

第36回「研究費の助成」研究結果概要

No.	所属／役職	申請者	研究課題
22101	兵庫県立大学 大学院工学研究科 助教 兵庫県立大学 大学院工学研究科 教授	松本 歩 八重 真治	シリコン表面の微細構造を利用した微量溶液の高感度レーザー分析
	研究目的 レーザーアブレーションで生成するプラズマの発光スペクトルを測定することにより、試料の元素を「その場で」瞬時に測定することができる。この手法をレーザー誘起ブレイクダウン分光(LIBS)と呼び、極限環境における現場分析や工業プロセスのモニタリングのための技術として期待されている。本研究では、金属援用エッチングにより作製した多孔質シリコン基板をLIBSに応用し、微量溶液の高感度分析を試みる。多孔質シリコンの孔内に試料溶液をトラップさせた状態でレーザーを照射し、プラズマを生成することで、微量溶液中の成分を高感度かつ定量的に検出できる手法を開発する。	研究結果 本研究では、多孔質シリコンとスピノコターを用いて液体のLIBS分析を試みた。金属援用エッチングで作製した多孔質シリコン基板上に炭酸ストロンチウム水溶液を10 μL滴下し、スピノコター後にレーザーを照射してLIBS分析を行った。その結果、溶液由来のストロンチウムの発光線を検出することに成功した。溶液中のストロンチウム濃度に対して発光線強度をプロットすると、直線的な検量線(決定係数0.998)が得られた。また、多孔質シリコン上で生成するレーザープラズマの発光スペクトルを解析し、プラズマの密度や温度を明らかにした。これらの結果は、微量溶液の新規分析技術の確立および多孔質材料のレーザーアブレーション現象の解明に貢献するものである。	
22102	東京理科大学 研究推進機構・総合研究院 准教授	石田 直哉	化学酸化法を利用したマグネシウム二次電池正極材料の探索と結晶構造解析
	研究目的 本研究は2019年ノーベル化学賞に選ばれたリチウムイオン電池(LIB)に対して次世代に相当するマグネシウム二次電池に関する研究を行う。LIBの正極材料は層状構造の酸化物が利用されている。私はこれまで、既報の高容量LIB正極材料に対して、化学酸化法によってリチウムを脱離して、リチウム脱離量と結晶・電子構造の関係を明らかにしてきた。さらにリチウムが脱離して生成した空孔を利用することでマグネシウム二次電池正極材料として利用できることを明らかにしてきた。本研究では、既報の材料から脱却して新規化学組成におけるマグネシウム二次電池正極材料の探索と、結晶構造解析に基づく充放電機構の解明を実施する。	研究結果 本研究は2019年ノーベル化学賞に選ばれたリチウムイオン電池(LIB)に対して次世代に相当するマグネシウム二次電池(MRB)に関する研究を行う。MRBはLIBよりも2倍の容量が発現されるが、電解液や負極に課題があるため適切に評価出来ない。本研究は、正極材料について種々の金属元素を置換した系を合成して評価すること、電解液にKを添加して過電圧を低減すること、そして負極の表面コートによって不働態生成を抑制することを目的に研究を実施した。その結果、資源制約の少ない鉄とマンガンを主成分とした正極材料において特に容量が高く、K添加の電解液と組み合わせることで可逆的な作動が可能となることが判明した。	
22103	物質材料研究機構 研究員	鄧 驍	膜小胞による嫌気鉄腐食の加速効果とその機構に関する研究
	研究目的 嫌気鉄腐食は、地下や海底に埋設された石油・天然ガスパイプラインで進行し、工業化国で年間数百億ドルの経済損失を引き起こしている。嫌気鉄腐食は、主に硫酸還元菌の代謝活動によって引き起こされるが、腐食機構に関しては未解明な部分が多い。近年、複数の硫酸還元菌において、固体電子源からの電子引き抜き(Extracellular Electron Uptake, EEU)能力が発見された。EEUによる電氣的腐食機構は、局所的且つ急速な腐食現象を説明できるだけでなく、新規な腐食検知法と防食技術の開発に向けた知見を与えるため、大いに注目されている。本研究では、EEUを行う細菌において酸化還元活性を持つ膜小胞が分泌されるという現象に着目し、膜小胞が電氣的腐食を加速するという仮説を提案し、検証する。	研究結果 地下や海底に埋設された鉄パイプラインやタンクでは、その表面に付着する微生物の代謝活動により、年間最大数ミリの速度で腐食が進行する。