



研究課題名 地球惑星中心領域の超高压物質科学

東北大学・大学院理学研究科・教授

おおたに えいじ
大谷 栄治

研究分野：高压地球科学

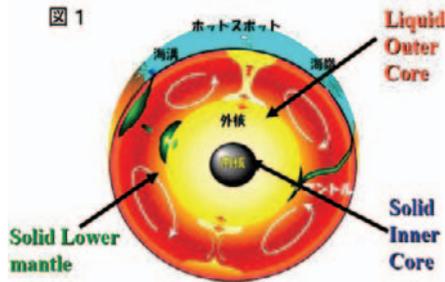
キーワード：地球惑星物質、地球惑星進化、地殻・マントル・核、鉱物物理

【研究の背景・目的】

地球中心部は、どのような組成であり、どのような状態であり、温度は何度であろうか？本特別推進研究「地球惑星中心領域の超高压物質科学」では、このような疑問に回答を与えるために地球核、核マントル境界、マントル深部の構成（図1）について三つの課題を解明することによって、地球中心領域の物質科学モデルを確立することを目的とする。

第一に地球核の温度圧力を実現し、圧力スケールを確立する。現状では圧力スケールが地球核を解明するためには、不十分である。

この研究では、核の条件であるマルチメガバルに及ぶ圧力スケールを確立する。さらに、300GPaで3000 Kを越える地球の内核の条件を実現する。第二にスピン転移、磁気転移、構造相転移など地球・惑星中心部の様々な相転移現象を明らかにする。第三に核・下部マントル条件で地球物質の弾性波速度を測定し、密度と地震波速度を制約する地球中心部の物質モデルを創出する。



【研究の方法】

上記の課題をダイヤモンドアンビル装置（図2）と、世界をリードする手法を用いて解明する。すなわち、ブリルアン散乱法と放射光のX線を併用してMgOやNaCl-B2相などの密度と音速の同時測定を行い、マルチメガバルに及ぶ圧力スケールを確立する。

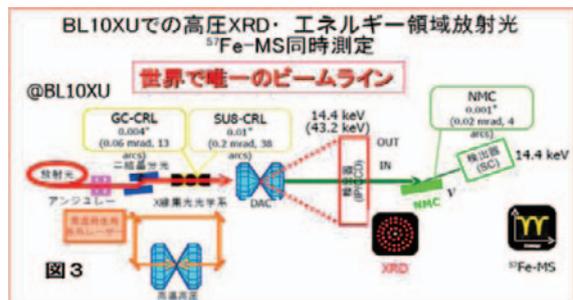


図2 ダイヤモンドアンビル装置

さらに、SPring-8のBL10XUに加えて大阪大学との研究協力により、ダイヤモンドアンビル面に高温負荷の小さいパルス加熱とX線回折法を用いて、高温高压下でのX線その場観察実験により地球中心条件を恒常的に発生し、そこでのX線回折を可能にする。

X線粉末回折、ブリルアン散乱による音速測定に加えて、SPring-8のBL10XUビームラインに、我が国独自のエネルギー領域放射光⁵⁷Feメスバウア分光システムを導入し、世界初のX線回折、放射光メ

スバウア併用システム（図3）を構築し、地球中心部の鉄原子の価数、スピン状態、磁気相転移を解明する。



ブリルアン散乱測定とともに、高分解能X線非弾性散乱（IXS）を用いて下部マントルと核を構成する物質の弾性波速度の測定を行う。これによって、地震学の直接観測量である地震波速度と直接比較対照を可能にする。

【期待される成果と意義】

地球中心部の核・核マントル境界・下部マントルは地球科学のフロンティアである。本研究によって、地球中心部の構成・状態・物質の大循環を、最重要観測情報である地震波速度と密度の両者による実験的制約が可能になる。そして、複数のX線分光法と回折法の併用によって相転移・融解の解明、密度・音速の測定にもとづいて、地球中心領域の物質科学モデルの創出することができる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

E. Ohtani, Melting relations and the equation of state of magmas at high pressure: application to geodynamics, Chemical Geology, Vol. 265, No. 3-4, 279-288, 2009.

E. Ohtani, D. Andrault, P. D. Asimow, L. Stixrude, Y. Wang, Editors, Advances in high-pressure mineral physics: From the deep mantle to the core, Physics of the Earth and Planetary Interiors, 174, Issues 1-4, 2009

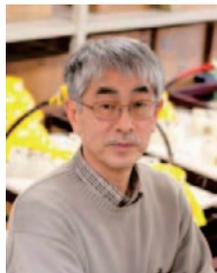
【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度

371,100千円

【ホームページ等】

http://www.ganko.tohoku.ac.jp/bussei/newHP/busseiHP/tokusuiHP_22-26/index.html



研究課題名 海半球計画の新展開：最先端の海底観測による海洋マントルの描像

東京大学・地震研究所・教授

うただ ひさし
歌田 久司

研究分野：数物系科学、地球惑星科学、固体地球惑星物理学

キーワード：海底観測、海洋マントル

【研究の背景・目的】

地球表面の3分の2以上を占める海洋域のマントルは、地球全体を理解する上で不可欠の領域である。特に中央海嶺で生成されたプレートが海溝から再びマントルに沈み込むまでの、いわゆる「ふつうの海洋マントル」には、地球科学上最も本質的な二つの問題が未解明のまま残されている。

その第一は、「アセノスフェアの流動性の原因は何か」である。プレートテクトニクスの根本には、堅いプレート（リソスフェア）が軟らかいアセノスフェアの上をすべるように動くという考えがある。しかし、アセノスフェアの流動性の原因は未解明であり、マントル物質の部分溶融による、鉍物の粒子サイズによる、鉍物中の水の効果によるなどの説がある。

