

【基盤研究(S)】

理工系（総合理工）



研究課題名 **ダイヤモンドナノ量子システムにおける量子メディア変換技術の研究**

横浜国立大学・大学院工学研究院・教授 **こさか ひでお**
小坂 英男

研究課題番号：16H06326 研究者番号：20361199

研究分野：ナノ構造物理

キーワード：量子情報物理・スピントロニクス

【研究の背景・目的】

モノのインターネット (IoT) によるビッグデータ社会の到来に向け、情報通信は飛躍的な量的進化を要求される一方で、マイナンバー制度による個人情報や医療情報、スマートグリッドなどのエネルギー情報を安全に配信するための量子通信ネットワークの実現が不可欠である。

本研究課題では、固体中のナノ量子システムにおいて、スピン縮退した量子系の幾何学的量子操作により、長距離伝送光子の量子状態を多数の核子で構成された集積量子メモリーに選択的に書き込み、長時間保持し、誤り訂正し、メモリー間の量子もつれを読み出す技術を確立する。本研究では、ダイヤモンド窒素空孔中心に備わる量子システムを中核とし、それを量子情報処理システムとして実用化するために不可欠な、誤り耐性のある集積固体量子メモリーの開発を目指す。

【研究の方法】

量子メモリーとして圧倒的性能を示すダイヤモンド中の窒素空孔中心 (NV 中心) の電子とその周辺にある多数の同位体炭素原子の核子を量子メモリーとし (図1)、以下の項目を目標として研究を行う。

1. 量子テレポーテーションを原理とし、光子から単一窒素核子へ量子状態を完全に維持して転写する量子メディア変換技術を確立する
2. NV 周辺に点在する多数の同位体炭素核子を集積メモリーとし、光子からの選択的な量子メモリー書き込みを行う
3. 任意の集積メモリー核子間の完全ベル測定による電子と光子の決定論的な量子もつれ検出を行う
4. 多数の核子を論理量子とした量子誤り訂正を行う
5. 光通信波長帯からダイヤモンド吸収帯の光子への量子波長変換を可能とする

これらの目標を達成するにあたり、光子と電子、電子と核子などの物質に内在する相互作用を量子もつれの原動力として利用し、光子と同様に電子も縮退した論理キュービットを用いた幾何学的量子操作する独自の手法を確立する。さらに、光波からラジオ波の超広帯域電磁波によるデジタルコヒーレント量子制御を行う。超広帯域電磁場の偏光、位相、強度、周波数の実時間制御を行うデジタルコヒーレント技術と FPGA による高速演算フィードバック技術を組み合わせて、物質に内在する電子軌道、電子スピ

ン、核スピンの量子もつれを解きほぐすデジタル量子制御技術を開発する。

【期待される成果と意義】

電磁波の資源を余すところなく利用して物質を量子制御し、デバイス・システム応用に供するためのフロンティアとして、光科学・量子科学の革新的な展開に先導的な役割を果たす。本研究を基礎とした量子通信ネットワークの実現より、量子通信の距離制限が解消されるとともに、古典的な通信容量限界を超えた量子光通信などの新たな活用法が期待され、破壊的イノベーションにつながる。

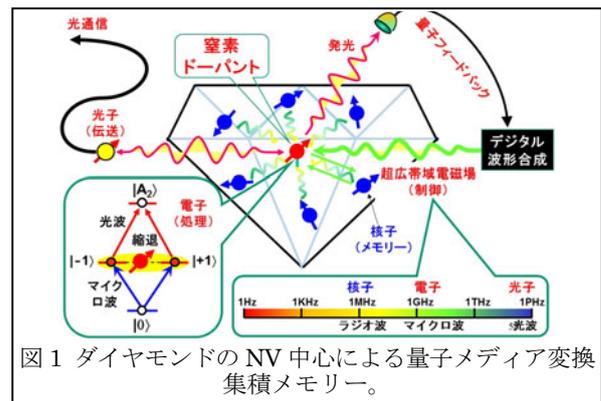


図1 ダイヤモンドのNV中心による量子メディア変換集積メモリー。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Sen Yang, Hideo Kosaka, Jorg Wrachtrup, et.al., "High fidelity transfer and storage of photon states in a single nuclear spin", *Nature Photonics*, nphoton.2016.103 (2016).
- Yuhei Sekiguchi, Hideo Kosaka, et.al., "Geometric spin echo under zero field", *Nature Communications*, 7, 11668 (2016).
- Hideo Kosaka, et.al., "Entangled Absorption of a Single Photon with a Single Spin in Diamond", *Phys. Rev. Lett.*, 114, 053603 (2015).

【研究期間と研究経費】

平成28年度－32年度
138,900千円

【ホームページ等】

<http://kosaka-lab.ynu.ac.jp/>



研究課題名 原子間力顕微鏡を用いた絶縁体表面でのナノ構造体構築と気体反応メカニズム解明

大阪大学・大学院工学研究科・教授 **すがわら やすひろ**
菅原 康弘

研究課題番号： 16H06327 研究者番号： 40206404

研究分野： 走査型プローブ顕微鏡

キーワード： 原子間力顕微鏡、ナノ構造、電荷移動、気体反応メカニズム

【研究の背景・目的】

絶縁体表面上のナノ構造体の物性解明は、センサー、触媒、電子デバイスへの応用に際して極めて重要である。原子数個から数十個からなるナノ構造体は、強い量子サイズ効果を示し、閉じ込められた電子のエネルギー状態は、バルク材料のものとは全く異なる。他方、絶縁体表面の欠陥は、不飽和な結合サイトであり、電荷の供与体あるいは受容体として作用する。そのため、絶縁体表面上のナノ構造体の電荷状態は、表面欠陥との電荷移動により大きく影響を受ける。実際、絶縁体表面上のナノ構造体の物理・化学的性質は、表面の欠陥構造により劇的に変化する。従って、新しい機能を有するナノ構造体を思い通りに設計するには、絶縁体表面の欠陥とナノ構造体との間の電荷移動を含めた相互作用の理解が本質的に重要である

本研究は、様々な環境（極低温・超高真空中、および、室温・反応ガス中）で動作する非接触原子間力顕微鏡を駆使して、絶縁体表面の欠陥とナノ構造体との間の電荷移動現象を解明するとともに、ナノ構造体の構造と電荷状態が触媒メカニズムにどのように関係するかを原子スケールで解明することを目的とする。

【研究の方法】

- (1) 原子間力顕微鏡と 3次元静電気力分光法を用いて、絶縁体表面の欠陥構造と電荷状態を明らかにする。表面の欠陥としては、原子空孔などの点欠陥及びドメイン境界の線欠陥などを取り上げる。
- (2) 絶縁体表面上のナノ構造体に CO, O₂, NO_x などのガスを吸着させ、ガス吸着に伴うナノ構造体の構造変化と局所電荷状態の変化を原子レベルで明らかにする。
- (3) 絶縁体表面上のナノ構造体に CO, O₂, NO_x などのガスを吸着させ、探針増強ラマン分光装置を用

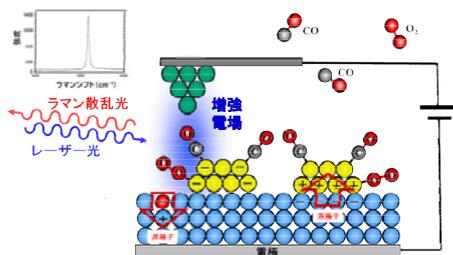


図1 研究方法の概要

いて、吸着ガスの局所的な吸着状態を解明する。
(4) 反応ガス中でのナノ構造体の局所電荷状態と反応ガスの局所吸着状態を比較検討する。第一原理計算による解析と触媒化学的な考察を加えて、絶縁体表面上でのナノ構造体の触媒メカニズムを解明する。

【期待される成果と意義】

不活性元素の代表である金がナノ構造体として絶縁体表面に担持されると、触媒として大きな活性を示す事が発見されている。このように絶縁体表面上にナノ構造体を構築し、その新奇な物性を探索することにより、新たな機能を見いだせると期待される。このような学問分野は、世界的にみても未開拓の学問分野であり、学術的な研究課題の宝庫である。本研究により、「絶縁体表面上のナノ構造体の物理・化学」という学問分野の開拓が期待される。

本研究により得られる絶縁体表面上のナノ構造体に関する貴重な知見は、触媒表面での様々な課題や燃料電池の電極表面での課題を解決すると期待される。また、革新的な高感度ガスセンサーなどの開発につながる。したがって、このような研究は、21世紀の環境・エネルギー分野の発展を支える基礎的研究として必要不可欠である。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- J. Bamidele, S. H. Lee, Y. Kinoshita, R. Turanský, Y. Naitoh, Y. J. Li, Y. Sugawara, I. Štich, and L. Kantorovich, “Vertical atomic manipulation with dynamic atomic-force microscopy without tip change via a multi-step mechanism”, *Nature Communications*, 5, 4476(1-7), 2014.
- Y. J. Li, J. Brndiar, Y. Naitoh, Y. Sugawara, and Ivan Štich, “Atomic force microscopy identification of Al-sites on ultrathin aluminum oxide film on NiAl(110)”, *Nanotechnology*, 26, 505705(1-5), 2015.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
139,100 千円

【ホームページ等】

<http://nanophysics.ap.eng.osaka-u.ac.jp/sugawara@ap.eng.osaka-u.ac.jp>



研究課題名 マイクロ流体アプローチによる1細胞トランスクリプトーム解析とその応用展開

東京大学・生産技術研究所・教授 **ふじい てるお**
藤井 輝夫

研究課題番号：16H06328 研究者番号：30251474

研究分野：総合理工

キーワード：ゲノム工学、1細胞解析、トランスクリプトーム解析

【研究の背景・目的】

同一の遺伝的背景を有する細胞集団において、個々の細胞における遺伝子発現には大きなばらつきがあることが指摘されている。次世代シーケンサの登場によって、比較的安価にかつ大量のシーケンスデータが得られるようになったことと相俟って、単一細胞の遺伝子発現を網羅的に解析する1細胞トランスクリプトームが可能になった。しかし、これまでの1細胞トランスクリプトーム解析を実現する手法に関しては、主として少数の単一細胞を取り扱い、その解析の高感度化を目指す報告が主流であった。細胞集団における不均一性を把握するためには多数の単一細胞を同時に解析できるシステムの開発が必要である。例えば、複雑な組織サンプルについて1細胞単位でなおかつ高スループットに遺伝子発現解析ができる方法の確立が望まれるようになった。本研究では、研究代表者らのグループで研究を進めてきたマイクロ流体アプローチによる単一細胞捕捉・解析デバイスと研究分担者らが有する解析手法とを組み合わせ、それらをより一層発展させることによって、10,000個規模の1細胞トランスクリプトーム解析を可能にする超並列1細胞トランスクリプトーム解析システムの確立を目指す。

【研究の方法】

多数の単一細胞操作・解析を行うことが可能なエレクトロアクティブマイクロウェルアレイ (Electroactive Microwell Array (EMA)) とトランスクリプトーム解析が可能な Cap Analysis of Gene Expression (CAGE) 法とを、それぞれ高度化して、融合することにより、単一細胞トランスクリプ

トーム解析法を実現する。具体的には、並列で単一細胞操作・解析を行うことが可能な EMA の内部に各細胞を識別するための index 配列を予め導入し、少量サンプルでのトランスクリプトーム解析が可能な picoCAGE 法を行うことにより、超並列1細胞トランスクリプトーム解析システムを実現する。

【期待される成果と意義】

本研究では、マイクロ流体アプローチと CAGE 法とを組み合わせることによって、10,000 個規模の細胞数を一括して扱うことが可能となるだけでなく、ワンステップ処理で細胞毎に得られる cDNA に index 配列を付加したものを直接シーケンスする方法を考えるため、増幅反応によるバイアスのない解析結果を得ることができる。これにより 10,000 個規模の単一細胞の中にもどのような mRNA がどれだけ存在するのかを見ることが可能となり、細胞毎の遺伝子発現パターン不均一性を明らかにすることができる。その際、液滴系のような確率的に細胞を区画化して識別する手法とは異なり、本手法では個々の細胞を各マイクロウェル内に捕捉するため、解析結果と個々の細胞とが確実に照合可能である。したがって、例えば捕捉した細胞の形態と遺伝子発現パターンとの対応関係等を明らかにすることが可能となる。本手法を確立することにより、子宮頸癌における遺伝子発現パターンと HPV の感染との対応関係のみならず、他の様々な疾患メカニズムの解明に大きく資することが期待できる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Kim, S. H. and Fujii, T., "Efficient analysis of a small number of cancer cells at the single-cell level using electroactive double-well array," *Lab on a Chip* **16**, pp. 2440 - 2449 (2016), selected as the outside front cover of the issue.
- Plessy, C. *et al.*, "Linking promoters to functional transcripts in small samples with nanoCAGE and CAGEscan", *Nature Methods* **7**, pp. 528-534 (2010).

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
136,600 千円

【ホームページ等】

<http://www.microfluidics.iis.u-tokyo.ac.jp/>
tfujii@iis.u-tokyo.ac.jp

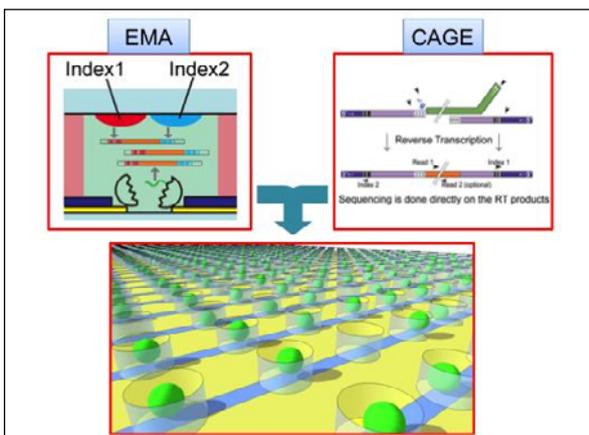


図 1 1細胞トランスクリプトーム解析

【基盤研究(S)】

理工系 (総合理工)



研究課題名 次世代三次元組織培養を実現する細胞ファイバ工学の創成

東京大学・生産技術研究所・教授 **たけうち しょうじ**
竹内 昌治

研究課題番号： 16H06329 研究者番号： 90343110

研究分野： 総合理工

キーワード： ナノマイクロバイオシステム

【研究の背景・目的】

体外で三次元組織を形成する技術は、創薬のための疾患モデルや再生医療に加え、細胞・組織を使った環境センサ、ソフトバイオアクチュエータ、培養肉など、幅広く価値が見いだされている。これまでの三次元培養は、細胞を球状に培養したスフェロイドが主流であったが、長期間培養するとスフェロイドの直径が増大し、中まで養分が浸透せず中心部が壊死してしまうことが問題となっていた。

本研究では、三次元組織を体外で形成し長期間培養できる技術「細胞ファイバ技術」に関して、形成機構の工学的理解や、組織特性の詳細な解析を通じた体系化を行う。加えて、基礎生物学、薬理、細胞治療分野の基盤技術としての有効性を示すことで、本技術に関する基礎から応用までの一連の研究基盤を創出する。

【研究の方法】

本研究では、以下の3項目を実現する。

1. 細胞ファイバの作製・制御・操作に関わる機構を理解し、作製方法の汎用化を行う。
2. 組織培養条件を最適化した細胞ファイバデータベースを構築し、実用的な細胞ファイバ技術基盤を確立する。

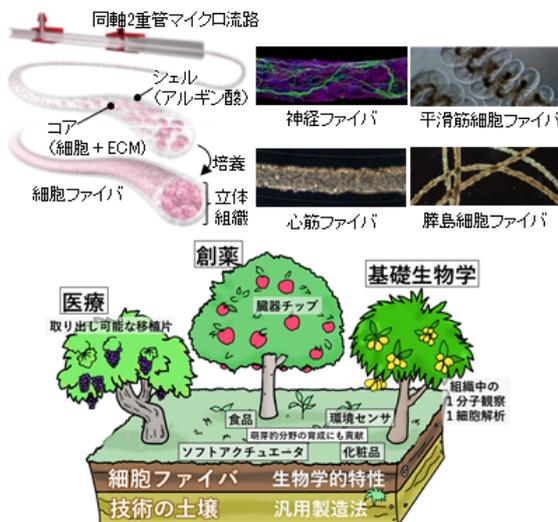


図1 (上左)細胞ファイバの作製法とイメージ図(上右)様々な細胞種で作製した細胞ファイバ(下)本研究にて拓く細胞ファイバ工学と期待される効果・波及効果

3. 応用展開として、基礎生物学(1 分子解析、1 細胞解析)・創薬(薬物評価システム、疾患モデル)・医療(脾臓・神経移植)分野での実用性を実証する。

目標遂行にあたり、細胞ファイバ技術に精通した工学・生物学・医学分野の研究者を研究分担者として集結させ、応用展開分野の各専門家と共に実用化に向けた密な共同体制を構築して研究を推進する。

【期待される成果と意義】

細胞ファイバは、直径を均一に保ち長期間の培養を実現できる画期的な手法である。また、コア部に適切な細胞外マトリクスを導入することができるため、生体内の環境を模擬した状態で細胞培養を行える。加えて、バイオプリンティング技術を始めとした、より大きな組織形成技術にも適用できることから、本提案によって細胞ファイバ技術の汎用性が高まれば、次世代の三次元組織形成技術の世界標準になると確信している。

本提案の遂行により、製造過程の困難さから従来は実現困難だった三次元組織の研究利用が飛躍的に加速する。特に、基礎生物学、創薬、医療の各分野においては、細胞ファイバ技術の進展に伴い、飛躍的な技術革新が期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- H. Onoe, T. Okitsu, A. Itou, M. Kato-Negishi, R. Gojo, D. Kiriya, K. Sato, S. Mirua, S. Iwanaga, K. Kuribayashi-Shigetomi, Y. Matsunaga, Y. Shimoyama, S. Takeuchi: Metre-long Cellular Microfibres Exhibit Tissue Morphologies and Functions, **Nature Materials**, vol. 12, pp. 584–590, 2013
- H. Onoe and S. Takeuchi: Cell-laden microfibers for bottom-up tissue engineering, **Drug Discovery Today**, vol. 20(2), pp. 236–246, 2015

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－31 年度
144,900 千円

【ホームページ等】

<http://www.hybrid.iis.u-tokyo.ac.jp/>



研究課題名 半導体スピントロニクス

京都大学・大学院工学研究科・教授

しらいし まさし
白石 誠司

研究課題番号：16H06330 研究者番号：30397682

研究分野：総合理工

キーワード：スピントロニクス・半導体・スピントロニクス

【研究の背景・目的】

固体を流れるスピントロニクス（純スピン流＝電荷の流れを伴わないスピン角運動量の流れ、とスピン偏極電流の総称）は、基礎物理・応用物理の両面で大きな関心が集まり、世界的な研究競争が行われている。電子のもう1つの属性である電荷が保存量であるのに対し、スピンは非保存量でありスピン拡散長という距離スケールで消失するため、これまで固体中の純スピン流の物性理解のために十分なスピン流を生成できなかったが、近年のナノテクノロジーに発展により、スピン拡散長以下の距離スケールを有する微細素子が作製できるようになり、人類はスピントロニクスを効率的に生成してその物性を精査することが可能となったことが背景にある。当初、非磁性金属中のスピントロニクス物性の研究が先行したが、近年、シリコン(Si)やゲルマニウム(Ge)、ガリウムヒ素(GaAs)、更にグラフェンなどの分子性半導体（ゼロギャップ半導体を含む）などの半導体中に室温でスピントロニクスが生成・伝播できるようになり、この分野の研究競争が激化している。

半導体中のスピントロニクス物性研究は、これまで室温でスピントロニクスを注入・伝播させることが難しく、また半導体へのスピン注入を証明する実験手法に関する解釈の誤りなどの深刻な問題の解決に時間を要したために、基礎物理の面でも個々の半導体材料におけるスピン緩和を個別に測定・理解するステージに留まっており、広範な半導体材料及びそれを基とする量子井戸などの人工ナノ構造群、さらに近年発展の著しい遷移金属ダイカルコゲナイドなどの原子膜半導体やトポロジカル絶縁体などの新しい半導体と言える系におけるスピン輸送と緩和の統一的学理の理解を目指した本格的な発展段階に達しておらず、更に応用を射程に入れた半導体スピントロニクス研究は漸くその途についたばかりである状況にある。

【研究の方法】

本研究では、(1)いわゆる結晶無機半導体(IV族[Si, Geなど]、化合物[GaAs, SiCなど])、(2)遷移金属ダイカルコゲナイド(WSe₂など)やグラフェンなど近年大きな注目を集める新奇原子膜半導体、(3)トポロジカルにスピン縮退が破られたディラック系ゼロギャップ半導体とみなせるバルク絶縁性トポロジカル絶縁体(BiSbTeSeやTlBiSe)、の大きめに3種類の材料群を広義の「半導体材料」とみなして研究の対象とする。更に、試料構造はバルクにかぎらず、ナノ量子井戸構造、さらに化合物半導体系で発現する2

次元電子ガスや分極反転2次元電子系も積極的に対象とする。研究手法は以下のアプローチを取る。

I. 高周波測定を用いた統一的評価手法を導入することによる半導体中のスピントロニクスの網羅的・包括的物性理解と、上記で定義した広範な半導体材料群中のスピントロニクス輸送物性とその緩和物性の評価。従来の電氣的、動力学的、熱的手法によるスピン輸送物性との対応の考察。

II. Iを通じて、特に原子膜系やトポロジカル絶縁体などの新奇「半導体」スピントロニクス物性を決定する大きな要因であるキャリア濃度によるスピン緩和物性の包括的測定と理解。

III. 特に新しい材料群である遷移金属ダイカルコゲナイド系半導体、トポロジカル絶縁体中のスピントロニクス輸送物性の計測と評価を通じた、新奇「半導体」材料スピントロニクス素子創出への展開。

【期待される成果と意義】

本提案の遂行により、金属スピントロニクスに比べてやや立ち遅れている半導体スピントロニクスにおいて確固たる学理の構築と、応用展開可能な素子創出のための学術的指針を得ることができる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- 1) S. Dushenko, H. Ago, K. Kawahara, T. Tsuda, S. Kuwabata, T. Takenobu, T. Shinjo, Y. Ando and M. Shiraiishi, "Gate-tunable spin-charge conversion and a role of spin-orbit interaction in graphene", Phys. Rev. Lett. 116, 166102 (2016).
- 2) S. Dushenko, M. Koike, Y. Ando, M. Myronov and M. Shiraiishi, "Experimental demonstration of room-temperature spin transport in n-type Germanium epilayers", Phys. Rev. Lett. 104, 196602 (2015).
- 3) Yu. Ando, T. Hamasaki, T. Kurokawa, F. Yang, M. Novak, S. Sasaki, K. Segawa, Yo. Ando and M. Shiraiishi, "Electrical Detection of the Spin Polarization Due to Charge Flow in the Surface State of the Topological Insulator Bi_{1.5}Sb_{0.5}Te_{1.7}Se_{1.3}", Nano Lett. 14, 6226 (2014).

【研究期間と研究経費】

平成28年度－32年度
134,400千円

【ホームページ等】

<http://cmp.kuee.kyoto-u.ac.jp/>
mshiraiishi@kuee.kyoto-u.ac.jp



研究課題名 原子層物質におけるバレースピンプトニクス の創生と応用

京都大学・エネルギー理工学研究所・教授

まつだ かずなり
松田 一成

研究課題番号：16H06331 研究者番号：40311435

研究分野：応用物性

キーワード：光物性、ナノ物性制御

【研究の背景・目的】

近年、グラフェン、カーボンナノチューブ、遷移金属ダイカルコゲナイドなど原子一層(数層)の物質系が出現し、物質科学・光科学の分野で大きなパラダイムシフトを迎えつつある。単層の遷移金属ダイカルコゲナイドに代表される原子層物質の特徴は、波数空間での谷(バレー)の自由度とスピンの自由度、またそれらの結合が挙げられる。このようなバレーとスピンの自由度が結合したバレースピンは、従来の電子の電荷の自由度のみを利用した電子(エレクトロニクス)・光(フォトニクス)応用とは大きく異なる、新たな研究分野の開拓を担う。

本研究では、遷移金属ダイカルコゲナイド、金属モノカルコゲナイドなどの原子層物質を舞台に、バレースピンの関与した特異な量子光学現象の解明・光学技術を駆使したバレースピン制御を目指す(図1)。さらに、原子層物質の特徴である室温での量子効果を利活用しながら、低損失光デバイスを実現する「原子層物質によるバレースピンプトニクス」という新たな研究分野を開拓し、光科学・物質科学の発展を目指すものである。

【研究の方法】

本研究で提案するバレースピンプトニクスの実現に向け、原子層物質でのバレースピンの発生・検出・制御のために必要とされる要素技術の研究を進める。そのための具体的なアプローチとして、1)バ

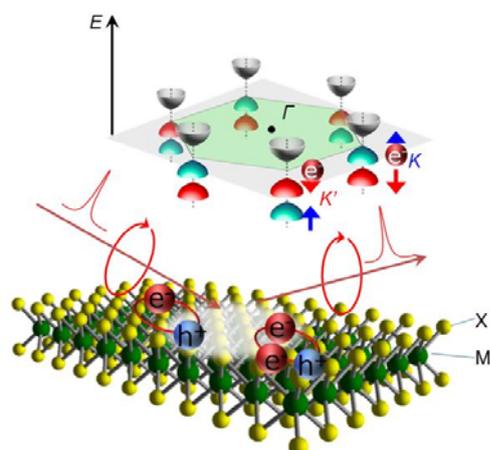


図1 原子層物質とバレースピンプトニクス

レースピンプトニクスに向けた高品質な原子層物質、原子層ヘテロ人工構造の作製技術の確立、2)先端分光技術を利用したバレースピン生成・検出とそのコヒーレント制御、3)単一バレースピン光子源などのバレースピンをベースにしたデバイスの実現、である。

【期待される成果と意義】

原子層物質では、電子が原子数層の極薄膜(二次元)に閉じ込められ、量子閉じ込めエネルギーが従来の半導体物質に比べ極端に大きく、これまでとは異なる新しい量子現象の発現が期待できる。これに加え、バレースピンという自由度を活用した学術研究は、新しい物質科学・光科学の学理構築に繋がる。また、バレースピン流を利用することで、熱散逸が少ない低損失量子光デバイスの実現が期待できるなど、将来の高効率エネルギー利用に向けたグリーンテクノロジーの観点などからも重要な研究であると考えられる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- D. Kozawa, R. Kumar, A. Carvalho, K. K. Amara, W. Zhao, S. Wang, M. Toh, R. M. Ribeiro, A. H. Castro Neto, K. Matsuda and G. Eda, Photocarrier relaxation pathway in two-dimensional semiconducting transition metal dichalcogenides, *Nat. Commun.* **5**, 4543 (2014).
- Y. Miyauchi, M. Iwamura, S. Mouri, T. Kawazoe, M. Ohtsu, and K. Matsuda, Brightening of excitons in carbon nanotubes on dimensionality modification, *Nat. Photonics* **6**, 715 (2013).
- S. Mouri, Y. Miyauchi, and K. Matsuda, Tunable photoluminescence of monolayer MoS₂ via chemical doping, *Nano Lett.* **13**, 5944 (2013).

