た。 1)CdTe/n ⁺ -GaAsヘテロ接合ダイオード検出器の開発 有機金属成長法により、n型低抵抗GaAs基板上に成長したp型厚膜CdTe成長層を用いてヘテロ接合型ダイオード放射線検出器を製作し、その特性評価を通じて素子構造の最適化と検出特性の改善を行った。製作した検出器によりAm(59keV)のγ線検出に世界に先駆け成功し、エプタキシャル成長層を用いて入射エネルギー解析能力をもつ検出器が実現できることを実証した。 2)Si基板へのCdTe層直接成長技術の開発 有機金属成長法によるSi基板へのCdTe層直接成長は、成長の前処理としてSi基板を減圧水素雰囲気中でGaAsと共に熱処理を行い、その後CdTe層を成長することにより、Si基板上に直接結晶CdTe層が成長することを見出し、またSi基板上のCdTe成長層を用いた放射線検出器の実現には、高品質厚膜CdTe層が必要であるが、Si基板上に薄膜CdTe層を成長後、薄膜成長層中の歪みを除去し、その後再成長を行うことにより、高品質の厚膜成長層が得られることを確認した。 3)CdTe/n ⁺ -Siヘテロ接合型ダイオード検出器の開発 上記1)及び2)の検討結果を基礎として、n型低抵抗Si基板上に直接成長したCdTe厚膜成長層を用いたダイオード型検出器を製作し、その特性評価を通じて高性能化を検討した。その結果、Si基板上でも良好な電気特性をもつ素子製作できることを確認した。 以上の検討により、最終目的とする高性能大面積放射線画像検出器実現に不可欠な基礎技術を確立した。		
大規模並列計算機を用いたfullQCDの真空構造に関する国際共同研究	2003年度 ～2005年度	鈴木 恒雄(SUZUKI, Tsuneo) 金沢大学・総合メディア基盤センター 教授 (60019502)	Lattice QCD Monte Carlo Simulation color confinement dual Ginzburg-Landau theory dual Meissner effect finite-temperature phase transition instanton monopole quantum chromodynamics quark confinement クォークの閉じ込め モノポール 量子色力学	素粒子・原子核・宇宙物理	基盤研究(B)	金沢大学	16,100,000	研究目的と実施計画に沿って、金沢では、高エネルギー研究所のSR8000共同利用計画及び理化学研究所の大型クラスターSX7共同利用計画(共同研究員)、大阪大学核物理センター共同利用計画に採択され、以下の研究を実施した。 1)O(α)improved clover fermion作用でのfull QCDの計算機シミュレーションを継続して行った。特に有限温度系の研究を重点的に行った。今年度は、引き続き24 ³ ×10 ³ の格子でのデータをとった。目的は、カイラル極限とともに、連続極限を決めるためである。われわれの作用は、O(α)improvedなので、連続極限を決めることができる。またクォーク質量が重いので系統誤差が大きい。転移温度のカイラルおよび連続極限の値を求めた。引き続き、多くのパラメータでデータを集め、より正確な値を決定できるように研究を続けている。モスケフのグループも別のパラメータで同じ24 ³ ×10 ³ の格子でデータをとっており、結果を両者で分析している。 2)理化学研究所のSX7ベクトル計算機でかなりの計算時間ももらったので、精密実験としてQCDの閉じ込め機構に関して、双対マイスナー効果はゲージによらないかどうかの研究をはじめた。5000個の熱平衡の真空配位を用いて、格子での通常のモノポールが見られないランダムゲージでも双対マイスナー効果が見られることがわかったので、引き続き双対マイスナー効果の特異的な真空のパラメータを測定した。ゲージによらず対応1と2の境界付近であることがわかった。 3)ゲージ普通な量で双対マイスナー効果が記述できないかを検討した。 4)現在、測定誤差を大幅に小さくできるmulti-level法を応用して、最大可換ゲージでない局所的な従来性質の悪いといわれた可換射影を用いて精密実験をしている。すでにこれまで見えていなかった可換成分のみで完全な強定数が見られることがわかった。		
ラメラ液晶相の構造に対するずり流動場効果とスローダイナミクス	2003年度 ～2005年度	加藤 直(KATO, Tadashi) 首都大学東京・都市教養学部理工学系・教授 (30142003)	X線小角散乱 dynamics lamellar phase liquid crystal shear flow small-angle X-ray scattering small-angle light scattering small-angle neutron scattering surfactant ずり流動場 ダイナミクス ラメラ相 中性子小角散乱 光散乱 小角光散乱 液晶 界面活性剤	生物物理・化学物理	基盤研究(B)	東京都立大学・首都大学東京	15,000,000	近年界面活性剤集合体(特にラメラ相)の構造に対するずり流動場効果が注目を集めている。本研究は、非イオン界面活性剤C ₁₂ NH ₂ (2n+1)(OC ₂ H ₄) _m OH(C _n E _m)のラメラ相に対してずり流動場中における中性子小角散乱(X線小角散乱)小角光散乱の測定およびシオロジ測定を行い、特定のずり速度(0.3~1s ⁻¹)において、ラメラ繰返距離が不連続に減少し、観測の水層がほとんど排除された「濃縮ラメラ」が形成されることを見出すとともに、その機構解明を目指したものである。 1.測定装置の改善 μmスケールおよびnmスケールの構造変化を短時間で追跡するために、流動場小角光散乱(shear SALS)および流動場X線小角散乱(shear SAXS)の測定装置を製作した。 2.時分割SANSおよびSALSの測定 一定ずり速度の下でSANSおよびSALS/パターンを時間依存性を測定した。ずり速度0.3~3s ⁻¹ ではずり流動場をかけてから数時間後に繰返距離の不連続な減少が観測され、ある種の相転移が起こっていることが示された。定常状態における繰返距離はずり速度1s ⁻¹ <-1>付近で極小を示した。一方SALS測定からは、ずり流動場をかけてから数分以内にμmスケールの構造変化が起こることがわかり、これが繰返距離の不連続な減少を引き起こしていることが示された。ずり速度3s ⁻¹ <-1>ではさらにオニオン相形成に対応するパターンが観測された。 3.ずり応力測定 一定ずり速度の下でずり応力の時間依存性を測定した。定常状態のずり応力は低ずり速度領域においてずり速度と共に増加したが、繰返距離が極小を示す1s ⁻¹ <-1>付近になるとずり速度増加に対して減少するという異常な挙動を示した。これはSANSにより示された局所的な相分離を支持する結果といえる。		
超高圧高温実験に基づくコアマントル境界の物質科学研究	2003年度 ～2005年度	八木 健彦(YAGI, Takehiko) 東京大学・物性研究所・教授 (20126189)	Fe-FeO系 FeO core-mantle boundary diamond anvil materials science post perovskite phase very high pressure コアマントル境界 ダイヤモンドアンビル ポストペロフスカイト レーザー加熱 下部マントル最下部物質科学 超高圧 高压X線	固体地球惑星物理学	基盤研究(B)	東京大学	13,200,000	本研究では、地球のコアマントル境界付近で起きていると考えられる様々な現象の解明を目的として、100GPa(100万気圧)領域下におけるケイ酸塩や金属の相転移や反応、およびその粘弾性的性質を明らかにするための実験技術を開発し、その技術を駆使して様々な研究を展開した。本研究で新たに開発された実験技術としては、(1)ダイヤモンドアンビルの加圧軸と直角方向からX線を照射して回折パターンをとり、一軸応力場における物質の粘弾性的性質を明らかにするtotal diffraction法、(2)取反オージェICによる極微小試料の切断断形技術、ダイヤモンドアンビル回収試料に応用するための技術、(3)アルゴンや窒素などの気体試料の中でケイ酸塩や金属を融解させ、これらの物質への希ガスの溶解度を測定したり、新物質を合成する技術、および(4)新型のマイクロビュレータを利用しての極微小試料の精密なサンプリング法、の4つが挙げられる。これらの実験技術を用いて、コアマントル境界に存在すると考えられるポストペロフスカイト相の塑性変形に伴う選択配向の様子を明らかにしたほか、下部マントル最下部条件下でのポストペロフスカイト相、ペロフスカイト相、およびマグネシオワタサイト相間の鉄の分配も明らかにし、コアマントル境界におけるケイ酸塩の挙動に関して新たな知見を得ることができた。さらに、コアに溶解している希ガス濃度を推測する実験的研究として、シリカへのアルゴンの溶解度を約10GPaまで測定し、従来類似の実験で測定されなかった6GPa付近の溶解度の急激な減少が、実験技術上の問題に起因する見かけ上のことであり、本質的にはそのような減少が起こらないことを明らかにした。またマイクロビュレータの利用により、今後コアの内部における研究を可能にするマルチメガバル領域の実験技術も大きく進展した。		

