

立 命 館 大 学

理 工 学 研 究 所 紀 要

第70号

MEMOIRS

OF THE

INSTITUTE

OF

SCIENCE & ENGINEERING

RITSUMEIKAN UNIVERSITY

KUSATSU, SHIGA, JAPAN

NO. 70

2011



## CONTENTS of No. 70, 2011

### <一般論文>

1. 非中空コアブラッグファイバにおける閉じ込め・材料損失と一般化4分の1波長積層条件の関係  
..... 鈴木 雄太・左貝 潤一 ..... 1
  
2. 線虫*Caenorhabditis elegans*の発生ステージにおける定量プロテオーム解析  
..... 物部香奈美・遠里由佳子・早野 俊哉・伊藤 将弘 ..... 13
  
3. 相互情報量とSVMを用いた酵素反応におけるEC番号の推定法の開発  
..... 松田 祥彦・伊藤 将弘・遠里由佳子 ..... 21
  
4. 高分解能中エネルギーイオン散乱と第一原理計算による3C-SiC(001)-3×2再構成表面の原子構造解析  
..... 松田 太志・奥村 英樹・田上 正崇・光原 圭・Anton Visikovskiy・城戸 義明 ..... 29
  
5. ガラス研磨用エポキシ樹脂研磨パッドの開発  
..... 村田 順二・谷 泰弘・広川 良一・野村 信幸・張 宇 ..... 41
  
6. ガラス研磨における酸化セリウムの代替砥粒開発  
..... 李 承福・桐野 宙治・谷 泰弘・村田 順二 ..... 51
  
7. 土壌肥沃度指標(SOFIX)に基づくデータベースから見た日本農地  
..... 堀井 幸江・松野 敏英・久保田謙三・福原 優樹・松宮 芳樹・  
平川 潤・松田 文雄・北村 實彬・久保 幹..... 63
  
8. Stochastic Equation on Pseudo-Sphere  
..... Hiroshi Kuratsuji and Masao Matsumoto ..... 73
  
9. Maximum Output Operation by Equivalently Field Weakening and Optimal Parameters of BLDC Motor  
..... Komatsu Yasuhiro, Syed Abdul Kadir Zawawi, and Yoshihiko Araki ..... 81
  
10. クーロメトリーによる酢酸菌が触媒するエタノール酸化反応の解析  
..... 上田 康介・高木 一好 ..... 91
  
11. 大型研究装置成果報告書 ..... 97
  
12. 理工学研究所記事 ..... 131



## 非中空コアブラッグファイバにおける閉じ込め・材料損失と 一般化4分の1波長積層条件の関係

鈴木雄太、左貝潤一

---

### **Relationship between confinement and material losses and generalized quarter-wave stack condition in nonhollow-core Bragg fibers**

**Yuta Suzuki, Jun-ichi Sakai**

We show effects of the core index on confinement and material losses in nonhollow-core Bragg fibers. Various propagation properties are computed using a multilayer division method. Confinement loss is investigated as a function of the core index  $n_c$  under the fixed value of cladding low-index  $n_b$ . When the cladding high-index  $n_a$  is relatively low, the light wave is confined to the core thanks to the photonic bandgap effect. On the other hand, for the large cladding high-index  $n_a$ , the light confinement is governed by a light concentration capability due to  $n_c$ . Cladding low-index layer thickness at which the confinement loss exhibits the minimum loss, agrees well with that calculated from the generalized quarter-wave stack condition even for the nonhollow-core case in the  $TE_{01}$  mode, while the fact does not hold for the  $TM_{01}$  mode. The nonhollow-core Bragg fiber is superior to the hollow-core Bragg fiber for a small number of cladding-pairs from the view point of the confinement loss, whereas the situation is opposite to the former for a large number of cladding-pairs.