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度

142,800千円

【ホームページ等】

<http://www.iae.kyoto-u.ac.jp/conv/matsuda@iae.kyoto-u.jp>

【基盤研究(S)】

理工系（総合理工）



研究課題名 界面スピン軌道結合の微視的解明と巨大垂直磁気異方性デバイスの創製

物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点
グループリーダー

みたに せいじ
三谷 誠司

研究課題番号：16H06332 研究者番号：20250813

研究分野：応用物性

キーワード：スピントロニクス、磁性、表面・界面物性、超薄膜、スピン軌道相互作用

【研究の背景・目的】

磁性体ヘテロ接合界面のスピン軌道結合は、次世代磁気メモリ技術に不可欠な界面垂直磁気異方性の物理的起源であり、更には、磁気異方性の電界制御やスピンオービトロニクスといった複数の新規研究分野の根幹となるものである。しかし、界面でのスピン軌道結合メカニズムの理解は乏しく、新規現象の発見や現象論的取扱いが進む一方で、微視的解明が取り残されている状況にある。その結果、革新的な物質系のデザインや機能予測はほとんど行われていない。

本研究では、先進的な薄膜成長技術による界面原子層制御、磁気分光によるスピンおよび軌道磁気モーメント等の微視的評価、第一原理電子構造計算を集結することによって、界面スピン軌道結合を微視的に解明し、その学術基盤の構築とデバイス応用を行う。具体例としては、界面軌道磁気モーメントやRashba型スピン軌道効果等の評価を、その計測手法の開拓と合わせて推進し、得られた成果に基づいて、従来より1桁大きな界面垂直磁気異方性を実現することを狙う。また、その巨大異方性に起因する新機能を有するトンネル接合素子等、界面スピン軌道結合を利用した新規デバイスを創製する。

【研究の方法】

学術基盤の構築のために、第一原理計算と直接比較可能な磁性体ヘテロ接合界面を創製する。これまでに蓄積してきたエピタキシャル成長技術や単原子層成長技術を用い、ミスフィット転位などの欠陥を持たない磁性金属/非磁性金属や磁性金属/酸化物の積層薄膜試料を得る。合金化による格子定数の制御や、界面挿入層厚を原子層単位で変化させることにより、基礎研究のための系統的試料作製を行う。

得られたモデル構造試料に対して、放射光を用いた電子・磁気分光を含む種々の物性評価を行う。特に軌道角運動量に関連する測定に注力し、新規軌道状態評価法の開拓にも挑む。第一原理計算により、原子サイトごとのスピンおよび軌道状態を解析し、界面スピン軌道結合の微視的解明を進める。

微視的解明の進捗の後、次の段階として、第一原理計算に基づく物質系のデザインや物性機能予測を行う。巨大な界面垂直磁気異方性や、異方的電子構造による新規物性を計算予測し、現実に試料創製を行うことで、その実現を狙う。

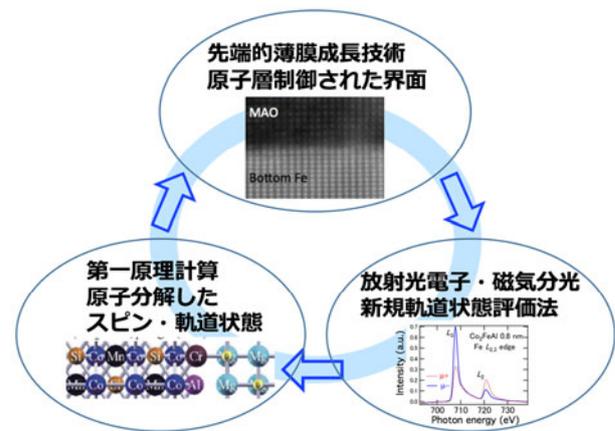


図1. 研究の手法

【期待される成果と意義】

界面スピン軌道結合の微視的メカニズムが明らかになり、その学術基盤が確立していくことが期待される。重要な新規関連分野の基盤となるため、学術・技術上意義深い。巨大な界面磁気異方性や、それに基づく新機能デバイスの創製も期待され、次世代磁気センサー・メモリ技術に関する意義も有する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ J. W. Koo et al., “Large perpendicular magnetic anisotropy at Fe/MgO interfaces”, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 192401 (2013).
- ・ J. Okabayashi et al., “Perpendicular magnetic anisotropy at the interface between ultrathin Fe film and MgO studied by angular-dependent X-ray magnetic circular dichroism”, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 122408 (2014).
- ・ Y. Miura et al., “A first-principles study on magnetocrystalline anisotropy at interfaces of Fe with non-magnetic metals”, *J. Appl. Phys.* **113**, 233908 (2013).

【研究期間と研究経費】

平成28年度－32年度
145,000千円

【ホームページ等】

<http://www.nims.go.jp/research/group/spintronics/index.html>
mitani.seiji@nims.go.jp

【基盤研究(S)】

理工系 (総合理工)



研究課題名 単原子スペクトロスコピーの高度化研究

産業技術総合研究所・ナノ材料研究部門・首席研究員

すえなが かずとも
末永 和知

研究課題番号：16H06333 研究者番号：00357253

研究分野：総合理工

キーワード：薄膜、表面界面物性、電子顕微鏡、電子分光、単原子物理

【研究の背景・目的】

単原子の分析・識別は、1,800年にダルトンが原子論を提唱して以来、全科学者の目標の一つであった。近年の電子顕微鏡の発展はめざましく、細く絞った電子線と高性能の分光器を用いることで、従来は不可能とされていた原子ひとつひとつからの分光がなされるまでに至った。本研究ではこの単原子スペクトロスコピー法のさらなる応用と発展を目指す。とくに電子顕微鏡を用いた電子分光測定の高速度・高感度化・高精度化を通して、単原子のスピンの状態、配位数およびそれらの変化の実時間観測を可能にし、物性研究および生命研究の基礎的発展に大きく貢献できる基盤技術開発につなげる。

【研究の方法】

本課題では5年間の研究期間中に、「単原子トラッキングを可能にする超高速ケミカルマップ」、「単原子スピン状態、配位数、電子準位などの情報取得」、「化学反応・相転移などに伴う単原子ELNES変化のその場測定」を実現するために、EELS法の高速度化・高感度化・高分解能化を目指す。具体的には、超高真空下でガス分圧や温度制御を可能にする観察時の試料環境制御、とくに深いエネルギー損失におけるスペクトルカットオフに対応し回折面上でのエネルギーぼけを最小限に抑えるための電子顕微鏡中間レンズ色収差低減、高輝度かつ高安定の電子銃導入、高速・高感度分光検出器の導入などを実施する。

【期待される成果と意義】

超高速ケミカルマップによる単原子追跡：電子顕微鏡内で刻々と変化する原子構造を元素別に追跡することができるようになり、欠陥ダイナミクスなどデバイス特性に重要な情報を原子レベルで取得できる。

単原子情報の充実化：単原子分析の感度を飛躍的に向上させることで、軽元素だけでなく貴金属や遷移金属などの検出も可能になる。また酸化数やスピン状態などの情報がより幅広い元素から得られるようになるため、多くの物質や細胞などに応用できる。

ELNES変化のその場測定：化学反応や相転移に伴う電子状態の変化を原子レベルで捉えることが可能になり、例えば酸素吸着を担う分子中のFe原子スピン状態を観測するなど生命活動の根源となる化学反応に原子レベルで迫ることができる。

物質の根源に思いをはせた古代ギリシア人以来、モノや生命を構成する最小単位をひとつひとつ可視化しカウントすることは何世紀もの間、科学者の夢であった。以上のような、物質・生命の原理の解明につながる単原子分析は、人類の知識に貢献できる。

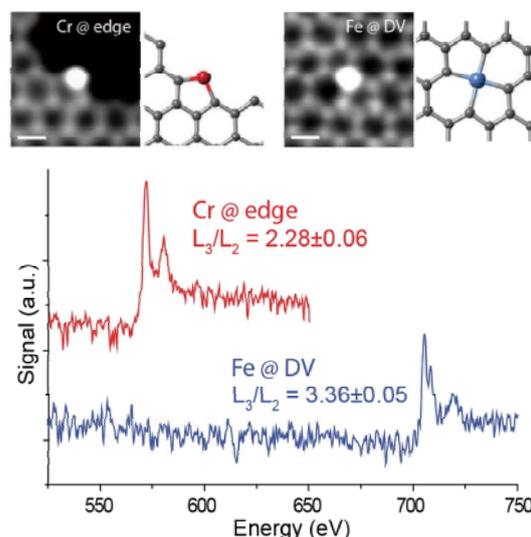


図 単原子のスピン状態測定の予備実験例。L吸収端における枝分かかれ比(L_3/L_2)は、注目する3d遷移金属のdサブバンド内の電荷移動量を反映しており、グラフフェニッジ上のCr原子も、複空孔(DV)中のFe原子も高スピン状態であることがわかる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- K. Suenaga et al., "Element-selective single atom imaging" *Science* 290 (2000) pp. 2280-2282
- K. Suenaga and M. Koshino, "Atom-by-atom spectroscopy at graphene edge", *Nature*, 468 (2010) pp.1088-1090

【研究期間と研究経費】

平成28年度—32年度
130,900千円

【ホームページ等】

<https://unit.aist.go.jp/nmri/index.html>
suenaga-kazu@aist.go.jp

【基盤研究(S)】

理工系 (総合理工)



研究課題名 イオン感応性を原理とする超高感度ナノレーザバイオセンサ

横浜国立大学・大学院工学研究院・教授 **ばば としひこ**
馬場 俊彦

研究課題番号：16H06334 研究者番号：50202271

研究分野：光工学・光量子科学

キーワード：フォトニック結晶

【研究の背景・目的】

ガリウムインジウムヒ素燐半導体フォトニック結晶ナノレーザは単純なプロセスで製作され、室温光励起により近赤外波長で発振する高性能な微小レーザである。その表面に抗体修飾等の機能化を施し、検体溶液に浸漬すると、溶液中の生体分子などを発振波長や発振強度の変化としてセンシングできる。

直前の基盤研究(S)「ナノスロットレーザの極限的な光局在を利用する超高感度バイオマーカーセンサ」(平成24-27年度)においては、汎用タンパク質に加え、癌やアルツハイマー病といった重度疾病のバイオマーカータンパク質、環境毒素、生細胞などをこのナノレーザによりセンシングしてきた。特にタンパク質に対してはfMオーダー以下の極低濃度検体の超高感度検出、 10^9 倍以上の高濃度不純物下での選択検出などに成功した。これらの高性能は、従来のフォトニックセンサに対して議論されてきた屈折率センシングの原理では説明できず、むしろ溶液中のイオンとの相互作用や、半導体の表面電荷が大きく関与することが判明した。

この発見をもとに、本研究では、これまでのフォトニックセンサでは調査されてこなかった「イオントロイクス」効果(図1)をナノレーザに対して探求、機能制御を可能にすること、医療応用が可能なレベルの高性能化と安定化を図ることを目的とする。

【研究の方法】

イオントロイクス効果の検証と制御については、ナノレーザ周辺の静電的相互作用、ナノフルディクス効果、電気光学効果を精密に解析する。また、マルチプローブ顕微鏡と高感度カメラによるモード局在、分子吸着、表面電位などを総合的に評価し、理論との対応を検証する。さらに一分子挙動の観測、外部電界による表面修飾の制御、各抗原に対する修飾の個別最適化などを通じて、各効果の定量化と制御を可能にする。

一方、医療応用システムの開発では、原子層堆積法による一貫した表面修飾プロセスにより表面を安定化する。また精神疾患である統合失調症のためのバイオマーカーを目標分子に設定し、様々な希釈試料の生成を可能にする微小流体デバイスと組み合わせた定量計測法を開発する。最終的に、使い捨て可能なプロテインチップを構築し、ほぼ全自動での計測の実現を目指す。

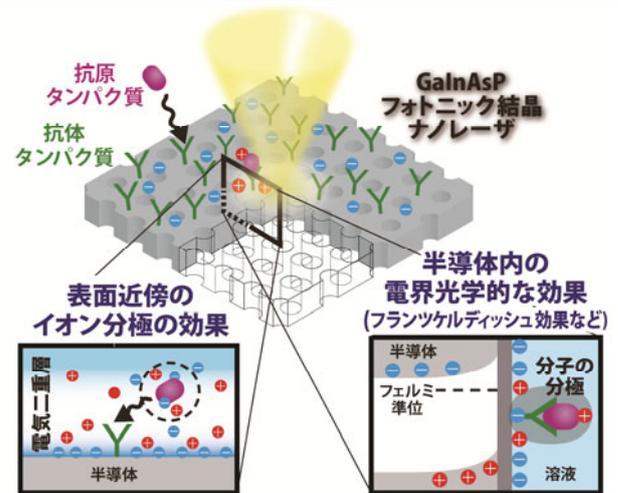


図1 フォトニック結晶ナノレーザとイオントロイクス効果の概念

【期待される成果と意義】

従来、研究されてきたプラズモン共鳴、微小共振器などのフォトニックセンサでは、分子吸着による周囲の屈折率上昇のセンシングの原理であると考えられてきた。しかし、実際にナノ領域でこれを検証した研究は、皆無に等しかった。本研究はこれとは異なる新原理を議論し、これによる高性能や新機能を提供するものであり、フォトニックセンサに新たな展開をもたらすと期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- K. Watanabe, Y. Kishi, S. Hachuda, T. Watanabe, M. Sakemoto, Y. Nishijima and T. Baba, Appl. Phys. Lett. **106**, 021106 (2015).
- T. Baba, MRS Commun. **5**, 555 (2015).
- M. Sakemoto, Y. Kishi, K. Watanabe, H. Abe, S. Ota, Y. Takemura and T. Baba, Opt. Exp. **24**, 11232 (2016).
- S. Hachuda, T. Watanabe, D. Takahashi and T. Baba, Opt. Exp. **21**, 12815 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
130,400千円

【ホームページ等】

<http://www.baba-lab.ynu.ac.jp/>

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 数理解物理学の観点からの代数幾何学の新展開

京都大学・大学院理学研究科・教授

もりわき あつし
森脇 淳

研究課題番号： 16H06335 研究者番号： 70191062

研究分野： 数物系科学、数学、代数学

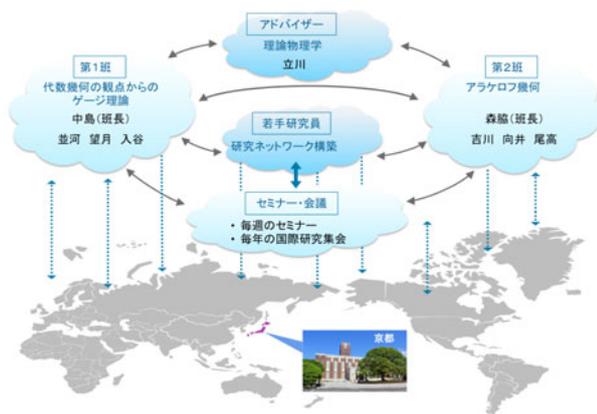
キーワード： 代数幾何、数理解物理学

【研究の背景・目的】

代数幾何学は、トッド教授の指摘があるように、数学の理論の実験場であると言える。現在では、数学に留まらず科学理論の実験場でもある。特に80年代からの超対称性ゲージ理論との交流や、90年代以降の、ミラー対称性に始まる超弦理論との交流が活発である。その他に、カラビ・ヤウ多様体論、シンプレティック多様体論、サイバーク・ウィッテン理論、グロモフ・ウィッテン不変量、ドナルドソン・トーマス不変量等、代数幾何学、及び、複素幾何学と関連する数理解物理学の話題は尽きない。

このように、数理解物理学の観点は最近の代数幾何学の発展において必要不可欠なものになっており、新しい研究の芽はこの境界領域から次々と生み出されている。

京都大学には数理解物理学と代数幾何学の双方に深く関わる世界的研究者が数多い。彼らと国内外の研究者を一つの研究グループとして束ね、交流を超えた数理解物理学と関連する代数幾何学の新しい数理現象の発見と新理論の構築を行い、数理解物理学の観点からの代数幾何学の展開と国際的拠点の形成を図る。



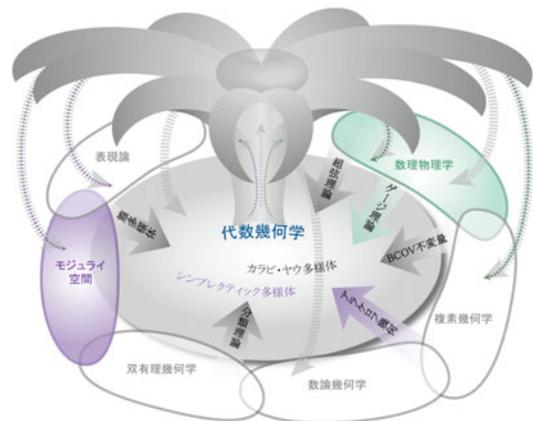
【研究の方法】

研究グループを二つの班に分け、研究を推進する。第一班は、中島・並河・望月・入谷から構成され、ゲージ理論の代数幾何学からの観点からの研究を中心に、中島を班長として研究を進める。第二班は、森脇・向井・吉川・尾高から構成され、数理解物理学に関わる数論幾何学(アラケロフ幾何)を中心に、森脇を班長として研究を進める。立川は、理論物理学者として、オブザーバーとしての役割を果たすとともに、数学と物理の両方に関わる研究を進める。また、本研究課題を遂行のため、森脇が代表を努め、科研費上の役割として存在しないが中島が副代表を努める。

班の間の情報共有を密にするため、定期的なセミナーを開催する。また、国際拠点の形成のため、毎年、国際研究集会を開催する予定である。さらに、優秀な若手研究者を雇用する。数理解物理学研究所に所属して、本研究計画に専念し、国内外の多くの研究者の間の連携に従事し、研究ネットワークの構築に努め、国際研究集会では組織委員の一人となる。

【期待される成果と意義】

各班に於いて、数理解物理学と関わる革新的な成果が現れ、代数幾何学の地殻変動をもたらすことを期待している。それにより、従来とは逆の代数幾何学から周辺分野、特に、数理解物理学の研究に大きな影響があると考えている。また、研究ネットワーク構築され、数理解物理学の観点からの代数幾何学の国際的拠点が形成される。



【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- H. Nakajima, Instantons on ALE spaces, quiver varieties, and Kac-Moody algebras, Duke Math. J. 76 (1994) 365--416.
- A. Moriawaki, "Arakelov geometry", Translations of Mathematical Monographs, vol 244, (2014), American Mathematical Society.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
61,700 千円

【ホームページ等】

<https://www.math.kyoto-u.ac.jp/ja/people/profile/moriawaki>
moriawaki@math.kyoto-u.ac.jp

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 多重ゼータの深化と新展開

九州大学・大学院数理学研究院・教授 **かねこ まさのぶ**
金子 昌信

研究課題番号：16H06336 研究者番号：70202017

研究分野：代数学

キーワード：数論、数論幾何学、低次元トポロジー

【研究の背景・目的】

多重ゼータ値および多重ゼータ関数は下記のような簡単な無限級数で定義される対象である。

$$\zeta(k_1, \dots, k_r) := \sum_{0 < m_1 < \dots < m_r} \frac{1}{m_1^{k_1} \dots m_r^{k_r}}$$

変数を自然数に限ったものを多重ゼータ値、複素変数の関数とみたものを多重ゼータ関数と言い、一変数の時は古典的なリーマンゼータ関数やその自然数での値である。またより一般的な型のものも含めた値、関数の総称として、ここでは多重ゼータと呼んでいる。オイラーが現代につながる根本的な研究を行って以来の長い研究の歴史があるが、数学や物理学のいろいろな分野に登場して、様々な観点から活発な研究がなされてきたのはこの四半世紀ほどのことである。

本研究では、これまでに種々の異なる由来から予想、あるいは証明されてきた多重ゼータ値についての等式や構造について、予想はその証明に迫るとともにそれらの相互関連を明らかにし、背後に存在するであろう統一理論の確立を目指していく。また多重ゼータ関数についてはその解析数論的、および p 進的な理論を整備し、多重ゼータ値の理論と相俟って次の四半世紀を潤すような新しい現象の発見に努める。さらに「多重ゼータ」として総合的に、関連する対象の理解を深化させつつ、新しい展開をめざしていく。

【研究の方法】

主たるテーマとして、

- 多重ゼータ値の関係式と代数構造
- 多重ゼータ関数の解析的、p 進解析的性質の理解
- 有限多重ゼータ値、p 進多重ゼータ値、モチビツク多重ゼータ値
- 多重ポリログ
- 多重ゼータ値と量子不変量の数論トポロジーの観点からの理解
- 多重ベルヌーイ数
- ガロア側面、組合せ側面からの理解

を掲げ、これらの観点について、代表者、分担者、連携研究者、海外共同研究者相互の意思疎通をはかりながら、個人研究、共同研究を推進する。

また研究交流や情報共有、議論のためのセミナー

や研究集会（国内、国際）、チュートリアル的な集会などを適宜開催して研究を進める。

【期待される成果と意義】

多重ゼータ値については、この 20 年来の研究の進展は著しいものがあるとはいえ、Broadhurst-Kreimer 予想や、どの関係式族がすべての関係を導くかに関する予想群を始めとして、未だ解決を見ない予想も多い、これらについて、どこまでを解決出来るとはつきり述べることは困難であるものの、その解決に向けた理解の深化、新しい手法の開発、また思わぬ関連の発見による。更に深い予想の提出を含めた理論的進展、などは十分見込まれる。ごく最近の有限多重ゼータ値に関連した研究の進展も期待される場所である。また、複シャッフルリー代数のように、全く異なる背景を持つ分野から同じ構造をもった対象が現れるような事象の背後にあるものについての理解が進むことが見込まれる。

多重ゼータ関数については、解析的な理論の進展はもちろんのこと、ルート系の多重ゼータ関数の研究や、最近の特異点解消多重ゼータ関数の研究が多く示唆を与えており、その意味するところの解明と、様々な既存の結果との関連がついていくことが期待される。

多重ベルヌーイ数の組合せ解釈など、他分野への応用も期待される場所である。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- M. Kaneko, K. Ihara and D. Zagier, Derivation and double shuffle relations for multiple zeta values, *Compositio Math.* vol. 142-02, pp 307--338, (2006).
- M. Kaneko, K. Tasaka, Double zeta values, double Eisenstein series, and modular forms of level 2, *Math. Ann.* vol. 367, pp 1091-1118, (2013).