それが原油流出などの事故、環境汚染と莫大な経済損失を引き起こすため、微生物鉄腐食機構を包括的に解明することが強く求められている。近年、細菌が固体鉄から電子を直接引き抜き過程は、鉄腐食進行に重要な役割を果たすと提案されているが、電子引き抜き速度に影響する生体分子に関する知見は非常に限られている。本研究では、腐食細菌が膜小胞を分泌し、それにより電子摂取及び鉄腐食を加速させる現象を発見した。さらに、その機構を検討した結果、膜小胞が導電性の微生物バイオフィルムの形成を促進し、鉄などの固体から高速電子摂取を可能にすることを明らかにした。	
22104	新潟大学工学部工学科化学システム工学プログラム 教授	金子 隆司	テトラヘドラルに分岐した剛直な高スピン共役ポリラジカル構造体の構築と等方的磁気機能膜への展開
	研究目的 分子磁性材料はビルドアップ型のナノ磁性材料として近年研究が活発化している。ナノ磁性材料では、スピン偏極電流、スピン液体、単分子磁石、低次元磁性体、などメソスコピックな領域で見られる新奇な物性とスピンエレクトロニクスや量子コンピュータなどそれに関わる新しい技術的応用に注目が集められている。申請者は共役ポリマー骨格に安定ラジカルが規則的に導入されたポリラジカルを合成し、π共役系を介した分子内での強固なスピン整列を実現している。本研究では、この成果のさらなる展開を目指し、高スピン共役ポリラジカルを構成要素とする磁気多孔質芳香族構造(Magnetic Porous Aromatic Framework: MPAF)を構築し、上記の物性及び応用の萌芽となる基盤構造体の実現を目指した。	研究結果 本研究では、高スピン共役ポリラジカルを構成要素とする磁気多孔質芳香族構造(Magnetic Porous Aromatic Framework: MPAF)の構築を目指し、テトラヘドラルに分岐した多環芳香族オリゴマーからなる剛直な共役ポリラジカルを合成した。前駆体ポリマーの紫外可視吸収および蛍光スペクトルとポリラジカルESRスペクトルから、スタッキングによる多孔質構造の形成が示唆された。固体粉末についてスタッキング構造に起因すると考えられる、部分的に比較的大きな反強磁性的相互作用が明らかとなった。オンセットの反平行なスタッキング構造からは強磁性的な相互作用が予測されるが、炭素1つずれたオフセットなスタッキング構造により反強磁性的相互作用を示したものと考えられる。	
22105	大阪公立大学大学院工学研究科 客員研究員 大阪公立大学大学院工学研究科 准教授	平井義彦 安田雅昭	ディーブローニングによるナノインプリント用材料・プロセス設計システムの開発
	研究目的 ナノインプリント技術は、AR用ガラスなどの光学素子を中心に、多様な能性材料を直接ナノ加工するダイレクトナノインプリントへの応用が進められています。ここでは、多様な樹脂材料に対し、その成型性が材料のガラス転移温度で表現できることを検証し、力学的特性が未知の材料に対する成型性を予測・検証します。さらに、格子構造のような単純構造だけではなく、多様な構造に対する成型性についても、シミュレーション予測を行い、その結果を学習させるとともに、欠陥要因となる応力発生についても予測・学習させます。これにより、未知材料と形状に対して、より欠陥の少ないプロセスならびに材料条件を効率的に提案するシステムを構築します。	研究結果 ナノインプリントにおいて、未知の機能性材料や加工形状に対するプロセス設計には、材料特性の測定や、形状依存性などの予備実験が必要となる。レプリカ材料として知られる水溶性のポリビニルアルコール(PVA)は、高温で成型すると水溶性が損なわれることが知られている。一方、グリセリンを添加すると低温でのナノインプリントが可能となる。しかし、その最適な含有量と、成型結果を検証するためには、膨大な予備実験が必要となる。そこで、グリセリン添加時の成型性の変化を、実験に基づき機械学習させ、圧力依存性や形状依存性をシミュレーションによる学習結果で補完する新たな機械学習システムを構築した。これにより、添加グリセリン量の最適設計と、成型性の圧力依存性の予測を行い、実験的にも有効性を検証した。	
22106	琉球大学理学部海洋自然科学科化学系 助教	滝本大裕	ナノ空間を駆使したレドックスフロー電池用流動電極の開発