Keywords; Bragg fiber, Photonic crystal fiber, Antiresonant reflecting optical waveguide, Photonic bandgap,  
Quarter-wave stack condition

E-mail: ro004066@ed.ritsumei.ac.jp (Y. Suzuki)

---

立命館大学大学院理工学研究科創造理工学専攻  
Graduate school of Science and Engineering, Ritsumeikan University,  
Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

## 1 はじめに

近年、インターネットトラフィック量の増加に伴い、さらなる高速大容量化が求められている。特に、光ファイバは多くの通信システムの基盤であり、低損失化や広帯域化が求められる。しかし、従来の石英系光ファイバは、1979年に理論限界損失値  $0.2\text{dB/km}$  を達成しており、低損失化に限界が見え始めている。そこでフォトニック結晶の概念を応用した、フォトニック結晶ファイバ(PCF: photonic crystal fiber)が注目されている。PCFは導波原理によって二つに大別することができる。一つは、全反射を導波原理とした屈折率導波型PCFである。もう一つは、フォトニックバンドギャップ(PBG: photonic bandgap)を導波原理とする、フォトニックバンドギャップファイバ(PBF)である。本研究対象であるブラッグファイバ(Bragg fiber)もPBFの一種であり、周期的に配置されたクラッド高・低屈折率層によるブラッグ回折が、コアへの光閉じ込めを実現する[1]。また、PCFの固有値方程式は一般的に煩雑である。しかし、ブラッグファイバにおいては、漸近展開近似や四分の一波長積層(QWS: quarter-wave stack)条件の適用によって、数学的扱いが比較的容易となる[2,3]。これはブラッグファイバ固有の特性である。

本稿で対象とする非中空コアブラッグファイバは、特にコア屈折率とクラッド低屈折率層の屈折率が等しい条件において、一般に反共振反射(ARROW: antiresonant reflecting optical waveguide)型ファイバと呼ばれる。ARROW型ファイバの元となるARROWモデルの概念は、1993年、J. L. Archambaultらによって提唱された[4]。その後、フォトニック結晶の概念が明らかになり、2002年、ARROWモデルは二つのタイプの全固体PBFとして拡張された[5,6]。これは物理的に等しい構造に関して、二つの理論モデルが存在していることを示す。それらは、ARROWモデルによる反共振反射理論と、ブラッグファイバにおける位相理論であり、互いに独立して発展してきた。2008年、SPARROW(stratified planar ARROW)モデルによって、これらの理論の関連性が議論された[7]。2011年、ブラッグファイバにおいて、位相理論と反共振反射理論の等価性が示された[8]。

本稿では、非中空コアブラッグファイバについて、位相理論を用いて定性的理解に努める。特に、非中空コアとPBGが与える閉じ込め損失への影響を、理論的および応用的観点から考察する。非中空コアによるコア屈折率と、クラッド反射波の干渉効果の閉じ込め損失への影響を考察する。次に、非中空コアブラッグファイバにおける一般化QWS条件の有用性および問題点を指摘する。最後に、非中空コアに対するコア材料損失の影響を考慮したファイバ損失に関して述べる。非中空コアブラッグファイバにおいて、コア材料損失の影響は不可避であり、実用化を想定し、解析を行った。

## 2. ブラッグファイバにおける位相理論と一般化四分の一波長積層条件

ブラッグファイバの導波原理であるブラッグ回折と、一般化QWS条件について、簡単に説明する。図2.1に非中空コアブラッグファイバの構造を示す。ブラッグファイバは、屈折率 $n_c$ 、半径 $r_c$ のコアと、周期構造をもつ、高・低屈折率 $n_a, n_b$ のクラッド $a, b$ 層で構成される。クラッド周期は $\Lambda = a + b$ で表される。

図2.2にブラッグファイバの半径方向における、光波の振る舞いを模式的に示す。コアから光波が漏れる際に、コア・クラッド境界で、電磁界の一部が反射する。同様に、透過した電磁界は、各クラッド端で反射し、透過波と反射波に分かれる。ただし、高屈折率層から低屈折率層に入射する際、反射する光波は、位相変化 $\pi$ を受ける。このように、コア・クラッド境界、および各クラッド端で生じた反射波は、再びコアへ戻る。このとき、コア・クラッド境界における反射波と、各クラッドからの反射波が同相であれば、それらは干渉効果によって互いに強めあい、コアへの強い光閉じ込めを実現することができる。