水は地球という惑星を特徴付ける物質である。第二の問題は、「水惑星地球全体の水収支がどうなっているのか」に関わる。近年の高温高压実験の成果により、マントル遷移層（深さおよそ 410～660 km の範囲）には、最大限に見積もると地表の全ての海水よりも大量の水を含み得ることが示された。最近、沈み込み帯における地球物理観測から、プレートの沈み込みに伴う水輸送の様子が明らかにされつつあるが、体積的に大半を占める「ふつうの海洋マントル」の遷移層の水の量の推定なしには地球全体の収支はわからない。

これら2つの課題に、我々が独自に開発した最先端の装置によって、観測的アプローチで取り組み、解明をはかるのが本研究の目的である。

【研究の方法】

海底における地震観測と電磁気観測によって得られる海洋マントルの描像（イメージ）の物理的解釈により、その場の物理状態を推定する。地震学的パラメータと電磁気学的パラメータを組み合わせることにより、信頼性の高い推定を行うことができる。具体的には、西太平洋の「ふつう」の海洋底において、我々のグループが開発して過去十年あまりの間に多くの成果を得てきた機動的観測装置（広帯域海底地震計および海底電磁力計）に加え、最近になって開発がなった最先端の装置（新型の海底地震計および海底電位差計、写真参照）を用いた2～3年の長期観測を行う。新型の地震観測では、従来は難しいとされてきた海底における水平地震動の観測を陸上と同程度のノイズレベルで行うことができるようになった。電磁気

観測でも、遷移層に感度のある数万秒より長い周期帯域でのノイズレベルを、従来に比べ十分の一に低減することができた。これらにより、さまざまデータ解析手法の適用により、ふつうのマントルから多様な情報の抽出が可能になった。



【期待される成果と意義】

本研究計画により「ふつうの海洋マントル」にある二つの重要課題を解明することは、学術的にみて二種類の意義・インパクトを世界の固体地球科学コミュニティに与えるであろう。

一つは純粋な科学的成果として、「海洋プレートとはなにか」という20世紀の固体地球科学の積み残した重要課題に決着をつけること、および「地球全体の水収支」という21世紀の固体地球科学の重要課題の一つの見通しをあたえることである。

もう一つは研究アプローチに関することで、本研究により「深海底でも陸上と同等の機動的観測が行える」ことが示されれば、観測固体地球科学の新たな潮流が生み出されると期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- (1) Utada, H., et al., (2009) A joint interpretation of electromagnetic and seismic tomography models suggests the mantle transition zone below Europe is dry, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **281**, 249-257.
- (2) Kawakatsu, H., et al., (2009), Seismic Evidence for Sharp Lithosphere-Asthenosphere Boundaries of Oceanic Plates, *Science*, **324**, 499-502.

【研究期間と研究経費】

平成22年度～26年度

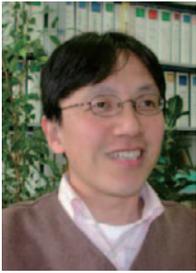
429,600千円

【ホームページ等】

<http://www.eri.u-tokyo.ac.jp/yesman/>

【特別推進研究】

理工系（数物系科学）



研究課題名 MEG 実験-レプトンフレーバーの破れから大統一理論へ

東京大学・素粒子物理国際研究センター・教授 **もり としのり**
森 俊則

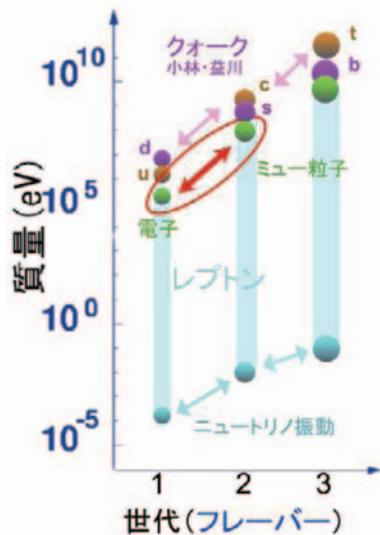
研究分野：数物系科学、物理学、素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：素粒子（実験）

【研究の背景・目的】

素粒子には、物質を作り上げているものの他にもっと重いものがあり、合わせて3世代の素粒子が存在する(図)。クォークでは世代間の移り変わりがKEKのBファクトリなどで観測されているが、それらはノーベル賞となった小林・益川両氏の研究によって標準理論でうまく説明できる。

一方スーパーカミオカンデ等が発見したニュートリノの世代間振動は予期しなかった現象であり、レプトンの世代研究の重要性を示した。荷電レプトン（電子やミュオン）の世代間の移り変わりは標準



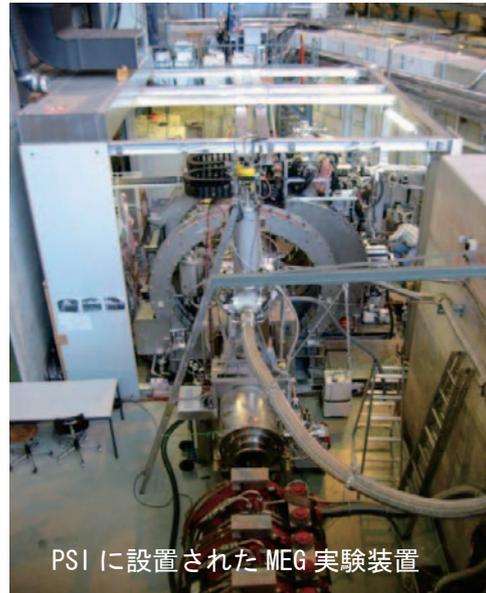
理論では厳しく禁止されるが、標準理論を超える新しい物理理論として期待されている超対称大統一理論では、荷電レプトンでもフレーバーを破る世代間の移り変わりが測定可能な高い確率で起こることが最近分かった。そこで、ミュオンから電子へ移り変わる $\mu \rightarrow e\gamma$ 崩壊反応(図の赤い部分)を探索して、超対称大統一理論の実験的検証を目指す研究を開始することになった。