	研究目的 本研究では、ナノ空間を駆使したレドックスフロー電池用流動電極の開発が目的であります。レドックスフロー電池の電極材料として注目されているキノ誘導体分子の課題は、電子伝導性が乏しいため、電池性能を左右する酸化還元応答が乏しい点であります。この課題に対して研究代表者は、1 nm未満のナノ空間にキノ誘導体を埋め込む(束縛させる)ことで、酸化還元応答が大きく改善されることを見出しました。この発見を本研究に活かし、高速電気化学応答を導き出せる分子とナノ空間の特徴を明らかにし、適切な流動電極を開発する点に注目しております。本研究が成功した暁には、将来的な大容量蓄電池の開発に貢献できる可能性を秘めております。	研究結果 本研究では、ナノ空間を駆使した材料開発を基盤として、充放電速度と耐久性が優れるレドックスフロー電池の流動電極を開発することを目的とした。まずは、どの細孔サイズが充放電速度を高められるのか明らかにするための検討を行った。その結果、高速充放電反応を導くには、1 nm未満のナノ細孔が必要であることを明らかにした。また、1 nm未満のナノ細孔を多く有する炭素材料を開発することで、充放電速度と容量の両方を高められる可能性を見出した。パーコレーション・ネットワークを導き出せる炭素材料として、メソポーラスカーボンとカーボンナノチューブを検討した。その結果、表面炭素が少ないメソポーラスカーボンを用いることで、パーコレーション・ネットワークの効果を引き出せる可能性を見出した。	

22107	横浜国立大学大学院工学研究院機能の創生部門 准教授	稲垣悦史	電気化学CO2吸脱着システムのための規則性多孔質カーボン電極の調整
	研究目的 「カーボンリサイクル」の実現には、その前段の工程である省エネルギー型のCO2分離回収システムが必須です。本研究では、既存のtemperature-swing adsorptionやpressure-swing adsorptionではなく、最近、新たに提案されたelectro-swing adsorption(ESA)に注目し、ESA電極の規則性多孔質炭素材料を開発します。具体的には、電極に「規則性多孔質カーボン」を採用し、その細孔内のみアントラキノンを含むイオン液体を電解液とするESAシステムを構築することを目的としています。本法では、電解液が浸透している規則性多孔質カーボンの粒子同士の隙間にCO2を含むガスを流通させて気相/電解液界面を最大限広くすることで、電解液へのCO2の溶解を効率よく進めることができます。	研究結果 「カーボンリサイクル」の実現には、その前段の工程である省エネルギー型のCO2分離回収システムが必須です。本研究では、既存のtemperature-swing adsorptionやpressure-swing adsorptionではなく、最近、新たに提案されたelectro-swing adsorption(ESA)に注目し、ESA電極の規則性多孔質炭素材料の開発を進めてきました。具体的には、アントラキノンの電氣的還元後の生成物とCO2との反応により、CO2を捕集する際の多孔質炭素体電極には、ミクロ孔のみで比表面積を増大させた活性炭よりも、規則的に配列したメソ孔をもつ「規則性メソポーラスカーボン(OMC)」が優れていることを見出しました。特にOMCの粒子径を小さくすることでCO2の物質移動が有利になり、高効率にCO2を吸着させることができました。今後もこの研究を継続して省エネルギー型のCO2分離回収システムの構築を進めてまいります。	
22108	兵庫県立大学 高度産業科学技術研究所 准教授	山口明啓	生体分解性プラスチックの分解・生体代謝機構の分子追跡の試み