このような閉じ込め条件を一般化QWS条件と呼ぶ。この条件は各クラッド $a, b$ 層について、

$$\kappa_a a = \pi q_1 - \pi/2, \quad \kappa_b b = \pi(q_2 - q_1) + \pi/2 \quad (q_1, q_2: \text{整数}, q_2 \geq q_1) \quad (2.1)$$

で与えられる[8]。ここで、 $\kappa_i$ は横方向伝搬定数を表す。また、 $q_1, q_2$ は整数であり、 $q_2 \geq q_1$ であれば、ど

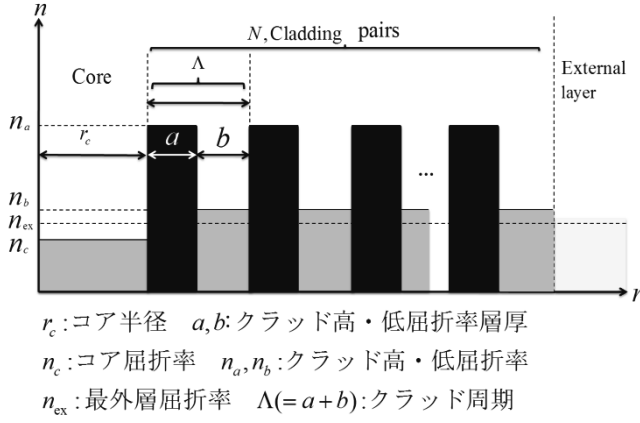


図 2.1 非中空コアブラッグファイバの構造

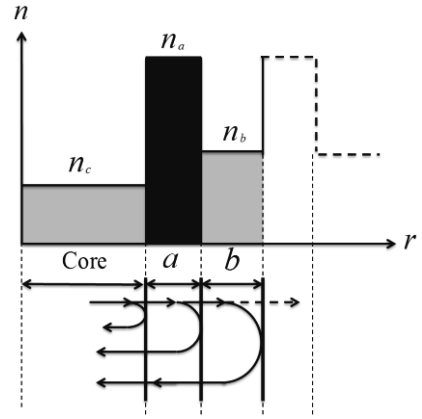


図 2.2 ブラッグファイバにおける光波の振る舞い

のような組み合わせでも成り立つ。また、式(2.1)で、特に  $q_1 = q_2 = 1$  のとき、

$$\kappa_a a = \kappa_b b = \pi/2 \quad (2.2)$$

を得る。これを QWS 条件と呼ぶ。この横方向伝搬定数  $\kappa_i$  から  $\beta$  を消去し、漸近展開法によって求められた固有値方程式を用いて、式(2.3)が得られる。

$$\frac{a}{\lambda_0} = \frac{q_1 - 1/2}{2} \left[ n_a^2 - n_c^2 + \left( \frac{U_{QWS} \lambda_0}{2\pi r_c} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad \frac{b}{\lambda_0} = \frac{q_2 - q_1 + 1/2}{2} \left[ n_b^2 - n_c^2 + \left( \frac{U_{QWS} \lambda_0}{2\pi r_c} \right)^2 \right]^{-1/2} \quad (2.3)$$

$$U_{QWS} = \begin{cases} j_{1,\mu}: \text{TE}_{0\mu} \text{モード} \\ j_{0,\mu}: \text{TM}_{0\mu} \text{モード} \\ j'_{v,\mu} (v \geq 1): \text{HE}_{v\mu} \text{モード} \\ j_{v,\mu} (v \geq 1): \text{EH}_{v\mu} \text{モード} \end{cases} \quad (2.4)$$