カーボン被覆触媒粒子の創製-カーボン層のナノ構造制御による機能の高度化	2003年度 ~2005年度	福垣 道夫(NAGAKI, Michio) 愛知工業大学・工学部・教授 (20023054)	Anatase Carbon coating Carbon precursors Metallic Sn fine particles Nano-structure control Photocatalysts Reduced phases of titanium oxide アナターゼ カーボン前駆体 カーボン被覆 スズ金属微粒子 ナノ構造制御 パラジウム微粒子 パラジウム金属微粒子 ポリビニルアルコール 光触媒 炭素前駆体 炭素前駆体 還元相 酸化チタン還元相 酸化チタン還元相	無機工業材料	基礎研究(B)	愛知工業大学	14,200,000	本研究の目的は①触媒粒子に被覆されたカーボン層のナノ構造を制御するための操作の確立および②それによって触媒性能の向上あるいは新しい触媒相あるいは新しい触媒能を創製することである。以下の結果が得られた。 1カーボン層のナノ構造制御 カーボン層のナノ構造を正確に評価するため酸化マグネシウムMgOを基材触媒粒子として選んだMgOとカーボン前駆体(ポリビニルアルコールPVA)との混合物を100°C付近の高温でカーボン被覆した後MgOを希硫酸で溶出し去りカーボンを単離した。そのカーボンについて、細孔構造を評価した。また触媒相にする酸化アルミニウムAl ₂ O ₃ へのカーボン被覆を行いカーボン層のナノ構造へ基材が強い影響を持っていることを示した。 チタンウムイソプロポキシをPVA水溶液中で加水分解して高温で加熱処理することによって、微粒子の酸化チタン粒子の状態でカーボン被覆が可能であることを示した。このプロセスによって、原料であるチタン化合物およびPVAをより効率的に使用でき、光触媒としてのパフォーマンスを向上させることが明らかとなった。 2)被覆カーボン層と基材との相互作用による機能の高度化 基材アナターゼTiO ₂ と被覆したカーボンが反応し、TiO ₂ を部分的に還元し、還元相Ti ₄ O ₇ が生成することを見出した。基材処理温度、時間、および雰囲気を選択することによって、一般式Ti _n O _{2n-1} 相が生成することが分かった。 酸化スズSnO ₂ とPVAの粉末混合物を900°Cまで加熱することによって、SnO ₂ を金属Snに還元し、カーボン被覆Sn微粒子を作成することができた。この加熱処理の過程でMgOを共存させることによって、融点の低い金属Snの凝集を防ぐことができることを見出した。加熱処理後、酸で洗浄することによってMgOを取り除いた。このようにして調製したカーボン被覆金属Sn複合体はリチウム二次電池負極としてかなり高い放電容量を示すことが明らかとなった。	
光散乱場の位相特異点の時空間ダイナミクスを用いた新しいセンシング技術の基礎研究	2003年度 ~2005年度	武田 光夫(TAKEDA, Mitsuo) 電気通信大学・電気通信学部・教授 (00114926)	Analytic Signal Displacement Measurement Optical Metrology Optical Vortex Phase Singularity Speckle Pattern Speckle Photography Stochastic Signal Vortex スポット スポックル スポックル干渉 スポックル干渉 ランダムドット 位相特異点 位相相関 応用光学 光波 変位計測 干渉計測	応用光学・量子工学	基礎研究(B)	電気通信大学	14,800,000	拡散表面をもつ物体からの光散乱場の位相情報を用いた新しい光波センシング技術を開拓することを目的として、光散乱場の位相分布の中に生成される光渦場(Optical Vortex)の渦中心に存在する位相特異点(Phase Singularity)の統計的性質を実験により明らかにした。また、位相特異点の統計的性質を利用して微小変位の精密計測する新しい発想に基づく原理を提案し、計測装置を試作しその有効性を実験的に示した。その具体的な内容は以下の通りである。 1.光散乱場の位相特異点の空間構造と統計的性質の解明 フーリエ解析法による精密干渉計測と波動場の内挿により光渦場の位相特異点近傍の位相の空間構造を高分解能計測する技術を開発し、Berryが理論的に予測した光散乱場の位相特異点の構造的空間的構造とその統計的性質を初めて実験的に検証した。また、Dennisが理論的に予測した位相特異点近傍の位相場の角運動量のケプラー則を初めて実験により検証した。 2.スเปックルパターンの解析信号の位相特異点を指標としたナノメートル領域の微小変位計測の実現 スเปックル場の強度情報と位相情報に対応づけるための手段としてRiesz変換に基づくスเปックル強度場の複素解析信号表現を採用し、複素解析信号の位相特異点の中心位置を指標とする微小変位計測法を提案し、実験によりナノメートルクラスの微小変位計測の可能性を実証した。 3.スベックルパターンの精密計測による微小変位計測の実現 スベックルパターンをヘルベルト変換して得られる複素解析信号の疑似位相情報のみを用いた信号領域での位相限定相関関数を指標とする微小変位計測の原理を提案した。実験と理論の両方により従来の強度相関法に対する優位性を実証した。 4.複素コヒーレンス場のコヒーレンス渦の存在の実証実験 光波動場の相関関数である複素コヒーレンス関数のコヒーレンス渦場が存在することが理論的に予測されていたが実験的にはまだ示されていない。コヒーレンス渦場を発生させる実験法を提案し、実験によりコヒーレンス渦場の存在を初めて実証することに成功した。	
粒子群・赤外活性ガス共存・乱射伝熱への電磁方程式直接解法によるアプローチ	2003年度 ~2005年度	岡本 達幸(KAMOTO, Tatsuyuki) 京都工業繊維大学・工学部・教授 (40127204)	coexistence of gas and particles direct finite difference solution electromagnetic equation multiple-scattering effect phase function radiative heat transfer radiative intensity scattering of radiative energy ふく射エネルギー-散乱 ふく射伝熱 ふく射強度 位相関数 多重散乱効果 球域非一様性 直接差分	熱工学	基礎研究(B)	大阪大学 京橋工 芸繊維大 学	11,800,000	粒子群による輻射エネルギーの散乱は、粒子数密度が高くなるにつれ、散乱エネルギーの強度低下がごく小散乱角の範囲に限定して現れるが、回折領域外の散乱角の大きい領域にも強度低下は現れない。粒子数密度が高くなると小散乱角域での散乱エネルギーの強度低下が顕著になるとともに、散乱角の大きい領域に向かって散乱エネルギー強度が低下する領域が広がっていく。回折領域の端にまで強度低下の影響が及ぶようになる。ほぼ全散乱角範囲に強度低下が現れるようになり、さらに粒子数密度が高まると全散乱角範囲で散乱エネルギー強度は一層低下していく。これは、散乱粒子数密度が高い状況では、単一粒子による散乱パターンをベースとする位相関数は使用できないことを意味している。また、粒子数密度に比例して、入射エネルギー-台階方向に粒子間距離を広げると、それに直交する方向に粒子間距離を広げると、散乱角の影響が薄くなり、後者の場合についてはどの程度の粒子間隔でも多重散乱の影響が消失するのをおぼろげに把握できた。また、散乱場が単分散の場合には、数密度を高める場合と、ほぼ小散乱角の領域に、影響が現れ大散乱角側へ影響が広がっていく傾向は不明確になるが、非常に数密度が高い場合に全散乱角範囲で散乱エネルギー強度が低下傾向は同じであった。 多重散乱が無視できる状況で多くの同一形状の3次元非球形散乱体がランダムな姿勢で存在する場合、径を一定に保って数を伸ばしていくと、等価球集団の平均径、径の分散は大きく、径の長くなるほど、平均径、径の分散は鈍くなる傾向があることが明らかになった。また、回折構内体である場合には、等価球集団の径の分散は小さく、平均径は平均散乱面積に等しい球の径にほぼ等しい。 電磁方程式の直接差分解法は、 Mie散乱理論では対処できなかった多重散乱の影響を正しく考慮できるが、電磁気学の概念でエネルギーの流れる方向と強さを表すことされる電場と磁場Hの外積の実効値は、各方向に流れるエネルギーをベクトル合成したものであり、方向別に単位立体角当たりのふく射エネルギー-産業を表現するふく射強度の概念を如何に結び付けるかが未解明であった。この問題については、近接非干渉法を求める等価定理の考え方を応用すれば、粒子群全体の着目した部分の粒子集団によって散乱されたふく射エネルギーのふく射強度を求められることを解明した。	
MOCVD原料分子の気相中での化学相互作用と強誘電体薄膜の自己組織化	2003年度 ~2005年度	磯崎 和夫(SHINOZAKI, Kazuo) 東京工業大学・大学院・工学研究科・助教授 (00196388)	FTIR MOCVD Metal-organic raw material microstructure residual carbon trap vapor phase deposition vapor phase reaction Trops 微構造 有機金属原料 残留炭素 気相分解 気相反応	無機材料・物性	基礎研究(B)	東京工業大学	15,500,000	MOCVD法では、原料の有機金属化合物原料が配管や反応容器内で相互作用を起こし、ガスから薄膜が析出する際に、基板との間で複雑な反応を起こすことが知られている。本研究では不明な点が多いMOCVD法による酸化バナジウム薄膜の合成機構に関して、強誘電体薄膜を例に、有機金属化合物原料から目的酸化物薄膜が構築される様子を検討した。また、Si基板上に酸化バナジウム薄膜を成長するために必要な、パuffers層(GeO ₂ /YSZ)の結晶化過程や透過電子顕微鏡による微構造観察を行った。 MO原料の気相中での反応および分解を検討するために、FTIRを導入したMOCVD装置を作成した。Ti(O-n-C ₃ H ₇) ₄ (TTIP)の気相中での分解挙動とTiO ₂ 薄膜の成長を検討した。その結果として、TiO ₂ 薄膜は基板温度によって、組成、結晶性、微構造が大きく変化した。低温(300°C)で成膜した薄膜は、高温(400°C以上)と比べ微構造が粗く、FTIRの観測から薄膜中にO-Hに起因するピークが観測された。原料ガスの分解速度は温度に依存するが、600°Cまで加熱しても、完全に分解しないすなわち、基板には分解原料と未分解原料が到達しており、基板表面が触媒作用を示し、酸化反応が促進されている。 鉛-ジタン酸塩体(Pb(OPM) ₂)とTTIPを用いてMgO(001)基板上に成膜したところ、650°C成膜において、Pb/Ti比が1または、それ以上の時、特定比のPbO ₃ 薄膜が得られる。PbとTiの割合に依るPbの蒸発のとき、Pbの蒸発が抑制され、Tiの割合が増える。Tiの割合が増えるとき、Pbを加熱するとPb(OPM) ₂ の1600cm ⁻¹ 付近の吸収が消滅し、1260cm ⁻¹ 付近に新たな吸収が観察された。すなわち、相互作用したPbとTi原料が中間体が生じていると予想され、シミュレーションによりPb-O-C-Ti結合を持つと予想された。 PZT薄膜をPT用原料とPZ用原料をバリス供給し、PT,PZガス、Ar、真空雰囲気を組み合わせた4種類のパターンについて行った。MgO基板上では、パターン種によって組成が変化し、結晶化挙動も変化した。ほぼ定比で結晶化した。Si基板上では結晶化はしないものの、組成的にはあるパターンでほぼ定比の膜が得られた。また、原料とArを交互に流した時に、最も平滑な表面が得られた。すなわち、バリスパターン及び雰囲気の変化により原料の吸着過程が大きく変化する事が確かめられた。	
ハイブリッド伝導帯を有する協奏電子機能材料の創製	2003年度 ~2005年度	小俣 孝久(OMATA, Takahisa) 大阪大学・大学院・工学研究科・助教授 (80267640)	CeSnO ₄ SnNbO ₄ <4,5> SnTaO ₄ <4,5> crystal structure electronic conduction electronic structure fluoride structure oxygen release behavior phase transformation precursor oxidation pyrochlore-type oxide α-PbO ₂ 関連構造 イルメナイト型構造 パイロクロア型酸化物 前駆体酸化法 相変化 結晶構造 蛍石型構造 蛍	無機材料・物性	基礎研究(B)	大阪大学	15,400,000	本研究課題では、伝導帯の底部でs軌道とd軌道あるいはs軌道とf軌道の各軌道のエネルギーが近接し、それらがハイブリッドしたバンドを形成する物質を設計、合成し、エネルギーバンドの解明と伝導性の付与および強磁場下における伝導性の測定を通して、新規な特性を有する酸化物電子伝導体の開拓を目指した。その成果として、パイロクロア型Sn ₂ M ⁿ V ₂ O ₇ (M=V,Nb,Ta)の低温酸化により、Sn ⁴⁺ /V ⁵⁺ とM ⁿ が規則配列したSn ₂ s軌道とNb ₄ d軌道、Sn ₅ s軌道とTa ₅ d軌道のエネルギーが近接した準安定新しい複合酸化物SnM ₂ <4>n>の合成に成功した。それら新規な複合酸化物の結晶構造を明らかにし、相変化メカニズムを提案した。SnTaO ₄ <4>n>とSn ₅ s軌道とCe ₄ f軌道がハイブリッドしたCeSnO ₄ では、水素雰囲気中での熱処理により酸素空孔を生成し、それによる電子ドープに成功し、ハイブリッド伝導帯を有する電子伝導性酸化物を得ることができた。磁場との相互作用による新規な特性の発現を期待。これらSnTaO ₄ <4>n>とCeSnO ₄ のFTの磁場下での伝導性を研究したが、残念ながら特異な性質を見出すには至らなかった。これは、伝導帯での各軌道のハイブリッドがそれほど強くないこと、起因するものと思われる。一方、蛍石型構造のSnTaO ₄ <4>n>では還元すると670Kから酸素を放出し、パイロクロア型酸化物へと相変化する。同じ組成であってもα-PbO ₂ 構造のSnTaO ₄ <4>n>では相変化がより高温の820Kから起こることが示され、本研究により合成方法が確立された新物質が、その化学的性質においてユニークな振舞いを示すことが明らかとなった。	