	研究目的 近年、海洋に流入する海洋プラスチックによる生体環境への影響が懸念されている。そのため、生分解性プラスチックの研究開発が進み、環境負荷を減少させる取り組みが行われている。ただ、生分解性プラスチックの分解・生体代謝機構に関して、まだ不明な点も多い。本研究では、マイクロ化学システムを基盤として、プラスチック材料に含まれる添加剤や分解過程(太陽光などによる分解や生分解など)で生じる分子を分析・追跡するプラットフォームを創出して、分解過程の分子レベルからの理解を深める。これらの知見をフィードバックして、材料開発への指針を提言するための評価機構の創製を行う。	研究結果 生体機能の解明を分子レベルで追跡するシステムの創製を行った。表面増強ラマン散乱活性を有するナノ構造体をナノスケールの針状テンプレート上に金を傾斜スパッタすることによって創出した。完成した分子イメージング領域をマイクロ化学システムに統合し、流路に試薬を流しながら分子センシングが可能であることを確認した。さらに、マイクロ波化学合成システムを透明化して、マイクロ波化学反応中の化学変化をリアルタイムでモニターできるシステムの創製にも成功した。先の分子センシングプレートとの組み合わせも可能である。X線イメージングへマイクロ流路を組み合わせることで水中での生物やプラスチック材料のその場観察可能なシステムの創製に成功した。	
22110	奈良先端科学技術大学院大学データ駆動型サイエンス創造センター・物質創成科学領域准教授	宮尾和幸	データ駆動によるファーマコフォアポイントの再定義
	研究目的 ファーマコフォアとは、低分子と標的マクロ分子との分子間相互作用に重要な「低分子内の部分構造(または原子)の空間的な位置や配置」を意味し、構成する部分構造はファーマコフォアポイントと呼ばれる。現状では、低分子の化学構造に対して(部分構造などの)ルールに基づいて、ファーマコフォアポイントが指定される。しかし、このような画一的なルールでは低分子の分子構造を考慮できない。本研究では、低分子-マクロ分子のX線結晶構造データベースからデータマイニングと機械学習を行うことで、任意の低分子に対して、より精度の高いファーマコフォアポイントを与える手法を開発する。	研究結果 創薬における、低分子と標的マクロ分子との分子間相互作用に重要な「低分子内の部分構造(または原子)の空間的な位置や配置(ファーマコフォア・ポイント(PP))」を理解することは合理的な分子設計につながる。本研究では、低分子の立体配座からPPを予測する深層学習モデルを新規提案および構築した。まず、結晶構造データベースから抽出した構造をキュレーションすることで必要なデータセットを準備した。立体配座の座標と原子の情報を入力とし、各原子のPPを出力とする深層学習モデルを構築し、準備したデータセットを用いて予測精度を検証した。モデルの精度自体は改善の余地があるものの、水素結合供与基の予測などの一部のPPは精度が高い予測ができた。	
22111	名古屋工業大学先進セラミックス研究センター 特任助教 名古屋工業大学大学院先進セラミックス研究センター 准教授	加藤邦彦 白井 孝	貴金属触媒反応・電気化学反応を介さない次世代遷移金属ブロンズ室温合成技術の開発
	研究目的 遷移金属ブロンズはその優れた光学的・電気的特性から、エネルギーデバイス、スマートウィンドウ、触媒など多岐に渡る応用が検討されている。従来手法では貴金属触媒や電気化学的反応を用いた手法が知られているが、低コストかつ大規模合成に不向きであった。先行研究において、酸化タンクステン/高分子材料混合粉に機械的処理を短時間行うだけで酸化タンクステンブロンズが合成できることを新たに発見した。本研究課題では、安価でありふれた元素で構成された原料のみを使ってスケラブルで室温合成可能な革新的手法を確立するとともに、持続可能エネルギーである光吸収により水質浄化などの触媒作用を示す光触媒材料への応用展開を目指す。	研究結果 酸化モリブデン(MoO3)-ポリプロピレン(PP)混合粉体を原料として、可視光及び近赤外照射下で優れた光触媒作用を示す複合粒子の合成に成功した。その場観測を含む構造評価・解析の結果、PPは分解過程でH+供給源となりMoO3へ重ドープされることでHxMoO3-y-MoO2が形成し、カーボンが副生することがわかった。得られた複合粒子は、環境汚染物質(メチルオレンジ)の光分解において未処理時と比較して1,000倍以上高い反応速度を示した。さらに、多機能性(酸触媒性、重金属吸着性)を併せ持ち、プラズモン共鳴効果により光熱変換効率が增加することで水の蒸発を加速させることも実験的に明らかとなり、次世代光触媒材料として十分に活用できる可能性を見出した。	
22112	東北大学大学院環境科学研究科先端環境創成学専攻 助教 東北大学大学院環境科学研究科 教授	栗田大樹 成田史生	三次元造形した生分解性ポリマーの分解過程における引張特性変化