【研究の方法】

超対称大統一理論の予言する 10^{-13} という極微の分岐比まで $\mu \rightarrow e\gamma$ 崩壊を徹底探索するため、独創的で巧みな実験装置を新しく考案して、良質な大強度ミュオンビームを持つスイスのポール・シェラー研究所(PSI)にMEG実験を提案した。その後スイス・イタリア・ロシア・米国と共同で実験装置を建設し、2008年度より実験を開始した。本研究では、実験感度を順次改善しながらデータを取得・解析して、超対称大統一理論の検証を行う。また並行して、さらに感度を上げた究極の実験を実現するための開発研究も行う。

【期待される成果と意義】

本研究において $\mu \rightarrow e\gamma$ 崩壊が発見されれば、標準理論を超える新しい物理の存在が実証される。さらに分岐比・角分布を測定することにより、超対称大統一理論などのエネルギースケールや対称性について絞り込むことも可能である。ここで得られる結果はLHCにおける発見と相補的であり、双方の結果を合わせて総合的に解析することにより、新しい物理に対する正しい理解が可能となる。



PSIに設置されたMEG実験装置

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ "A Limit for the $\mu \rightarrow e\gamma$ Decay from the MEG Experiment," MEG Collaboration (T. Mori, S. Mihara, W. Ootani, A. Baldini, et al.), Nucl. Phys. B 834 (2010) 1-12.
- ・ "Charged Lepton Flavor Violation Experiment," W.J. Marciano, T. Mori, and J.M. Roney, Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 58 (2008) 315-341.

【研究期間と研究経費】

平成22年度-26年度

415,200千円

【ホームページ等】

<http://www.icepp.s.u-tokyo.ac.jp/meg/>
<http://meg.icepp.s.u-tokyo.ac.jp/>

特別推進研究



研究課題名 赤外線新技术による太陽系外惑星研究の展開

自然科学研究機構 国立天文台・光赤外研究部・准教授

たむら もとひで
田村 元秀

研究分野：天文学

キーワード：光学赤外線天文学、太陽系外惑星、補償光学、赤外線素子、波長校正

【研究の背景・目的】

1995年の太陽以外の恒星を周回する惑星（系外惑星）の間接的発見以来、系外惑星の研究は天文学における最重要課題のひとつとなった。太陽系では8個しかない惑星が、わずか15年のあいだに450個を超える候補が発見された今、最も重要な次のマイルストーンは太陽系の惑星に似た巨大系外惑星を直接的に多数観測し、それらの惑星の性質を明らかにする「直接撮像」と、より軽い「地球型惑星」の検出である。我々はこの双方に対して、赤外線の新技術に基づく天文観測の手法により挑戦する。

【研究の方法】

本研究においては、世界最高レベルのコロナグラフ技術を用いた高コントラスト赤外線装置と補償光学技術を用いて、我々の太陽系の惑星に似た、恒星近傍にある系外惑星を多数直接撮像する。太陽系の巨大惑星形成領域あるいはそれ以遠をカバーし、従来のドップラー法やトランジット法では未開拓の領域である（図1）。

また、同半径領域にある原始惑星系円盤の詳細構造を同じく直接観測によって描き、円盤から惑星が形成される過程を観測する。

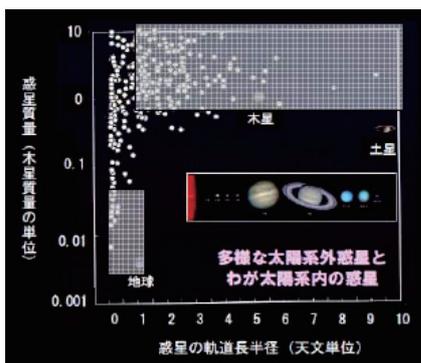


図1 太陽系内外の惑星と本研究で狙う惑星のパラメータスペース

さらに、世界最高精度の赤外線ドップラー観測装置を開発する。そのために、波長校正、赤外線検出器、分散素子、赤外波面補償光学という赤外線の新技術開発を推進する。

【期待される成果と意義】

恒星から、地球・太陽間の距離の数倍から数十倍の距離にある巨大惑星を多数検出し（図2）、その性質（明るさ、温度、組成）を求めることができる。また、同領域の原始惑星系円盤と残骸円盤の形態を初めて統計的に研究し、系外惑星の多様性の起源を解明する。さらに、惑星系形成理論と比較することによって、惑星の形成を解明し、我々の太陽系が普遍的かどうかを議論できる。

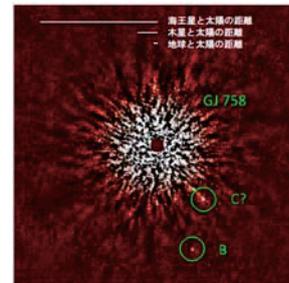


図2 系外惑星の直接撮像画像

また、赤外線技術を駆使したドップラー装置による観測によって、低質量星の恒星を周回する1地球質量の惑星をハビタブルゾーンに検出する（図1）。その結果、未開拓の地球型惑星の統計や普遍性の研究が可能になり、惑星における生命の有無の議論まで期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・渡部潤一・井田茂・佐々木晶編、日本評論社、シリーズ現代の天文学第9巻「太陽系と惑星」、2008年
- ・井田茂・佐藤文衛・田村元秀・須藤靖、技術評論社、宇宙は地球であふれている、2008年