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
75,400 千円

【ホームページ等】

<http://www2.math.kyushu-u.ac.jp/~mkaneko/kibans/>

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 周期の理論と双有理幾何学の融合、ミラー対称性研究の新時代

大阪大学・大学院理学研究科・教授

たかはし あつし
高橋 篤史

研究課題番号：16H06337 研究者番号：50314290

研究分野：数学、幾何学

キーワード：複素幾何学、双有理幾何学、ミラー対称性

【研究の背景・目的】

幾何学的対象には大きさや形といった特徴を反映する量がある。長方形を考えたとき、(縦の長さ) × (横の長さ) と (縦の長さ) ÷ (横の長さ) が大きさと形をあらわす。ここで横の長さを逆数にした長方形を考えると、大きさ・形はもとの長方形の形・大きさとなる。つまり、大きさと形の役割が入れ替わった長方形の組ができる。ミラー対称性とは、この例のような、二種類の幾何学的特徴の役割を交換する対称性のことである。

より正確に述べると、ミラー対称性は、シンプレクティック幾何学に対応する A-モデルと複素代数幾何学に対応する B-モデルという、二つの位相的弦理論の等価性である。ミラー対称性は定性的・定量的な多くの重要な着想・予想を与え、幅広い数学分野を関連させ、新たな知見とともに既存の数学を一層深める。「物理的着想・対象・手法」を数学に取り入れつつ、ミラー対称性の背後にある数学的真理を解明するのは極めて興味深い問題である。

現在とくに重要な課題が二つある。一つは、ホモロジー的ミラー対称性の証明、A-モデルおよび B-モデルに対して独立に構成される圏の同値性の証明である。もう一つは古典的なミラー対称性 (Gromov-Witten 不変量の理論に対する周期の理論と変形理論に対する周期の理論の同型) をホモロジー的ミラー対称性から函数的に導出すること、つまり、B-周期の理論とくに原始形式・平坦構造 (Frobenius 構造) の函数的導出、である。これらの課題の解決に向けて、近年重要な成果が続々と得られている。

一方、極小モデル理論のさらなる理解のため、圏論的手法・混合ホッジ構造に基づく双有理幾何学研究が活発に行われている。圏論的力学系という導来圏の新たな研究手法がごく最近登場したが、これも圏論的手法や周期の理論による双有理幾何学研究の重要性を示唆している。

本研究課題の目的は、周期の幾何学的理論と双有理幾何学を融合し両理論を飛躍的に発展させ、ミラー対称性現象のより深い理解を与え、周期の理論と双有理幾何学における古典的重要問題に対する大きな貢献をもたらすことである。

【研究の方法】

以下の3課題における諸問題の解決に取り組む：

1. 非可換ホッジ理論研究の推進、圏論的力学系の

基礎研究。量子原始形式の理論の構築。

2. (非可換) ホッジ理論による (非可換) 双有理幾何学研究。とくに極小モデル理論研究の推進。
3. Gromov-Witten 不変量・原始形式・Weyl 群不変式を結ぶ、ミラー対称性と周期写像の理解。具体的には、以下の方法で計画を遂行する。
 - ① 研究分担者・連携研究者・研究協力者・海外共同研究者から構成される研究体制により、個別・共同研究を行う。
 - ② 博士研究員の雇用により、本研究課題のさらなる発展・当該研究分野の活性化を目指す。
 - ③ 大阪大学・京都大学におけるセミナー・勉強会の定期的開催、国際研究集会の年次開催により、研究交流および研究成果の発信を行う。これらにより、当該分野の研究拠点形成を目指す。

【期待される成果と意義】

ミラー対称性研究における最先端の重要諸課題に大きな寄与が期待されるだけでなく、100年以上の歴史がある数学の古典的・伝統的問題に新たな知見がもたらされる。とくに、双有理幾何学研究に対する新たな不変量・手法の提供、離散群・特異点・ルート系・有限次元代数の間にある不思議な関係の解明、に対する大きな貢献が期待される。独創的で優れた研究を日本から世界に発信する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Wolfgang Ebeling, Sabir M. Gusein-Zade, Atsushi Takahashi, Orbifold E-function of Dual Invertible Polynomials, *Journal of Geometry and Physics* 106 (2016), 184 – 191.
- Yuuki Shiraishi, Atsushi Takahashi, On the Frobenius Manifolds for Cusp Singularities, *Advances in Mathematics* 273 (2015), 485 – 522.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 – 32 年度
79,900 千円

【ホームページ等】

<http://www.math.sci.osaka-u.ac.jp/~takahashi/project.html>
takahashi@math.sci.osaka-u.ac.jp



研究課題名 無限粒子系の確率解析学

九州大学・大学院数理学研究院・教授 おさだ ひろふみ
長田 博文

研究課題番号: 16H06338 研究者番号: 20177207

研究分野: 確率論

キーワード: 無限粒子系、確率解析、ランダム行列、可解モデル、確率幾何

【研究の背景・目的】

無限粒子系とは、統計物理に典型的に出現する対象で、単一もしくは有限種類の無限個の粒子の集団である。以下、単一種類の場合を考える。無限粒子系を、配置空間（点測度から成るラドン測度の空間）の元として捉え、点過程（配置空間の確率測度）で無限粒子系の定常状態を表現する。また、初期状態でラベルを付けその無限個の粒子の連続運動のランダムな時間発展を考えた場合、その確率力学は、対称性のある無限次元確率微分方程式として記述される。

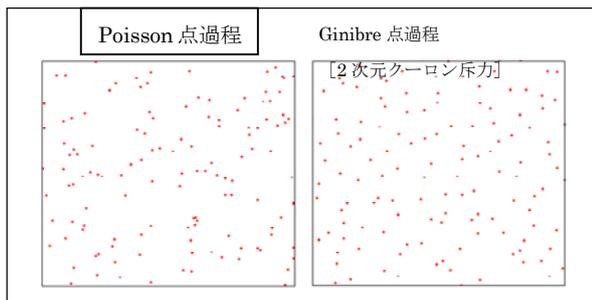
本研究は、対称性を持つ無限次元確率微分方程式の新しい理論に基づき、無限粒子系の確率解析学を構築する。

この解析学は、本質的にすべてのギブス測度を口切りに、ランダム行列の固有値の熱力学極限やランダム解析関数の零点として出現する無限粒子系など、今まで手が出せなかったような遠距離強相互作用を持つ系に対しても有効である。

それを用いて、遠距離強相互作用が生み出す、通常のギブス測度とは異なる、様々な新奇な現象を解明し、その逆温度 β についての相転移現象と臨界現象を研究する。

同時に、対数干渉ポテンシャルを備えた逆温度 $\beta=2$ の 1 次元空間の無限粒子系という特別なクラスについては、可解モデルとしての構造を用いて、モーメントや遷移確率の無限次元の類似物等の明示表現を得る。更に可解モデルの構造を、確率解析的理論と融合させ、臨界現象に於ける精密な粒子の漸近挙動を解明する。

【研究の方法】



Poisson と Ginibre

研究代表者 1 名、研究分担者 6 名、研究協力者、ポスドク、大学院生により研究組織を構成する。1) 無

限粒子系の確率解析の新理論の完成、2) 確率力学的普遍性、3) 確率力学的剛性、4) 確率解析の新理論と可解モデルの理論の融合、及び、新展開、5) 格子気体、ジャンプ型無限粒子系、分数ブラウン運動の無限粒子系、6) 確率偏微分方程式、7) ランダム媒質、以上の課題について、具体的な目標を定め研究する。

【期待される成果と意義】

2次元無限粒子系の典型例 (Poisson と Ginibre) のシミュレーションを左下に掲載した。Poisson は相互作用がなく、逆に Ginibre はクーロン力による遠距離強相互作用を持ち本研究の主研究対象の一つである。遠距離強相互作用による様々な新奇現象が期待される。この相互作用の扱いは、従来の理論では大きな困難を生じたが、この研究では、それに適応可能な新理論を構築し無限粒子系の確率解析学という分野を切り開いていく。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Infinite-dimensional stochastic differential equations, related to random matrices, Hirofumi Osada, Probability Theory Related Fields (2012) 153:471–509
- Interacting Brownian motions in infinite dimensions with logarithmic interaction potentials, Hirofumi Osada, The Annals of Probability 2013, Vol. 41, No. 1, 1–49
- Interacting Brownian motions in infinite dimensions with logarithmic interaction potentials II: Airy random point field, Hirofumi Osada, Stochastic Processes and their Applications 123 (2013) 813–838

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度–32 年度
90,100 千円

【ホームページ等】

http://www2.math.kyushu-u.ac.jp/~osada/public-2_html/index.html

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 非線形解析学と計算流体力学の協働による乱流の数学的理論の新展開

早稲田大学・理工学術院基幹理工学部・教授 小 菌 ひでお 英 雄

研究課題番号：16H06339 研究者番号：00195728

研究分野：偏微分方程式論、非線形解析学

キーワード：ナビエ・ストークス方程式、調和解析学、関数解析学、大域的適切性、漸近解析

【研究の背景・目的】

ナビエ・ストークス方程式は非線形特有の現象を引き出すことのできる典型的モデルとして、理論および実験両方の研究者から注目されてきた。毎年定期的に国際シンポジウムが開かれており、世界トップレベルの研究者達が未解決問題取り組んでいる。研究メンバー小菌、隠居は過去にそれぞれ日本数学会のプロジェクトである MSJ-IRI 国際研究集会、RIMS プロジェクトの組織代表、副代表を務めた。ミレニアム7問題の1つである同方程式の「時間大域的可解性」は他の6つの問題と比較して純粋数学のみならず、計算科学、流体力学とも密接に関係していることが特徴である。一方、計算科学における直接数値シミュレーション (DNS) は乱流研究の有力な手段であるが、強い非線形性と巨大自由度をもつという乱流の本質的特長を反映するには困難であった。金田が芳松と推進している一様等方性乱流の DNS は従来とは桁違いの大型計算であり、これによって初めて大規模実験、あるいはそれを凌駕する高いレイノルズ数の乱流データが実験的誤差や不確定性なしに取れるようになった。

本研究の目的は、このような学問的な背景に基づき、非線形解析学と計算流体力学の手法を駆使して流動現象の本質である乱流の解明に挑戦することである。実際、無限大や極限操作といった数学解析固有の方法が大規模計算を不可欠な研究手段とする乱流現象の解明や従来数理的な裏付けの乏しかった乱流理論や乱流モデルの構築に新たな知見を与えることが期待できる。本研究では経験則や直感に過度に依存しない信頼性の高い乱流の数学的理論の確立、更には乱流の数理解モデルの開発を目指す。

【研究の方法】

本研究は非線形解析研究班と流体力学研究班の連携によって推進する。非線形解析研究班では、非線形偏微分方程式の手法、特に調和解析学と関数解析学を用いてナビエ・ストークス方程式の解の性質を数学的厳密理論の観点から考察する。領域のサイズの影響やエネルギー減衰といった数値計算では扱えない無限大や極限操作を研究対象とし、大規模な流れを記述する適切なモデルの構築を行うと同時に乱流の普遍原理の解明に数学的な確証を与える。

流体力学研究班では、計算科学的方法、特に大規模直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation) による乱流現象の解明、及び数理論的根拠を持ち、恣意的調節パラメータを含まない情報縮約手法の開発に挑戦する。

(I) 調和解析学、特異極限と有界性の影響評価

- ・無限領域における流れの解析
- ・乱流の大スケールの普遍性に対する計算領域サイズの影響評価

(II) 境界層の数理解析と粘性極限

- ・プラントル方程式の適切性・非適切性の研究
- ・時空間一様なナビエ・ストークス方程式の非粘性極限の導出

- ・エネルギー散逸率の下からの評価とオイラー方程式の解のエネルギー保存則の崩壊
- ・エネルギースペクトルとナビエ・ストークス方程式の弱解の正則性

(III) 乱流のもつ普遍的法則性の解明

- ・固体壁を持つ乱流における普遍的統計法則
- ・乱流中のパッシブスカラー場の減衰則

(IV) 情報縮約手法の開発 予測可能性と信頼性の評価

- ・乱流の非経験的 LES スペクトルモデルの開発
- ・乱流に対する秩序渦手法の開発

【期待される成果と意義】

乱流の解明は単に流体力学の分野に留まらず、大気・気象、航空、エネルギー、防災等社会の諸問題の解決に大きく関わっている。大型計算機の発達により単純化されたモデルの構築、小さなスケールの流れの解析がかなりの精度で実現されている。このような状況下で、更に無限大や極限といった数学解析独自の手法を展開することにより、これまでの大規模計算科学による流体现象、特に大きなスケールの乱流の数学的理論の確立が期待される。また、本研究は数学解析の見地からはミレニアム問題の一つ「ナビエ・ストークス方程式の大きなデータに対する古典解の存在」に対して真正面から取り組むという挑戦的な試みである。ここで大きなデータとは、大きなレイノルズ数と同値であり、乱流の解明と密接に関わる。近年の著しい数理解析的手法およびコンピュータの進展によって、60年来の von Neumann の夢であった純粋数学と計算科学の協働による乱流解明の現実化が期待されている。

本研究班の実績である乱流 DNS の持つ自由度は非常に大きく、数値シミュレーションでは乱流研究分野に限らず、全科学分野を見渡しても例がない。それ故、本研究の非線形解析学と計算科学の手法による「流体数学理論の構築」は、乱流を典型とする非線形超巨大自由度力学系に対する数理解析の新しい応用分野の開拓にも貢献すると期待される。即ちナビエ・ストークス方程式を代表とする非線形偏微分方程式論、更に巨大自由度の非線形力学に変革をもたらさうる課題である。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・小菌、非圧縮性ナビエ・ストークス方程式の定常・非定常流の調和解析的研究数学 第67巻、113-132 (2015).
- ・Kozono, Amann, Giga et al., Recent Developments of Mathematical Fluid Mechanics, Birkhaeser-Verlag 2016.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
123,600千円

【ホームページ等】

<http://www.math.sci.waseda.ac.jp/math/>



研究課題名 極低運動量移行の電子弾性散乱による陽子電荷半径精密決定

東北大学・電子光理学研究センター・教授 **すだ としみ**
須田 利美

研究課題番号：16H06340 研究者番号：30202138

研究分野：原子核 (実験)

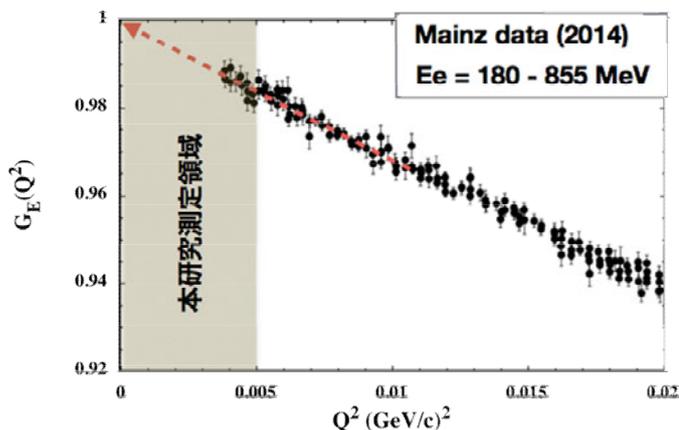
キーワード：電子弾性散乱、陽子電荷半径、極低運動量移行、電荷形状因子、ローゼンブルース分離

【研究の背景・目的】

高エネルギー電子散乱、水素原子分光実験、そして μ 水素原子 (電子を μ に置換した原子) 分光実験から決定された陽子の電荷半径が、決定誤差を考慮しても 7σ で4%も食い違うことが明らかになり、現在「陽子電荷半径問題 (Proton Charge Radius Puzzle)」として Nature 誌や Science 誌の表紙を飾る事態になっている。過去のデータの解釈の妥当性、分光データに対する陽子の有限なサイズの極僅かな影響を見積もる理論計算の再検討、高度化などの努力が払われているが、現時点では「陽子電荷半径問題」の原因は明らかになっていない。追試の努力も行われていて、精度並びに信頼度の高い電荷半径決定に向けた実験が実施あるいは検討されている。

本研究は、電子散乱による荷電半径決定法では最も信頼度の高い方法を採用する。低エネルギー電子加速器である東北大学・電子光理学研究センターの大強度60MeV 直線電子加速器を利用し、世界の他の研究施設では測定不可能な極低運動量移行領域 ($0.0003 \leq Q^2 \leq 0.005$ (GeV/c) 2) での電子・陽子弾性散乱実験をおこなう。所謂 Rosenbluth 分離法によって電荷半径の情報を含む電荷形状因子を分離・決定し、電荷形状因子の極低運動量移行領域での振る舞いから半径を決定する。

電荷半径は、電荷形状因子の $Q^2 \rightarrow 0$ での微分係数として定義されるため、その決定精度を上げるには、可能な限り運動量移行を小さくする必要がある。しかしながら、世界の素粒子・原子核研究用電子加速器はすべて高エネルギー化され、上記運動量移行領域での測定は不可能な状態である。



【研究の方法】

本研究では、前例のない極低運動量移行領域での測定により、モデル依存性のない解析方法で電荷半径を決定する。信頼度高く荷電半径を決定するには、陽子との弾性散乱断面積から電荷形状因子を実験的に分離決定することが不可欠である (Rosenbluth 分離)。しかしながら、世界で稼働中の原子核研究用電子加速器施設では極低運動量領域での Rosenbluth 分離を伴う測定は実施不可能である。それは、電子ビームエネルギーが高すぎ Rosenbluth 分離に必要な大きく散乱角度を変えた測定、並びに頻繁な加速エネルギー変更が実際上不可能なためである。

本研究を実施する東北大学・電子光理学研究センターで放射性同位体 (RI) 生成用電子直線加速器 (最大ビームエネルギー 60 MeV) は、エネルギー変更が容易であり Rosenbluth 分離を伴う測定が可能である。高品質電子ビーム供給用ビーム輸送系と広い散乱角度を覆う散乱電子測定系を建設することで、陽子の電荷半径をモデル依存性無く決定することが出来る。信頼度高く高精度の電荷半径を決定するため、系統誤差を 10^{-3} 以下に押さえた測定を実現する。

【期待される成果と意義】

測定例のない $0.0003 \leq Q^2 \leq 0.005$ (GeV/c) 2 領域で、 Q^2 値 20 点で電子弾性散乱断面積を測定する。 Q^2 一定の元で散乱角度を変え (電子ビームエネルギーも要変更) 電子・陽子弾性散乱断面積を測定し、Rosenbluth 分離手法により実験的に電荷形状因子 $G_E(Q^2)$ を分離決定する。 $G_E(Q^2)$ の Q^2 依存性から 1% 以下の精度で電荷半径を決定する。運動量移行を約一桁小さく出来き、高次モーメント寄与を二桁以上押さえ込むことにより、電子散による電荷半径測定法としては最も信頼度の高い測定になる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ R. Pohl et al., Nature 466 (2010) 213.
- ・ A. Antognini et al., Science 229 (2013) 417.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
128,500 千円

【ホームページ等】

<http://www.lns.tohoku.ac.jp>
suda@lns.tohoku.ac.jp

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 高速掃天観測による連星中性子星合体现象の研究

東京大学・大学院理学系研究科・准教授

しげやま としかず
茂山 俊和

研究課題番号：16H06341 研究者番号：70211951

研究分野：物理学

キーワード：宇宙物理、重力波、連星中性子星

【研究の背景・目的】

重力波望遠鏡の建設が進みアメリカの advanced LIGO(aLIGO)で、ブラックホールの合体による重力波が初めて検出された。しかし、電磁波での対応天体検出には至っていない。一方、同じ重力波源とされる中性子星合体からは電磁波放射が期待され、既に確立された観測手段で確認することで、その現象の理解および一般相対性理論の検証、中性子星を構成する高密度物質の性質などを解明するための重要な情報が得られると期待される。

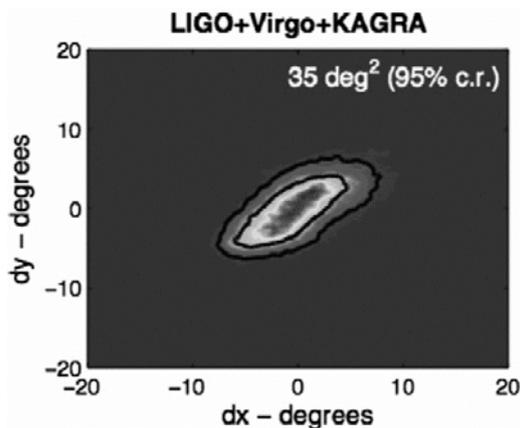


図1 重力波の到来方向予想

そこで、本研究では高感度 CMOS センサを搭載した超広視野高速カメラ Tomoe Gozen1(視野 ϕ 9 度・以下 Tomoe)を開発し、東京大学木曾観測所の口径 1.0m シュミット望遠鏡にて、重力波イベントの迅速な超広視野追観測を実施し、光学対応現象の検出をめざす。これと並行して、光学追観測の起点となる重力波到来予想を迅速に計算するために、重力波望遠鏡 KAGRA の高速解析システムを整備する。

他方、重力波源と考えられている連星中性子星合体とそれに伴い放出される物質からの放射(キロノバと呼ばれる現象)を計算する詳細な理論モデルを構築し、光学対応現象の予測と、その観測結果から重力波源となった現象の解明を行う。

【研究の方法】

研究期間の前期 2 年間に、広視野高速カメラ Tomoe の開発と理論的研究を並行して進める。研究期間の後期 3 年間に、Tomoe を東大木曾観測所の 1m 広視

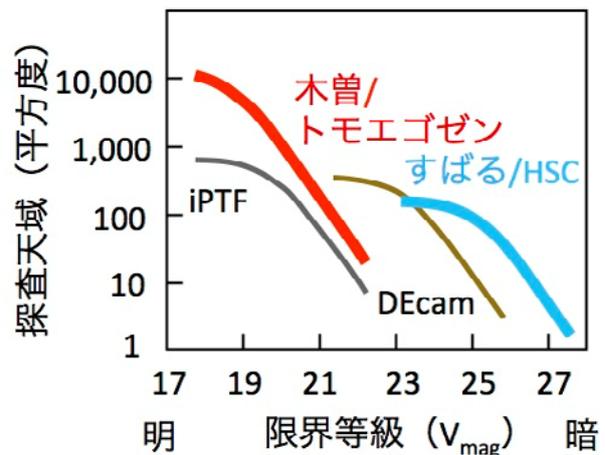


図2 1時間の観測で探索可能な領域

野望遠鏡に搭載して、光赤外線による重力波源の迅速な追加観測を実施する。また、KAGRA の重力波解析システムを強化し、1)ノイズとの相関解析、2)探索する中性子星質量範囲の拡大、3)複数の重力波望遠鏡からのデータのうち他の解析センターとは異なるペアのデータ解析、の3項目を実施することで重力波信号の信頼性を高める。

【期待される成果と意義】

観測結果と理論モデルを比較することで中性子星合体から放出される物質の元素組成、質量、運動エネルギーを導き出し、中性子星を構成していた超高密度物質の性質に制限を加えると同時に、重元素の起源としての役割を解明する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・Sekiguchi, Y. et al. Physical Review D 91, 064059 (2015)
- ・Tsujiimoto & Shigeyama, Astronomy & Astrophysics, 565, L5 (2014)

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
98,300 千円

【ホームページ等】

<http://www.ioa.s.u-tokyo.ac.jp/tomoe>

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 X線突発天体の監視による重力波源の同定とブラックホール形成メカニズムの研究

金沢大学・数物科学系・教授

よねとく だいすけ
米徳 大輔

研究課題番号：16H06342 研究者番号：40345608

研究分野：数物系科学

キーワード：宇宙物理学(実験)、重力波、X線、人工衛星、ブラックホール

【研究の背景・目的】

2015年9月15日に米国の重力波観測施設 LIGO によって、史上初となる重力波の直接検出が実現した。人類は「重力波」という宇宙観測の新たな手段を獲得したため、「重力波」と「電磁波」の連携観測によって、未だ誰も実現したことのない宇宙物理学を展開できるはずである。特にブラックホールが形成する瞬間や、その周辺環境で生じる現象など、強い重力場における物理学の理解が飛躍的に進むだろう。

しかしながら、重力波の観測だけでは方向決定精度が不十分なため、電磁波で輝く天体を発見することが困難な状況である。本研究では、重力波観測が本格化する 2018 年頃に、広視野 X 線撮像検出器とガンマ線トリガーシステムを搭載した超小型衛星を打ち上げ、重力波の発生と同期した突発天体の発見を目指す。X 線・ガンマ線天体の発見情報を迅速に通報し、可視光・赤外線・電波などのあらゆる波長帯での追観測を展開することで「重力波天文学」という新たな学術分野の創成・発展に貢献する。

【研究の方法】

電磁波観測の中でも、X 線観測は全天の 1/10 以上の領域を網羅する超広視野観測を実現できるため、重力波が発生した瞬間を同時に観測できるという特徴がある。本研究では、我々がこれまでに開発を進めてきた広視野 X 線撮像検出器 (図 1) やガンマ線トリガーシステムの衛星搭載モデルを開発する。

また、本研究による突発天体の発見をいち早く通報するシステムを導入し、地上・宇宙の大型観測施設による追観測を行うことで、より詳細で多様な観測データを取得する環境を構築する (図 2)。

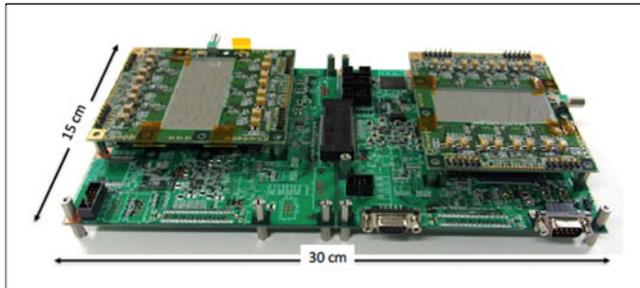


図 1 広視野 X 線撮像検出器のプロトタイプモデルの写真。本研究では衛星搭載モデルを完成させる。

【期待される成果と意義】

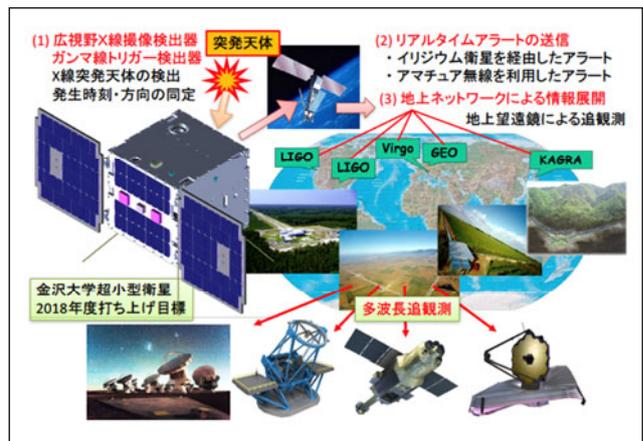


図 2 本研究の全体像を示した図

重力波発生源のひとつである連星中性子星の衝突・合体では、一気にブラックホールを形成する場合や、大質量の強磁場中性子星を経由する場合などが想定されている。本研究による重力波と X 線・ガンマ線の検出時間の差などから、ブラックホールの形成過程を、初めて観測的に議論できるようになる。また、ブラックホールから放出する相対論的な速度を持ったジェットのエネルギー源が、ニュートリノであるか磁場エネルギーであるかを解明できる可能性もあり、重力波観測と連携した全く新しい宇宙物理学を展開できるようになる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・"Establish of Gravitational Wave Astronomy with Gamma-Ray Burst and X-ray Transient Monitor", D. Yonetoku, et al., UNISEC, Takumi Journal, Vol.5, No.2, pp.19-27 (2014)
- ・"X-raying extended emission and rapid decay of short gamma-ray bursts", Y. Kagawa, D. Yonetoku et al., ApJ, 811, 8 (2015)