$j_{v,\mu}, j'_{v,\mu}$ :  $v$  次ベッセル関数  $J_v$  とその一次微分  $J'_v$  の  $\mu$  番目の零点

一般化 QWS 条件は、SPARROW モデル[7]での central gap point と完全に一致することが示されている[8]。

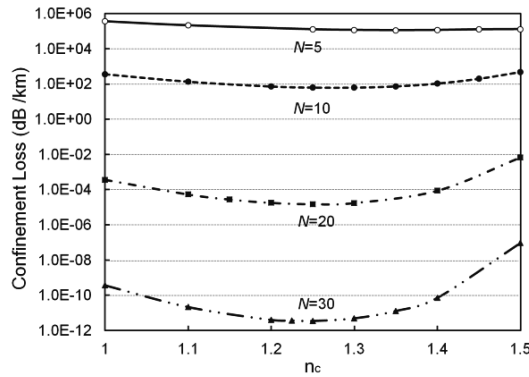
以下の解析では、クラッド層厚決定に式(2.3)を用いる。

### 3. 閉じ込め損失のコア屈折率依存性

本章では、非中空コアブラッグファイバでコア屈折率が、閉じ込め損失に与える影響について考察する。コア屈折率の上昇は、コア自身の光を集める効果を強める。本稿では、この効果をコア集光効果と呼ぶ。中空コアブラッグファイバでは、コア屈折率は低く、コア集光効果については議論されていない。そこで、閉じ込め損失への、コア集光効果と PBG の影響を調べる。なお、PBG が生じるためには、クラッド層が周期構造をもつこと、コア屈折率がクラッド低屈折率層よりも低い屈折率をもつことが必要条件である。本稿全体の特性解析には、数値解析法の一つである多層分割法[9]を用いる。

#### 3.1 閉じ込め損失に対するコア屈折率とクラッド層対数の影響

TE<sub>01</sub> モードの閉じ込め損失のコア屈折率依存性を図 3.1 に示す。解析に用いた主な構造パラメータは  $n_a = 2.5$ ,  $n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0 \mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 1.0 \mu\text{m}$  である。クラッド高・低屈折率層は、 $n_c = 1.0$  において QWS

図 3.1 TE<sub>01</sub>モードの閉じ込め損失のコア屈折率依存性

条件を満たすように固定した。また、縦軸は閉じ込め損失、横軸は $n_c$ の値を示している。各クラッド層対数  $N$  についての解析結果を示す。

図 3.1 から、いずれのクラッド層対数  $N$  でも、閉じ込め損失値は $n_c$ に対して穏やかに増減し、極小値は $n_c = 1.2 \sim 1.4$ の間で得られる。また、クラッド層対数  $N$  が増えるにしたがって、閉じ込め損失値は全体的に低下している。クラッド層対数  $N=30$  では閉じ込め損失の極小値がより顕著に確認できる。このとき、閉じ込め損失の極小値は、 $n_c = 1.25$ 付近で得られる。

これらの解析を行ったブラッグファイバのクラッド構造は、 $n_c = 1.0$ で QWS 条件を満たすように固定されている。しかし、閉じ込め損失値は、コア屈折率が、 $n_c = 1.0$ よりも大きい値で極小となっている。これは、コア集光効果が、光閉じ込めに寄与しているためである。一方、QWS 条件は、コア・クラッド境界、および各クラッド層からの反射波の位相に関する最適条件である。よって、クラッド層からの反射波の影響が強い場合に、QWS 条件の光閉じ込めへの寄与は顕著になる。図 3.1 では、クラッド層対数  $N$  が増えるにしたがって、閉じ込め損失の極小値は、コア屈折率 $n_c = 1.0$ に近づいている。