	研究目的 本研究は、水環境分解も期待できる生分解性プラスチックである酢酸セルロースの引張試験片を熱溶解積層(FDM)式3Dプリンタによって作製する。そして、国際規格ISO 17556に準拠して生分解試験を実施する。そして、引張試験および観察、有限要素解析を実施し、分解過程における酢酸セルロースの力学特性変化を明らかにする。最終的に、分解過程における力学特性変化の評価および構造用生分解性プラスチックとしての新たな基準(〇〇日間は、作製直後の力学特性の××%以上を維持すること、など)を提案する。	研究結果 本研究では、生分解性プラスチックの一つである酢酸セルロースの三次元造形と引張特性評価、生分解性評価を行った。今回の実験では、ホットプレスで作製した試験片を用いて予備実験を行いたいが、生分解度の定量評価に至らなかったため、三次元造形試験片を用いた試験をしなかった。これは試験中のコンポスト乾燥が原因であると考えており、湿度を一定に保つ工夫をして再試験中である。一方で、試験片そのものは2週間後から分解が進み、10週間後には原型をとどめなかった。三次元造形条件が引張特性に大きく影響することがわかった。現在、造形後の細いフィラメントを抽出し、単独の引張特性を評価予定である。	
22113	神奈川県立産業技術総合研究所川崎技術支援部 研究員 神奈川県立産業技術総合研究所川崎技術支援部 研究員	戸邊智之 濱田健吾	ペロブスカイト太陽電池のn型半導体電極に関するラジカル量・トラップ密度の測定と劣化の関係について
	研究目的 有機・無機ハイブリッドペロブスカイト結晶を光活性層に有するペロブスカイト太陽電池(PSC)は、真空プロセスが不要で、溶液塗布による製膜が可能であり25%を超える高い光電変換効率が得られることから次世代の太陽電池として注目されている。しかし、PSC成膜の際に使用される金属酸化物半導体、特にTiO2は、光触媒能によって有機物を分解することが懸念されている。本研究では、PSCの一つの劣化要因であると考えられる金属酸化物半導体の粉末を用いてラジカル量・トラップ密度を測定し、PSCデバイスの劣化挙動を明らかにする。これにより、PSCの実用化に貢献する。	研究結果 有機・無機ハイブリッドペロブスカイト結晶を光活性層に有するペロブスカイト太陽電池(PSC)は、真空プロセスが不要で溶液塗布による成膜で20%を超える高い光電変換効率が得られることから、次世代の太陽電池として注目されている。しかし、成膜で使用されるTiO2には、固有の低い電子移動度と紫外線によるトラップの生成という二つの特徴があり、電荷の蓄積、再結合損失に影響を与え、I-V測定においてヒステリシスを発生させている可能性がある。また、TiO2には光触媒反応による有機物分解作用があるため、PSCの有機成分が分解され、劣化が進行していることが考えられる。本研究では、ESRを用いてTiO2、SnO2のラジカル発生量を測定し劣化要因を解析することを目的とする。	

22114	静岡県立大学薬学部薬科学科 教授 静岡県立大学薬学部薬科学科 助教	眞鍋 敬 山口深雪	触媒の特性を活用する含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化反応の開発
	研究目的 医薬品等の有用化合物の多くにはアリール基が含まれており、そのためこれまで多くの触媒的アリール化反応が開発されてきた。特に含窒素芳香族化合物のアリール化は極めて重要な反応である。しかし含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化は未だ発展途上であり、さらなる発展が望まれる。本研究の目的は、触媒の特性を活かした含窒素芳香族化合物の位置選択的アリール化反応の新手法を開発することである。特に我々が独自に開発したDHPTおよび類似の設計指針に基づく配位子を組み込んだ触媒等を活用し、種々の化合物の位置選択的アリール化を開発する。本研究で開発する手法は、これまでの含窒素環状化合物合成法を大きく改良・発展させる可能性をもつ。	研究結果 医薬品や機能性分子等の有用化合物の多くには、芳香環置換基(アリール基)が含まれている。そのため、遷移金属触媒を用い、ピロロールやインドール等の含窒素芳香族化合物にアリール基を位置選択的に導入できる位置選択的アリール化反応は、種々の有用物質の化学合成において重要な反応である。今回我々は、分子内に求核部位を有するインドール類を基質とする位置選択的アリール化/環化反応によるピロロインドリン類およびビロロインドリン類の合成法を開発した。また無置換ピロールの3位および2位選択的アリール化を検討した。いずれの反応においても、パラジウムに対する配位子を適切に選ぶことにより選択性を制御できることが明らかとなった。	