Ni基マルチインターメタルリックスin-situ複合材料の合金設計と組織制御	2003年度 ～2005年度	高杉 隆幸(TAKASUGI, Takayuki) 大阪府立大学・工学研究科・教授 (20108567)	Geometrically close packed phase Intermetallic compound Microstructural stability Multi-phase alloy Ni3Al Ni3Ti Ni3V Ni3Al Ni3Ti Ni3V Superalloy Thermal stability Ti3Al 熱安定性 組織安定性 複相組織 超合金 金属間化合物	構造・機能材料	基礎研究(B)	大阪府立大学	15,500,000	新規の高温構造材料として、Ni ₃ Al-Ni ₃ Nb-Ni ₃ Ti, Ni ₃ Al-Ni ₃ Ti-Ni ₃ V, Ni ₃ Al-Ni ₃ Nb-Ni ₃ V, Ni ₃ Si-Ni ₃ Nb-Ni ₃ Tiに属3元合金系に立脚するマルチ・インターメタルリックスin-situ複合材料の研究開発を、合金設計と組織制御に基づき行い、以下のような結果を得た。 1. Ni ₃ Al-Ni ₃ Ti-Ni ₃ VならびにNi ₃ Al-Ni ₃ Nb-Ni ₃ Vでは、2重複相組織を形成することを見出した。すなわち、L1 ₂ <22>相を構成相として、ミクロメータ尺度からなる上部複相組織として、ナノオーダーからなる下部複相組織が形成されることを見出した。2重複相組織は上部ならびに下部組織共に整合性に優れ、高温長時間の熱処理によっても微細組織を保つことが可能であることを見出した。 2. Ni ₃ Si-Ni ₃ Nb-Ni ₃ Ti合金系では、構成相間の固溶度の温度変化を利用しての組織制御により、析出強化機構が発現することを見出した。 3. Ni ₃ Al-Ni ₃ Nb-Ni ₃ TiならびにNi ₃ Al-Ni ₃ Ti-Ni ₃ Vマルチ・インターメタルリックス合金は強度の逆温度依存性と塑性変形能を示し、長時間保持によっても高温強度の劣化(低下)がないことを観察した。また、従来の合金にはない、高い高温クリープ強度と延性さらには高いクリープ破断寿命を示すことを見出した。 4. Ni ₃ Al-Ni ₃ Ti-Ni ₃ Vマルチ・インターメタルリックス合金について、溶解法、鍛造法、単結晶法による製造プロセスが可能であることが示され、安価で大量かつ信頼性の高い製造法の道を拓いた。 5. 溶解法、鍛造法、単結晶法による材料について、クリープ速度、クリープ破断寿命等を測定した。得られたデータは現用最強のNi基超合金に匹敵あるいは上回る特性を示していることを明らかにした。	
未到時間領域の超短パルス光発生とその計測	2002年度 ～2006年度	酒井 広文(SAKAI, Hirofumi) 東京大学・大学院理学系研究科・助教授 (20322034)	aligned or oriented molecules attosecond pulses carrier envelope phase (CEP) coherent vacuum ultraviolet radiation high-order harmonic generation non-collinear optical parametric amp polarization rate technique visible to near infrared range アト秒パルスの発生と計測	応用光学 量子工学 応用光学 量子工学	基礎研究(S)	東京大学	106,860,000	(可視-近赤外領域) 非平行バラメトリック増幅法(NOPA)を開発し、NOPAを用いた可視光超短パルスの発生を行った。これにより超高速実時間分光が可能になり、3000cm ⁻¹ の高速波数に達するまでのさまざまな分子振動の測定解析が可能になった。またこの超短パルスが持つ広帯域なスペクトル領域において測定を行うために、本研究グループが開発を行い完成させたマルチ(128ch)ダブルロックインアンブとその分光システムを用いた。時間分解分光では広帯域光を試料に照射することにより、帯域幅の逆数にほぼ比例する時間分解能を得ることができたため、超短パルスの持っている広帯域性を全面的に活かして、同時測定できるようにした。多波長の実時間信号を同時に高精度で測定することができ、また短時間で測定が可能となるため、試料の光劣化などの問題を回避することが可能になった。これにより、さまざまな物質の素動起や非線形動起過程の緩和過程をより詳細に理解できるようになった。 (真空紫外領域) 時間依存偏光パルス(偏光状態が時間とともに変化するパルス)を配列した12分子に照射することにより、多光子イオン化過程の最適制御に成功した。この成果は、高次高調波発生の新ステップであるトネルイオン化を最も高度に制御する技術を開発したこと意味する。また、非断熱的に配列した分子中からの高次高調波発生実験において、同一条件下で高調波信号とイオン信号を同時に計測する独自の実験手法の導入により、分子軌道の対称性の効果を明らかにするとともに、高調波発生第3ステップである再結合過程における電子のド・ブロイ波間の量子干渉効果(ここでは強く打ち消しあう干渉効果)を世界で初めて観測することに成功した。さらに、配列した分子に偏光ゲート法を適用した。この場合には、高調波発生効率の積平均依存性から自然な推論として、分子軸と積平均の長軸が平行な時の方が高調波の発生が可能な時間幅がより制約され、高調波のスペクトル幅はより広くなると予想したが、実験結果はむしろ逆の傾向を示すことを初めて発見し、その物理的原因を説明した。したがって、数サイクルパルスの偏光ゲートによりアト秒パルスを発生する場合にも、搬送波包絡位相(CEP)だけでなく、分子の空間配列を重要な制御パラメータとすることを初めて明らかにした。	
分子振動動起・回転誘起の素過程を探る結合モード光散乱分光法	2002年度 ～2006年度	高木 賢志郎(TAKAGI, Kenshiro) 東京大学・生産技術研究所・教授 (90013218)	High-resolution light scattering Micellar solution Molecular relaxation Mountain component Optical Kerr effect Phase transition of liquid crystal Phonon spectroscopy Translation-rotation coupling フォノンスペクトルコピー フォノンスペクトルコピー マウンテン成分 ミセル ミセル系 並進・回転結合 光カー効果 光	応用物理学一般 応用物理学一般	基礎研究(S)	東京大学	81,510,000	本研究の目標は、新開発の光ビート分光振動線とスペクトロスコピーと相関光誘起カー効果スペクトロスコピーとを往とする独自の解析スキームを確立して、振動・回転動起の分子ダイナミクスを可視化し、解明する新しい研究分野を構築することであった。最初の研究成果として、我々は流動場-配向結合線とスペクトロスコピー法の開発に成功した。実験に用いた装置は自らが独自に開発・改良を行ったもので、従来の測定困難だった条件下において分子配向ダイナミクスを観察できるという特徴がある。これらを用いて、配向に関する非線形光学効果の増大現象、広帯域領域における分子配向結合現象に関する研究を行った。 つぎに我々は、光ビート分光法による分子配向結合現象の直接観察を試みた。液体中の自発的な密度揺らぎによる散乱光のスペクトル関数は、液体分子の動的運動方程式と熱揺動方程式によって記述される。本研究では、光ビート分光法を用いることにより、今まで測定が困難であったHz～MHzという低周波領域の光散乱スペクトルを精密に測定することで、スペクトルの微妙な形状変化なども含む動的構造因子をもの直接観察するという新しいブリュアン散乱法を確立した。 これらの成果を受けて、我々はさらに異なる形状分子液体における特異な配向結合現象の観察と、自由度間結合係数の直接観察を行った。配向揺らぎを直接観察する高分解能光散乱法、および表面波屈折法という二種類の実験手法による結果を組み合わせ、分子配向と並進運動およびそれらの結合を支配する三つの輸送係数の値をすべて求めることに成功した。三つの粘性係数それぞれの温度に対する依存性から、臨界的な振る舞いを有するのは結合粘性であると明らかにし、その臨界指数を求めることができた。	
中性単一成分分子性金属の創成と展開	2002年度 ～2005年度	小林 昭子(KOBAYASHI, Akiko) 東京大学・大学院・理学系研究科・教授 (50011705)	Antiferromagnetic Phase Transition Dithiolate Metal Complex HOMO-LUMO gap Molecular Alloy Systems Molecular Conductors Single-Component Molecular Metals Three-Dimensional Fermi Surfaces ¹ HNMR ジチオレン金属錯体 ジチオレン錯体 三次元フェルミ面 中性単一分子 中性単一分子性金属 中性単一成分分子金属 分子性伝導体	機能・物性・材料 →機能物質化学	基礎研究(S)	東京大学	72,020,000	本研究では、拡張型テトラアフルバレン骨格を持つジチオレン金属錯体による中性単一成分分子性超伝導体、高い転移温度をもつ(強)磁性金属および溶解性分子性金属等の実現を目標とし、配位子の修飾や中心金属の選択により一連の新物質を創成し、この分子性結晶と金属錯体の性質をあわせ持つ新しい物質群の構造、物性および機能性を明らかにした。 1)新しい単一分子だけで出来た分子性金属[Ni(tmtd) ₂] (tmtd=trimethylenetetrahydrofuranediyl dithiolate)が金属の厳密な証明であるフェルミ面を持っていることを証明するために、33テラ磁場を使用し、マイクログラフを用いた微小結晶の磁化測定を行った。その結果[Ni(tmtd) ₂]の磁気量子振動の観測に成功し、[Ni(tmtd) ₂]が電子とホールからなる三次元的なフェルミ面を持つ金属であることを確認した。この研究により新たに設計・合成された中性単一分子の結晶、[Ni(tmtd) ₂]が3次元金属であることを実験的に完全に証明することができた。 2)転移温度の高い単一分子磁性金属に關しては、初めての単一分子性金属[Ni(tmtd) ₂] (tmtd=trimethylenetetrahydrofuranediyl dithiolate)と同型構造を持ち、奇数個の1電子をもつ金属錯体分子[Au(tmtd) ₂]を合成し、この錯体分子の結晶が、従来の分子性伝導体では考えられない、代表的な反強磁性無機金属であるマンガンの転移温度(約100K)より高温の110Kにおいて反強磁性秩序を持つ事を見出した。また未発表であるが、ごく最近マイクロ単結晶の伝導度の実験により転移温度以下においても金属的な電気抵抗の温度依存性を確認した。このように高い磁気転移を持つ分子性金属は勿論初めてであり、この研究により当初の目標を達成できた。 3)また超伝導については、最近合成に成功した分子性金属[Ni$_{1-x}$Au$_{x}$(tmtd) ₂] (0x1)の結晶は[Ni(tmtd) ₂]より大きなフェルミ面を持つこと考えられ、従って超伝導の実現に有利であると予想される。微小結晶の単結晶の電気抵抗の測定を行った。通常では残留抵抗が観測されるはずの2K以下の低温で僅かではあるが抵抗が減少を初め、また、反磁性の増大が観測された。この結果は、結晶中に微量な超伝導部分を含む事を強く示唆するものである。本結果は単一分子性超伝導体の存在を明確に示すものであり、今後、本合金系に限らず大きな超伝導部分を持つ結晶を見出すことが重要な課題である。	
モルフォロピク相境界組成をもつリラクサー誘電体のミクロ構造制御	2002年度 ～2005年度	上江洲 由晃(UESU, Yoshiaki) 早稲田大学・理工学術院・教授 (10063744)	Dielectric constant Electric-field-induced resistant switching Morphotropic phase boundary Perovskite oxide Pulse-laser deposition method Relaxor Thin films バルシューザー成膜(PLD) モルフォロピク相境界 リラクサー レーザーデポジション成膜装置 圧電性 強誘電体薄膜 強誘電体 強誘電体薄膜 薄膜 複合ペロブスカイト結晶 誘電率 酸化物 量子	固体物性 [光物性・半導体・誘電体] →物性1	基礎研究(A)	早稲田大学	49,660,000	(1)PSN/PT超格子多層膜の構造と誘電特性 PLD法により世界で初めてPSNPT超格子薄膜を作成することに成功した。構造はシングルステップのSrTiO ₃ (STO)(001)基板の上に電極相として厚さ40nmのSrRuTiO ₃ (SRO)を載せ、その上にPSN/PT超格子薄膜、さらにトップ電極としてAuを蒸着した。PSN/PT超格子は2種類を作成した。PSN格子とPT格子からなるN層の超格子膜を(PSNxPTy)Nと書くこと、(PSN ₅ PT ₃) ₁₀ および(PSN ₂₀ PT ₁₅) ₁₀ である。これらの超格子膜の構造をX線回折法により詳細に調べたところX線超格子反射が明確に観測され、確かに超格子薄膜が作成されていることを確認した。これから超格子周期、相間距離を決定した。さらに室温で誘電測定を周波数10 ² ～10 ⁶ Hzの範囲で行い、300～350の実部誘電率を得た。 (2)ペロブスカイト構造物質の電気バリエーションが効果的な電気バリエーション誘起抵抗スイッチ効果と超格子膜の遷移金属酸化物薄膜で普遍的に発現することを示し、個々の物質の電子構造には依存せず、結晶欠陥のような一般的な性質に起因することを突き止めた。	