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
140,800 千円

【ホームページ等】

<http://astro.s.kanazawa-u.ac.jp/~yonetoku/>
yonetoku@astro.s.kanazawa-u.ac.jp



研究課題名 K中間子崩壊に潜む新物理の探索

大阪大学・大学院理学研究科・教授

やまなか たく
山中 卓

研究課題番号：16H06343 研究者番号：20243157

研究分野：素粒子(実験)

キーワード：素粒子(実験)、K中間子、J-PARC、標準理論を超える新しい物理

【研究の背景・目的】

物質の根源である素粒子には、クォークや電子などの粒子と、電荷が反転した反クォークや陽電子などの反粒子がある。宇宙のビッグバン直後には、粒子と反粒子は同じ数だけできたはずだが、膨張して冷えた現在の宇宙には、反粒子はほとんど残っていない。これは、その間に粒子が反粒子より少し多くなるという反応が起きたためである。このような粒子と反粒子の反応の違いをCP対称性の破れと呼ぶ。現在の素粒子の標準理論では、宇宙に物質を作ったCP対称性の破れは説明できない。

本研究の目的は、標準理論を超え、CP対称性を破る新しい素粒子物理を探索することである。

CP対称性を破る新しい素粒子物理を探索するために、中性のK中間子が π^0 中間子とニュートリノ対に壊れる事象を観測し、その崩壊分岐比を測定する。まずこの崩壊は、崩壊の前後でCPの状態が異なるために、CP対称性を破っている。また、標準理論によるこの崩壊の分岐比は 3×10^{-11} と非常に小さく、理論による誤差も約2%と小さい。新しい物理の寄与により崩壊の分岐比が標準理論の予測からずれていれば、それはこの崩壊に標準理論を超える新しい物理が寄与していることの証拠となる。

【研究の方法】

茨城県にあるJ-PARC大強度陽子加速器を用いてK中間子を大量に生成し、その崩壊をKOTO実験測定器(図1)で観測する。 π^0 中間子の崩壊からの2個のガンマ線を、下流に置いた電磁カロリメータ(CsIカロリメータ)で観測する。また崩壊領域全体を検出器(NCC, FB, MB, CV等)で覆い、他に粒子が観測されないことを確認する。

実験は2013年に開始し、わずか4日間のデータで、

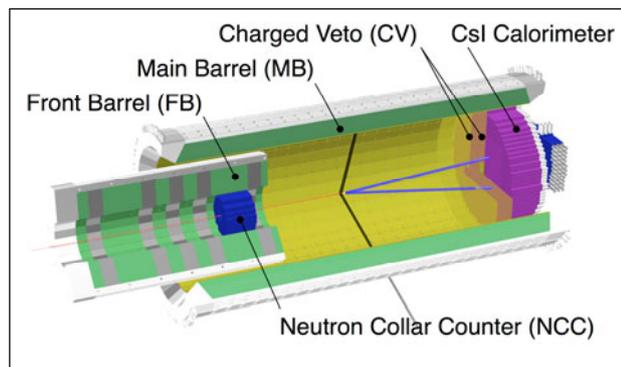


図1 KOTO実験装置

現在までの最高感度の実験とほぼ同じ感度を得、2015年にはその20倍のデータを収集した。これからはビーム強度も2倍以上に上げ、次の改良も行い、データを収集していく。

また、2013年に発見された、中性子起源の新たな背景事象を削減するために、電磁カロリメータの前面に約4000個の新たな半導体の光検出器を取り付ける。この新たな光検出器と、後面に従来からついている光電子増倍管の信号の時間差から、入射粒子の反応の奥行きを測定し、カロリメータに入ったガンマ線と中性子を識別する。これは今までにない全く新しい手法である。

また、データ収集システムをATCAという最新の通信技術を用いて大幅に改良し、並列で読み出される各測定器からの情報を、読み出しの中間段階で事象ごとにまとめ、電磁カロリメータに入射した粒子数を数えて事象を選別するなどの複雑な処理を行う。これにより、大強度のビームで実験を行ってもデータを効率よくデータを収集する。

【期待される成果と意義】

新しい物理の効果によって崩壊分岐比が 1×10^{-10} 以上になっていれば、 3σ 相当の有為さで新しい物理の存在を示す事ができる。また、ヨーロッパのCERN研究所で行われている実験による K^+ 中間子が π^+ 中間子とニュートリノ対に壊れる崩壊分岐比の結果、これから始まるKEK Belle II実験の結果などを組み合わせることによって、その新たな物理の中の理論モデルやパラメータを絞り込むことができる。また、もし崩壊が発見されない場合でも、いくつかの新しい物理のモデルに対して制限をかけることができる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ T. Masuda *et al.*, "Long-lived neutral-kaon flux measurement for the KOTO experiment", PTEP 2016, 013C03-1~23 (2016).
- ・ T. Yamanaka, "The J-PARC KOTO Experiment", PTEP 2012, 02B006-1~7 (2012).

【研究期間と研究経費】

平成28年度～32年度
133,800千円

【ホームページ等】

<http://koto.kek.jp>

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 ステライルニュートリノ探索で探る標準模型を超えた物理

高エネルギー加速器研究機構・素粒子原子核研究所・准教授

まるやま たかすみ
丸山 和純

研究課題番号：16H06344 研究者番号：80375401

研究分野：物理学

キーワード：素粒子 (実験)

【研究の背景・目的】

ニュートリノ振動は、2015年10月に梶田氏と Art McDonald 氏がノーベル賞を受賞し、一躍脚光を浴びた物理現象である。これは、ニュートリノがその飛行距離とエネルギーに依存してフレーバー（電子、ミュー、タウ、ステライル）を変える現象であるが、本研究は、未解決である「フレーバーの変化の中に少量のステライルが含まれるか否か」という問題を高い確度で探る。

ステライルニュートリノは通常のニュートリノと違い、弱い相互作用をしないニュートリノの総称であり、現在の素粒子標準模型では説明出来ない粒子である。例えば、ディラック型右巻ニュートリノである可能性がある。ステライルニュートリノの存在が確定できれば振動発見時と同様に定説が覆される。

ステライルニュートリノは弱い相互作用を行わないため、その存在の確認は主に弱い相互作用を行うニュートリノとの振動を通じてなされる。いくつかの加速器・原子炉・線源を使ったニュートリノ実験でその存在が示唆されているが、決定的な証拠がない状況で、確定的な検証が急務である。現在、その検証に向け、世界でいくつかの実験が提案されている。本研究はそれらの実験の中でも短期間で世界に先駆けて結果を出すことを目的とする。

【研究の方法】

図1に本研究を行う際のセットアップを示す。図1右方向から来る3 GeVの陽子が水銀標的に衝突する際、 μ^+ 静止崩壊から大量のニュートリノを生成する。本実験ではこの際生成される反ミューニュート

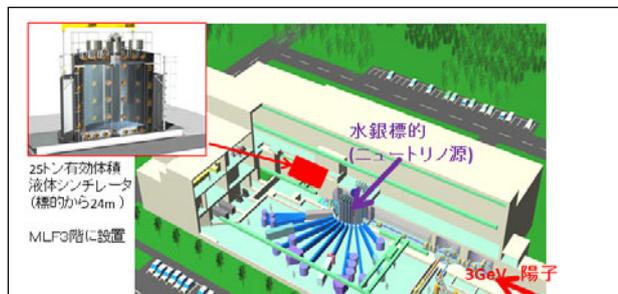


図1: MLF 建屋と検出器

リノが、標的から24m先のMLF3階に設置された50トン(有効体積25トン)液体シンチレータ測定器で検出される間に振動して反電子ニュートリノへ変化する割合を精査する。この短距離での振動は、

先駆実験で示唆されているステライルニュートリノがある場合のみ起こる。

この実験では、既に存在し世界最高感度の研究を行うことができるJ-PARC物質・生命科学研究施設(MLF)の3階に、検出器技術が確立した高性能で比較的小型の液体シンチレータ検出器を置くだけで世界最高の結果を出せることが特徴である。

【期待される成果と意義】

図2に実験感度を掲載した。横軸は反ミューニュートリノが反電子ニュートリノへ振動する割合で、

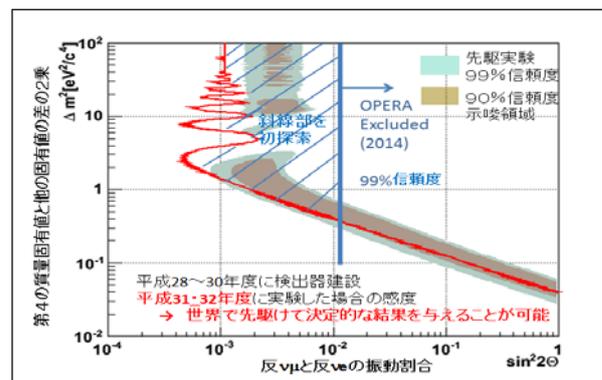


図2 本研究の感度

縦軸が第4質量固有値と他の固有値の差の2乗を表している。斜線部は本研究の予想探索感度であり、水色茶色の部分が先駆実験のステライルが存在する場合のニュートリノ振動の示唆領域である。先駆実験示唆領域について結論を出すことが可能である。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ S. Ajimura et al, PTEP 2015 6, 063C01 (2015)
- ・ M. Harada et al, arXiv:1310.1437 (実験提案書)
- ・ 高エネルギーニュース(vol.34 No.1): 岩井、末包、古田、丸山
(<http://www.jahep.org/hepnews/2015/15-1-1-JSN S2.pdf>)

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
140,100千円

【ホームページ等】

<http://research.kek.jp/group/mlfnu/>



研究課題名 強相関物質設計と機能開拓 —非平衡系・非周期系への挑戦—

東京大学・大学院工学系研究科・教授 **いまだ まさとし**
今田 まさとし
正俊

研究課題番号: 16H06345 研究者番号: 70143542

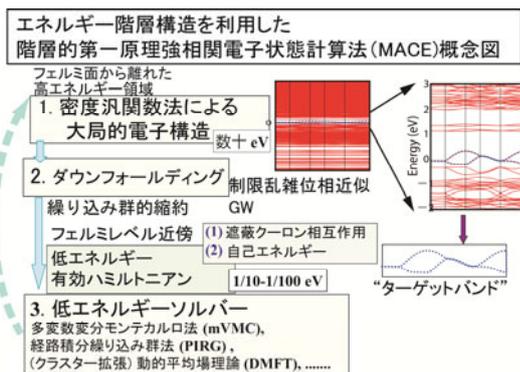
研究分野: 数物系科学

キーワード: 強相関系、非平衡、界面表面、第一原理計算、物質設計

【研究の背景・目的】

電子相関の大きな物質群(強相関物質)は基礎科学の革新と新概念の揺りかごととして、また 21 世紀の産業創成を担う新物質相の有力候補として世界的な研究競争が展開されている。20 世紀産業革命を担った半導体に比べ、強相関物質は多くの理論的困難を抱えていた。しかしここ 10 年で強相関物質の持つ特有の階層構造を利用して、電子状態を第一原理的に解明する手法が確立し(下図)、**応用が広がってきた。**

本研究はこれを拡張し 1.非平衡と 2.非周期性(表面・界面・準結晶)が顕著な強相関物質の原理解明と機能発現というフロンティアを開拓し、強相関物質の学理究明を推進する(右図)。特に新手法展開に適する a.非平衡高温超伝導、b.高効率太陽電池、c.非平衡時間分解実験手法の理論解析、d.界面・薄膜高温超伝導、e.磁壁等の可動・制御性の高いトポロジカル物質界面、f.準結晶の特異熱・電気伝導、g.永久磁石開発のための粒界面磁性を、電荷・スピン・格子系究明により機構解明・機能開拓し、遷移金属化合物を軸に強相関物質物性を第一原理的に解明し「強相関物質の理論設計」をめざす。

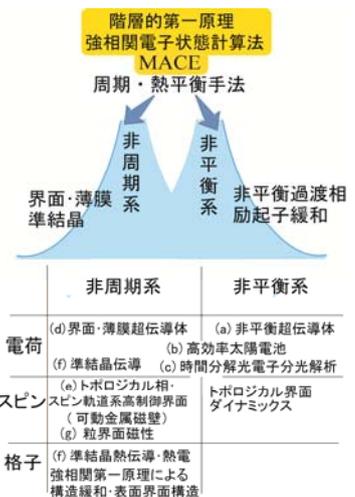


【研究の方法】

【手法の拡張】階層的強相関第一原理手法(MACE)の適用範囲を拡張し(1)非平衡・励起計算手法を組込む:変分モンテカルロ(VMC)法、動的平均場(DMFT)法の拡張と直接時間発展法の開発、バーテックス補正を含む第一原理多体摂動論を整備する。(2)非周期系(界面・薄膜・準結晶)を構造緩和も含めて扱い拡張する。(3)電子格子相互作用、スピン軌道相互作用、多軌道複雑系のために VMC,DMFT を拡張し、既知集団励起、創発集団励起を組込む。汎用性を達成したコードの公開普及も進める。

【物質設計・機能開拓】

非平衡手法を非平衡超伝導機構解明、高効率太陽電池の基本原理解明などに応用し、非周期系拡張手法と電子格子一体での強相関系構造緩和手法を薄膜・界面高温超伝導機構解明と物質設計、新原理トポロジカル界面設計、準結晶熱伝導解明と設計などに応用する。



【期待される成果と意義】

強相関電子物質の基礎学理解明と物質設計による機能開拓を第一原理的に実現するという長年の課題解決に資する。直接予想される成果には界面や非平衡での超伝導臨界温度が決まる機構の解明と物質設計への応用、太陽電池候補物質の物性解明と高効率な基本原理解明、スピン軌道相互作用の強い物質のトポロジカルな界面/表面機能設計、強相関準結晶の解明などがある。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ F. Aryasetiawan, M. Imada *et al.*, "Frequency-Dependent Local Interactions and Low-Energy Effective Models from Electronic Structure Calculations" *Phys. Rev. B* **70** (2004) 195104.
- ・ M. Imada and T. Miyake, "Electronic Structure Calculation by First Principles for Strongly Correlated Electron Systems" *J. Phys. Soc. Jpn.* **79** (2010) 112001.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
85,400 千円

【ホームページ等】

<http://www.solis.t.u-tokyo.ac.jp/index.html>
imada@ap.t.u-tokyo.ac.jp


研究課題名 分子性強相関電子系における量子液体の探索と理解

理化学研究所・加藤分子物性研究室・主任研究員

かとう れいぞう

加藤 礼三

研究課題番号：16H06346 研究者番号：80169531

研究分野：数物系科学

キーワード：分子性固体・有機導体、強相関系、超伝導

【研究の背景・目的】

固体中における電子間クーロン相互作用が物性に本質的な影響を与える強相関電子系の科学は、1970年代後半から凝縮系物理の基礎学理および（デバイス物理等の）応用の両面において大きく発展してきた。しかしながら、期待される学理の深さや応用展開の多様性から見れば未だ極めて不満足な状態にある。

多様な自由度が拮抗する強相関電子系では、電子は、固相のような長距離秩序も気相のような完全な一様性も持たない特殊な秩序状態である「量子液体」相を形成する。量子液体相は、高温超伝導体のRVBや分数量子ホール効果のように、強相関電子系の特徴を最も良く表すものであり、基礎学理とデバイス応用の両面から重要である。

本研究では、分子系の特徴である、単純明快な電子構造、柔らかな結晶格子、低キャリア密度、化学修飾による可制御性等を最大限に活かして、分子性強相関電子系における3つのタイプの量子液体、1) 量子スピン液体、2) 多層ディラック電子系の分数量子ホール液体、3) 電場誘起モット転移近傍の非フェルミ液体について、その探索と理解を目指す。

【研究の方法】

1) 量子スピン液体 (QSL)

金属錯体分子から成る量子スピン液体候補物質 $\text{EtMe}_3\text{Sb}[\text{Pd}(\text{dmit})_2]_2$ および周辺物質は、三角格子を有するモット系である。本系の特徴は、対カチオン部位の化学修飾・重水素化・混晶化や圧力印加によって、QSL相と競合する多様な周辺電子相(反強磁性相、電荷秩序相、Valence bond 秩序相、金属相等)を含む相図上において電子状態を精密に制御することが可能な点にある。本研究では、これらの周辺電子相の特異な性格を ESR、NMR、低温 X 線構造解析、振動分光、第一原理計算、モデル計算等によって解析し、これを手がかりに QSL の本質を理解する。

2) 多層ディラック電子系の分数量子ホール液体

分子性導体 $\alpha\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{I}_3$ は、加圧下で多層ディラック電子系となる。接触帯電法でこの多層ディラック電子系へ正孔を注入し、低温・高磁場下で電子相関による多層分数量子ホール効果の観測を行い、その性格を明らかにする。

また、HOMO バンドと LUMO バンドが共に伝導に関与する典型的なマルチバンド系である、単一成分子性導体を用いて、新奇のディラック電子系を

開発する。

3) 電場誘起モット転移近傍の非フェルミ液体
薄片単結晶を用いた電界効果トランジスタ(FET)におけるフィリング制御モット転移・超伝導転移を対象として、転移温度・最適ドーピング濃度・擬ギャップの有無・フェルミ面形状の電子ドープ/正孔ドープ対称性等を、様々なデバイス技術を用いて明らかにし、非フェルミ液体と超伝導相を探索するとともに、第一原理計算やモデル計算を用いてその解釈を試みる。

【期待される成果と意義】

物質合成・デバイス作製・物性評価を一貫的に行う、化学と物理学との強固な連携体制を構築し、分子性 π 電子系の特長が最も発揮される3種の「量子液体」の探索と理解を通じて、強相関電子系の基礎学理と将来の分子エレクトロニクスの基礎原理を明確にする。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- "Development of π -Electron Systems Based on $[\text{M}(\text{dmit})_2]$ (M= Ni and Pd; dmit: 1,3-dithiole-2-thione-4,5-dithiolate) Anion Radicals", R. Kato, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **87**, 355-374 (2014).
- "Quantum Hall Effect in Multilayered Massless Dirac Fermion Systems with Tilted Cones", N. Tajima, T. Yamauchi, T. Yamaguchi, M. Suda, Y. Kawasugi, H. M. Yamamoto, R. Kato, Y. Nishio, and K. Kajita, *Phys. Rev. B*, **88**, 075315/1-6 (2013).
- "A Strained Organic Field-Effect Transistor with a Gate-Tunable Superconducting Channel", H. M. Yamamoto, M. Nakano, M. Suda, Y. Iwasa, M. Kawasaki, and R. Kato, *Nature Commun.*, **4**, 2379/1-7 (2013).

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
142,600 千円

【ホームページ等】

<http://www.riken.go.jp/lab-www/molecule/>

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 最上部マンツルの構造とモホ面の形成過程の研究 ～海と陸からのアプローチ～

静岡大学・理学領域 (地球科学系列)・教授

みちばやし かつよし
道林 克禎

研究課題番号：16H06347 研究者番号：20270978

研究分野：数物系科学

キーワード：地球惑星科学、地質学、海洋底地質、リソスフェア、マンツル

【研究の背景・目的】

本研究は最上部マンツルの構造とモホ面の形成過程を解明するために、小笠原・マリアナ海溝の海溝かんらん岩とアラビア半島オマーンオフィオライトかんらん岩について岩石構造組織の発達過程、弾性・電気伝導度・透水性等の物性測定、岩石-水反応実験などの多角的アプローチから研究する。

小笠原・マリアナ海溝には沈み込み創成期に前弧域の拡大過程によって形成した最上部マンツルが存在し、オマーンオフィオライトには太平洋プレートに代表される高速拡大海嶺直下で形成した海洋プレート最上部マンツルが露出している。

この海と陸のかんらん岩の構造岩石学的特徴を比較検討して最上部マンツルの発達過程とそれを支配する要因を考察する。

【研究の方法】

小笠原・マリアナ海溝のかんらん岩とアラビア半島オマーンオフィオライトかんらん岩について、(1)かんらん岩の組織構造、結晶方位解析と歪・差応力の推定。(2)水や二酸化炭素などの揮発性物質濃度や温度圧力条件の見積もり。(3)かんらん岩-水の反応速度の実験研究を行う。さらに(4)国際陸上科学掘削計画(ICDP)オマーン掘削の孔内検層によってモホ面周辺の岩石物性を明らかにする。そして海と陸のかんらん岩研究を比較しながら最上部マンツル構造の共通点と相違点を明らかにして最上部マンツルの最適物質科学モデルを構築する。

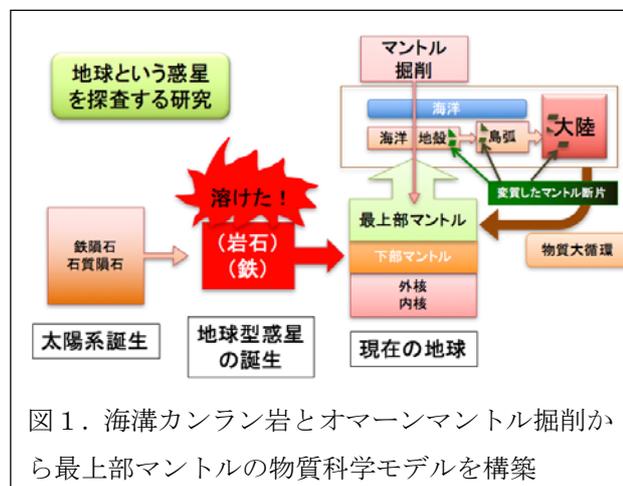


図1. 海溝かんらん岩とオマーンマンツル掘削から最上部マンツルの物質科学モデルを構築

【期待される成果と意義】

モホ面の物質科学的地質学的描像と最上部マンツルの構造について従来を上回る精密なデータが得られる。さらに海洋底物理探査の結果から推定されている太平洋プレート構造に加えて、沈み込み帯前弧側の構造に対して高精度な解釈を与える材料を提供できる。そして、10年後のマンツル掘削計画に向けた太平洋プレート全体の深部断面構造の理解を加速させられる。



図2. 10年後のマンツル掘削に向けた太平洋プレート深部の地殻-マンツル構造モデルの構築

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・道林克禎, 2016. 超深海海溝のマンツル直接研究～まるで惑星探査みたいなフィールドサイエンス～. 化学と工業, 69, 446-448.
- ・道林克禎, 2015. 最上部マンツルかんらん岩の結晶方位ファブリックとP波速度構造. 地学雑誌, 124, 397-409.
- ・道林克禎, 2012. かんらん石ファブリック: 上部マンツルを探る手がかり. 岩石鉱物科学, 41, 267-274.
- ・道林克禎, 2008. かんらん岩の構造敏感性と弾性的異方性. 地学雑誌, 117, 93-109.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
141,700千円

【ホームページ等】

<http://www.ipc.shizuoka.ac.jp/sekmich/>
michibayashi@shizuoka.ac.jp

【基盤研究(S)】

理工系 (数物系科学)



研究課題名 浅部マグマ過程のその場観察実験に基づく準リアルタイム火山学の構築

東北大学・大学院理学研究科・教授 なかむら みちひこ
中村 美千彦

研究課題番号：16H06348 研究者番号：70260528

研究分野：数物系科学 (地球惑星科学)

キーワード：マグマ・火成岩、火山噴火

【研究の背景・目的】

火山の火道浅部まで上昇したマグマは、減圧による溶解度の低下により大きな過冷却状態に置かれ、微細な結晶 (ナノライト) の晶出が進んで粘性が急激に上昇する (図1)。この「減圧凍結」区間をマグマがいかに駆け抜けるかで、噴火が起こるか噴火未遂に終わるかや、噴火の様式 (爆発性) が決定される。本研究では、これまで未解明であった、この減圧脱水結晶作用による粘性上昇の速度過程を、その場観察実験により明らかにする。一方、マグマ上昇や噴火の駆動力は発泡であり、気泡の量により決定される。そこで発泡したマグマから気泡が抜けるメカニズムを実験により調べる。この両者を、火道を流れるマグマの物理モデルに組み込むことで、実際のマグマ貫入イベントの圧力-時間履歴に即して「準リアルタイム」での活動推移予測を可能にする。マグマの粘性・密度などの物性にに基づくこの予測を、その後の噴火過程の観測結果や実際に噴出した火砕物と比較し、モデルの検証を行うという、火山活動研究の新しいサイクルを構築する。