ブラッグファイバのコアへの強い光閉じ込めを実現するため、周期的なクラッド層による PBG と、コア集光効果が重要である。しかし、ブラッグファイバの構造によって、これらの効果の光閉じ込めへの寄与は異なる。例えば、クラッド層対数が少ない場合、PBG による十分な光閉じ込めを実現できないため、コア集光効果がより顕著になる。逆に、中空コアブラッグファイバのように、コア屈折率が低い場合、コア集光効果は弱くなり、PBG による光閉じ込めが重要になる。また、PBG と QWS 条件は密接に関係している。そのため、コア屈折率が低く、クラッド層対数が増えるほど、QWS 条件の寄与は大きくなる。特に、中空コアを用いる場合は、QWS 条件によって決定された精密なクラッド構造が重要である。

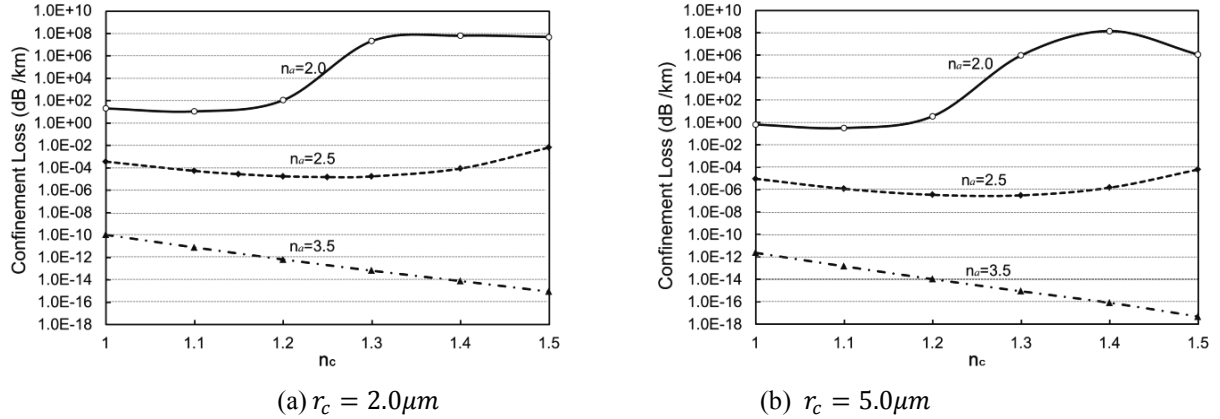
### 3.2 閉じ込め損失に対するコア屈折率とクラッド高屈折率の影響

閉じ込め損失のコア屈折率依存性を、クラッド高屈折率の関数として図 3.2(a),(b)に示す。図 3.2(a),(b)はそれぞれコア半径 $r_c = 2.0, 5.0 \mu m$  に対応しており、TE<sub>01</sub>モードに対する結果である。解析に用いた主な構造パラメータは、 $n_b = n_{ex} = 1.5, \lambda_0 = 1.0 \mu m, N = 20$ である。クラッド高・低屈折率層厚は、各コア半径において $n_c = 1.0$ で QWS 条件を満たすように固定された。また、縦軸は閉じ込め損失、横軸は $n_c$ の値を示している。

図 3.2(a)では、各線は $n_a = 2.0, 2.5, 3.5$ に対する結果を示している。 $n_a = 2.0$ の場合、閉じ込め損失値がコア屈折率 $n_c = 1.2$ あたりから急峻に上昇し、 $n_c = 1.3$ からはほぼ一定の値を示している。 $n_a = 2.5$ の場合では、 $n_c = 1.3$ あたりを極小値として、コア屈折率の変化に伴って、穏やかに増減している。また $n_a = 3.5$ の場合では、閉じ込め損失がコア屈折率に対して逆比例して低下している。

また、図 3.2(b)では、 $n_a = 2.0$ の場合、閉じ込め損失値がコア屈折率 $n_c = 1.2$ あたりから急峻に上昇している。しかし、図 3.2(a)とは異なり、 $n_c = 1.4$ あたりを極大値として、再びコア屈折率 $n_c = 1.5$ あたりで閉じ込め損失値が低下している。また、 $n_a = 2.5, 3.5$ の場合は、図 3.2(a)とほぼ同じ傾向を示している。