レーザー場におけるメソスコピック系の非線形ダイナミクス	2002年度 ～2005年度	吉川 研一(YOSHIKAWA, Kenichi) 京都大学・大学院・理学研究科・教授 (80110823)	Laser Nonequilibrium systems dynamical phase separation mesoscopic system pattern formation reaction diffusion system rhythm spontaneous motion リズム形成 ミクロモーター ミクロ相分離 メソスコピック系 バズム レーザー レーザートラップ トラップ 光ピンセット 光モーター 分子機械 分散現象 化学-機械エネルギー変換 単一分子操作 反応拡散系 微小液滴 無容器器	物性一般 (含基礎理論)-数理論-物理-物性基礎	基礎研究(B)	京都大学	14,700,000	非平衡開放系の物理を理解することは、宇宙から生物にいたるまで、さまざまなスケールの物理を考える際に重要な課題である。そこで、われわれはマイクロメートル～ミリメートルのスケールの定常的な非平衡開放条件を集光レーザー場を用いて形成することを目的として研究を進めてきた。すなわち、集光レーザー場によって物体をトラップしながら、光子としてエネルギー注入による非平衡開放条件下で引き起こされる動的な非線形現象についての実験をデザインし、非平衡開放系に関する実験モデル系の確立、理論的基礎の構築を目指した。その結果、次に示すような重要な成果を得ることができた。 ・定常的な集光レーザー場中における高分子-脂質チューブの周期的構造変化 ・レーザーにより誘起されるマイクロメートルスケールの相分離現象 ・レーザーエネルギー注入による液滴の振動・消滅リズム ・レーザー照射位置の制御による液滴の自発的運動の制御 また、レーザーによる非平衡系での現象と対比させて考えるため、化学エネルギーの勾配により駆動される自発運動についても研究を行い、次の成果をあげた。 ・界面活性剤水溶液中における油滴のガラス基板上自発的運動 ・水-アルコール系におけるアルコール液滴の自発的運動 ・反応液滴の自発的運動 これらは光エネルギー-化学エネルギーを注入源とする非平衡開放場であると捉えることにより、非線形微分方程式で記述可能であることを示した。このような定式化により、実験系の制御やデザインができるようになってきている。理論的考察を通じて、非平衡開放条件下、自発的にリズムやパターンを生成する現象についての、新奇なシナリオを構築することに成功した。
熱電駆動型形状記憶合金運動素子を用いた新たなマニピュレータシステムの開発	2002年度 ～2005年度	羅 雲(LUO, Yun) 東北大学・先進理工学研究機構・助教 (40302228)	manipulator modeling phase transformation shape memory alloy thermoelectric element マニピュレータ モデルリング 人工筋肉 形状記憶合金 熱電素子 相変態 義肢	機械力学-制御-機械力学-制御	基礎研究(B)	東北大学	16,800,000	熱電駆動型形状記憶合金運動素子を用いて、従来のものより軽量かつ早い応答特性を有する新たなマニピュレータシステムの創製を目指して研究を展開した。 ・形状記憶合金の変態に伴う回復力の温度、拘束条件への依存性について実験的な考察を行った。相変態に誘起される形状記憶効果と形状記憶合金内部に時効処理時の拘束歪みに依存した分布応力場として表し、回復力のモデリングに関するモデルを提案した。また、形状記憶合金の複合的現象をともなう変態挙動を表現するために、変態領域にそれぞれ独立した分率を定義してモデルの改良を行い、実験結果との比較によりモデルの妥当性を検証した。本研究で用いる形状記憶合金板に対して、変態温度やヤング率などを考慮した曲げモーメントモデルを用いたシミュレーションに適用した。これにより温度のみで形状記憶合金マニピュレータの力学出力を制御することが可能となった。 ・相変態分率の変化を考慮したアクチュエータの自由変形モデルを構築し、温度履歴に依存した形状記憶合金アクチュエータの変形量の予測を可能にした。また、温度履歴による変態履歴の両方に依存した変形量のメカニクス特性についてもシミュレーションを可能にした。これにより形状記憶合金アクチュエータの変形量の制御が自由変形モデルに基づいた温度制御で可能となった。 ・形状記憶合金のリボンに複数熱電素子を装着したような簡単な構造を有するマニピュレータ試作し、その出力をコントロールするためにフィードバック制御システムを構築した。温度制御系はPID制御のより、室温付近から目標温度までの加熱時間が短く、目標温度に達したときのオーバーシュートおよび定常偏差が小さな温度制御を実現した。周囲温度が安定している環境で高精度な力学出力ができた。試作した義肢用長(人工指)サイズのマニピュレータは自重の10倍以上の重量を把持できるものであり、熱電素子を用いた強制冷却で自然冷却の3倍以上の冷却速度が得られた。
面不斉集合分子の創製とその触媒機能	2002年度 ～2005年度	滝又 宜弘(KANOMATA, Nobuhiro) 早稲田大学・理工学術院・教授 (40221890)	Asymmetric alkylation Crystallization-induced asymmetric transformation Cyclophane synthesis Intramolecular pinacol coupling Multi planar-chiral molecules Phase transfer catalysis Samarium iodide Stereocontrol of planar chirality シクロファン合成 ヨウ化セマリウム 不斉アルキル化	合成化学-合成化学	基礎研究(B)	明治大学 →早稲田大学	13,400,000	本研究では、面不斉分子の効率合成法の開発を行うとともに、複数の面不斉を有する新しい集合型面不斉分子を設計・合成し、これらの相間移動触媒機能について検討を行った。 ・面不斉分子の効率合成法として芳香環上の直鎖置換基を直接活性化して架橋鎖を形成する「シクロファン架橋鎖合成法」について検討した。ここでヨウ化セマリウムを用いた分子内ピナコリング反応によるパラシクロファン誘導体の合成を繰り返し、炭素数9-12の架橋鎖を有するパラシクロファンジオール体が最大64%の収率で得られることを見出した。また、これらを架橋安息香酸誘導体へと変換するルートを開発した。さらに、11炭素鎖を有するパラシクロファン誘導体においては、異性体品出法を用いて面不斉の立体制御に成功した。また、以前から研究を行ってきたビニル/ミソホスホンを用いることで、様々な架橋鎖長を有する面不斉ピリジジファン合成が可能であることを見出した。本合成法の一般性を確立した。 一方、ピリジジ型、並びにベンゼン型シクロファン化合物を不斉源とする新たな有機触媒の開発を目標として、複数の面不斉ユニットを導入したキラル4級アミノニウム塩の合成を行った。これらを相間移動触媒として用いた不斉アルキル化反応では、75%と良好な不斉収率でピリジジ誘導体の不斉アルキル化が進行することを見出した。これは面不斉シクロファンを不斉源とする初めての相間移動触媒反応である。また、これら一連の不斉触媒機能を詳細に検討し、ピリジジ型触媒の方がベンゼン型触媒よりも優れた立体選択性を示すことを明らかにした。
水の多様性の発現機構	2002年度 ～2005年度	大塚 薫(OHMINE, Iwao) 名古屋大学・大学院・理学研究科・教授 (60146719)	2次元ラマン分光法 Raman spectroscopy charge transfer fluctuation freezing, melting process (phase transitions) hydration hydrogen bond non linear multi dimensional spectroscopy pKwの温度依存性 water ラマン分光法 分子機構 揺らぎ 水の自己解離 水和 水素結合 水素結合ネットワーク 氷化と融解過程への分子論的機構 氷化-融解(相転移)	特別推進研究	名古屋大学	293,800,000	「水の多様性の発現機構」に関する次の5つの課題について研究を進めた 1)低温の水の水素結合構造とそのダイナミクスの解明:低温の水には低密度の液体(LDL)と高密度液体(HDL)の2つの状態があると考えられている。我々はフラグメント解析法を開発して水素結合ネットワークの性質を調べ、LDLでは15種類の基本的フラグメント構造によってほとんど空間が埋め尽くされており、各々のフラグメントの生成には互いに強い相関があることを見つけた。すなわち、LDLとHDLの間には(擬似的)相転移が存在し得ることの理由を初めて理論的に示した。さらに、過冷却状態における周波数依存の熱容量が如何に変化するのか、またそのダイナミクスと分極率の3次元応答関数などとの関係を明らかにした。 2)水の結晶化、融解現象の分子機構の解明をさらに進めた。フラグメント解析を用い、初期核の構造とその成長過程の様相を明らかにした。 3)高次非線形、特に2次元ラマン分光の理論的解析:液体の低周波運動の様相を探る新しい実験手段として2次元ラマン分光法の理論的解析を行い、この方法が非線形動的に非常に敏感であり、水の氷化現象の初期過程の検出にも用い得る方法であることなどを明らかにした。 4)イオンの水和構造についての研究:水分子の自己解離定数とその温度依存性の理論的計算を行い、その完全な再現に成功した。その解析により、その機構における水和構造-相互作用の長距離性、周りの水分子への電荷移動の長距離移動の様相などを明らかにした。また温度が高くなればなるほど、解離イオンの水和エネルギーの安定化が大きくなることには、常識と逆を見つけた。その原因を明らかにした。これは超臨界水の高い反応性とも関係している。現在、表面におけるイオンの水和構造の特徴についても研究を進めている。 5)また蛋白質(生体高分子)の反応ダイナミクス、特に光起電黄色蛋白質(Photoactive Yellow Protein: PYP)の光サイクルの研究、またイオンチャンネルモデル系におけるイオン輸送の現象などを明らかにしてきた。	
極限的短パルス光の発生とその物質との相互作用	2002年度 ～2005年度	小林 孝嘉(KOBAYASHI, Takayoshi) 東京大学・大学院・理学系研究科・教授 (60087509)	Absolute phase Carrier envelope phase (CEP) NOPA Non-collinear optical parametric amplification (NOPA) Photonic crystal fiber Quantum interference control Real-time vibrational spectroscopy Transient-state spectroscopy Visible-infrared region キヤリアエンベロープ位相	特別推進研究	東京大学	200,200,000	(1)極限的短パルスの発生:作成したNOPA光学系の安定性を評価するための手法として、フォトニッククリスタルファイバーを用いてNOPA出力パルスのCEP自己安定化に対する評価を行い、よい安定性を持つことが確認された。スペクトル干渉により二台のNOPAの相互安定性を評価した。これにより二台のNOPAでポンプ・プローブ実験を行うことが可能になった。 (2)短パルス特性新計測法の開発:我々の開発した自動的な短パルス絶対位相(厳密には搬送波包絡位相)の安定化したパルスの測定を行った。これまでの絶対位相の測定は、ごく最近それを主張している論文が、二報報告されているが、いずれの場合も、超高光電場の巨大なレーザー系から出ている極短パルス高出力パルス光を必要としている。我々はそれらと全く異なる方法により、微弱な低出力短パルスで測定出来る方法を考案して、実験を行った。光パルス増幅過程を用いた、絶対位相を固定した短パルス発生を提案、作成を行い、 $\pi/10$ 以下でゆらぎを安定化させることに成功した。その絶対位相制御レーザーシステムを用いることで絶対位相安定レーザーシステムの実験を行った。その測定の結果、分子配向誘起の効率は絶対位相によって制御できることを実験的に測定することができ、理論予測とも一致した。 (3)遷移状態分光法:分子振動の実時間分光として、ポリジアセチレン、共役ポリエン、イソシアニド-金会合体等の一次元系、タロシアン、ポルフィリン及びその金属化合物等のマクロサイクル系の電子振動結合の実時間動力学的な解明を行った。	
細胞周期の開始制御	2001年度 ～2005年度	岡山 博人(OKAYAMA, Hiroto) 東京大学・大学院薬学研究所・教授 (40111950)	Anchorage-dependent and independent proliferation BMP-2 Cdc2 Cdc25A Cdc6 Cdk4 Cdk6 Chk1 Control of S phase onset D3 DNA障害-複製チェックポイント G1 S Spombe S中期開始制御 Tsc-Rheb Uniquitination p53 カテンンチェックポイント ユビキチン リゾソーム 細胞周期 足場依存性:非依存性増殖 足場非依存性増殖 骨化	特定領域研究 (A)-特定領域研究	東京大学	151,600,000	当研究の主たる課題であり、発癌の根拠機構をなす足場依存性・非依存性細胞周期機構の解明に向けて研究を推進し、重要な進展を得た。特に、足場消失に伴い、染色体DNAの複製開始に必要なCdc6タンパクの発現が転写停止とタンパクの分解促進によって遮断されること、このタンパクの分解に、少なくとも2種類のユビキチンリガーと1種類のカテンン様システムプロテアーゼが関わっていること、その一つはG1期で作用することが示されているOdh1-APであり、その働きに癌抑制因子p53が必要であること、更にこれらの系によるCdc6タンパクの分解制御にTsc-Rhebシグナル経路が深く関わっていることを見出した。一方、G1期サイクリン依存性キナーゼのなかでCdk6/サイクリンD3の複合体が、阻害タンパクの影響を受けにくいこと、その結果、増殖刺激が無い状態で細胞の増殖促進効果を発揮し化学発癌に対する細胞の感受性を著しく引き上げること、更に、骨細胞分化を抑制することを明らかにした。他方、細胞周期チェックポイント制御に関して、以下の知見を得た。Myl1キナーゼはCdk2の抑制的キナーゼであり、ツグメル節の減数分裂においては、Moz/MPK下流のp90RskキナーゼがMyl1と結合し、その活性を阻害している。また、体細胞周期においてPole1がMyl1と結合し、Myl1がMyl1と結合し、Myl1がMyl1と結合することによってその活性を阻害することを見出した。更に、様々な基質中の二重リン酸化されたDSGモチーフ(DpSGFXS)を認識するSDF1/TP-Cy ubiquitinリガーが、ツグメルおよびCdc25Aにある新規な非リン酸化型DDGモチーフ(DDGFXD)を認識し、分解に導くことを見出した。	