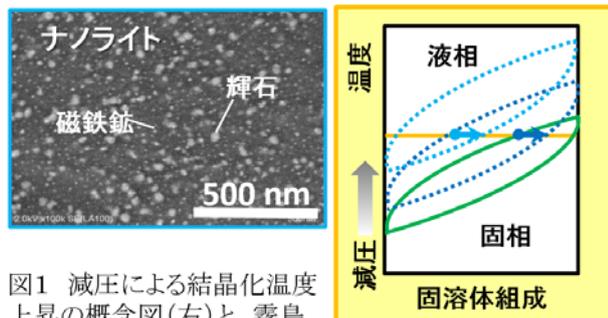


図1 減圧による結晶化温度上昇の概念図(右)と、霧島火山新燃岳2011年噴出物中のナノライトの例(左)。

【研究の方法】

透過型電子顕微鏡、電界放出型走査電子顕微鏡に加熱試料ステージを導入して、過冷却状態にあるマグマの結晶核形成率と結晶成長速度を「高温その場観察」し、ナノメートルに至る幅広いサイズ範囲で測定する。得られた速度を、新燃岳等、活火山の一連の噴出物の石基組織解析に応用して、噴火様式が分岐する条件を決定する。また実績ある流紋岩質マグマの変形装置を基に、安山岩～玄武岩質マグマの脱ガス度とレオロジーの測定を、新開発の実験装置で行う。これらを併せて、火道浅部条件でのマグマ

粘性の時間変化を決定するとともに、火道流物理モデルに適用してマグマの噴火挙動を計算する。

【期待される成果と意義】

流紋岩質マグマより粘性が低い苦鉄質のマグマでは、表面張力による緩和効果が効いて、発泡組織や脱ガスの歪速度 (= マグマ上昇速度) 依存性が無視できなくなり、火道流モデル計算に大きく影響すると予想される。本研究により、上昇貫入してきたマグマ物性の経時変化を準リアルタイムに推定し、ひき続くマグマ挙動を予測し検証できるようになる。

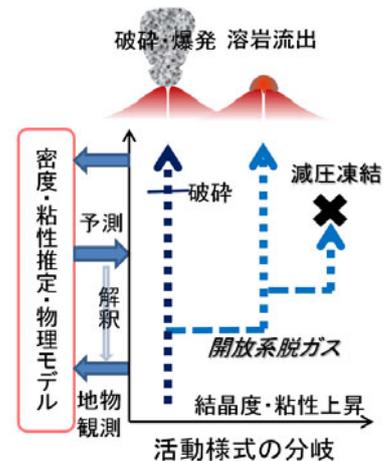


図2 観測-予測-検証サイクルによる噴火モデルの高度化

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Okumura, S., Nakamura, M., Uesugi, K., Nakano, T., Fujioka, T., Coupled effect of magma degassing and rheology on silicic volcanism, Earth Planet. Sci. Lett., 362, 163-170, doi:10.1016/j.epsl.2012.11.056, 2013.
- Mujin, M., Nakamura, M., A nanolite record of eruption style transition, Geology, 42, 611-614, doi:10.1130/G35553.1, 2014.
- 中村美千彦, マグマ上昇過程の物質科学的研究, Japan Geoscience Letters, 11, 3-5, 2015.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
136,100 千円

【ホームページ等】

<http://epms.es.tohoku.ac.jp/arcmag/>
nakamm@m.tohoku.ac.jp



研究課題名 隕石中の難揮発性包有物の形成速度論に基づく太陽系最初期の物理化学環境解析

北海道大学・大学院理学研究院・教授

ゆりもと ひさよし
 本 尚義

研究課題番号： 16H06349 研究者番号： 80191485

研究分野： 地球宇宙化学

キーワード： 地球化学、宇宙化学、隕石、太陽系、原始惑星系

【研究の背景・目的】

太陽系形成の最初期に内側太陽系で高温ガスからの固体凝縮プロセスや加熱による固体溶融プロセスがあったことは、始源的隕石中の難揮発性包有物 (CAI や AOA) の存在から明らかである。惑星材料物質が経験したこの高温プロセスは、原始星や原始惑星系円盤の天文観測でも観測されておらず、その物理化学環境はいまだにはっきりとしない。

本研究では、難揮発性包有物の同位体岩石学・鉱物学的研究に、室内実験による難揮発性包有物の再現実験を組み合わせ、太陽系最初期の高温プロセスの物理化学環境を定量的に制約する。特に本研究により、原始惑星系円盤内縁領域の圧力条件、水蒸気分圧とガス/ダスト比が新規決定できることが期待される。

【研究の方法】

初期太陽系最初期高温プロセス (CAI, AOA 形成) の物理化学環境 (温度、圧力、水蒸気分圧) を隕石分析、室内実験を連携させて、定量的に決定する。具体的には次の研究を進展させる。

初期太陽系円盤を模擬した低圧低水蒸気圧力条件で CAI 組成メルトの結晶化実験・酸素同位体交換実験 ($H_2^{18}O$ を使用する) をおこない、天然の CAI の組織および酸素同位体分布 (鉱物内、鉱物間) を再現する水蒸気分圧条件を制約する。制約された水蒸気分圧条件を基に CAI 鉱物から推定される酸素分圧条件 (H_2O/H_2 比) を用いて、CAI 溶融場の全圧 (H_2 分圧にほぼ等しい) を定量的に求める。

凝縮 CAI にも含まれるメリライトの低圧 H_2-H_2O 雰囲気下での蒸発実験をおこない、蒸発による元素分別 (Mg, Si), Mg, Si の同位体分別、ならびに蒸発係数 (理想蒸発速度からのずれを表す無次元パラメータ) を決定する。蒸発係数は凝縮係数 (とオーダーでは等しいため、メリライトの蒸発係数を用いて、

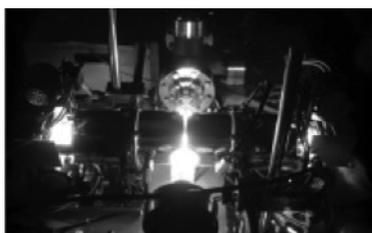


図 1 初期太陽系最初期高温プロセスを実験室内で再現する真空加熱炉

CAI の凝縮タイムスケールを温度、圧力の関数として決定する。同時に蒸発時の酸素同位体交換反応および結晶内の酸素同位体拡散係数も決定する。天然 CAI 中のメリライトに見られる元素ゾーニング、酸素同位体分布を制約条件とし、それらを再現しうる CAI 凝縮時間を見積もり、凝縮 CAI 形成場の温度、圧力条件、ダスト/ガス比を定量化する。

【期待される成果と意義】

太陽系最初期に高温プロセスがあったことはコンドライト研究から明らかであるが、その物理化学条件を統一的かつ定量的に制約した研究はない。ALMA 望遠鏡による高空間分解能、高感度での分子観測など天文観測も進んでいるが、近傍の原始惑星系円盤を ALMA で観測しても、木星軌道以内の空間分解はできず、隕石形成領域の高温環境を観測することはできない。実証的な制約は隕石からのみ可能である。申請者らのグループは隣の研究室であり、かつ、世界で唯一の同位体イメージング手法 (同位体顕微鏡) を用いた隕石分析で世界をリードし、世界に類のない高温低圧での初期太陽系条件化学反応実験でも世界をリードしている。これらを有機的に融合する本研究計画は極めて独創的な計画である、地球型惑星形成にいたる化学プロセスの初期条件が決定されることとなり。惑星形成論の初期条件に対し、実証的な制約となる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Kawasaki, N., Kato, C., Itoh, S., Wakaki, S., Ito, M. and Yurimoto, H. (2015) $^{26}Al-^{26}Mg$ chronology and oxygen isotope distributions of multiple melting for a Type C CAI from Allende. *Geochim. Cosmochim. Acta* **169**, 99-114.
- Takigawa A., Tachibana S., Nagahara H. and Ozawa K. (2015) Evaporation and condensation kinetics of corundum: The origin of the 13- μm feature of oxygen-rich AGB Stars. *Astrophys. J. Suppl.*, **218**, doi:10.1088/0067-0049/218/1/2.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
 140,700 千円

【ホームページ等】

<http://vigarano.ep.sci.hokudai.ac.jp>



研究課題名 特異な1~2次元反応場を用いた未踏ナノ物質の創製と機能開拓

名古屋大学・大学院理学研究科・教授

しのはら ひさのり
篠原 久典

研究課題番号：16H06350 研究者番号：50132725

研究分野：基礎化学

キーワード：カーボンナノチューブ、グラフェン、反応場

【研究の背景・目的】

本研究の目的は当研究グループが世界をリードする“ナノチューブとグラフェンの特異な1~2次元の反応場を利用した未開拓物質の創製と機能開拓”を包括的に発展・普遍化させることである。われわれは2008年、ピーポット（フラーレン内包ナノチューブ）の高効率合成方法を世界に先駆けて開発し、ナノチューブ内部の1次元空間ではバルク条件下では決して起こらない極めて特異な反応が誘起されることを見出した。また2014年、大面積単結晶の単層グラフェンを独自の化学気相成長法で合成することに成功し、2枚のグラフェンでサンドイッチされた空間は新規な2次元の反応場であることを実証した。本研究ではナノリボン、ナノワイヤ、ヘテロナノチューブや2次元原子層物質などバルクでは合成困難な新規物質のナノ反応場を用いた高効率合成法を確立し、構造と機能を調べることでナノサイエンスの進展に大きく寄与する基盤の創出を目指す。

【研究の方法】

カーボンナノチューブ（CNT）およびグラフェンサンドイッチ構造の内部の1~2次元ナノスペースの反応場を用いることにより、バルク条件下では合成が困難な未踏ナノ物質（主に、極小幅グラフェンナ

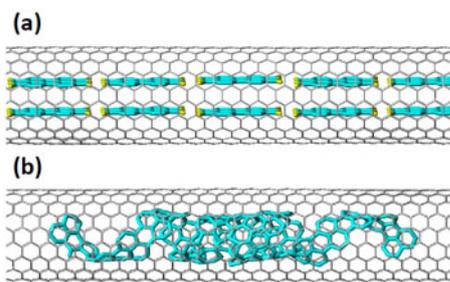


図1 CNT内部空間

ノリボン、ダイヤモンドナノワイヤ、単層BNチューブ、金属原子層物質、水超微粒子など）の創製を行う。この新合成法で重要な点は、(1) 高純度・高品質の単層および2層CNT、大面積・単結晶の単層グラフェンの使用；(2) 前段物質（分子、金属）の選択（上記のナノ物質にはそれぞれ、多環芳香族分子、ダイヤモンド（高次アダマンタン）、ホウ素・窒素化合物や金属を使用）；(3) 800~1,200℃での高温熱アニリングによる反応の促進；(4) 独自の溶液超音波抽出法を用いた未踏ナノ物質の抽出・単離と物

性測定、の4つである。実験方法を駆使して、未踏ナノ物質の創製と機能開発を系統的に行う。

また、2枚のグラフェン間の2次元ナノ空間には

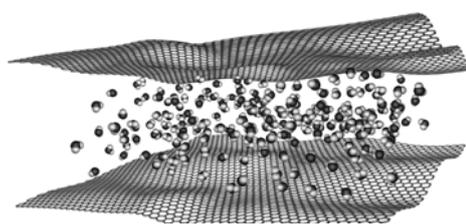


図2 グラフェンの2次元空間

比較的高い圧力が印加されている。このため、水や水溶液などの液体の超微粒子液滴も安定にグラフェンサンドイッチ構造にすることができ、HRTEMによって直接その構造や動的挙動をリアルタイムで観測・追跡できる。

【期待される成果と意義】

CNTや2層グラフェン内部で合成された1~2次元の新規ナノ物質の構造決定や電気・磁気的な物性測定と機能開拓は、物質科学やナノサイエンスへ革新的な進展をもたらし、将来的には現在のCNTやグラフェン電子デバイスを凌駕する高性能電子デバイスの創製へもつながるであろう。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- “Template Synthesis of Linear-Chain Nanodiamonds inside Carbon Nanotubes”
Y.Nakanishi *et al.*
Angew. Chem.Int.Ed. **54**, 10802-10806 (2015).
- “Core-Level Spectroscopy to Probe the Oxidation State of Single Europium Atoms”
L.H.G.Tizei *et al.*
Phys.Rev.Lett. **114**, 197602-1-5 (2015).

【研究期間と研究経費】

平成28年度—32年度
108,200千円

【ホームページ等】

<http://nano.chem.nagoya-u.ac.jp/noris@nagoya-u.jp>



研究課題名 高次構造を有するポリケチド系生理活性天然有機化合物の全合成研究

東京工業大学・理学院化学系・教授

すずき けいすけ
鈴木 啓介

研究課題番号：16H06351 研究者番号：90162940

研究分野：有機化学

キーワード：天然有機化合物、ポリケチド、複雑さ、多様性、二量化、ハイブリッド化

【研究の背景・目的】

天然物の多段階合成の歴史は、天然由来の分子の構造確認の役割に加え、未踏峰に挑むような知的挑戦から出発したが、長足の進歩により、かつて困難とされた分子でも合成が可能になり、今やルーチン化したと言うむきもある。しかし、今でも合成が困難である標的分子が多く存在し、特に生理活性天然物の中には稀少で、合成的供給が期待されるにもかかわらず、多数の不斉中心や官能基をもつ複雑精緻な構造（高次構造）により、合成の行く手が阻まれることもある。このことは、有機合成化学の一つの限界を示している。

本研究は“高次構造を有するポリケチド系生理活性天然有機化合物の全合成研究”と題し、II型ポリケチド生合成経路に由来する、複雑多様な構造（高次構造）を持つ生理活性物質の全合成に関するものである。その特徴は、生合成経路で高次構造が発現する過程に着目し、得られるヒントをもとに新たな合成反応や合成戦略の開発を目指す点にある。

具体的には、1) 鍵中間体の構造修飾、2) オリゴマー化、3) ハイブリッド化、の3つの過程に着目し、それらを有機合成的に実現することを試みる。本研究を通じて標的化合物群の合成経路を開拓し、有機合成化学の進歩に寄与することを目指す。

【研究の方法】

研究にあたり、我々は自然にヒントを求めた。すなわち、生合成過程における構造の複雑化、多様化が如何に起きているのか？という問いかけから、以下の三つの要因を認識した。まず、第一にある基本構造 **A** があり、その構造修飾により類縁体 **A₁**、**A₂**、**A₃**... となることである。第二には基本構造 **A** がオリゴマー化すること、第三に他の化合物類型 **B**、**C** と結合して複合構造 **A-B-C**... となることである。

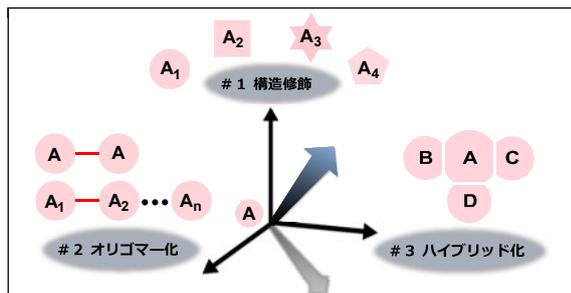


図1 天然有機化合物の分子多様性

【期待される成果と意義】

本研究の特色は、ポリケチド系生合成経路における構造高次化の過程に着目し、そこに新たな分子構築法の開発のヒントを求めることである。研究の進展により、それまで不可能であった複雑精緻な構造への道が開け、生命関連分野に意義ある成果が期待される。

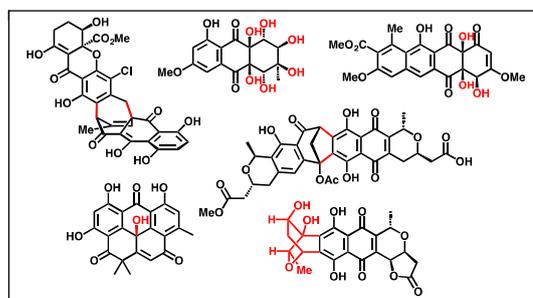


図2 合成標的の例

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- “Total Synthesis of the Antibiotic BE-43472B”, Y. Yamashita, Y. Hirano, A. Takada, H. Takikawa, K. Suzuki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 6658–6661.
- “Synthesis and Determination of the Absolute Configuration of Cavicularin by a Symmetrization/Asymmetrization Approach”, H. Takiguchi, K. Ohmori, K. Suzuki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 10472–10476.
- “Synthesis of the Pluramycins 2: Total Synthesis and Structure Assignment of Saptomycin B”, K. Kitamura, Y. Maezawa, Y. Ando, T. Matsumoto, K. Suzuki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 1262–1265.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
141,800 千円

【ホームページ等】

http://www.chemistry.titech.ac.jp/~org_synth



研究課題名 曲面状 π 共役分子の新しい有機化学と材料科学

京都大学・化学研究所・教授 やまご しげる
山子 茂

研究課題番号：16H06352 研究者番号：30222368

研究分野：有機化学

キーワード：有機合成化学、超分子、ナノカーボン材料

【研究の背景・目的】

フラーレン、カーボンナノチューブ (CNT) など曲面を持つ環状 π 共役化合物の多くは、優れた電気的特性や光物性を有し、有機電子材料の基盤物質群として興味深い。しかし、そのバルク量での入手は物理的合成法に限られるため、入手可能な基本骨格は大きく限られている。さらに、混合物として得られるため、煩雑な分離・精製が必要である。このため、分子設計に基づく機能・物性の精密化には限界がある。したがって、環状・曲面構造を持つ π 共役分子を自由にかつ選択的に合成し、大量に供給できれば、そのインパクトは計り知れない。

代表者は、アームチェア型 CNT の環状最小構成単位であるシクロパラフェニレン (CPP) に着目し、独自の合成法の開発により、大量合成法の確立に成功している。本研究では CPP 類の材料科学への応用を念頭に、新奇曲面 π 共役分子の高効率・大量合成法の開発を基礎として、得られた化合物の階層化による高次構造体の形成による機能化と、得られた化合物の基礎物性の測定を通じ、有機デバイスへの応用への発展を図る。これらの研究を通じ、曲面 π 共役分子の有機化学と材料科学の新領域を切り拓くことを目的とする。

【研究の方法】

本研究では主に以下の四項目について検討する。

- ①曲面 π 共役分子の合成：従来法の発展及び入手容易な CPP の変換法の開発により、 π 共役系を拡張、および官能基を導入した環状 π 共役分子群を合成する方法の開発を行う。
- ②曲面 π 共役分子の階層化：代表者が解明した CPP のホストゲスト化学や配位化学に基づき、①で得た分子をはじめとする環状 π 共役分子の階層構造の構築と機能化を行なう。

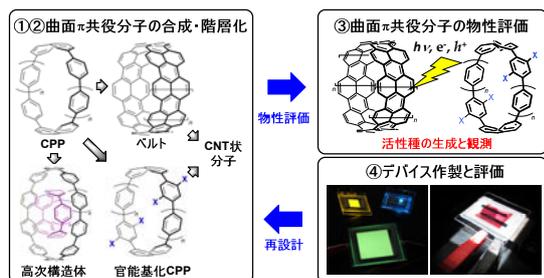


図 1. 主な研究の概要

- ③曲面 π 共役分子の物性評価：①②で得た分子の励起状態、酸化還元状態等の不安定状態の物性を、フラッシュフォトリスやパルスラジオリス等の時間分解分光法と理論計算を用いて明らかにする。
- ④デバイス作製と評価：CPP 誘導体を含む曲面 π 共役分子を有機デバイスに応用した例は皆無である。そこで理論と実験の両面から CPP の分子構造—凝集構造—物性間の相関を解明するため電荷輸送解析計算や電荷移動度の実測、凝集構造の解析を行なう。

【期待される成果と意義】

機能性材料創製の鍵分子である π 共役分子の物性向上のために、様々な官能基や置換様式を持つ分子が合成されている。このような研究では既存の母骨格の修飾も重要な研究課題であるが、新奇骨格・構造を持つ π 共役分子の創製はより大きな可能性を秘めた、基礎科学における極めて重要な課題である。本研究では、独創的な合成法と新奇性の高いホストゲスト化学に基づき、新しい曲面構造を持つ π 共役分子群と高次構造体を創出し、その基礎物性を解明すると共に、デバイスへの応用を目指す。これにより、有機化学の新分野の創出に加え、新しい有機電子材料の可能性を拓くことが期待され、材料科学分野にも強いインパクトを与えるものと確信している。さらに、これらの分子が材料として実用化されることで、社会にも大きく貢献できると考えている。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- “Organoplatinum-Mediated Synthesis of Cyclic π -Conjugated Molecules: Towards a New Era of Three-Dimensional Aromatic Compounds”, S. Yamago, *et al. Chem. Rec.*, **14**, 84-100 (2014).
- “Cycloparaphenylenes and carbon nanorings”, S. Yamago, *et al. Polycyclic Arenes and Heteroarenes: Synthesis, Properties, and Applications*, Qian, M. Ed., John Wiley & Sons Ltd, Chichester, UK, **2015**, pp143-162.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度—32 年度
145,600 千円

【ホームページ等】

<http://os.kuicr.kyoto-u.ac.jp/>
yamago@scl.kyoto-u.ac.jp



研究課題名 固体電気化学プロセスから発現する新しいエネルギーおよび情報変換

名古屋大学・大学院理学研究科・教授

あわが くにお
阿波賀 邦夫

研究課題番号： 16H06353 研究者番号：20202772

研究分野： 機能物性化学

キーワード： 電子物性、表面・界面、電気化学

【研究の背景・目的】

ユビキタスな物質や手法による新しいエネルギー変換や情報変換の実現は危急の課題である。2次電池や色素増感太陽電池などを研究対象としてきた固体電気化学だが、近年、電気2重層トランジスタや分子性2次電池の研究が急速に進展し、ますますその存在感を増している。本研究では、レドックス変化と電子およびイオン輸送が複合化された電気化学プロセスを、分子物性科学や有機エレクトロニクスに展開することによって、新しいエネルギー変換や情報変換の方法論を確立する。

【研究の方法】

本研究では、以下の3テーマを実行する。

【研究A】分子物性科学と固体電気化学の双方型研究：

対イオンのドーブ・脱ドーブサイクルの下でも、ポラス構造のために構造と結晶性を保持する「構造耐性」をもつ金属有機構造体 (MOF) や共有結合構造体 (COF) を合成し、2次電池の正極活物質あるいは正極活物質担持材としての特性を探る (図1)。物性科学で培われた物質群を固体電気化学にもち込む。その一方、固体電気化学を利用した新しい物性科学を展開する。すなわち、MOFや分子結晶、有機無機層状物質など、さまざまな系において電気化学的なバレンス制御を行い、これによって常磁性⇄強磁性スイッチングなどの新物性を開拓する。

【研究B】有機エレクトロニクスへの展開： 固液界面電気2重層が生み出す巨大電場は $\sim 10^9$ V/m ほどにも達する。本項目では、このような巨大局所電場を有機エレクトロニクスに応用して、トランジスタ機能や高効率光電変換を追及する。具体的には、イオン液体や有機強誘電体を絶縁層とする電気2重層トランジスタや、分極電流を生み出す新しい光電セルを発展させる。後者は、我々が独自に研究を進め

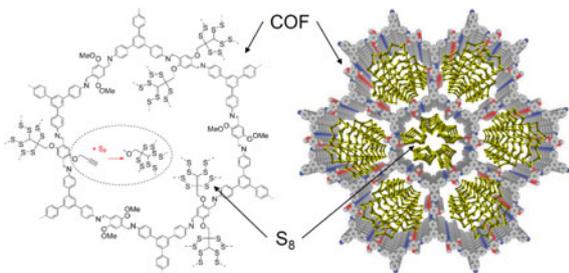


図1 COF骨格中にS₈分子を取り込み、硫黄2次電池の正極活物質として利用する。

ているもので、[電極1(M) | 電荷分離層(S) | 絶縁分極層(I) | 電極2(M)] (MISM光電セル) なる構造から、パルス光、チョップ光や変調光が、S層の電荷分離を経てI層の分極Pを時間変化させるときに生じる分極電流を高効率で取り出し、新しいエネルギーおよび情報変換機構として発展させる。

【研究C】固体電気化学 operando 計測と理論の発展：

研究A, Bを、足元を照らしながら計画的に進めるため、さまざまな固体電気化学 operando 計測と理論を発展させる。XAFS、XRD、固体NMR、磁化、電気伝導度を、電気化学反応進行下において試料を系外に取り出すことなく観測する。分子動力学 (MD) 法と量子化学計算を組み合わせることによって、固体電気化学プロセスを理解する理論を構築する。

【期待される成果と意義】

ユビキタス元素を用いた新しい分子性2次電池の発展、電気化学磁石や超伝導体、過渡光電流を用いたエネルギー変換や情報変換の発展が期待される。分子物性科学で培われたさまざまな物質を固体電気化学に新材料として提供する一方、電気化学の方法論によって新しい物性や有機エレクトロニクスを実現する。両者に Win-Win の関係を構築しながら、新しいエネルギー変換や情報変換の手法を確立する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- "Discovery of a "Bipolar Charging" Mechanism in the Solid-State Electrochemical Process of a Flexible Metal-Organic Framework," Z. Zhang, H. Yoshikawa and K. Awaga, *Chem. Mater.*, 2016, **28**, 1298.
- "Organic optoelectronic interfaces with anomalous transient photocurrent", L. Hu, X. Liu, S. Dalgleish, M.M. Matsushita, H. Yoshikawa and K. Awaga, *J. Mater. Chem. C*, 2015, **3**, 5122.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
143,000千円