【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度

396,900千円

【ホームページ等】

<http://optik2.mtk.nao.ac.jp/~hide/index.html>
motohide.tamura@nao.ac.jp



研究課題名 光機能性分子の開発と医療への応用

東京大学・大学院薬学系研究科・教授

ながの てつお
長野 哲雄

研究分野：生体関連化学

キーワード：生体機能関連化学、生体認識・機能化学

【研究の背景・目的】

医学が発達した現代においても癌や心血管疾患等の発見・治療は未だに困難であり、人々の死因の多くを占めている。生体内の分子プロセスを非侵襲的に可視化する分子イメージング技術は、これらの疾患の原因解明や早期診断を可能にするものとして大きな注目を集めている。特に、疾患部位を選択的に可視化する蛍光プローブや MRI 造影剤といった機能性分子はイメージング技術を用いた診断において鍵となるため、その開発に向けて精力的に研究が行われている。

我々のグループでは、過去 10 年以上に渡って機能性蛍光プローブを中心とする光機能性分子（図 1）の開発研究に注力してきた。現在までに開発した分子は 50 を超えるが、その多くは我々自身が確立した設計原理に基づいており、14 種類のプローブについては市販化も達成している。本研究では、これまでに培った知見を基にしながら、①医学系研究者や企業との共同研究、②目的に応じた新たな分子設計法の開発、を行うことで、疾患の診断や治療薬開発といった「医療への応用」に適した光機能性分子の開発を目指す。

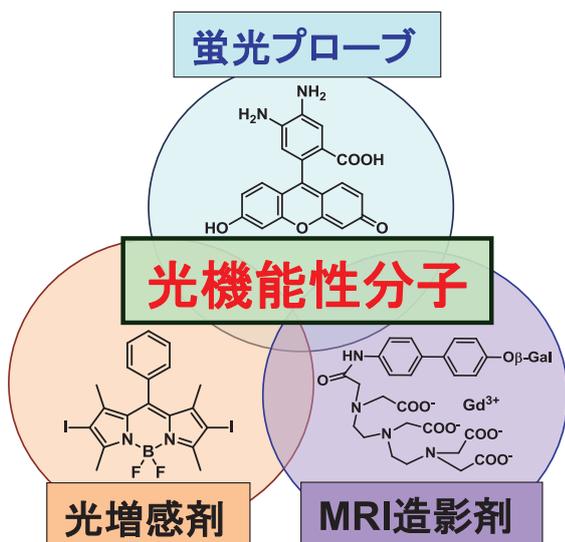


図 1 我々が開発した光機能性分子(例)

【研究の方法】

蛍光法を用いて生体内部からのシグナルを検出するためには、近赤外領域（650-900 nm）での励起が可能な蛍光プローブを用いる必要がある。そ

こで本研究では、構造修飾の容易な新規長波長蛍光団を開発すると共に、そこに標的分子との反応点を組み込むことで機能化を達成する。また、癌や虚血といった重篤な疾患に関与している分子を標的とした各種の蛍光プローブや MRI 造影剤を開発し、in vivo イメージングへと適用する。更に、疾患関連酵素等の活性を検出する蛍光プローブを開発し、医薬品候補化合物の網羅的な評価や血液診断への応用を行う。

一方、光照射によって活性酸素種を産生し細胞を殺傷する光増感剤については、病変部位においてのみ選択的に増感能を有する分子を開発することで、副作用の低減を達成したいと考えている。

【期待される成果と意義】

本研究によって生まれる光機能性分子を利用することで、個体内における疾患関連分子のリアルタイムでの挙動が明らかになり、疾患のメカニズム解明や診断、新規治療法の発見に結びつくことが期待される。また、イメージングプローブを用いた新薬候補化合物の評価によって画期的な作用機序を持つ医薬品が生まれる可能性がある。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- "Development and Application of a Near-Infrared Fluorescence Probe for Oxidative Stress Based on Differential Reactivity of Linked Cyanine Dyes" D. Oushiki, H. Kojima, T. Terai, M. Arita, K. Hanaoka, Y. Urano and T. Nagano, *J. Am. Chem. Soc.*, **132**, 2795-2801 (2010).
- "Design and Development of Enzymatically Activatable Photosensitizer Based on Unique Characteristics of Thiazole Orange" Y. Koide, Y. Urano, A. Yatsushige, K. Hanaoka, T. Terai and T. Nagano, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 6058-6059 (2009).

【研究期間と研究経費】

平成 22 年度 - 26 年度

419,200 千円

【ホームページ等】

<http://www.f.u-tokyo.ac.jp/~tlong/Japanese/top.html>
tlong@mol.f.u-tokyo.ac.jp



研究課題名 **スーパー制限酵素を用いた
ゲノム・マニピュレーション工学の創成**

東京大学・先端科学技術研究センター・教授 **こみやま まこと
小宮山 眞**

研究分野：生体関連化学

キーワード：核酸、ゲノム解析、バイオテクノロジー、組換え

【研究の背景・目的】

高等生物の細胞内では、巨大 DNA で構成される染色体の中に数多くの遺伝子ならびに制御因子が正確に配置され、互いにフィードバックしながら精緻なゲノム・システムを構築している。すなわち、ゲノムは多数の遺伝子の単なる集合体ではなく、その中の遺伝子や制御因子が互いに有機的・組織的に密接に関連し、また時空間分布を精密に制御されて生命活動を維持している。したがって、工学・医学・薬学をはじめとする一連のバイオテクノロジーをさらに飛躍的に発展させるためには、ゲノム・システムを積極的に活用し、遺伝子機能を多次的かつ合目的的に制御することが必要である。しかし、これまでは、巨大なゲノム DNA を正確に操作する手段が無く、そのために、ゲノム・システム中で各遺伝子（群）がどのように機能しているかに関する情報は乏しく、また必然的にゲノム・システムを望み通りに有効活用することはできなかった。