ゲージ場の量子論におけるフェルミ粒子とソリトン	2001年度 ～2006年度	藤川 和男(FUJIKAWA, Kazuo) 日本大学・理工学部・教授 (30013436)	Berry位相 Chiral anomaly Dirac演算子 Entanglement Gauge symmetry Geometric phase Lattice gauge theory Quantum game theory Quantum theory with singular potential Statistics エンタングルメント カイラルアノミー カイラル対称性 ゲージ対称性 ゲージ理論 ゲーム理論 ソリトン トポロジー ハミルトニアン フェルミ演算子 ホロノミー 位相 双対性 可	特定領域研究 (B)ー特定領域研究	東京大学 一日本大学	10,300,000	藤川は、格子上の場の理論、特に新しいDirac演算子の可能性を考察した。また格子上の場の理論におけるマヨラナ粒子の定義とかCP対称性の定義にかかわる問題を中心に考察すると同時に格子上で超対称性の定義に関する考察を行った。時空が非可換な理論におけるユニタリ性の問題点の考察も行った。スピノと統計の定理の異なる角度からの理解も与え、またソリトン解を持つ超対称な2次元模型に現れる一種の量子異常の考察を行った。 藤川は、また幾何学的な位相と呼ばれるものの位相的な性質とかその背後にあるゲージ対称性の起源に関する考察を行い、幾何学的な位相と量子異常の基本的な差異を明らかにした。非熱的および混合状態の幾何学的な位相は全てシュレディンガー方程式に内在する「隠れた」ゲージ対称性上に付随したホロノミーとして理解できることを示した。 簡井は、量子特異点の物理的性質を調べ、超対称性や双対性、Berry位相などの興味深い現象が生成される可能性を見出し、発散を持つポテンシャル系にも応用できるような量子特異点の特異点を拡張し、特異点のスペクトルに対する影響を調べた。特に発散ポテンシャル系が古典再帰(quasirecurrence)現象を示す場合には、一種の状態遷移のみで成り立つ量子非再帰で発生する量子正の温度依存性を調べ、それが非再帰の粒子の統計性に大きく依存することから、量子特異点の性質を制御することにより、量子計算のquasirecurrenceとして用いることが可能であることも示した。また、量子特異点を持つ可解系としてCalogero模型を考察し、 $N=3\&$ の場合に従来よりも一般的な量子解を得た。量子特異点と粒子の統計性に関する研究成果もまとめた。 簡井は、また量子論の非局所相関性の応用として従来のゲーム理論を量子化し、ゲームの安定解が持つ性質(ディレンナ解消など)に対する量子縫れ(エンタングルメント)の役割を詳しく調べた。Schmidt分解と呼ばれる複合量子状態表現に基づいて、計量可能な量子相関を持ち、かつ従来のアプローチを含む一般論を構築することに成功した。これは別に非可換性空間上の電磁場理論における(古典)解を構成し、非可換性に起因する異常分散関係と偏光条件を得た。
数値的手法にもとづいたゲージ理論の非摂動的効果の解明	2001年度 ～2006年度	鈴木 恒雄(SUZUKI, Tsunoo) 金沢大学・総合メディア基盤センター・教授 (600119502)	Confinement Extra dimension Kugo-Ojima confinement condition Landau gauge Landauゲージ Lattice QCD QCD The Kugo-Ojima condition The Kugo-Ojima parameter color confinement dual Ginzburg-Landau theory finite-temperature phase transition flavor symmetry monopole	特定領域研究 (B)ー特定領域研究	金沢大学	12,600,000	この研究で、鈴木はQCDの閉じ込め機構におけるトポロジー特にモノポールの役割を調べてきたが、18年度にきわめて精度の高い数値計算を行い、一切ゲージ固定などの人為的な条件を置かず、可換な双対マイナー効果で理解できることを発見した。弦定数などの閉じ込めに特徴的な振る舞いや電場が絞られる原因はすべて可換なモノポールの寄与であること、なぜ可換な電荷で非可換なカラーの閉じ込めが実現しているのかがいかに示された。現在は、カイラル対称性が成立しているoverlap fermion形式を使って、閉じ込め機構とカイラル対称性の自発的破れの関係を研究している。更に軽いクォークの入ったfull QCDでの研究で、軽いクォークのモノポールへの影響を研究している。久保は離散群に基づくフレーバー対称性が低エネルギーで実現されている可能性があり、標準理論やその拡張された理論が持つフレーバー問題と関連するところの有力候補であることを見いだした。さらにフレーバーの対称性と陽子崩壊モード、暗黒物質の関係について調査を行い、フレーバー対称性は様々な形で実験的に検証可能であることを明らかにした。中島は、Landauゲージの九後・小嶋カラー閉じ込め条件について、非クランチ数値実験において初めて成立するという数値結果を得た。さらに中島はLandauゲージQCD(SU(3))のゴースト凝縮の可能性を調べた。現在までの解析ではゴースト凝縮は0とコンスタントである。
量子ドットの緩和とコヒーレンス制御	2001年度 ～2005年度	舩本 泰章(MASUMOTO, Yasuaki) 筑波大学・大学院・数理物質科学研究科・教授 (60111580)	CdSe量子ドット CuBr量子ドット CuCl量子キューブ GaAs量子ドット GaAs量子点 InP InP量子ドット PbSe量子ドット energy relaxation exciton phase relaxation photon echo quantum beat quantum dot spin エネルギー緩和 コヒーレンス コヒーレントフォノン スピントネル過程 ノンマルコフ過程 フォトンエコー ペテロダイン検出 ペテロダイン検出フォトンエコー 位相緩和 励起子 励起子-フォノン結合	固体物性 (光物性・半導体・誘電体) 一物性!	筑波大学	119,860,000	量子ドットの光スペクトルの均一・幅とコヒーレンス緩和機構の解明)遷移InGaAs/GaAs量子ドットの共振二次発光の干渉を用いた位相緩和測定法を実証し、また、蓄積フォトンエコー法によりCdSeおよびCuBr量子ドットにおける励起子位相緩和を測定した。ドットにおける低温度範囲は、温度に依存しない成分、励起子-母体の二準位系間の相互作用、励起子-閉じ込め音響フォノン間の2フォノンラマン過程の3つの中で統一・普遍的に記述できる。 <量子ドット中の高速エネルギー緩和(フォノン緩和)の解明> InPやInGaAs自己形成量子ドットに負の電気バイアスをかけ、ドットから光励起された穴を抜き取り非放射緩和と速度を制御し、定常・時間分解発光の両面から緩和するフォノン緩和が明らかにされた。フォノンポルネック効果は、予想に比して十分速いフォノン緩和の観測により否定された。 <超高感度ペテロダイン検出フォトンエコーの開発と単層量子ドットへの応用>単層遷移GaAs量子ドットと電場印加InP量子ドットのペテロダイン検出フォトンエコー測定に成功し、前者では非再帰に比べドット中の励起子分子の束縛エネルギーの増大、後者では、電場により穴をトンネル過程でドットから引き抜く過程を観測した。 <量子ビートによる量子ドットのスピノ依存微細構造の研究>トリアン発光の量子ビートをInP量子ドットで見出し、更に、量子ドットの4種類の量子ビートを発見した。これらの研究はチャージチューナブル量子ドットの概念を生み出した。 <電子をドープさせたInP量子ドット中のサブミリ秒の電子スピノ緩和時間> InP量子ドット中のドープ電子のスピノ緩和時間がサブミリ秒からミリ秒に達することを示した。 <電子スピノの緩和時間に対する弱磁場による核スピノ揺らぎの凍結効果> 正孔ドープInAs量子ドットにおいて、無磁場で500psの光励起電子スピノの緩和時間が、0.1Tの磁場で4nsに伸びる。核スピノ揺らぎの凍結効果を実証した。
精密酸塩基触媒の創製と精密有機合成化学への活用	2001年度 ～2005年度	丸岡 啓二(MARUOKA, Keiji) 京都大学・大学院・理学研究科・教授 (20135304)	1,3-dipolar cycloaddition L-ドープ Neber転位 Strecker reaction acid amino acid base catalysts bidentate T(IV) complex binaphthol enantioselective silylation phase transfer catalysis カルボニル キラル相間移動触媒 キラル触媒 グリシンエステル シリル化合物 ティッシュェンコ反応 マンザジシムA ルイス酸 不斉アルヒル化	物質変換 一合成化学	京都大学	123,890,000	本研究では、次世代の精密有機合成化学の強力な進展に向けて、精密酸塩基触媒の合理的、目的な触媒設計を行ない、他の反応触媒では及ぶことがないような反応性、選択性が獲得できるような精密合成反応プロセス(触媒的不斉合成も含む)の確立を目指した。まず、精密アルヒル触媒の化学では、二点配位によるカルボニル基の二重活性化の概念を不斉合成にまで展開させた。すなわち、Ti-O-Tiユニットを有する光学活性二点配位型ビスチタン触媒をデザインし、そのμ-オキソ構造が実際に二点配位を起し高い反応性、選択性を示すことを見だし、不斉アルヒル化反応、ニロロンやジアゾ酢酸エステルを用いる不斉1,3-双核子環状付加反応に応用することができた。一方、光学活性ピナコトール由来のスピロ型キラル相間移動触媒をデザイン、改良し、様々な不斉相間移動反応の開発に成功した。更に、キラル相間移動触媒の構造の単純化ならびに反応性・選択性の飛躍的向上を目指し、究極の有機分子触媒ともいえるモノナフテルジアルキルアンモニウム塩のデザインに成功した。これにより、各種の光学活性性エタノール酸の实用的不斉合成プロセスが可能になった。この不斉アルヒル化法ではかさ高いアミノ酸の合成には不向きなため、かさ高いアミノ酸合成を目指して不斉ストリックマン反応を可能にする、最適なラセン型キラル相間移動触媒を新たに考案した。二点配位精密酸塩基触媒の化学に加え、半導体の機能性有機金属分子としてのトリス(β,β-ジフルオロフェニル)シリル、ゲルミン、スズ化合物を効率よく合成し、それらの機能性評価や合成的な応用について詳細に検討した。
細胞を要さない再生血管用医材の開発とその臨床応用	2008年度 ～2010年度	松村 剛毅(MATSUMURA, Goki) 東京女子医科大学・医学部・助教 (20297469)	ティッシュエンジニアリング 先天性心疾患 再生医療 再生血管 医器材 橋渡し研究 生体吸収性素材 生分解性素材 生力学的試験 超音波イメージング	胸部外科学	東京女子医科大学	19,500,000	細胞の播種をすることなく生分解性素材のみにて再生血管を作成するための素材の探究と最適化を行った。分解速度、物理強度、形状の異なる素材を組み合わせ2年にかかる長期埋植実験を行い、良好な閉塞性と機能、組織像を有する再生血管の作成に成功した。それは、生力学的にも正常血管とほぼ同等な弾性率を有する血管であった。本研究により素材のみでも良好な再生血管がin vivoにて作成できることが証明された。
自己、他者、集団、社会の重層的関係についての行動科学的検討	2004年度 ～2006年度	浦光博(URA, Mitsuhiro) 広島大学・大学院・総合科学研究科・教授 (90231183)	bridging function cultural differences in correspondence bias mass media on-line and off-line reality construction self-appraisal social capital volunteer activities インターフェース オフライン・オンライン ソーシャル・キャピタル ネットワーキング スキル ネットワーク ポランティア活動 マクロ経済データ マスコミュニケーション リアリティ形成	社会心理学	広島大学	13,300,000	大きく3つの観点から6つの研究を行った。第1に、ソーシャル・キャピタル論の観点である。特に、橋渡し型ソーシャル・キャピタルが地域防犯活動や犯罪の抑制といかに関わるのかについて検討した。ボランティア活動の橋渡し効果に着目した研究では、地縁的活動だけでなく、地域を越えたボランティア活動が防犯機能を持つことが示唆された。また、インターネットの橋渡し機能に着目した研究では、WWW利用による防犯情報の入手が防犯活動にボランティアの影響を及ぼすことが見いだされた。第2に、インターネット空間における自己過程の観点から、対面的な相互作用を伴わない対人関係が自己評価にいかなる影響を及ぼすのかを検討した。オンラインでの自己評価が対面的に及ぼす影響は、オフラインでのそれよりも大きくないこと、オンラインでの反動的自己は、リアルな世界で形成される現れ自己と乖離したものでないことが確認された。第3に、コミュニケーション過程に込められた文化・社会の影響の観点から、属性推論過程における対応バイアスの生起メカニズムの検討と、マスコミュニケーションにおける言語のリアリティ形成メカニズムに関する文化人類学的な検討を行った。日本語でのコミュニケーションにおける一人称代名詞の省略が対応推論研究において見いだされた日欧の文化差を説明する可能性が示唆された。また、文化人類学的な論議から、マスメディアにおけるマイリリティに関するリアリティ形成が、マジョリティ側の無意識的な構造化と密接に関連することが示唆された。