【ホームページ等】

<http://advmat.chem.nagoya-u.ac.jp/>
awaga@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp



研究課題名 基質認識型・超強塩基性有機分子触媒の創製

東北大学・大学院理工学研究科・教授 寺田 まさひろ
真浩

研究課題番号：16H06354 研究者番号：50217428

研究分野：合成化学

キーワード：不斉合成、有機分子触媒、選択的合成、触媒設計・反応、反応場

【研究の背景・目的】

環境負荷の軽減を目的とした高度分子変換法の開発は、モノづくりの根幹を支える有機合成化学において最重要課題の一つとなっている。Brønsted 塩基は酸性プロトンを有する反応基質の活性化剤として多用されてきたが、多くの場合、強塩基性を備えたアルカリ金属やアルカリ土類金属などの金属塩が主流となってきた。一方、有機塩基は反応剤として有機変換反応に汎用されてはいるものの塩基性が充分でないため対象となる分子変換が限られていた。近年になって、超強塩基性を備えた有機分子が従来の有機塩基では成し得なかった分子変換において特異な反応活性を示すことが明らかにされ、脚光を浴びるようになってきた。しかし、こうした強塩基性金属塩あるいは超強塩基性有機分子による分子変換は、いずれも当量を用いることが前提となっており、触媒としての利用はこれまでほとんど関心が払われてこなかった。本研究は、Brønsted 塩基、なかでもこれまで触媒としての利用がほとんどなされていなかった超強塩基性有機分子に着目し、これらの触媒としての機能開拓を図るとともに、不斉認識や分子認識など基質認識能を付与した基質認識型・超強塩基性有機分子触媒の設計開発を目的とする。

【研究の方法】

ホスファゼンはそのコア構造であるイミノホスホランにイミノ基を介した共役系を導入することで極めて高い塩基性を示すことが知られている。このホ

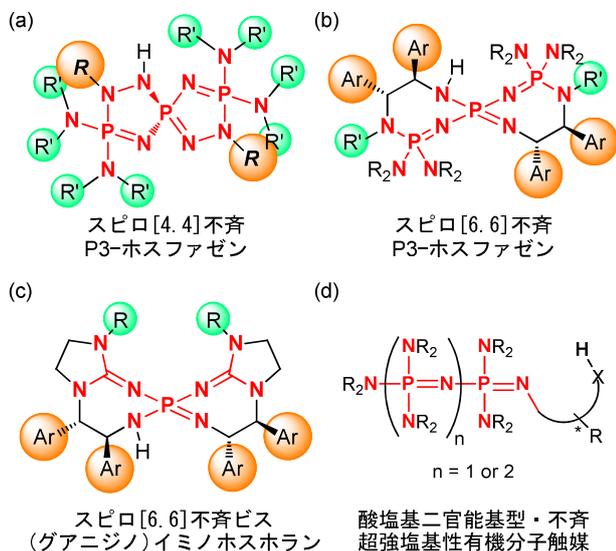


図1 基質認識型・超強塩基性有機分子触媒の設計開発

スファゼンに基質認識能を付与することで、本研究の目的である「基質認識型・超強塩基性有機分子触媒」の設計開発を目指す。イミノホスホランに効果的な基質認識能を付与しつつ超強塩基性を獲得するため、その両端にホスファゼン(図1a,b)もしくはグアニジノユニット(図1c)を二つ導入したC₂対称性を有する触媒分子群ならびに水素結合ドナーとなる酸性官能基を導入した酸塩基二官能基型の触媒分子群を開発する(図1d)。開発した「基質認識型・超強塩基性有機分子触媒」を用いて従来系では困難であった触媒反応系の開拓を計画している。また、量子化学計算によって、これらの選択性の発現機構ならびに触媒反応系を解析することで触媒分子設計および反応系構築の指導原理を確立する。

【期待される成果と意義】

高基質認識型・超強塩基性有機分子触媒の設計開発により、度分子変換に要求される「先例の無い触媒活性」「高い立体選択性」「回収再利用系の構築」を実現することで分子変換ひいてはプロセス化学にイノベーションをもたらす方法論の開発が期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- "Development of a Chiral Bis(guanidino)iminophosphorane as an Uncharged Organosuperbase for the Enantioselective Amination of Ketones" T. Takeda, M. Terada, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, *135*, 15306-15309.
- "Enantioselective Addition of a 2-Alkoxy carbonyl-1,3-dithiane to Imines Catalyzed by a Bis(guanidino) iminophosphorane Organosuperbase" A. Kondoh, M. Oishi, T. Takeda, M. Terada, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2015**, *54*, 15836-15839.
- "Construction of Vicinal Quaternary Stereogenic Centers by Enantioselective Direct Mannich-Type Reaction Using a Chiral Bis(guanidino) iminophosphorane Catalyst" T. Takeda, A. Kondoh, M. Terada, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, *55*, 4734-4737.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
143,500千円

【ホームページ等】

<http://www.orgreact.sakura.ne.jp/index.html>
mterada@m.tohoku.ac.jp



研究課題名 自由界面のトリガー効果に基づく高分子膜の増幅的変換プロセスの創出

名古屋大学・大学院工学研究科・教授 せき たかひろ
関 隆広

研究課題番号：16H06355 研究者番号：40163084

研究分野：機能高分子化学

キーワード：自由界面、高分子薄膜、光配向制御、形態誘起、モデリング

【研究の背景・目的】

我々は、これまで液晶性高分子薄膜を中心とした界面での光配向現象や形態制御について系統的な研究を行ってきた。ごく最近、液晶分子配向には空気界面の役割が極めて重要であること、高分子膜上に局所的に異種高分子を塗布し加熱することで大きな物質移動が誘起されることを見出した。本研究はこれらの最新成果に基づき、高分子膜の自由界面（空気側界面、表面）に焦点をあて、表面を起点（トリガー）とした増幅・増殖作用を伴って膜全体の構造、相状態、分子配向、表面形態が変化する諸現象の探索・理解と体系化をすすめる。本課題は、高分子化学系と高分子物理系の研究者が協働して研究を進め、液晶およびアモルファス高分子薄膜にかかる新たな変換・操作技術と光機能の創出を行うとともに、高分子膜表面にかかる物理の深化を行う。

【研究の方法】

自由界面での操作によって高分子膜自身を変換するプロセスに焦点を当て、化学的および物理的アプローチの両面から、液晶高分子膜およびアモルファス高分子膜を用いて諸現象の探索・解明および体系化を総合的に行う。化学的アプローチでは、光配向スイッチング（図1）、側鎖液晶変換、液晶フロントル重合等を行う。物理的アプローチでは、高分子膜表面へインクジェットにより局所塗布を行い、それで誘起される物質移動現象（図2）の系統的な把握と・解析を進める。研究の展開と波及効果に鑑み、単独グループの枠を超え、高分子化学系では兵庫県立大学、東京理科大学と、高分子物理系は名古屋大学ナショナルコンポジットセンターの研究者と共同して研究を進める。

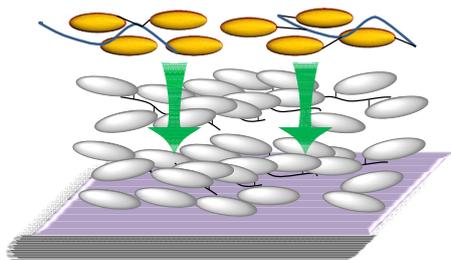


図1 自由界面から光を用いて液晶高分子の配向を制御する（模式図）

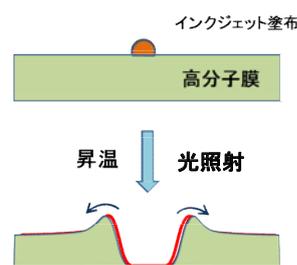


図2 高分子膜の自由界面に存在する異種高分子へテロ界面から誘起される物質移動（模式図）

【期待される成果と意義】

固体基板表面を用いて物質の状態を制御する手法に関しては膨大な研究の蓄積がある。しかし、空気側の自由界面側に着目する研究例はわずかであり、今が世界潮流の出発点である。

液晶デバイスの新たな配向法を提案するとともに、高分子膜の表面加工プロセスとしては、フォトリソグラフィ、CP、光表面レリーフ形成、応力による表面リンクル形成と異なる新たな加工技術を創出できるものと期待される。例えば、インクジェット印刷によって意のままのマイクロ流路作成や材料配向化が可能となり、微細加工技術や産業へと展開する可能性がある。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ K. Fukuhara, S. Nagano, M. Hara, T. Seki, Free-surface molecular command systems for photoalignment of liquid crystalline materials, *Nat. Commun.*, **5**, 3320 (2014).
- ・ T. Nakai, D. Tanaka, M. Hara, S. Nagano, T. Seki, Free surface command layer for the photoswitchable out-of-plane alignment control in liquid crystalline polymer films, *Langmuir*, **32**, 909-914 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成28年度～32年度
138,200千円

【ホームページ等】

<http://www.apchem.nagoya-u.ac.jp/06-BS-2/seki-labo/index-j.html>



研究課題名 人工遺伝子スイッチを用いた遺伝子発現の制御と機構の解明

京都大学・大学院理学研究科・教授 すぎやま ひろし
杉山 弘

研究課題番号： 16H06356 研究者番号： 50183843

研究分野： ケミカルバイオロジー

キーワード： 遺伝子発現制御、DNA ナノ構造体、機能性 Py-Im ポリアミド

【研究の背景・目的】

本研究は、エピジェネティックな遺伝子発現制御のメカニズムを、申請者らの研究グループが培って来た独自の分子科学的アプローチにより総合的に解明し、それを応用しようというものである。

第一に、DNA の配列特異的な結合分子である Py-Im ポリアミドにエピジェネティックな遺伝子発現の活性化機能を付与し、体細胞の初期化や、iPS 細胞を特定体細胞へ分化させることを目指す。

第二に、遺伝子発現制御に連動する DNA 自身やヌクレオソームの高次構造の変化について、これらを 1 分子レベルで可視化し、動的な状態を解析する技術を確認する。これら 2 つのアプローチで研究を両輪のように進めることにより、エピジェネティックな遺伝子発現制御の機構を分子レベルで解明し、人工遺伝子スイッチの実現を目指す。

【研究の方法】

Py-Im ポリアミドによる遺伝子活性化と DNA フレームを用いた一分子観察法これらを組み合わせることで、遺伝子発現機構の解明に必要な動的構造変化を観測し分子機構を理解し、応用として人工遺伝子スイッチによる体細胞の初期化や、iPS 細胞から目的とする細胞への分化の誘導を検討する。具体的には、下記の 5 つの研究テーマを集中的に遂行する。

- 1) 体細胞から初期化を効率的に誘導する機能性 Py-Im ポリアミドの開発
- 2) iPS 細胞から様々な組織細胞の分化を効率的に誘導する機能性 Py-Im ポリアミドの開発

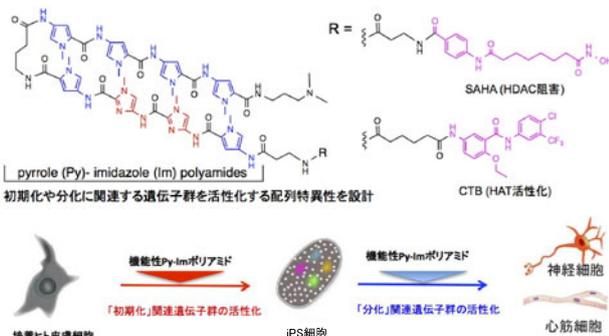


図 1 機能性 Py-Im ポリアミドの構造と機能

- 3) 三重鎖やグアニン四重鎖構造の転写への影響の検討と、これらを特異的に認識する機能分子による遺伝子発現の特異的制御
- 4) 原子間力顕微鏡(AFM)による分子の挙動や状態をリアルタイムで直接可視化、解析可能にする 1 分子測定技術の確立
- 5) ヌクレオソーム分子の動的挙動や相互作用の解析による遺伝子発現機構の解明

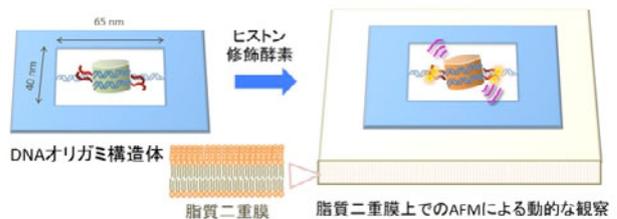


図 2 DNA ナノ構造体による 1 分子解析技術

【期待される成果と意義】

この研究の進展によって、体細胞の初期化や iPS 細胞からの分化誘導が可能になれば、将来的には現在も治療法がない先天性遺伝疾患や癌に対する治療にも応用が期待できる。さらに 1 分子測定技術の改良を進めることで、重要課題である遺伝子発現機構の解明を実現する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Suzuki, Y.; Endo, M.; Sugiyama, H. *et al.*, *Nature Commun.*, **2015**, *6*, 8052.
- Suzuki, Y.; Endo, M.; Sugiyama, H. *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 211-218.
- Pandian, G. N.; Taniguchi, J.; Sugiyama, H. *et al.*, *Sci. Rep.* **2014**, *4*, 3843.
- Han, L.; Pandian, G. N.; Sugiyama, H. *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 13410-13413.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
133,700 千円

【ホームページ等】

<http://kuchem.kyoto-u.ac.jp/chembio/>

【基盤研究(S)】
理工系(工学)



研究課題名 原子配列の秩序性に基づく材料強度科学研究基盤の創成と材料強度劣化損傷因子の解明

東北大学・大学院工学研究科・教授 **みうら ひでお**
三浦 英生

研究課題番号：16H06357 研究者番号：90361112
 研究分野：工学
 キーワード：ナノマイクロ材料力学

【研究の背景・目的】

本研究においては、地球温暖化防止対策に資する次世代エネルギー機器の高効率化に不可欠な、機器動作環境の過酷化（高温高負荷化）に起因して生じる構造材料の強化微細組織のナノスケールでの崩壊過程の可視化技術と、高温強度劣化過程の測定技術の開発を目的とする。これにより機器の安全・安心動作を保証する、エネルギー機器の残存寿命予測評価技術の高度化を目指す。特に原子配列の秩序性の変化に伴う材料強度の劣化という視点に基づき、ひずみ誘起異方的増速拡散現象に基づく、原子空孔や不純物原子などの点欠陥や転位の運動に代表される線欠陥の発生・増殖による原子配列の秩序性の変化を可視化するとともに、その原子配列の秩序性の変化と材料強度物性の相関性を解明する「材料強度科学」という新たな学術基盤の創成を目指す。

【研究の方法】

本研究では、多波長レーザ光源を用いた走査型レーザ顕微鏡観察環境における微小強度試験片を用いた高温疲労・クリープ重畳負荷試験を実施し、各種エネルギーあるいは航空輸送機器等で使用される耐熱合金の強化組織の崩壊（消失）メカニズムを、構成元素のひずみ誘起異方的増速拡散現象という視点で定量的に解明する計測・評価システムを開発する。多波長レーザ光を試験片表面で走査し、その反射強度分布変化から個別元素拡散を可視化するシステムを開発するとともに、原子配列の秩序性という概念を導入し、材料の損傷を従来の転位論に基づく塑性変形に限定せず、特定元素や原子空孔の異方的な拡散や局所的なひずみ場の影響などを統合的に評価す

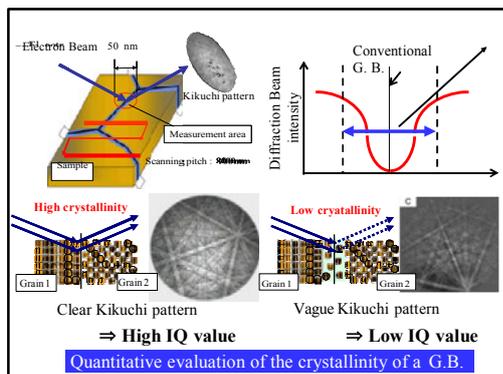


図1 原子配列の秩序性評価

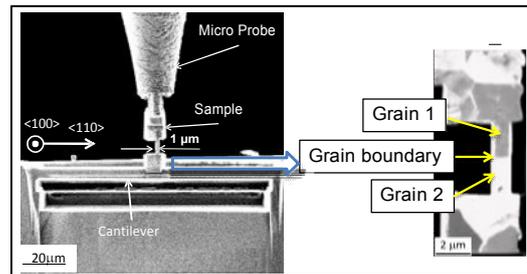


図2 電子顕微鏡内単一結晶・結晶粒界強度評価システム

る。また、走査型プローブ顕微鏡、電子顕微鏡内も併用できる微小試験片を用いた高温強度試験設備をシステム化し、材料組織と強度劣化機構を定量的に繙く破壊予知と破壊防止技術を確立する。

【期待される成果と意義】

電子線回折を応用した原子配列の秩序性評価に基づく結晶品質と材料強度特性の相関性評価は申請者等が提案した新手法であり、既に後述する挑戦的萌芽研究(H24-25年度)でその新規性や有効性は実証済みである。また、多波長レーザ光を用いた大気中強度試験環境における元素拡散測定技術も申請者等の独自の発案と考えており、材料の高温初期損傷評価技術が開発されれば、汎用性の高い材料強度信頼性評価技術への展開も期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Naokazu Murata, Naoki Saito, Kinji Tamakawa, Ken Suzuki, and Hideo Miura, JOURNAL OF ELECTRONIC PACKAGING, vol. 137 (3), (2015), pp. 031001~031008.
- Suzuki, K., Murata, N., Saito, N., Furuya, R., Asai, O, and Miura H., JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, vol. 52, (2013), pp. 04CB01-1~04CB01-8.

【研究期間と研究経費】

平成28年度～32年度
 80,800千円

【ホームページ等】

<http://www.miura.rift.mech.tohoku.ac.jp>
hmiura@rift.mech.tohoku.ac.jp



研究課題名 高精度形状可変ミラー光学系の構築と
X線自由電子レーザーのアダプティブ集光

大阪大学・大学院工学研究科・教授 **やまうち かずと**
山内 和人

研究課題番号：16H06358 研究者番号：10174575
研究分野：機械工学
キーワード：精密加工、精密計測、X線光学

【研究の背景・目的】

回折限界での動作が可能な X 線集光光学系は第 3 世代放射光光源や X 線自由電子レーザー (XFEL) の高度利用に不可欠である。我々は、精密ミラー開発の立場から X 線光学系の高度化に携わり、これまでに世界最小の 7nm 集光や日本の XFEL(SACLA)のナノ集光を実現した。これらの光源では、ビームサイズの可変機能が実現することによって、更なる高度利用が可能な状況にある。

そこで、本研究では、超精密加工学や計測学、波動光学にもとづく X 線光学などの精密工学を駆使して XFEL が有するコヒーレント光としての性能をフルに利用できる形状可変ミラーを実現し、世界に先駆けて回折限界での動作が可能なズームコンデンサーを実現する。また、利用研究者と連携したフィジビリティ試験を必要に応じて実施し、放射光科学に具体的に貢献することを目標とする。

【研究の方法】

XFEL をフルに活用するために必要なビームサイズ可変アダプティブ集光を回折限界の条件で実現するため、反射 X 線の波面誤差が $\lambda/4$ 以内 (レーリー基準、 λ は利用 X 線の波長) となる超精密非球面ミラーの創成技術を確立し、さらに、ピエゾ素子駆動によって反射面形状のその場での変更が可能なアダプティブミラーを実現する。並行して、ピエゾ素子のドリフト制御法など、ミラー形状制御システムを高度化するとともに、ビームサイズを変更する際の光学パラメータの調整に不可欠な X 線波面のその場観察法 (At-wavelength 法) の開発を行う。そして、これらの基盤的な技術の確立を経て、形状可変ミラーによる 2 段集光光学系 (回折限界動作可能なズームコンデンサー光学系) を実現する。同時に放射光科学への真の貢献を目指して、放射光施設でのフィジビリティ試験を適宜実施する。

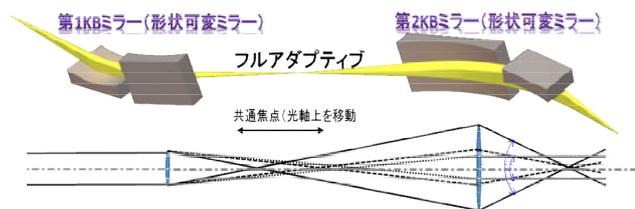


図1 ズームコンデンサー光学系の概要

【期待される成果と意義】

XFEL 利用研究は、現在のところ日本と米国の 2 極で進められ、激しい競争が展開されている。集光光学系の性能は SACLA が秀でており、X 線非線形光学などの展開において世界をリードしている。この間に、XFEL の利用研究の幅を大きく広げるアダプティブ光学系を世界に先駆けて実現し、SACLA でしかできない実験環境を確立する意義は極めて大きい。

また、本研究は X 線の集光光学系において真の補償光学を世界に先駆けて展開するものである。その意義は XFEL 利用分野に限定されるものではなく、X 線光学一般の学術的な進展に極めて大きな貢献が期待できる。さらに、X 線光学素子開発を目的に培った超精密加工・計測技術の更なる高度化は、日本が得意とする光学加工 (Optical Fabrication) 技術の将来に亘っての発展に大きく貢献する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- S. Matsuyama, H. Nakamori, T. Goto, T. Kimura, K. P. Khakurel, Y. Kohmura, Y. Sano, M. Yabashi, T. Ishikawa, Y. Nishino K. Yamauchi, Nearly diffraction-limited X-ray focusing with variable-numerical-aperture focusing optical system based on four deformable mirrors, Scientific Reports 6, 24801 (2016)
- K. Yamauchi, M. Yabashi, H. Ohashi, T. Koyama, and T. Ishikawa, Nanofocusing of X-ray free electron lasers by grazing-incidence reflective optics. Journal of Synchrotron Radiation, 22 (2015) 592-598
- H. Mimura, H. Yumoto, S. Matsuyama, T. Koyama, K. Tono, Y. Inubushi, T. Togashi, T. Sato, J. Kim, R. Fukui, Y. Sano, M. Yabashi, H. Ohashi, T. Ishikawa, and K. Yamauchi, Generation of 1020 W/cm² Hard X-ray Laser Pulses with Two-Stage Reflective Focusing System, Nature Communications, 5 (2014) 3539

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
141,800 千円

【ホームページ等】

<http://www-up.prec.eng.osaka-u.ac.jp/>



研究課題名 量子ドットによる光電スピン情報変換基盤の構築

北海道大学・大学院情報科学研究科・教授

むらやま あきひろ
村山 明宏

研究課題番号：16H06359 研究者番号：00333906

研究分野：電子・電気材料工学

キーワード：電気・電子材料(半導体、磁性体)、薄膜・量子構造、作成・評価技術

【研究の背景・目的】

温度に依存しないレーザ発振特性など優れた光学特性を示し超低消費電力光デバイスへの応用が期待される III-V 族化合物半導体量子ドットに対して、室温で動作可能な金属強磁性体電子スピン電極から、電子スピンを電流輸送し注入する。量子ドットでは電子のスピンの緩和時定数が発光減衰時定数より十分長いという利点があるため、量子ドットに注入された電子のスピンの偏極状態は、光電変換過程において発光の円偏光特性に直接、情報メディア変換される。

本研究では、量子ドットの結合励起状態を活用した超高速電子スピン注入と半導体誘電バリア層中のスピンの輸送などを研究し、電子スピン情報を円偏光に変換するスピン偏極発光ダイオード(図1)を作製していく。また、電子スピンと円偏光の結合共振器ナノ構造や、円偏光増幅レーザと円偏光受光スピン偏極ダイオードに関する基礎特性も研究する。

これらにより、将来的に電子スピン情報の光インターコネクションを目指す、量子ドットによる光電スピン情報変換システムの基盤を構築していく。

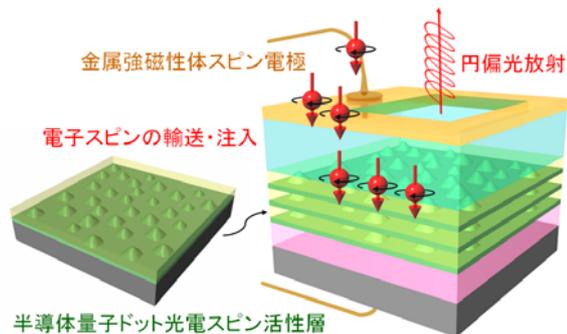


図1 量子ドットを用いる光電スピン変換素子の模式図

【研究の方法】

実用光デバイス材料である III-V 族化合物半導体量子ドットに対して、室温動作が可能な金属強磁性体スピン電極から、スピン偏極電子を輸送注入する。特に、量子ドットを用いた光電スピン変換活性層において、これまで研究を行ってきた二次元電子系との結合構造(図2)を活用することにより、電子スピンの高効率捕獲とピコ秒領域の超高速スピン注入を実現する。また、半導体バリア層における電流スピン輸送の研究を行い、電子スピン状態の円偏光への変換効率を高めつつ室温動作を目指すスピン偏極発光ダイオードの研究を推進する。このため、量子ド

ットに対する注入操作と注入後の電子スピン状態の熱的安定性に関する研究を行い、その結果を基にした結合量子ドット構造を設計作製していく。また、電子スピンと円偏光電場の結合を高めるための光共振器ナノ構造を作製するとともに、円偏光を増幅可能なレーザ素子や円偏光を電子スピン情報に変換するための円偏光受光スピン偏極ダイオードの基礎特性に関する研究も行っていく。