我々はすでに、“どのように大きな DNA でも、望みの場所で選択的に切断できる化学ツール（スーパー制限酵素）”の開発に成功している。そこで、本申請研究では、このスーパー制限酵素を用いてヒトをはじめとする高等生物の巨大ゲノムを直接に操作する手法を確立し、これを通じてゲノム・システムを総合的かつ包括的に解明する。こうして、これまでの生命科学の概念を塗り変える『ゲノム・マニピュレーション工学』を創成し、これをゲノムを対象とする次世代バイオテクノロジーへと展開する。

【研究の方法】

我々が開発したスーパー制限酵素を使って、ゲノムを望み通りに改変する技術を確立し、これを活用してゲノム中における各遺伝子（群）の機能を明らかにする。こうして“ゲノム・マニピュレーション工学”を創成する。すなわち、スーパー制限酵素によりゲノムを所定の位置で切断し、
(1) 特定遺伝子を相同組み換えで別の遺伝子に変換し、また (2) 特定遺伝子をノックアウトする。さらに、(3) 位置選択的切断により所定の2個の遺伝子（あるいは遺伝子と制御因子）を空間的に切り離して互いに断絶する。そのうえで、これらのゲノム操作が生化学的特性（転写効率や関連タンパク質の細胞内分布など）に及ぼす影響を

定量的に評価する。また、(4) スーパー制限酵素を使ってゲノムから所定部位を切りだし、その中の遺伝子群の機能を精密に *in vitro* 解析する。こうして、ゲノム中での遺伝子（群）の機能ならびに遺伝子間の相互コミュニケーションを解明する。

【期待される成果と意義】

現状のバイオテクノロジーでは、細胞の中に導入した各遺伝子は“単独で機能する素子”として捉えられており、細胞内のゲノム（遺伝子群）との相互作用はほとんど無視されている。そのために、導入した遺伝子の発現効率、発現時系列、生化学機能も、“単独に機能する素子”を前提として評価されている。明らかにこれでは不十分であり、極端な場合には、実際には細胞内で非常に有効に機能する遺伝子がスクリーニング・プロセスで選別し漏れてしまう危険性さえある。したがって、本申請研究で得られる知見に基づいてゲノム・システムを正しく理解できるようになれば、新たなバイオテクノロジーやゲノム創薬法などが開発できるものと期待される。また本研究で確立する“ゲノムを正確にマニピュレーションする技術”が、ゲノム自体を改変する遺伝子治療に直接に有用であることは言うまでもない。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- [1] “Artificial restriction DNA cutter for site-selective scission of double-stranded DNA with tunable scission-site and specificity”, M. Komiyama, Y. Aiba, Y. Yamamoto, J. Sumaoka, *Nature Protoc.*, 3, 655-662 (2008).
- [2] “Homologous Recombination in Human Cells using Artificial Restriction DNA Cutter”, H. Katada, H. J. Chen, N. Shigi, M. Komiyama, *Chem. Commun.*, 6545-6547 (2009).

【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度

400, 400千円

【ホームページ等】

<http://www.mkomi.rcast.u-tokyo.ac.jp/index.html>



研究課題名 有機半導体分子の合成とナノ組織化による高効率光電変換

東京大学・大学院理学系研究科・教授 なかむら えいいち
中村 栄一

研究分野：物理有機化学、有機合成化学、有機エレクトロニクス

キーワード： π 電子系、フラレン、有機半導体、ナノ組織化、薄膜構造、有機薄膜太陽電池

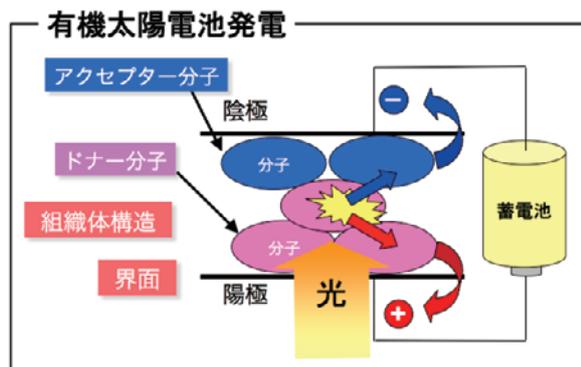
【研究の背景・目的】

有機半導体分子とそれらが形成する組織体の構造には無限の多様性が存在するが故に、異なる機能を持った多種の有機物の薄膜で構成される高効率有機薄膜太陽電池の設計は、化学者にとって心躍る新しいチャレンジである。太陽光エネルギーの有効利用は人類の生存に関わる技として、化学者が積極的関わりを持つべき重要な研究テーマである。これまで行われてきた有機化学の医薬・農薬への応用と異なり、有機化学の電気電子科学技術への本格的な応用はこれから始まる場所である。

そこで本研究では、有機エレクトロニクス研究における新しい研究指針「発想を新反応に求めて機能分子を探索する」という考えに基づき、半導体性を示す新型の平面共役分子や球形をした共役分子であるフラレン誘導体の設計・合成、およびそれらの分子組織体のナノレベルでの構造制御法を開発し、高効率有機薄膜太陽電池の早期実用化に資することを目的とする。