The Francis Crick Institute

John Cooper
Chief Operating Officer and Deputy CEO
The Francis Crick Institute

Jim Smith
Director
National Institute for Medical Research
Medical Research Council

Monday 27 February 2011

What is The Crick?

- A world-class medical research institute striving to understand and overcome the most significant diseases affecting people today
- A partnership of:
 - Medical Research Council
 - Cancer Research UK
 - Wellcome Trust
 - UCL (University College London)
 - Imperial College London
 - King's College London



How will we achieve it?

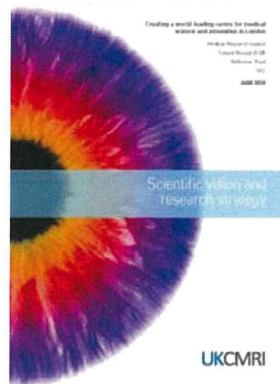
- Bring together the MRC National Institute for Medical Research and the CR-UK London Research Institute with UCL, Imperial and King's and top scientists from around the world
- Working in new and multidisciplinary ways, making discoveries to improve people's health
- Led by Sir Paul Nurse, Nobel Laureate and President of the Royal Society



The Science

We will focus on improving human health and tackling the major causes of human mortality, including:

- Cancer
- Heart and circulatory disease
- Infection
- Immunity
- Degeneration and regeneration
- Diseases of the brain and nervous system



Scientific Vision and Research Strategy

- Fundamental processes underlying human health and disease
- All areas of disease, from molecule to whole organism
- Multi-disciplinarity
- Constant refreshment of ideas and people
- Development of new technologies
- Culture supporting clinical and commercial translation
- Local, national and international networks, with academia, industry and public sector
- National role for the wider UK science base
- Engagement with the public

What is special about The Crick?

- World class research facilities
- Big enough for a critical mass of researchers from many disciplines to focus on major scientific areas
- Close to academic partners and hospitals
- A building that helps researchers to work together more easily and in new ways
- Long-term support for ambitious programmes
- Accelerating the development of new treatments
- Huge potential to change patients' lives

7

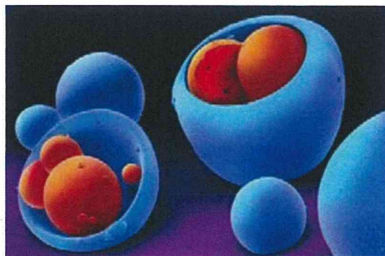
National benefits

- Better health, improved quality of life and increased prosperity through investment in excellent medical research
- Develop technologies and train scientists and technical staff to the highest standards, for the benefit of the wider UK biomedical science base



International benefits

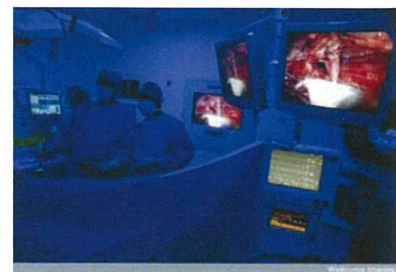
- The Crick will be one of the world's leading biomedical research institutions, working to defeat the diseases that affect humankind
- It will recruit from a global pool of talent and seek opportunities to work with partners worldwide
- It will train the research leaders of the future



9

Innovation and translation

- Extensive links with clinical facilities and industry to speed up the translation of discoveries made in the laboratory into effective treatments
- Clinical and commercial translation valued as highly as discovery research



The Francis Crick Institute

The building

11



Why St Pancras and Somers Town?