22115	名古屋市立大学大学院理学研究科理学情報専攻 教授	雨夜 徹	新奇特ポロジカルカーボンアーキテクチャの創成
	研究目的 フラーレンやカーボンナノチューブ、グラフェン等に代表されるナノカーボン類はその特徴的な「かたち」と特異な機能から注目を集めている。本分野のさらなるブレイクスルーのために、有機合成手法による未踏なトポロジーを有するカーボンアーキテクチャの創成とその特性解明が期待されている。また、トポロジ的にユニークなカーボンアーキテクチャの合成は挑戦的課題であり、合成化学的な観点からも意義深い。そのような背景の下、本研究では、結び目構造、カテナン構造、メビウス構造、織り構造などの構造モチーフを有する新奇特ポロジカルカーボンアーキテクチャの創成に取り組む。	研究結果 本研究では、 π 共役系分子の「かたち」に着目し、従来になかったトポロジ構造のカーボンアーキテクチャを標的とする合成化学的研究に取り組んだ。具体的には、ひねりによりメビウス構造を持ちながらペンタフォイルノットに分類される結び目構造を有する環状オリゴアレン分子の合成に取り組んだ。合成戦略は、結び目構造の中央部位に相当する分子フラグメントを5つのキラルなスピロピフルオレン化合物を連結することで用意し、その末端にU字型オリゴアレンリンカーを5つカップリングする、というものである。実際、この戦略に基づき、カップリング反応を行ったところ、標的分子の質量に一致する分子を見出すことができた。	
22116	東京都立大学都市環境学部環境応用化学科 助教	伊藤 正人	ESIPTを活用した高効率シングルレットフィッシュン分子の創製
	研究目的 シングルレットフィッシュンは、1つの光子によって2つの三重項励起子を生成できることから、太陽電池をはじめとした機能性材料の発展に大きく貢献すると期待されている。しかし、分子自体の不安定性や理想的なエネルギー関係の構築などが課題として挙げられ、高い安定性と効率を兼ね備えた新たな分子系の創出や戦略の確立は現在においても求められている。そこで本研究では、励起状態における分子内プロトン移動に着目し、安定かつ高効率な新規分子系の創出に取り組む、待られた知見をもとに、さらなる機能性の獲得を目指し、電子構造をより緻密に制御した分子の造り込みを行う。	研究結果 シングルレットフィッシュン(SF)は、1つの光子から2つの三重項励起子を生成できることから、機能性材料の発展に大きく貢献すると期待されている。本研究では、従来の分子設計指針とは異なるアプローチにより、安定かつ高効率な新規分子系の創出を目指した。種々の合成検討を通して合成した分子内に2つのアゼピン環を有する誘導体が、アゼピン骨格の8 π 電子系に由来し、2つの湾曲部位を有する構造をとることが明らかとなった。この湾曲構造が複数の外部刺激により可逆的な湾曲-平面の構造変化を示すことが示唆された。この構造変化に基づく特異な電気化学特性も見出されている。本分子系を用い、目標である新規SF分子系の創出に向け継続して取り組んでいく。	
22117	神奈川県立産業技術総合研究所電子技術部 統括専門研究員 台湾成功大学 教授	金子 智 吉村昌弘	シリコン基板表面での機能性材料成長における化学的安定性の評価