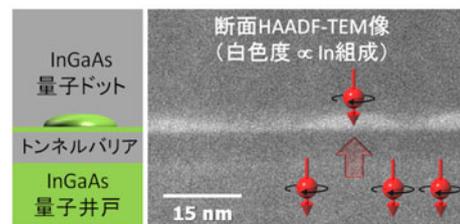


図2 二次元電子系と結合したトンネルスピン注入型 InGaAs 量子ドットの模式図と断面 TEM 写真

【期待される成果と意義】

電子スピン電極と接続する二次元電子系からゼロ次元量子点へのスピン波動関数の時空間連続性や熱浴との相互作用によるエネルギー緩和は、量子ドットへの電子スピンの輸送注入において本質的であり、物質科学の重要な知見となる。また、本研究の成果として期待される室温で動作可能な光電スピン情報変換機能により、これまで基礎的な研究に留まっていた半導体光スピントロニクスへの応用が可能になる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ X.j. Yang et al., "Ultrafast spin tunneling and injection in coupled nanostructures of InGaAs quantum dots and quantum well", Applied Physics Letters **104**, 01240:1-4, 2014.
- ・ T. Yamamura et al., "Growth-temperature dependence of optical spin-injection dynamics in self-assembled InGaAs quantum dots", Journal of Applied Physics **116**, 094309:1-7, 2014.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
142,500 千円

【ホームページ等】

<http://www.ist.hokudai.ac.jp/labo/processing/murayama@ist.hokudai.ac.jp>



研究課題名 非線形誘電率顕微鏡法を用いた界面電荷輸送現象における諸問題の起源解明

東北大学・電気通信研究所・教授

ちょう やすお
長 康雄

研究課題番号： 16H06360 研究者番号： 40179966

研究分野： 電気電子工学

キーワード： 走査型非線形誘電率顕微鏡、界面電荷輸送現象、局所 DLTS 法

【研究の背景・目的】

界面電荷輸送現象における諸問題の起源解明のため、新規多機能・高性能走査型非線形誘電率顕微鏡 (SNDM) 群を開発する。具体的には局所 DLTS 法が行える SNDM 装置、走査型非線形誘電率常磁性共鳴顕微鏡 (SNDMR) 法を新規に開発する。また近年開発してきた走査型非線形誘電率ポテンシオメトリ (SNDP) 法や、原子分解能を有する非接触走査型非線形誘電率顕微鏡 (NC-SNDM) 法及び超高次走査型非線形誘電率顕微鏡 (SHO-SNDM) 法の更なる高度化を図り、それらを総て組み合わせ、実際に種々の界面に適用し計測・分析を行い、移動度低下の原因となっている界面状態密度や散乱源の起源を明らかにする。今回開発される手法を有効に活用し、半導体 MOS 界面やグラフェン/SiC の移動度低下の原因を特定し、半ば永遠の工学的問題とされて来た問題を一挙に解決する。ひいては界面 (表面) を使った半導体デバイスや伝導デバイスの性能を飛躍的に向上させる。

【研究の方法】

第一段階として、電子デバイスにおける電荷輸送の諸問題解決の為、観測手段としての SNDM 装置群の高度化、新規開発、更には起源解明用の新規 SNDM 装置の開発を行う。

具体的には、

- ① SHO-SNDM 法の更なる高度化
- ② 原子分解能 NC-SNDM 法並びに SNDP 法の高度化
- ③ 局所 DLTS 法の開発
- ④ SNDMR 法の研究開発を行う。

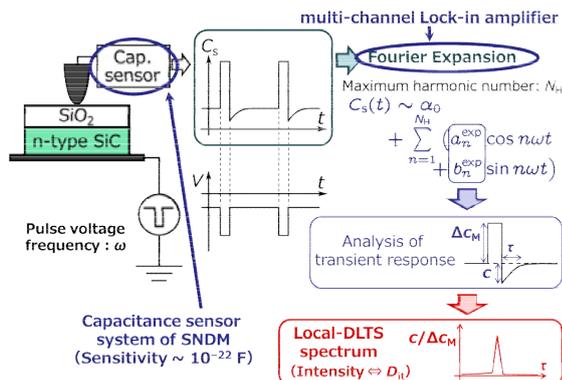


図1 提案する局所 DLTS 法 の概念図

その後、これらの SNDM 装置群を有効に組み合わせ、実際に種々の具体的な界面 (SiO₂/SiC, HfO₂/Si, グラフェン/SiC 等、何れも界面移動度が理論値より悪い。) に適用し、計測・分析を行うことにより移動度低下の原因となっている界面準位や散乱源の起源を明らかにする。

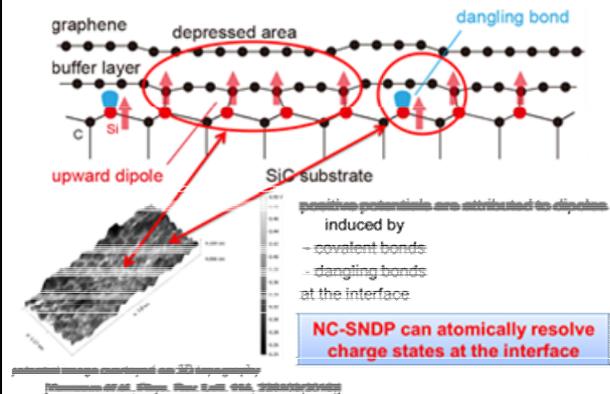


図2 グラフェン/SiC 界面の予備的観測結果

【期待される成果と意義】

今回の研究で開発される手法が有効に活用でき、半導体 MOS 界面やグラフェン/SiC の移動度低下の原因を特定できれば、多くは古くから解決できず半ば永遠の課題として諦めに近かった電子工学上の問題を一挙に解決する事につながり、ひいては界面 (表面) を使った半導体デバイスや伝導デバイスの性能が飛躍的に向上する事につながる。一見地味な研究に見えるがその波及効果は大きく、全世界の半導体業界のかなりの部分に福音をもたらすと考えられる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ K. Yamasue and Y. Cho, Rev. of Scientific Instrum., Vol.86 (2015) pp. 093704-1-8
- ・ N. Chinone, T.Nakamura and Y. Cho, "J. Appl. Phys., Vol.116 (2014) pp.084509-1-7.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
149,700 千円

【ホームページ等】

<http://www.d-nanodev.riec.tohoku.ac.jp/>
yasuocho@riec.tohoku.ac.jp

研究課題名 二次元原子薄膜ヘテロ接合の創製とその新原理テラヘルツ光電子デバイス応用



東北大学・電気通信研究所・教授 おつじ たいいち
尾辻 泰一

研究課題番号: 16H06361 研究者番号: 40315172

研究分野: 工学、総合理工

キーワード: 電子デバイス、量子デバイス、ミリ波・テラヘルツ波、グラフェン、ナノ構造物性

【研究の背景・目的】

テラヘルツ(THz)波帯は、多くの産業応用が期待される未開拓電磁波帯である。従来の光電子デバイスは、電子走行効果やフォノンデコヒーレンスという本質的な物理限界に律速され、動作が困難である。そのような中、炭素原子の単層シート:グラフェンは、電子・正孔が極限的輸送特性を有する相対論的 Dirac 粒子として振る舞い、研究進展が著しい。

一方、h-BN 絶縁体や MoS₂ 等の遷移金属ジカルコゲナイド(TMD)半導体等の van der Waals (vdW)層状物質が、グラフェンと不活性なヘテロ接合材料として注目されている。我々は、h-BN トンネルバリア層をグラフェンで挟んだゲート制御グラフェン二重層(G-DGL)において、THz フォトン・プラズモンの発光・吸収が共鳴トンネルをアシストし、従来より桁違いに高い量子効率で THz 波の増幅・発振・検出・非線形波動制御が可能なることを理論的に発見し、一部機能の試作検証に成功している。工学的応用発展の鍵は連続ヘテロエピタキシー技術の実現にある。

本研究は、連続ヘテロエピタキシーによる二次元原子薄膜ヘテロ接合をプラットフォームとして創製し、二次元原子薄膜ヘテロ接合系に特徴付けられた電子・フォトン・プラズモン・フォノンが関わる複合量子系に現れる新奇な物理現象を動作機構として導入し、THz 波領域での増幅・発振・検出・非線形波動制御の各機能を、従来の材料・物理機構が果たし得なかった極めて高いエネルギー効率で実現し得るデバイスを創出することを目的とする(図 1)。

【研究の方法】

まず、絶縁体や半導体もしくは両者の積層からなるトンネルバリア薄膜をグラフェンでサンドウィッチした DGL コアシェルと外部ゲートからなる G-DGL 構造をプラットフォームとして創製する(図 2)。

グラフェン二重層 vdW ヘテロ接合 THz信号処理

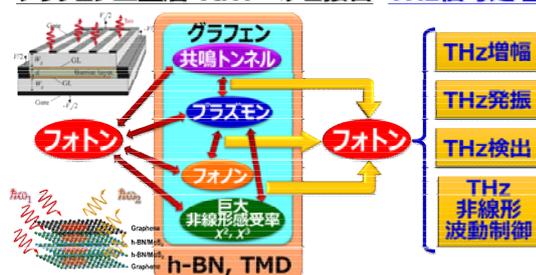


図 1 研究の目的: G-DGL vdW ヘテロ接合に発現する非線形複合量子効果とその THz デバイス応用。

平行して、第一の物理機構としてフォトンアシスト共鳴トンネル効果を G-DGL に導入し、THz 波増幅・検出の各機能性能の従来素子に対する優位性を明らかにする。次に、第二の物理機構としてプラズモンアシスト共鳴トンネル効果を G-DGL に導入し、その THz 帯利得増強・検出感度増強効果を明らかにする(図 2)。さらに、第三の物理機構としてグラフェンプラズモンとトンネル現象との二重共鳴を導入し、THz 波増幅・検出・発振・非線形波動制御の各能力の格段の向上に挑む。

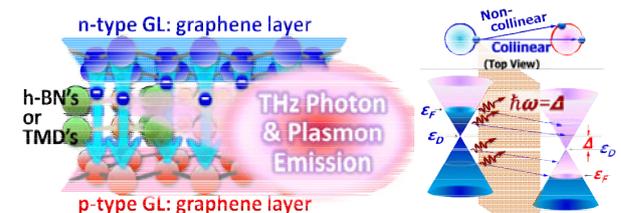


図 2 研究の手段: G-DGL とそのフォトン・プラズモン発光アシスト共鳴トンネル現象。

【期待される成果と意義】

フォトン・プラズモンを介在させて GL 間の量子力学的トンネル効果を変調するという全く新しい物理機構によって、フェルミ面のみならず全ての過剰キャリアが寄与し得る圧倒的に高い量子効率を実現できる点が独創的かつ革新的成果として期待される。

本研究が成功すれば、100Gbit/s 級超高速 THz 無線、瞬時に超大容量メディア転送可能な Transfer-Jet など、将来のコピキタス通信に産業革命をもたらすことが期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- T. Otsuji, V. Popov, and V. Ryzhii, "Active graphene plasmonics for terahertz device applications," *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, 094006 (2014).
- V. Ryzhii, A.A. Dubinov, T. Otsuji, V.Ya. Aleshkin, M. Ryzhii, M. Shur, "Double-graphene-layer terahertz laser: concept, characteristics, and comparison," *Opt. Exp.* **21**, 31569-31579 (2013).

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
144,600 千円

【ホームページ等】

<http://www.otsuji.riec.tohoku.ac.jp>



研究課題名 安全良質な水の持続的供給のための
革新的前処理－膜分離浄水システム

北海道大学・大学院工学研究院・教授

まつい よしひこ
松井 佳彦

研究課題番号： 16H06362 研究者番号：00173790

研究分野： 工学、土木環境システム

キーワード： 用排水システム

【研究の背景・目的】

水問題解決のために、低質な水資源を低コスト・低消費エネルギーで、安全・安心な水として利用するための、維持管理が容易な高度水供給技術が求められています。本研究は、ナノ粉碎技術による吸着剤の超微粒子化と細孔表面制御、多価金属塩の準安定領域を応用した高分子技術による凝集剤の高機能化、真空紫外線促進酸化を水処理技術へ応用し、これらを統合し、さらに膜分離前処理に展開することで、劣化した原水水質にも対応可能な、高い分離・分解能力を有する低消費エネルギー・低コストの先端的水浄システムを創出します。

【研究の方法】

要素研究として、吸着、凝集、酸化の水処理プロセスの根幹をなす資機材の高機能化から研究に取り組み、資機材を試作し、直接計測とモデル推定を並行して行うなど多角的な評価法を用い基本特性を評価し、さらに、バッチ実験とラボスケール小型膜ろ過プラント実験で要素技術の総合によるシナジー効果を検討します(図1)。さらに、各要素処理技術を組み込んだパイロットプラントを運転し、新規に開発される吸着、凝集、酸化プロセスの実施設への適用を図ります。

①微粉碎法により超微粒子活性炭の製造を試みるのと同時に(図2)、粒子の集塊性や吸着容量低下、使用済み粒状炭の超微粉碎による再利用を検討して行きます。②反応温度などの製造条件を最適化することにより、膜ろ過における膜ファウリング原因のバイオポリマーやヒ素、ウイルスなどの除去性をさらに高めた超高塩基度凝集剤を製造します。③多様な波長の真空紫外線やLED紫外線を適用したOHラジカル促進酸化反応で難分解性物質の分解や凝集性改善に与える影響を検討します。④超微粒子活性炭や超高塩基度凝集剤と膜との親和性やファウリング性や残留性などを検討し、膜分離や沈澱+砂ろ過へ応用展開します。



図1 研究計画

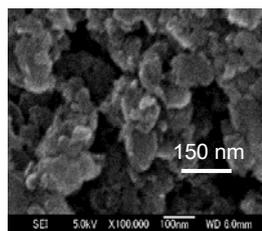


図2 超微粉炭

【期待される成果と意義】

超微粒子活性炭・超高塩基度凝集剤・紫外線促進酸化とそれらの要素技術間と膜分離が統合されることで、分離・質変換処理に対して技術革新をもたらします(例 図3)。低質の原水にも対応可能で、低消費エネルギー・低コストの革新的浄水システムが創出され、学術的基盤の明確な技術として成果が社会へ還元されます。このことは、日本における安全な飲料・生活用水の安定供給に大きく貢献できることを意味します。さらにより深刻な水問題に直面する諸外国に対し、多様な課題解決策を提示可能となり、国際的なリーダーシップの発揮、水ビジネスの国内外への展開の支援に寄与します。

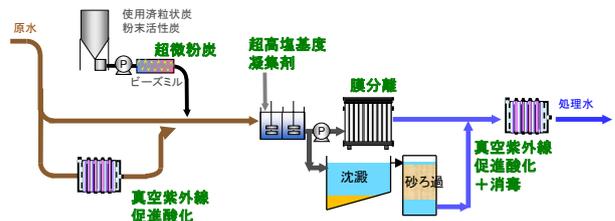


図3 超微粉炭+超高塩基度凝集剤+促進酸化+膜分離

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Kimura, M., Matsui, Y., Kondo, K., Ishikawa, T.B., Matsushita, T. and Shirasaki, N., Minimizing residual aluminum concentration in treated water by tailoring properties of polyaluminum coagulants, Water Research, 47(6), 2075-2084, 2013.
- Matsui, Y., Yoshida, T., Nakao, S., Knappe, D. and Matsushita, T., Characteristics of competitive adsorption between 2-methylisoborneol and natural organic matter on superfine and conventionally sized powdered activated carbons, Water Research, 46(15), 4741-4749, 2012.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
100,800千円

【ホームページ等】

<http://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/risk/>



研究課題名 歴史的建造物のオーセンティシティと耐震性確保のための保存再生技術の開発

名古屋市立大学・大学院芸術工学研究科・教授

あおき たかよし
青木 孝義

研究課題番号：16H06363 研究者番号：10202467

研究分野：建築学、建築構造・材料、建築環境・設備、建築史・意匠

キーワード：歴史的建造物、オーセンティシティ、耐震性、保全技術、保存・再生

【研究の背景・目的】

国内外で大規模地震が頻発しており、文化財・近代化遺産建造物を含む歴史的建造物が被災し、その修復・補強が急務となる一方、有効な対策・方法は確立されていない。そのため、組積造や鉄筋コンクリート造(RC造)の歴史的建造物の修復・補強は、その良否の判断基準が不明確なものも含め、専ら個別対応されてきた。

本研究は、組積造や今後増大するRC造の登録有形文化財の保存活用に対応するため、個別対応から普遍的な課題を抽出するとともに、各国が蓄積してきたノウハウを統合し、実験的・解析的に検証することで、歴史的建造物の調査・診断・修復・補強方法に関する技術を確立することを目的としている。また、文化財・近代化遺産建造物の保全に資する高度な資料・ガイドラインを作成するとともに、オーセンティシティを確保しつつ耐震性・耐久性を確保するための保存再生技術の開発を目的としている。



RC 飛行船格納庫(1917) 半田赤レンガ建物(1898)

【研究の方法】

- 1)過去になされた文化財・近代化遺産建造物を含む歴史的建造物の調査・診断・修復・補強事例を系統的に整理し、普遍的な課題を抽出するとともに問題点を明らかにする。
- 2)国内外の歴史的建造物の調査研究を通して、劣化現象と修復方法を整理し、調査・診断・補修・補強方法の問題点(課題)を明確にする。
- 3)上記1)、2)に基づき、耐久性向上技術と補強技術について、補強効果、施工精度、景観、耐久性、傷害程度、オーセンティシティ、可逆性、経済性などの観点から評価を行う。
- 4)光学的計測技術や削孔ドリル法、ASTM、RILEM TC 127-MSで規定されているフラットジャッキ、微動観測やモニタリングなどの非破壊・微破壊検査技術を組積造・RC造の歴史的建造物に適用し、その有効性や適用範囲を評価、検証する。

- 5)材料の劣化現象、特に塩析出による劣化原因と実態の把握のため、内外の環境計測、材料の水分状態の計測、塩の採取分析、材料の水分移動特性を測定する。
- 6)材料の化学的分析や材料実験により、材料の劣化メカニズムと将来予測、劣化抑制材料や表面保護の方法を検討し、補修材料の暴露試験や促進耐候性試験に基づく有効な補修方法を提案する。
- 7)モニタリングにより補修・補強効果を検証する。
- 8)劣化現況調査・診断と環境実験・材料実験・構造実験、構造解析による構造特性・耐震性能の評価、モニタリング結果に基づき、オーセンティシティを確保した上での具体的な材料の補修や構造補強方法の提案(開発)とガイドラインを作成する。

【期待される成果と意義】

歴史的建造物のオーセンティシティと耐震性・耐久性確保のための保存再生技術の開発により、歴史的建造物の継承に役立つ。また、得られた研究成果は、今後増大することが明らかなコンクリート系のインフラストック、既存の建築ストックなどの有効活用にも活かされる。加えてPML(予想最大損失額)評価とそれに基づくBCP(事業継続計画)の策定により、「事後対策」技術の進化・深化が「予防保全」措置へのインセンティブになることが期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・D. Sabia, T. Aoki, R. Cosentini, R. Lancellotta, Model Updating to Forecast the Dynamic Behavior of the Ghirlandina Tower in Modena, Italy, Journal of Earthquake Engineering, Vol.19, Issue 1, pp.1-24, 2015.
- ・T. Aoki, N. Yuasa, H. Hamasaki, Y. Nakano, N. Takahashi, Y. Tanigawa, T. Komiyama, et al., Safety Assessment of the Sanctuary of Vicoforte, Italy, Journal of Materials and Structural Integrity, Vol.5, No.2/3, pp.215-240, 2011.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
136,300千円

【ホームページ等】

<http://www.sda.nagoya-cu.ac.jp/aoki/>



研究課題名 ヘテロ接合型人工微細構造による赤外エネルギーハーベスタ

物質・材料研究機構・国際ナノアーキテクトニクス研究
拠点・グループリーダー

ながお ただあき
長尾 忠昭

研究課題番号：16H06364 研究者番号：40267456

研究分野：材料工学

キーワード：赤外線、熱輻射、物性、ナノ光学材料

【研究の背景・目的】

地上の全ての物体は熱エネルギーを持ち、赤外線を輻射・吸収することで、相互に熱エネルギーを授受している。人工的な表面構造を持つ材料により、熱輻射・吸収のスペクトルを自在に制御することが可能となれば、必要な波長の赤外線だけを放射する光源や、特定の対象物だけに反応するセンサー、廃熱や環境輻射からエネルギーを拾い集めるエネルギーハーベスティングなどへの輻射熱利用が可能となり、省エネルギー化・低炭素化への貢献やセンサー開発への応用が期待される。

そこで、本研究では、熱物性の本質に関わり赤外電磁波と強く混成しうるフォノン現象、局在赤外プラズモン、低エネルギー電子励起などに注目し、これらの励起メカニズムと相互間のエネルギー移動を解明し、変換効率を人工的に高めた赤外光共振器やナノ接合構造の開発のための材料選択・設計の指導原理を構築する。

たとえば、金属-半導体接合型ポラリトン共振構造を介して電子励起・フォノン励起間のエネルギー移動を最適化し、赤外線を高効率に輻射、あるいは捕集し、エネルギー変換するための材料科学的方法論を開拓する。優れた赤外吸収・輻射特性を持つ金属・金属性化合物、半導体とを組み合わせ、赤外プラズモンポラリトン-赤外光電子励起-フォノンの間のエネルギー輸送効率を向上し、高い効率をもつエネルギー変換デバイスやシステムの創成を目指す。

【研究の方法】

マイクロ・ナノスケールの微細構造をもつ物体の吸収や輻射スペクトルは、構造を適切に設計することによって黒体の吸収や輻射スペクトルから大きく変化させることができ、目的に応じた機能を持たせることができる。このような人工微細構造におけるエネルギー伝達や減衰を発光分光、超高速分光、顕微赤外吸収・近接場顕微分光により調べる。その知見を元に、形状最適化・材料選択・損失低減への指針を構築する。狭ギャップ半導体、あるいは界面電子状態や欠陥を用いて、赤外光を利用しやすい電気や近赤外光の形に変換するための新たなエネルギー変換の方法論を探求し、この方法論を上記のナノ・マイクロスケールの微細構造の設計に組み込むことで、高感度なセンサー素子や、高効率なエネルギー

ハーベスタのためのプロトタイプシステムを開発する。

【期待される成果と意義】

材料内部の熱・電気エネルギーが材料表面・界面において別形態のエネルギーに変換される過程についての研究が進み知的基盤が整備される。特に熱輻射エネルギーが高効率に電気エネルギーに変換される、あるいはその逆過程である、熱が電磁波として外へ放射する過程を人工的に制御し利用する方法論ができると期待できる。その結果、波長選択型の高効率な赤外センサー、太陽光や廃熱による輻射光を利用した発電などの実現可能性が高まり、センサーネットワークにおける自己給電や環境発電などの創エネルギー材料・システムの創成に繋がることが期待できる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ S. Ishii, S.R. Pasupathi, T. Nagao, "Titanium Nitride Nanoparticle as Plasmonic Solar Heat Transducers," *J. Phys. Chem. C* **120**[4], 2343-2348 (2016).
- ・ T. Dao, K. Chen, S. Ishii, A. Ohi, T. Nabatame, M. Kitajima, and T. Nagao, "Infrared perfect absorbers fabricated by colloidal mask etching of Al-Al₂O₃-Al trilayers," *ACS Photonics* **2**, 964-970 (2015).
- ・ K. Chen, T. Dao, S. Ishii, M. Aono, and T. Nagao, "Infrared aluminum metamaterial perfect absorbers for plasmon-enhanced infrared spectroscopy," *Advanced Functional Materials* **42**, 6637-6643(2015)

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
141,400 千円

【ホームページ等】

http://samurai.nims.go.jp/NAGAO_Tadaaki-j.html
NAGAO.Tadaaki@nims.go.jp

【基盤研究(S)】 理工系(工学)



研究課題名 常識を破る鉄鋼材料の疲労特性：疲労き裂研究の新機軸

九州大学・大学院工学研究院・教授 **つざき かねあき**
津崎 兼彰

研究課題番号：16H06365 研究者番号：40179990

研究分野：構造・機能材料

キーワード：疲労変形、疲労き裂停留、ひずみ時効、マルテンサイト変態、鉄鋼材料

【研究の背景・目的】

物質研究と異なり、材料研究は工学であり「使われてこそ」です。このために「出口」を意識した研究が必要です。その上で基礎研究としての「科学」の要素をしっかりと含む必要があります。「出口」と「科学」の両輪がしっかりとこそ、産業社会にも受け入れられ且つ次代の若者の共感も得られます。本研究では、そのような「夢のある鉄鋼材料の基礎研究」を機械工学と材料科学の専門家がスクラムを組んで遂行します。

出口を見据えた夢のある基礎研究領域として、部材や部品の設計強度を決定する金属疲労に注目して、「疲労き裂研究の新領域」を拓きます。そのために、我々が独自に見出した常識を破る現象である(1)析出強化型アルミ合金での疲労限の出現と(2)鉄鋼での低サイクル疲労の長寿命化の二つを研究シーズとして、そのメカニズムを徹底解明します。そして疲労き裂は、発生はするけれども、その後に進展拡大しない、またはき裂の進展速度を小さくするメカニズムを見出します。すなわち疲労破壊しにくい材料の指導原理を獲得します。それによって、(a)高い疲労限を持つオーステナイト系ステンレス鋼や(b)水素環境下でも疲労特性が劣化しない鉄鋼など、従来常識を打ち破る新規の鉄鋼材料を創製します。