- Camden is a centre of medical excellence—more than 30 medical research organisations nearby
- *The close proximity of clinical research facilities and faculties of other disciplines including engineering and maths is vital for the stimulation and support of translational research*
Department for Business, Innovation and Skills
- Excellent national and international transport links
- A very attractive location for the best researchers



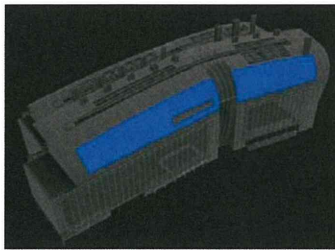
The design

- Four floors of laboratories plus plant above ground
- Space for up to 1,250 researchers plus support staff
- Much of the ground floor will have public access and be available for community use
- Focus on practical sustainability



A sustainable development

- Green principles embedded into the building design and operation:
 - On-site combined heat and power system
 - Solar panels
 - Energy-efficient fittings
 - High-quality landscape areas
 - Extensive cycle storage
- Building materials sourced to minimise environmental impact
- Building Research Establishment Environmental Assessment Methodology *Excellent* rating



15

Sympathetic design

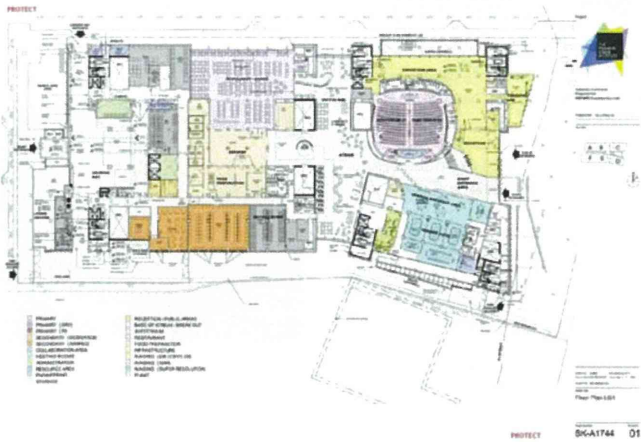
- High visual permeability
- Observable interior at street level
- One-third of the building below ground to reduce mass
- Set back on Ossulston Street to create public open space
- The tallest part of the building is away from local homes



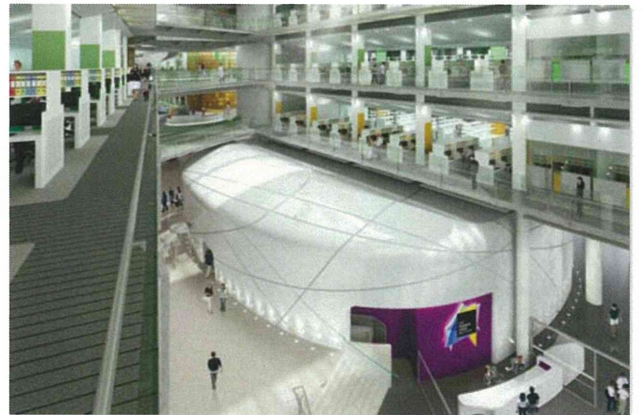
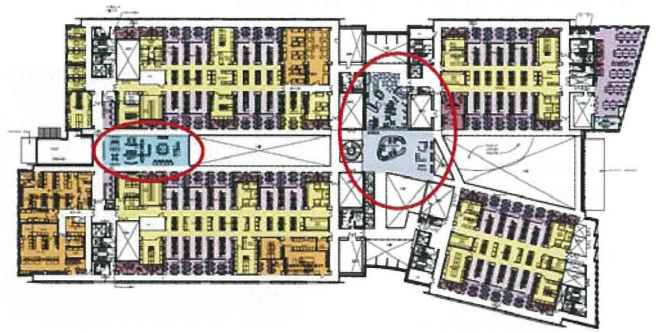
16



Ground floor plan



Laboratory floor plan



Construction

- Construction week 45 of 179
- Spring 2013—external work completed
- Spring 2015—internal works completed; staff begin to move in



The Francis Crick Institute

Public and community engagement

Education and engagement

- Auditorium and exhibition area
- A teaching laboratory with priority access for local schools
- An ambitious education programme, volunteering, mentoring and work placement schemes
- Extensive public engagement with science programme
- Support for community initiatives to improve local health and well-being



Local community

A community benefits package worth almost £10 million, including:

- £3.8 million towards a new district energy centre to provide residents with cheaper heat and power
- £1.7 million for insulation and other improvements to local homes
- Apprentices, job opportunities and local business support
- Improved access and community safety



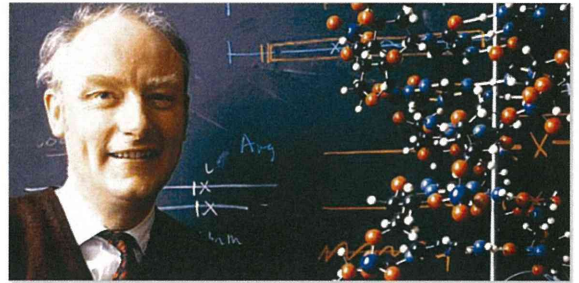
Living Centre



- Help improve health and wellbeing in the local area
- 450m² space—designed and run in partnership with the community



Francis Crick



- Co-discoverer of the structure of DNA
- Really clever, open to new ideas, collaborative, interdisciplinary, asked the hard questions



crick.ac.uk

Lead Discovery Center **LDC**

The Max Planck Drug Discovery & Development Center – Bridging the •Innovation Gap•

February 2012
B. Klebl
Lead Discovery Center (LDC) Dortmund

Lead Discovery Center **LDC**

From Bench to Bedside

Biologists
Chemists
Pharmacologists
Clinicians

Research Development Production

Targets Leads NCE Drugs

Target Validation Assay Dev. Screening Hit-to-Lead Lead Optimisation Preclinical Ph I Ph IIa Ph IIb Drugs

... a risky, long and winding road (~12 y, 1 Bio \$)

... an interdisciplinary effort requiring various (specialised) expertises, talents, skill sets, mind sets, working attitudes, supporting functions, ...

Lead Discovery Center **LDC**

Translation Gap

= •Innovation Gap or •Risk Gap or •Finance Gap or □

Target Validation Assay Dev. Screening Hit-to-Lead Lead Optimisation Preclinical Ph I Ph IIa Ph IIb Drugs

ACADEMIA GAP INDUSTRY

Academia Industry

Basic Research Discovery Research Commercial Development

The Development GAP

Increased Value and Commercialisation Potential

□ •Valley of Death□

Source: Larry Steranka, Cancer Research Technology, Presentation at BIO 2007

Taken from M. Krebs, IMBA

Lead Discovery Center **LDC**

Key Problem:

- Inventions at target or hit stage cannot be licensed at reasonable terms
- Drug Discovery know-how is lying on the industry side

Solution:

- Foundation of the **Lead Discovery Center GmbH**

by:

MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

Lead Discovery Center **LDC**

MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

- 80 institutes
- 16.900 employees < 6.600 scientists
- >12.000 publications p.a.; 32 nobel laureates
- additional 7.700 young & guest scientists
- ~40 institutes with life science (biomedical) oriented research programs (BMS and CPT)
- 1.73 Bio. annual research budget
- central tech transfer unit:

3.200 inventions
1.900 contracts
90 spin-offs

★ MP Florida Institute

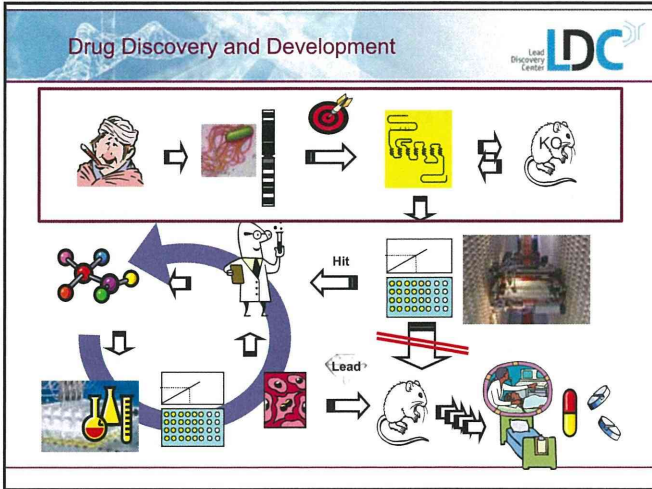
Berl. Klebl, LDC GmbH 24.02.2012

Lead Discovery Center **LDC**

Why Dortmund?

Dortmund ist Meister

Borussia Dortmund



Paving the Way for Innovative Medicines

The Lead Discovery Center GmbH professionally transforms excellent basic research into marketable assets

Setup

- spin-off of Max-Planck-Innovation (founded 2008)
- Location: BioMedizinZentrum Dortmund, NRW

Company profile

- 47 employees, 85% of PhDs with Pharma experience
- framework contract with Max-Planck-Society
- Industrial Advisory Board: AstraZeneca, Boehringer Ingelheim, MERCK SERONO, NYCOMED

Product profile

- small molecule Lead series with PoC in animal models
- strict Lead criteria according to Industry standards

Bert Klebl, LDC GmbH 24.02.2012

Core Competencies In-house

Integrated Core competencies & expertises in small molecule drug discovery established in-house

LDC
Lead Discovery Center

Dortmund Protein Facility

LDC
Lead Discovery Center

Slide: T. Bergmeier, LDC
Bert Klebl, LDC GmbH 24.02.2012

COMAS

LDC
Lead Discovery Center

1st primary HTS completed

Numbers:

- 182k compounds, ~20k compounds to come
- currently @ ~35k compounds/6 hours
- scalable to increase throughput & compound store
- will move close to LDC
- proprietary: MPI-MP, LDC, other MPG (?)