	研究目的 シリコン基板上への新機能材料合成には、基板上での材料の熱的安定性や結晶格子の整合性などのため、材料選択や合成条件の検討なども含めて試行錯誤が繰り返されている。そこで、シミュレーションを導入し結晶成長の予測を行うことで、材料選択時の参考とする。本研究では、基板表面と合成材料との界面での安定性について分子動力学を用いた考察を行う。シミュレーションでは各種材料の安定性について吸着エネルギーを用いて評価し、その結果を広く公開することで、シリコン基板上での材料合成のための大きな指標となり得る。また、シミュレーションで得られた最適な材料を実際にシリコン基板上に成膜し、シリコン結晶面と材料合成の関係などの実証も行う。	研究結果 シリコン(Si)基板上での新機能材料合成のため、基板表面と合成材料との界面での安定性について分子動力学を用いた吸着エネルギーを用いて評価した。シミュレーションではシリコン基板上での酸化マグネシウム(MgO)を例として計算し、実際の成膜による結晶成長との比較を行い、シミュレーション結果と一致するcubic on cubic成長することを示した。また、同じ吸着エネルギーを用いた評価でグラフェン成長に最適な基板の選択を行ったところ、チタン酸ストロンチウム(STO)が候補となった。実験的にも平坦な膜成長がSTO基板上で確認された。	
22118	関東学院大学理工学部理工学機械学系 教授	柳生裕聖	厚膜高分子レジストの粗視化分子動力学モデルの作成と機械的性質の評価
	研究目的 MEMSにおけるデバイスの構造材料としてSU-8やTMMRなどの化学増幅型ネガレジストが使用されている。このレジストはマイクロデバイス上の構造体やマイクロ流体デバイスの流路形成などに応用されており、その加工プロセスではフォトリソグラフィ加工における露光、熱処理条件に対し柔軟に対応するために架橋度による機械的性質の変化が小さいレジストが必要である。このようなレジストを開発するにはレジストの分子構造と機械的性質の関係を把握する必要がある。申請者は既に粗視化分子動力学法(粗視化MD法)によるTMMRレジストのモデル化を報告している。本研究ではレジストの引張試験の結果と、粗視化MD法を用いた1軸伸張シミュレーション結果を比較することにより、モデルパラメータの最適化を検討する。	研究結果 MEMSにおけるデバイスなどの構造材料として使用されている化学増幅型ネガレジストの分子構造と機械的性質(弾性率)の関係把握するために、粗視化分子動力学法によるレジストのモデル化を検討した。本研究ではTMMRレジストを用いて引張試験を実施し、応力-ひずみ線図より、引張弾性率を算出した。シミュレーションでは既に申請者が報告している化学増幅型ネガレジストモデルについて、アングルポテンシャルのパネ定数を変更して、実験と同じ伸長速度で伸長シミュレーションを実施し、引張弾性率を算出した。実験結果から、TMMRレジストの引張弾性率は、インデンテーション試験結果との比較から得た弾性率よりも小さな値を示すことが明らかとなった。このことからアングルポテンシャルのパネ定数小さく設定することにより、実験値に近い引張弾性率を有するモデルを作成できた。	
22119	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 主任研究員	江口美陽	負電荷の置換による分子電荷分布への影響および配位反応の加速
	研究目的 我々はカチオン性ポルフィリンのカウンターアニオンを層状アルミノシリケートの表面負電荷に換えることで、ポルフィリンの金属配位反応が加速することを見出した。層状表面によって分子の片側を被覆されている構造は配位反応には不利であると予想されたが、それを覆す結果となった。これは、表面負電荷への交換により分子内電荷分布が大きく変化したことを示唆する。本研究では、活性化エネルギーや頻度因子の決定を含む各種測定や理論計算などにより負電荷の交換による分子内電荷分布変化の様子を観察し、反応性への影響を明らかにする。同時に、無機層状物質の表面により加速される化学反応の例を探索する。	研究結果 本研究ではカチオン性ポルフィリン分子を層状アルミノシリケート表面に吸着させることで、この金属配位反応が23倍加速されることを見出した。さらにこれが反応の頻度因子が3桁近く増幅したことに因るものであることを明らかにした。頻度因子が増幅したのは、層状ケイ酸塩表面が強く分極していることにより分子に誘電分極が引き起こされたためであると考えられる。誘電分極により、分子の溶媒側で負電荷密度が増大し、これが金属イオンを効率よく引き寄せ、反応の頻度因子を増幅させたかと考察した。分子は層状アルミノシリケートにより片側を被覆されている状態にも関わらず頻度因子が増幅しており、誘電分極による影響の大きさが伺える。触媒とは異なるメカニズムで反応効率を向上させる、新しい加速方法を見出すことができた。	