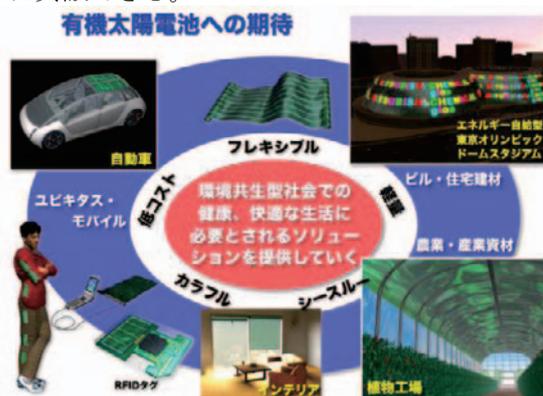
【研究の方法】

本課題で研究する「低分子塗布変換型有機薄膜太陽電池」は、耐久性、材料設計の多様性など、従来の有機薄膜太陽電池に比べて優れている点が多い。本研究では、以下の研究課題に取り組む。(1) 有機半導体分子の探索と分子設計・合成。(2) 階層的ナノ組織化デバイス構造構築。(3) 半導体組織のナノ構造の解析（非周期構造の分子レベル解析）。有機合成と物理有機化学を柱に、薄膜モルフロジー解析、電子顕微鏡によるナノ構造解析などを通して、太陽電池特性と分子物性との相関を明らかにし、さらなる高効率化を図る。



【期待される成果と意義】

本研究の鍵である「高機能有機半導体分子の設計」、「ナノからマクロスケールでの分子組織体の完全階層化」、これまでの化学研究で正面から取り上げられることが少なかった「非周期構造の分子レベル解析」への挑戦は、基礎科学の新しい領域の開拓に繋がるのが期待される。世界に先駆けて長寿命・高効率の有機薄膜太陽電池の基礎研究を完成し、実用化の道筋を明らかにすることにより、学術の発展と資源・エネルギー問題解決の両方に貢献できる。



【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- 1) “Columnar Structure in Bulk Heterojunction in Solution-Processable Three-Layered p-i-n Organic Photovoltaic Devices Using Tetrabenzoporphyrin Precursor and Silylmethyl[60]fullerene”, Y. Matsuo, Y. Sato, T. Niinomi, I. Soga, H. Tanaka, E. Nakamura, *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 16048-16050 (2009).
- 2) “Bis(carbazolyl)benzodifuran: A High-mobility Ambipolar Material for Homojunction Organic Light-emitting Diode Devices”, H. Tsuji, C. Mitsui, Y. Sato, and E. Nakamura, *Adv. Mater.*, **21**, 3776-3779 (2009).
- 3) “Imaging Single Molecules in Motion”, M. Koshino, T. Tanaka, N. Solin, K. Suenaga, H. Isobe, and E. Nakamura, *Science*, **316**, 853 (2007).

【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度

458,700千円

【ホームページ等】

<http://www.chem.s.u-tokyo.ac.jp/users/common/NakamuraLab.html>



研究課題名 d-電子複合系の理論化学：新しい高精度大規模計算法による微視的理解と予測

京都大学・物質-細胞統合システム拠点・特任教授

さかき しげよし
榊 茂好

研究分野：基礎化学（物理化学）

キーワード：電子状態、理論化学、化学反応、金属錯体化学、錯体・有機金属触媒

【研究の背景・目的】

遷移金属元素に高周期典型元素、典型金属、有機官能基が結合した複合電子系を持つ分子は、その複合的な電子状態により構造や物性、反応性が多様性に富み、基礎、応用双方で重要な地位を占めている。このような複合電子系は、理論化学/計算化学・分子科学分野で魅力的かつ挑戦的な研究対象である。しかし、これらの多くは電子相関効果が大きく、最近広く使用されている DFT 法だけでは信頼できる結果が得られない。本研究では、これまでにない大規模系の高精度電子状態計算を実行可能とする理論的計算法を開発し、遷移金属元素や高周期ヘテロ元素を含む複合電子系の構造、物性、反応性を微視的に解明することを目的とする。具体的には、(1)ハイブリッド型高精度大規模電子状態理論計算法の開発、(2)多核金属錯体および高周期典型元素、典型金属元素、有機官能基を含む遷移金属複合電子系の構造、結合性、物性、反応の微視的解明と制御、(3)ヘテロ元素や遷移金属元素を含むナノカーボン化合物の構造と機能の理論的解明、(4)遷移金属元素を含む複合系の化学反応における電子的過程の理論的解明を行なう。(1)では、高精度計算で省略される置換基や官能基の電子的効果を取り込むため、置換基や官能基の電子的効果を取り込むフロンティア軌道再現有効ポテンシャル(FOC-EP)を開発し、高精度波動関数理論と組み合わせるハイブリッド型電子状態理論計算法を開発する。(2)では、特に、金属間および金属と高周期典型元素間に多重結合を含む系に注目し、それらの多重結合の結合性を微視的に解明し、これまで未解明であった金属間および金属-高周期典型元素間の単結合および多重結合の結合論を確立すると共に、第2周期の炭素などと高周期典型元素化学種との相違が遷移金属との関わり合いの中で、どのような特徴として表れるかを明らかにする。(3)では、高周期ヘテロ元素や遷移金属元素を含むナノカーボン化合物の構造、機能と電子状態の関連を電子状態計算から解明する。(4)では、遷移金属複合系の化学で重要な触媒作用を取り上げ、触媒サイクルに含まれる素反応過程の微視的解明、触媒サイクルの機構、反応制御因子を解明し、さらに予測・制御を達成する。

【研究の方法】

本研究では DFT 法も使用するが、波動関数理論による高精度電子状態計算法の大規模系への応用を可能とするハイブリッド型高精度大規模電子状態理論計算法を開発を行う。この方法では、実際の置換基や官能基の電子的効果を取り込むフロ