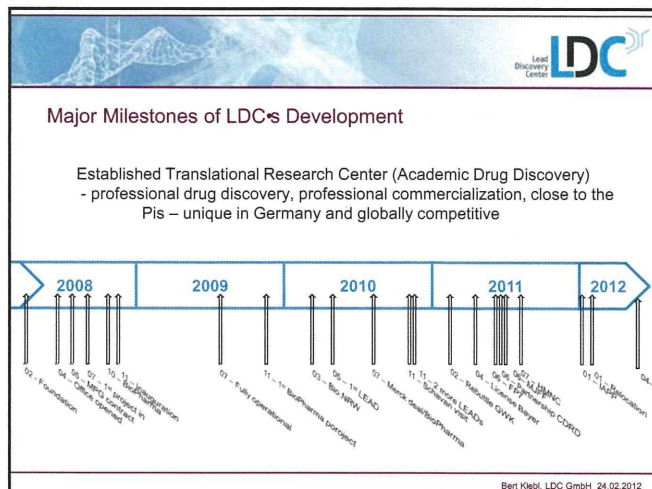
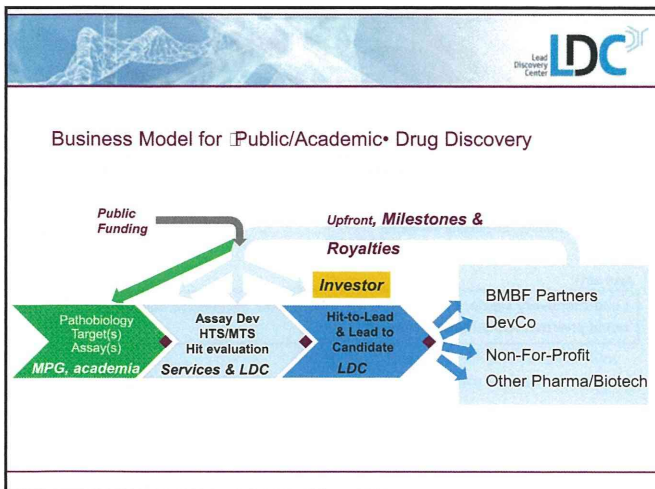
Bert Klebl, LDC GmbH 24.02.2012

Definition of LEAD = LDC Product

3 Hallmarks

- **Interpretable proof-of-concept in a target- and disease-relevant experimental animal model** (incl. evidence that sufficient concentration of unmodified compound can reach the target long enough)
- **Plausible strategy to further improve on compound properties, potency, specificity, off-target activities, any liabilities identified,**
 - (evidence that properties can be modulated: structure-property relationships)
- **Intellectual property for Lead series secured or •freedom to operate** □

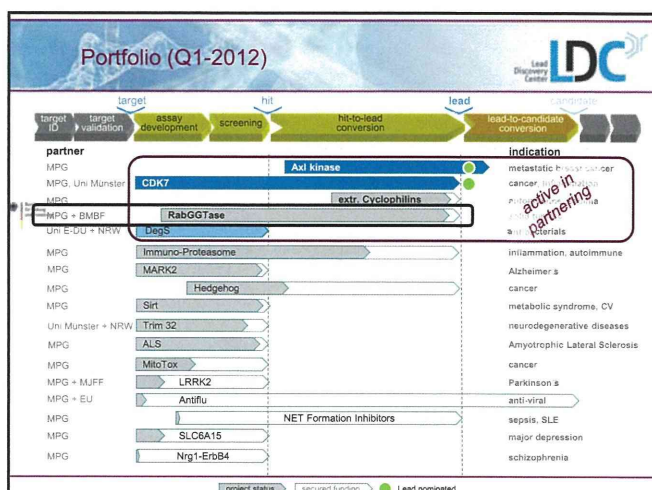
Bert Klebl, LDC GmbH 24.02.2012

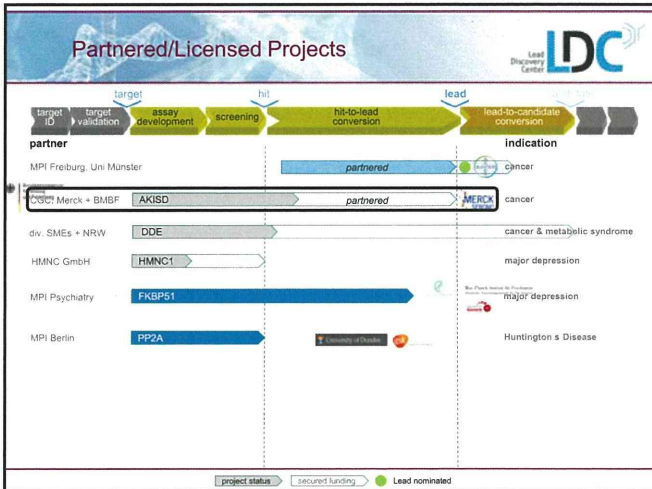


- ### LDC's Major Achievements in 4 Years
- Big success!
- ~50 novel jobs
 - 3 leads
 - 2 early partnerships (Merck Serono & HMNC) under pre-negotiated terms
 - 1 lead licensed to Bayer
 - Licensing negotiations initiated for remaining 2 leads
 - 2 additional projects licensed/transferred into partnerships (PP2A, FKBP51)
 - Blueprint for other TRCs (e.g. expert reviews on IP-K, CDRD for their further funding, possibility to serve as franchise model for European centers *in status nascendi*)

- ### Portfolio Project Requirements
- Innovative, novel science – either (patho)biology, pharmacology or chemistry (know-how is sufficient, IP not essential at this stage)
 - Medical need
 - Active collaboration/support of sponsor(s) group & LDC
 - Know-how in the therapeutic area(s)
 - Positive vote by MPG review board or
 - Funding secured (MPG, BMBF or NRW, private money, ???)
- You have questions, proposals, etc.: then give us a call at 0231-9742-7000

- ### Approval Process for Academic Projects
-
- Currently >100 proposals w/o scouting, at different diligence levels, large proportion of MPG proposals
 - MPG projects undergo a 2-way review:
 - 4/6 MPG directors review scientific content
 - LDC/MI review druggability & commercial potential
 - Funding secured through MPG





Validation of LDC Business Model

January 2011

Lead Discovery Center and Merck KGaA Enter Collaboration for the Discovery of Anti-Cancer Compounds

- early discovery collaboration around a novel kinase platform technology
- research funding & licensing payments

April 2011

Lead Discovery Center and Bayer enter into license agreement covering a novel pharmaceutical lead structure.

- small molecule based oncology lead (kinase inhibitor)
- upfront and milestone payments up to 137.5 m plus royalties

Bert Kleib, LDC GmbH 24.02.2012

Linking Academia & Industry

Bundesministerium für Bildung und Forschung

Merck Serono, e.g.

CGC, e.g.

LDC

to facilitate early drug discovery with an application focus

Bert Kleib, LDC GmbH 24.02.2012

Biotech Collaboration

HolsboerMaschmeyer NeuroChemie GmbH

Scientific Basis: MPI of Psychiatry, Prof. Dr. Dr. h.c. Florian Holsboer

Goal: Personalized treatment for major depression

Model: Risk Sharing

Bert Kleib, LDC GmbH 24.02.2012

Limitations of MPG Project Financing

- Support for basic research only = Leads/PoC
- not all projects are expected to be licensable at lead status
- Funding is not exchangeable, dependent on administrative hurdles within MPG
- Project input from MPG & non-MPG sources (>100) -> MPG budget (6m p.a.) covers just the tip of the iceberg

Increasing Value and Commercialisation Potential

Funding Solution for New Early Drug Discovery Paradigm

ACADEMIA = Public Funding

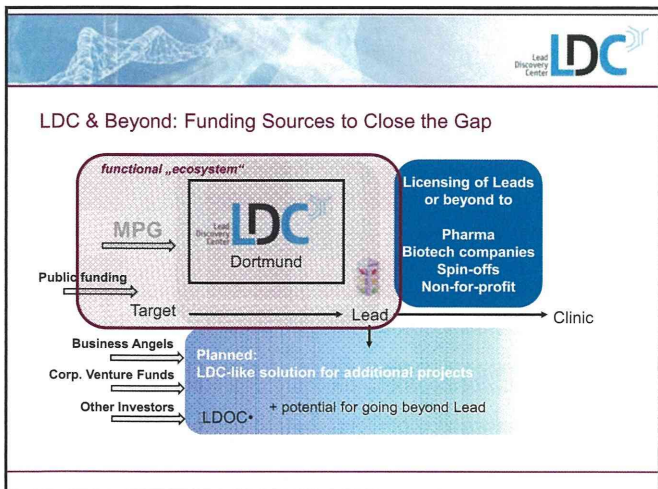
Bundesministerium für Bildung und Forschung

PUBLIC + PRIVATE FUNDING

Private Funding = INDUSTRY

Ministerium für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes Nordrhein-Westfalen

Bert Kleib, LDC GmbH 24.02.2012



DORTMUND Wirtschaftsförderung
 TechnologieZentrum Dortmund

Bundesministerium für Bildung und Forschung
 Ministerium für Innovation, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen

Matthias Stein-Gerlach
 Max-Planck-Innovation
 EXZELLENZ STIFTUNG ZUR FÖRDERUNG DER MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

BIO.NRW
 MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT

AstraZeneca NYCOMED
 BAYER MERCK SERONO
 Boehringer Ingelheim

General Assembly:
 Jörn Erselius
 Axel Ullrich
 Herbert Waldmann

Thanks!
 Lead Discovery Center GmbH
 Otto-Hahn-Str. 15
 44227 Dortmund
 Telefon +49 231 97 42 70 00
 Telefax +49 231 97 42 70 39
 www.lead-discovery.de

NCI's Experimental Therapeutics Program (NExT): Promoting Collaboration Between Public, Industry, and Investigator

NCI新規抗がん剤開発
産官学連携をどう進めるか
2012年3月6日

Naoko Takebe
Investigational Drug Branch
Cancer Therapy Evaluation Program
DCTD/NCI/NIH

Overview

- To introduce NCI Cancer Therapy Evaluation Program (CTEP) as an example for collaboration between Public, Industry, and Investigator in anti-cancer therapeutics development.
 - NCI CTEP Model: Promoting Investigator Initiated Clinical Trials
 - Introduction to the NCI Experimental Therapeutics (NExT) Program: Source of Anti-cancer Agent
 - Conclusion: What Can Industry-Academia-Government Cooperative Model Do?

Selected NCI/CTEP-sponsored Group Trials Contributing to FDA-approved Indications for New Oncology Agents

- 1991
 - Fludarabine phosphate (SWOG)
 - Pentostatin (CALGB, SWOG)
- 1992
 - Paclitaxel (GOG, CALGB, ECOG, NCCTG, SWOG)
- 1993
 - Melphalan IV (CALGB)
- 1994
 - Pegaspargase (POG)
- 2001
 - Imatinib mesylate (COG, SWOG)
- 2004
 - Letrozole (NCIC, Intergroup)
 - Oxaliplatin (NCCTG, Intergroup);
 - Taxotere (SWOG)
- 2005
 - Nelarabine (COG, CALGB)
- 2006
 - Bevacizumab (ECOG, Intergroup);
 - Rituximab (ECOG, Intergroup)
 - Herceptin (NSABP, NCCTG, Intergroup)
- 2008-2011 (May)
 - Nelarabine (COG, CALGB)
 - Imatinib mesylate/GIST-adjuvant(ACOSOG)
 - Bortezomib (MSKCC)
 - Bevacizumab/RCC (CALGB)
 - Romidepsin (NCI CCR)
 - Dasatinib (SWOG)

Total CTEP R&D Agreements Executed and Active Between 1997-2008