これらのメカニズム解明には、固体金属中で起こる原子の拡散、結晶構造の変化など(図1)を積極的に取り込んだ新しい材料強度学や固体力学の体系が必要です。疲労き裂研究の新機軸を展開することで新しい学問体系の土台を築くことにも寄与します。

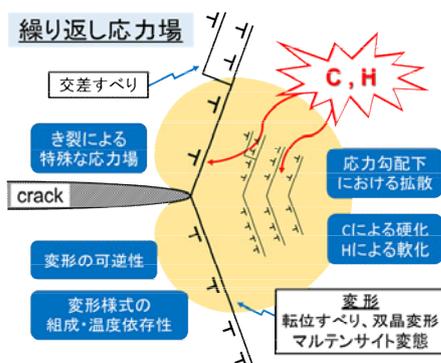


図1 本研究で対象とする疲労き裂先端の描像

【研究の方法】

第一ステージ(H28,29年度)では、独自に見出した(1)析出強化型アルミ合金での疲労限の出現と(2)鉄鋼での低サイクル疲労の長寿命化について、メカニズムの解明を行います。メカニズム解明にあたっては、き裂先端という特殊な応力場での原子拡散、転位運動ならびにマルテンサイト変態挙動についての十分な観察と討論を行います。

第二ステージ(H30-32年度)では、応用と基礎の二本立ての取り組みを行います。応用としては、前半に得られた知見を基に、画期的な疲労特性を持つ新規の鉄鋼材料の創製に挑戦します。基礎では、き裂先端での材質変化を積極的に取り込んだ疲労研究を機械工学と材料科学のタッグで遂行し、新しい学問体系の土台を築きます。

【期待される成果と意義】

新しい学問体系の土台を築くとともに、(a)高い疲労限を持つオーステナイト系ステンレス鋼や(b)水素環境下でも疲労強度が低下しない鉄鋼材料の創製に挑戦します。疲労限を持つと無限寿命設計が可能となり、これは機械システム的设计と品質管理に大きく貢献します。原子拡散によるひずみ時効現象が疲労限出現の原因であれば、使用温度によっては疲労限が消失するわけで、このメカニズムの理解によって事故を未然に防ぐことが出来るようになります。また「耐水素鋼」は水素社会実現に不可欠な水素ステーションの普及拡大に大きく貢献します。耐熱鋼や耐食鋼は存在しますが、「耐水素鋼」や「耐疲労鋼」は従来存在せず、新機軸の研究です。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

Yun-Byum Ju, Motomichi Koyama, Takahiro Sawaguchi, Kaneaki Tsuzaki, Hiroshi Noguchi : "In situ microscopic observations of low-cycle fatigue-crack propagation in high-Mn austenitic alloys with deformation-induced ϵ -martensitic transformation" *Acta Materialia*, **112** (2016), pp. 326-336.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
151,000千円

【ホームページ等】

<http://www.mech.kyushu-u.ac.jp/~force/>



研究課題名 「第二世代」粒界工学へのブレークスルーのための学術基盤の強化

熊本大学・大学院先端科学研究部・教授 つれかわ さだひろ
連川 貞弘

研究課題番号： 16H06366 研究者番号： 40227484
研究分野： 材料工学、材料加工・組織制御工学
キーワード： 結晶・組織制御、粒界、転位

【研究の背景・目的】

多結晶材料の力学特性および機能特性は、結晶粒界の存在に著しく影響される。粒界構造と粒界物性に関する基礎的研究の成果を基に、1980年代初頭に東北大学・渡邊忠雄教授が世界に先駆けて提案した『粒界設計・制御に基づく高性能多結晶材料の開発』という概念は、現在では『粒界工学』として世界に広く受け入れられている。1990年代半ばには、積層欠陥エネルギーの低い Ni 基合金やオーステナイト系材料に対して、焼鈍双晶(双晶境界は $\Sigma 3$ 対応粒界)の形成を利用して対応粒界頻度を 80%程度まで高める材料プロセスが開発され、対応粒界頻度を高めることにより耐クリープ性や耐腐食性が著しく向上することが実証されてきた(図1)。このように、「第一世代」の粒界工学は一定の成功を納めている。しかしながら、現状では、粒界制御が可能な材料が積層欠陥エネルギーの低い材料に限られていることや、粒界設計の精密化のためには、粒界現象の理解の深化が必要となっているなど、解決すべきいくつかの問題や課題がある。

本研究では、「第二世代」粒界工学へのブレークスルーを図るための学術基盤の強化を目的として、研究期間内において次の課題に取り組む予定である。

(1) 粒界現象理解の深化による粒界工学の学術基盤の強化

- 粒界近傍における局所力学特性 - 粒界-転位相互作用に基づく Hall-Petch 則の理解
- 強加工により導入される非平衡粒界の構造と力学物性

(2) 粒界制御プロセスの新指導原理の確立

- 積層欠陥エネルギーの高い材料に対する粒界制御法の指導原理の確立
- 多結晶材料における粒界微細組織の統計的評価方法の精密化

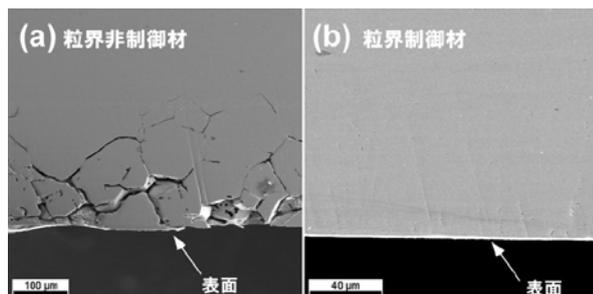


図1 オーステナイト系ステンレス鋼(SUS304)の粒界腐食におよぼす粒界制御の効果：(a)粒界非制御材，(b)粒界制御材 (S. Tsurekawa *et al.*, *Acta Mater.*, 54, 3617, (2006).)

【研究の方法】

課題(1)では、粒界の幾何学関係を系統的に変えた双結晶試料を用いて、① ナノインデンテーション法による粒界近傍における局所力学特性を評価するとともに、TEM 内その場変形測定法による転位挙動と力学応答との関係を明らかにする。② 非平衡粒界の構造と力学特性の特徴を明らかにする。

課題(2)では、①積層欠陥エネルギーの高い材料に対する新しい粒界制御方法の指導原理を確立する。②パーコレーション理論やフラクタル理論を取り入れた粒界微細組織の定量評価の精密化を行う。

【期待される成果と意義】

本研究の目的が達成されれば、広範な材料に対して粒界工学の応用の道が開かれ、新しい材料設計・開発手法としてイノベーションの創成につながると期待される。さらに、「粒界工学」は、従来組成の材料であっても粒界微細組織を設計・制御することにより、さらに優れた特性を発現させることができることから、資源の乏しい我が国において、合金元素添加に頼らない材料開発手法として、元素戦略上も非常に重要な技術となる。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- T. Watanabe, S. Tsurekawa, The Control of Brittleness and Development of Desirable Mechanical Properties in Polycrystalline Systems by Grain Boundary Engineering, *Acta Mater.*, **47**, 4171-4185, 1999.
- S. Tsurekawa, Y. Chihara, K. Tashima, P. Lejček, Local plastic deformation in the vicinity of grain boundaries in Fe-3 mass% Si alloy bicrystals and tricrystal, *J. Mater. Sci.*, **49**, 4698 - 4704, 2014.

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度 - 32 年度
137,900 千円

【ホームページ等】

<http://www.msre.kumamoto-u.ac.jp/~mice/tsurekawa@kumamoto-u.ac.jp>



研究課題名 超臨界フルイディックセラミクスによるサーマルマネージメント材料創製

東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授 **あじり ただふみ** **阿尻 雅文**

研究課題番号：16H06367 研究者番号：60182995

研究分野：工学

キーワード：超臨界流体、ナノ粒子、ナノ流体、分散、凝集構造、粘性

【研究の背景・目的】

様々なナノ粒子が開発されているにも関わらず、その応用展開が必ずしも十分すすんでいないその一因は、ナノ粒子と溶媒や高分子間との親和性制御が容易でないことにある。それに対し、申請者が開発した超臨界水熱合成法によれば、高密度に有機修飾したナノ粒子を合成でき、それにより表面性状は有機分子となるから、高分子との親和性を高く設定できる。さらには、粒径分布を制御することで、80vol%もの超高濃度でさえ流動性を示す、“フルイディックセラミクス”ともいえる新素材を創製できた。これにより、様々なハイブリッド材料やナノインクの開発が展開される端緒ができた。しかしながら、そのナノ材料・部材の物性を設計する科学がなく、そのため合理的材料設計基盤ができていない。

本研究では、この新素材の①生成原理の解明、設計法の確立を図り、それに基づき、②高性能「熱制御」材料創製をめざす。

【研究の方法】

超臨界水中での有機修飾機構の解明を行ない、任意の種類、修飾密度でナノ粒子を有機修飾するためのナノ素材設計手法を確立する。

ナノ粒子の分散・凝集現象を“相挙動”と捉える。化工熱力学を導入し、粒子間、粒子・溶媒間相互作用を評価し、それに基づき分散凝集（相平衡）推算法（設計）を確立する。PVT 評価等の熱力学物性評価法をナノ粒子系に適用し、状態方程式と比較することで、ナノ粒子間相互作用すなわちポテンシャルを評価する。これを計算科学に用いることで、ナノ粒子系の構造と物性を評価する。

新たな数学（パーシステント・トポロジー）を導入し、このナノ粒子系の無秩序な凝集（相分離）構造を評価し、無秩序構造に潜む規則構造を抽出する。これにより、構造・物性相関を構築する。まず、凝集（相分離）状態での（静的）構造と粘性の関係を評価する。次に、外場（せん断、温度等）エネルギーが付与された流動状態での（動的）凝集構造を評価し、同様に動的構造・粘性相関を得る。これらと上記相挙動との関係も明らかにする。以上により、フルイディックセラミクスの流動原理を解明する。

それらに基づき、流動性（動的構造発現）と熱伝導/光伝達特性（静的構造発現）とを同時達成し、革新的「熱制御」材料を創製する。

【期待される成果と意義】

- 1) 高い流動性と無秩序構造との相関に基づく、レオロジーへの新科学の提供。
- 2) 流動性を発現する有機修飾ナノ粒子の設計法の確立
- 3) パーシステント・トポロジー の導入によるナノ粒子分散系の無秩序構造の記述法の確立
- 4) 熱制御材料の創製 a) 流動性と熱伝導性をともに発現するフルイディックセラミクス、b) 温度によって熱線を遮蔽、透過を制御しうるナノ粒子を透明分散させたフレキシブルフィルム

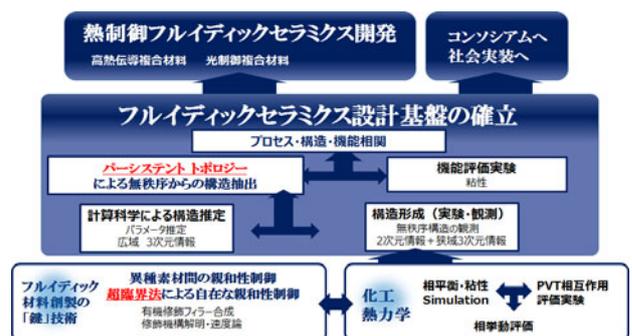


図1 研究構想

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・Byrappa K, T.Adshiri, "Hydrothermal technology for nanotechnology", Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 53 117-166 (2007)
- ・J.Zhang, S.Ohara, M.Umetzu, T.Naka, Y. Hatakeyama, T.Adshiri, "Colloidal ceria nanocrystals tailor-made crystal morphology in supercritical water", Adv. Mater., 19, 203-206(2007)

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度
140,700 千円

【ホームページ等】

http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/ajiri_lab/eng/lish/index.html
ajiri@tagen.tohoku.ac.jp



研究課題名 簡易・高速プロセスによるソフト電池の創製と、
構造変化の可逆化による容量革新

早稲田大学・理工学術院・教授

のだ すぐる
野田 優

研究課題番号：16H06368 研究者番号：50312997

研究分野：工学

キーワード：材料プロセス、二次電池、カーボンナノチューブ、三次元界面

【研究の背景・目的】

携帯機器や自動車に加え、大規模災害時の非常用電源、自然エネルギーの出力平準化など、蓄電技術の重要性は増々高まっている。活物質を、金属箔集電体に導電材とバインダとともに塗布して電極が作られるが、これらの“付随物”が電池内で大きな質量割合を占める。安定なセパレータを基礎に付随物を最小化、活物質を最大化できれば、電池の質量とコストを最小化できる筈である。

本研究では、多量のイオンを出し入れする高容量活物質の体積変化を前提とし、電極内で体積を保存するポーラス電極、可逆的に体積変化するスポンジ電極を、軽量で柔軟で良導電性のカーボンナノチューブ(CNT)を活用して創製する。更にセル全体で安定性を保つソフト電池を提案・開発する。実用的なものづくりを専門とする化学工学者が代表となり電池を専門とする電気化学者と協働し、簡易・高速・高収率なプロセスで革新的な高容量電池の実現に挑む。

【研究の方法】

シリコン(Si)や硫黄(S)などの新材料は質量あたり10倍の容量を持つが、充放電時に体積変化し構造が破壊する。各種ナノ構造で優れた容量・出力密度が報告されているが、多くは厚く重い金属集電体を無視し薄く塗布した活物質のみの値で、実用的でない。電池は安価なデバイスであり、低コスト原料から簡易に高速・高収率に実用的に厚く作る必要がある。

我々は、Si源を2,000℃以上と融点より大幅に高温加熱して1minで数μmと高速に真空蒸着、基板を低温に保って多孔質構造を、蒸着源にCuを少量添加して組成傾斜構造を実現、高い負極特性を得た(図1)。更にCNTが金属箔に直接接合し直立した三次元集電体を開発、多様な活物質を複合化し電極内で体積を保存するポーラス電極を開発する。

一方、我々は数100μmと長尺で99wt%超と高純度な数層CNTの、滞留時間0.3sで炭素収率70%と高速・高収率な半連続合成を独自の流動層法で実現している。このCNTは分散・ろ過で軽量・良導電性のスポンジ状膜をバインダレスで形成する(図2)。その中に種々の活物質を包含し、軽量で実用的に厚く、可逆的に体積変化するスポンジ電極を開発する。

これらポーラス電極・スポンジ電極に、セパレータ・電解液、セル化・システム化技術を適用、革新的に高容量なソフト電池を開発する。

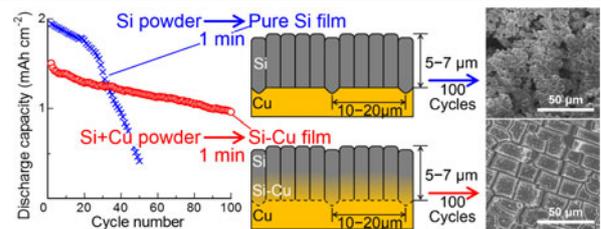


図1. 急速蒸着による組成傾斜 Si-Cu 多孔質負極

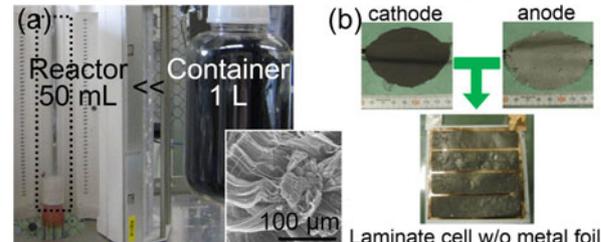


図2. 長尺 CNT 半連続合成(a)と Li 電池(b)

【期待される成果と意義】

付随物を最小化した“無駄のない”新規設計により二次電池の容量を革新、簡易なプロセスで高速・高収率に作ることで、低コストでのソフト電池の実現が期待される。また現行電池にもポーラス電極・ソフト電極は適用可能であり、性能向上と低コスト化に寄与すると期待される。加えて、高機能なナノ材料の実用合成は、ナノテクの本格的実用化に貢献すると期待される。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- D.Y. Kim, H. Sugime, K. Hasegawa, T. Osawa, and S. Noda*, "Sub-millimeter-long carbon nanotubes repeatedly grown on and separated from ceramic beads in a single fluidized bed reactor," Carbon **49**(6), 1972–1979 (2011).
- K. Hasegawa and S. Noda*, "Lithium ion batteries made of electrodes with 99 wt% active materials and 1 wt% carbon nanotubes without binder or metal foils," J. Power Sources **321**, 155–162 (2016).

【研究期間と研究経費】

平成 28 年度–32 年度
142,900 千円

【ホームページ等】

<http://www.f.waseda.jp/noda/index-j.html>



研究課題名 抗原分子の油状ナノ分散化技術を利用した低侵襲性経皮ワクチンの創製

九州大学・大学院工学研究院・主幹教授

ごとう まさひろ
後藤 雅宏

研究課題番号：16H06369 研究者番号：10211921

研究分野：プロセス工学・生物工学

キーワード：ドラッグデリバリーシステム(DDS)

【研究の背景・目的】

経皮免疫法とはウイルスなどの抗原を皮膚から投与し、体内の抗原特異的な免疫力を増強・記憶させ、病気にかかりにくくする“塗り薬型のワクチン療法”である。本研究では、抗原分子に油状ナノ分散化技術(S/O技術)を応用し、今まで注射でしか投与できなかったワクチンを塗り薬(あるいは貼り薬)として投与できる“塗布型ワクチン”を創製する。

現在までに、独自に開発したS/O化技術を利用し、抗原分子の皮膚浸透性の向上および免疫付与に成功した。本研究では、経皮免疫増強のメカニズム解明を行い、その知見をフィードバックすることで、より高い抗体産生に挑戦し、これまで誰も成し得なかった非侵襲性のがんワクチンおよび花粉症治療のための高効率経皮ワクチンシステムを確立する。

【研究の方法】

高効率ながん免疫、花粉症免疫の達成へ向け、まず油状ナノ分散(S/O)化剤の最適化および経皮免疫メカニズムの解明を行う。そのためには、図1に示すように、(A)抗原の高効率な皮膚浸透、(B)抗原提示細胞への高効率デリバリー、(C)リンパ節中の免疫細胞の活性化が重要であると考えている。

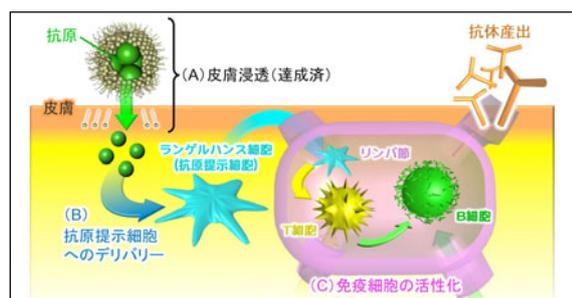


図1 経皮免疫機構

(A), (B), (C) 各ステップを効率化し、高効率な経皮免疫を達成するためのS/O製剤の最適化を図る。本S/O製剤は、抗原となるタンパク質が、疎水性の高いバリアである角質層を突破できるという画期的な製剤であるが、免疫系細胞の存在する角質層下部への浸透性の更なる向上が、抗原提示細胞への高効率デリバリーに繋がると期待される。現在までに、膜透過性ペプチドであるオリゴアルギニンや、経皮吸収促進剤としてイオン液体をS/O製剤に導入することで、抗原タンパク質の皮膚浸透性が向上、抗体産

生が大幅に増加することを見出した。さらに、経皮吸収を促進する様々な分子を導入し、抗原の皮膚浸透と抗原提示細胞へのデリバリーの高効率化を図る。特に本研究では、がん免疫療法と花粉症免疫療法の2つの経皮免疫システムの確立を狙う。

経皮がん免疫では、様々な腫瘍抗原を用い、腫瘍を移植した担がんマウスの腫瘍成長抑制効果を検証する。経皮花粉症免疫では、スギ花粉抗原由来のヒトT細胞エピトープペプチド(7crp)を用いた検討を行う。スギ花粉症マウスを作製し、S/O化した7crpを経皮投与した場合の、花粉症の指標となるIgE抗体等の変化を観察する。

【期待される成果と意義】

本研究で提案する、油状ナノ分散化技術であるS/O化技術は、ペプチドやタンパク質といった抗原分子による“経皮ワクチン療法”において重要な皮膚浸透性を向上させることができる。これによって日本独自の低侵襲性の経皮ワクチンが構築できる。本技術は、現在の注射投与を経皮吸収に剤形変更でき、発展途上国へのワクチン供与も可能となる。高齢化社会を迎えた今日の日本にとって、治療から予防へのパラダイムシフトが重要であり、経皮ワクチンは、その達成の鍵を握ると考えられている。今後はこれまで得られた最先端の創薬システムをいかに国民生活に有効に活用するかが重要な課題である。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Y. Hirakawa, R. Wakabayashi, A. Naritomi, N. Kamiya, M. Goto, 'Transcutaneous immunization against cancer using solid-in-oil nanodispersions' *Med. Chem. Commun.*, 6, 1387-1392 (2015).
- M. Kitaoka, N. Kamiya, M. Goto 'Transdermal Immunization using Solid-in-oil Nanodispersion with CpG Oligodeoxynucleotide Adjuvants', *Pharm. Res.*, 32(4), 1486-1492 (2015).

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
128,500千円

【ホームページ等】

<http://www.bioeng.cstm.kyushu-u.ac.jp/>
m-goto@mail.cstm.kyushu-u.ac.jp



研究課題名 超小型衛星の多目的実用化時代に向けたオールラウンド超小型宇宙推進系の実現

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・准教授

こいずみ ひろゆき
小泉 宏之

研究課題番号：16H06370 研究者番号：40361505

研究分野：総合工学

キーワード：航空宇宙工学、推進・エンジン、超小型衛星、電気推進、プラズマ

【研究の背景・目的】

現在、宇宙利用は超小型衛星の多目的実用時代に入っている。いまや米国のベンチャーキャピタルの10%が民間宇宙ビジネス（主役は小型衛星）に投資され、この潮流の一端を作り出したNASAは深宇宙探査への本格適用に乗り出した。この実用時代における躍進の鍵が小型推進系、すなわち超小型衛星用エンジン、の実現である。超小型衛星の実用化加速に伴い、推進系に求められる機能は多様化の一途を見せておりオールラウンドな推進機能が要求されている。そして、さらに、相乗りによるロケット打上、それに即応可能な衛星開発を実現させるために、毒劇物および高圧ガスを使用しない「安全」な推進系が求められている。本研究の目的は、完全無毒な推進剤を利用し、3種類の高効率/大推力/多軸制御可能なスラスタを統合させたオールラウンド超小型推進系を実現させることである。

【研究の方法】

本研究の柱は、究極的に安全な推進剤として水を利用したイオンスラスタの性能向上、低毒性推進剤による姿勢制御用スラスタの開発、そして超小型衛星システムと連動した研究開発からなる。

理想的な推進剤として期待されている”水”をイオンスラスタの推進剤として利用する。世界で主流となっている方式のイオンスラスタは、酸化に極端に弱いプラズマ源であるため水を利用することができない。一方、本研究ではマイクロ波放電を利用することにより、この問題を回避し既に作動実証に成功している。しかし、分子性の水プラズマは単原子のキセノンプラズマよりも、はるかに複雑な特性をもち性能向上が課題である。この性能向上を、実験および数値計算（プラズマ計算とイオン加速計算）の両者を駆使して達成する。

超小型衛星が、通常の衛星とくらべて大きく異なる点は、そのサイズ故に全ての機器間結合（熱、電気、機械）が強いこと、そして、開発期間が1-2年と極端に短いことである。このために、従来型の機



図1 水を推進剤として利用したイオンスラスタの作動

器ごとに完全なインタフェースを区切ったの独立開発そして統合という方式は最適とは言えず、研究段階からのシステム統合そして問題点の洗い出しが不可欠である。本研究では、推進系の特性を、望ましくない熱・電気的な特性まで含め、研究段階から衛星システムと共有し研究開発を進める。これにより実機開発におけるスムーズな統合と、いつ飛翔チャンスが訪れても即座に対応できる状況を生み出す。

【期待される成果と意義】

オールラウンドな推進能力と究極的安全性および取扱性を有する超小型推進系の実現は、キューブサット多目的実用化時代における鍵であり、躍進する小型衛星実利用を日本が牽引する動力となる。また、推進系と衛星システムの研究段階からの統合は、分野間交流の拡大とシーズ/ニーズの適合を加速させる。さらに、本研究の水イオンスラスタ研究における分子性ガス ECR プラズマの解析コード/イオン引出コード構築と実験による検証は、半導体製造、表面改質、廃棄物処理から医療・バイオ応用に至るまで幅広い産業応用を持ち、水プラズマの基礎特性の解明に貢献する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- Koizumi, H., Kawahara, H., Yaginuma, K., Asakawa, J., Nakagawa, Y., Nakamura, Y., Kojima, S., Matsuguma, T., Funase, R., Nakatsuka, J., and Komurasaki, K., Initial Flight Operations of the Miniature Propulsion System installed on Small Space Probe: PROCYON, Transactions of Japan Soc. for Aeronautical and Space Sci., Aerospace Technology Japan, 2016, to be published.
- Takao, Y., Hiramoto, K., Nakagawa, Y., Kasagi, Y., Koizumi, H., and Komurasaki, K., “Electron extraction mechanisms of a micro-ECR neutralizer,” Japanese Journal of Applied Physics, Volume 55, Number 7S2, 2016

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度
128,800千円

【ホームページ等】

<http://www.al.t.u-tokyo.ac.jp/koizumi/html/htdoc/>