ンティア軌道再現有効ポテンシャル法 (FOC-EP) を開発し、ONIOM 法や FMO 法、SAC/SAC-CI 法、CASPT2 法と組み合わせ、大規模系の高精度計算を実現する。同時に、複雑な結合性を解析する新規解析法を提案する。即ち、置換基の電子的効果を FOC-EP 法で取り込み、結合性や電子状態を部分系の軌道に基づいて解析する。

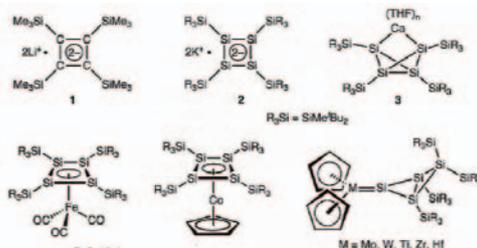


図1. 検討予定の d 電子複合系

【期待される成果と意義】

本研究で提案するハイブリッド型高精度電子状態計算と複雑な結合性の解析法は、d 電子複合系のみでなく、様々な複雑系の微視的理解に有効な方法となり、意義高いものである。また、遷移金属元素、有機官能基、高周期典型元素、典型金属などを含む複合電子系の構造、結合性、機能、反応性、触媒作用に関する微視的理解と予測・制御と言う成果を達成するが、これらの成果は、新しい結論や反応論の展開につながり、極めて意義高い。これらにより、進展の著しい遷移金属と高周期典型元素を含む複雑な複合系の分子科学の新しい進展と工学的応用を可能にすると共に、大規模系に対する理論化学の新しい発展を促すものである。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- S. Sakaki, Y.-y. Ohnishi, H. Sato, *Chem. Record.*, 10, 29-45 (2010).
- N. Ochi, Y. Matano, Y. Nakao, H. Sato, S. Sakaki, *J. Am. Chem. Soc.*, 131, 10955-10963 (2009).

【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度
353,500千円

【ホームページ等】

<http://www.users.iimc.kyoto-u.ac.jp/~z59354sakaki@moleng.kyoto-u.ac.jp>



研究課題名 原子オーダー平坦な界面を有する3次元立体構造トランジスタの製造プロセスに関する研究

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授

おおみ ただひろ
大見 忠弘

研究分野：電気電子工学、電子・電気材料工学
キーワード：電気・電子材料（半導体）

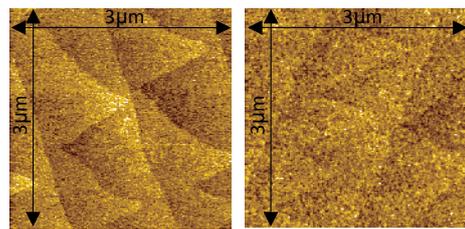
【研究の背景・目的】

現状のシリコン集積回路(LSI)は、(100)シリコン表面上にだけ2次元平面形状のトランジスタを用いて製作されている。結果として、現状のシリコン技術はシリコン結晶の有する全性能を駆使することが全くできず、そのごく一部を活用しているにすぎない。そのため、ゲート絶縁膜の薄膜化と寸法微細化だけで進歩を遂げて来た現状のシリコン技術は完全に行き詰まり、LSIの性能向上が完全に停滞してしまっている。この困難を克服するには、任意のシリコン表面上に、ゲート絶縁膜とシリコンの界面が原子オーダーで平坦になされた3次元立体構造MOSトランジスタを製造するプロセス技術を生み出して、シリコン結晶の有する全性能を駆使することにより、超低消費電力で文字通り超高速動作するバランスドCMOSシリコンLSIを生み出すことが本研究の目的である。すなわち、停滞している現状のシリコンLSI技術を、その理論限界に向かって連続的に超高速化させることである。そのために3次元立体構造MOSトランジスタの側壁シリコン表面の原子オーダー平坦化が必要なのである。

【研究の方法】

バランスドCMOSを構成するトランジスタは、①現状のInversion Mode MOSトランジスタからAccumulation Mode MOSトランジスタへ、②(100)面基板2次元平面形状から(551)SOI基板3次元立体構造へ、③ゲート絶縁膜/Si界面の原子オーダー平坦化、これらの技術を導入することにより電子・ホールの散乱要因が原理的に消滅もしくは激減し、シリコンLSIの圧倒的な性能向上が実現される。しかし、これらの技術は、現状のシリコン技術では全く実現不可能であり、我々が開発したウルトラクリーンテクノロジーを駆使したラジカル反応ベースの新しい製造技術によりはじめて具現化される。図1は原子オーダーで平坦化されたSi(100)表面をラジカル酸化および従来の熱酸化した後のSiO₂/Si界面を原子間力顕微鏡で測定した結果である。ラジカル酸化で形成した界面は原子1層のステップと原子オーダーで平坦なテラスが維持されているのに対し、従来の熱酸化で形成したSiO₂/Si界面は凸凹に粗れている。本研究では、我々が開発したダメージや汚染を一切与えないプラズマ装置を用いたラジカル反応ベースの新製造技術を駆使し、従来では全く実現不可

能であった3次元立体構造シリコン表面および側壁面の原子オーダー平坦化に取り組む。



ラジカル酸化膜/Si界面 従来の熱酸化膜/Si界面
図1 原子間力顕微鏡で測定したSiO₂/Si界面ラフネス

【期待される成果と意義】

ゲート絶縁膜とシリコンの界面が原子オーダーで完全に平坦化された3次元立体構造のMOSトランジスタが実現されれば、トランジスタの電流駆動能力がきわめて大きくなると共に、MOSトランジスタの特性ばらつきが激減し、1/f雑音も激減する。結果として、誤動作をまったく起こさず完全な信頼性を維持しながら、電源電圧を小さくでき、消費電力を電源電圧の2乗に比例して小さくできるのである。情報通信機器の低消費電力化を図りながら、超高速化・超高性能化が実現される意義はきわめて大きい。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

1. R. Kuroda, T. Ohmi, et al., "Atomically Flat Silicon Surface and Silicon/Insulator Interface Formation Technologies for (100) Surface Orientation Large-Diameter Wafers Introducing High Performance and Low-Noise Metal-Insulator-Silicon FETs", IEEE Trans. Electron Dev., VOL.56, NO.2, pp.291-298, February 2009.
2. T. Ohmi, et al., "Revolutional Progress of Silicon Technologies Exhibiting Very High Speed Performance Over a 50-GHz Clock Rate", IEEE Trans. Electron Dev., VOL.54, NO.6, pp.1471-1477, June 2007.

【研究期間と研究経費】

平成22年度－26年度

474,400千円

【ホームページ等】

http://www.fff.niche.tohoku.ac.jp/
Email: ohmi@fff.niche.tohoku.ac.jp



研究課題名 省電力／超高速ナノ CMOS のための電子物性設計と高移動度チャネル技術の創生

名古屋大学・大学院工学研究科・教授

ざいま しげあき
財満 鎮明

研究分野：応用物理学・工学基礎、薄膜・表面界面物性

キーワード：薄膜、界面、半導体、エピタキシャル成長

【研究の背景・目的】

現代の高度情報化社会を支える Si 超々大規模集積回路（ULSI）は、その基本素子である MOS トランジスタをスケールリング則に沿って微細化することで高速化と高集積化、高機能化を実現してきた。しかし、素子寸法がナノスケールに到達した現在では、材料の物性的限界から、これまでの微細化トレンドの維持が次第に難しくなり始めている。更に最近では、環境問題や携帯機器への応用の増大から、デバイスの一層の低消費電力化や高速化、高機能化などが求められている。

ULSI の超低消費電力化／超高速化においては、MOS トランジスタの電流駆動能力向上が不可欠である。現在でも Si の物性的限界を打破するために、Si に歪を加えてより高いキャリア移動度を得る技術が導入されている。しかし、この歪 Si による移動度向上にも限界が見えており、次世代ナノスケール ULSI では、歪 Si を越える高移動度材料のチャネル領域への導入が不可欠となっている。

本研究では、ナノスケール CMOS の超低消費電力化と超高速化を実現するための高移動度チャネル技術の創生に向けて、歪 Ge 系チャネル材料の開発とその電子物性設計指針の構築を目指す。

【研究の方法】

Ge は電子、正孔共に Si を越える移動度を持つ材料として知られているが、歪 Si の CMOS 性能を越えるためには、電子移動度をさらに向上させる必要がある。Ge に 1% 程度の伸張歪を印可すると電子と正孔共に歪 Si の移動度を越えることが可能である。また、さらに大きな伸張歪の印加や 20% 程度の Sn の添加により、バンド構造が直接遷移型に変化し、電子と正孔移動度が飛躍的に増加する可能性があることが予想されている。

これらのことを踏まえて本研究では、Si 基板上に歪 Ge チャネルを実現することを目的として、歪 Ge/GeSn/Si ヘテロ構造作製のための基盤技術の確立と、歪 Ge および高 Sn 組成 GeSn の電子物性の解明、MOS 構造界面制御技術の提案などを行う。（図 1）

【期待される成果と意義】

Ge への Sn 添加は、IV 族系半導体材料に新しい物性や自由度をもたらすことができる。特に、次世代ナノ CMOS の n チャネルと p チャネル

MOS トランジスタの両方を、Si プロセスとの整合性の高い Ge 系材料で実現する可能性を拓くことができれば、現在考えられている次世代 ULSI 技術のトレンドを根本から変革することができるため、産業的なインパクトは極めて大きい。

さらに、この材料系は、高伸張歪印加や高組成 Sn 添加により直接遷移化が期待されるため、ULSI 応用のみならず、太陽電池や受光・発光デバイスなどへの応用展開も大いに期待できる。

歪 Ge および GeSn を用いた非シリコン／歪物性制御チャネルの要素技術

- 伸張歪 Ge と高 Sn 組成 GeSn ヘテロエピタキシャル成長
 - 歪制御と Sn 組成制御による新しい電子物性設計とその実証
- シリコンプラットフォームへの融合
 - 絶縁膜／Ge(Sn) 界面制御技術
 - シリコン基板上へのトランスファー技術（貼り合わせ、選択エピ成長）

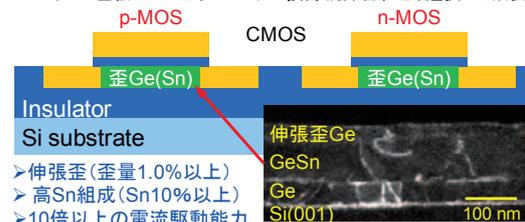


図 1 本研究の内容

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Y. Shimura, N. Tsutsui, O. Nakatsuka, A. Sakai and S. Zaima, “Control of Sn Precipitation and Strain Relaxation in Compositionally Step-Graded $Ge_{1-x}Sn_x$ Buffer Layers for Tensile-Strained Ge Layers”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **48**, 04C130-1-4 (2009).
- S. Takeuchi, Y. Shimura, O. Nakatsuka, S. Zaima, M. Ogawa and A. Sakai, “Growth of Highly Strain-Relaxed $Ge_{1-x}Sn_x$ /Virtual-Ge by a Sn Precipitation Controlled Compositionally Step-Graded Method”, *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 231916 (2008).

【研究期間と研究経費】

平成 22 年度 - 25 年度

344,600 千円

【ホームページ等】

<http://alice.xtal.nagoya-u.ac.jp/zaimalab/>
zaima@alice.xtal.nagoya-u.ac.jp