図 3.2 クラッド高屈折率層の屈折率に対する閉じ込め損失のコア屈折率依存性(TE<sub>01</sub>モード)

まず、これらの解析結果を、クラッド高屈折率層の屈折率が低い場合について考える。この条件では、各クラッド端から反射される光波の電磁界は弱くなる。そのため、十分な光閉じ込めを実現するためには、多くのクラッド層対数が必要となる。前節で述べたように、クラッド層対数が増えるにしたがって、QWS条件の寄与が大きくなる。そのため、この場合もQWS条件を満たすクラッド構造が重要である。

図 3.2(a),(b)の $n_a = 2.0$ に対する結果では、クラッド構造は $n_c = 1.0$ におけるQWS条件によって固定されている。そのため、 $n_c$ の増加に伴って、クラッド構造が各コア屈折率のQWS条件から外れていく。このとき、各反射波の干渉効果は弱くなり、閉じ込め損失が上昇している。図 3.2(a)では、コア屈折率の上昇に伴う、コア集光効果の増加は、あまり寄与していない。しかし、図 3.2(b)ではコア半径が $r_c = 5.0\mu\text{m}$ と大きく、コア集光効果が増大するため、 $n_c = 1.5$ あたりで再び閉じ込め損失が減少している。

次に、クラッド高屈折率層の屈折率が高い場合について考える。このとき、各クラッドから反射される光波は、相対的に大きな振幅をもつ。そのため、クラッド高屈折率層の屈折率が低い場合と比較して、より少ない周期構造で、強い光閉じ込めを実現することができる。よって、図 3.2(a),(b)の $n_a = 3.5$ の結果のように、 $n_c$ の増加に伴って、クラッド構造がQWS条件を満たさないにもかかわらず、閉じ込め損失値は減少している。よって、この条件では各反射波の干渉効果よりも、コア集光効果が閉じ込め損失へ寄与している。

これらの結果から、クラッド高屈折率層の屈折率が低い場合、各反射波による光閉じ込めの寄与が顕著であり、コア集光効果はあまり顕著でない。逆に、クラッド高屈折率層の屈折率が高い場合、各反射波の干渉効果が弱くても、コア屈折率の増加に伴う集光効果によって、強い光閉じ込めを実現できる。

3.1、3.2節の結果から、コア屈折率、クラッド高屈折率層の屈折率が低い構造では、コアへの光閉じ込めの観点から、各反射波の干渉効果が相対的に重要になる。よってQWS条件によるクラッド構造の最適化が、相対的に強い意味をもつ。

#### 4. コア屈折率とクラッド低屈折率層の屈折率が等しい条件下の閉じ込め損失のクラッド層厚依存性

本章では、コア屈折率とクラッド低屈折率層の屈折率が等しい条件 ( $n_c = n_b$ ) 下における閉じ込め損失のクラッド層厚依存性を中心に述べる。ここでは、QWS条件を満たす高・低屈折率層厚と、閉じ込め損失の極小値を与えるクラッド層厚を比較する。

##### 4.1 TE・TMモードに対する閉じ込め損失のクラッド低屈折率層厚依存性

$n_c = n_b$ 条件下におけるTE<sub>01</sub>・TM<sub>01</sub>モードに対する、閉じ込め損失のクラッド低屈折率層厚依存性を図 4.1(a),(b)に示す。主なパラメータは $n_c = n_b = n_{\text{ex}} = 1.5$ ,  $n_a = 2.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ ,  $N=10$ である。クラッド高屈折率層厚は各モードでQWS条件( $q_1 = 1$ )を満たすようにしており、TE<sub>01</sub>モードでは $a=0.1236\mu\text{m}$ 、TM<sub>01</sub>モードでは $a=0.1244\mu\text{m}$ である。縦軸は閉じ込め損失、横軸はクラッド低屈折率層厚である。また、図中の「◆」は、一般化QWS条件(式(2.3))を満たすクラッド層厚を示している。

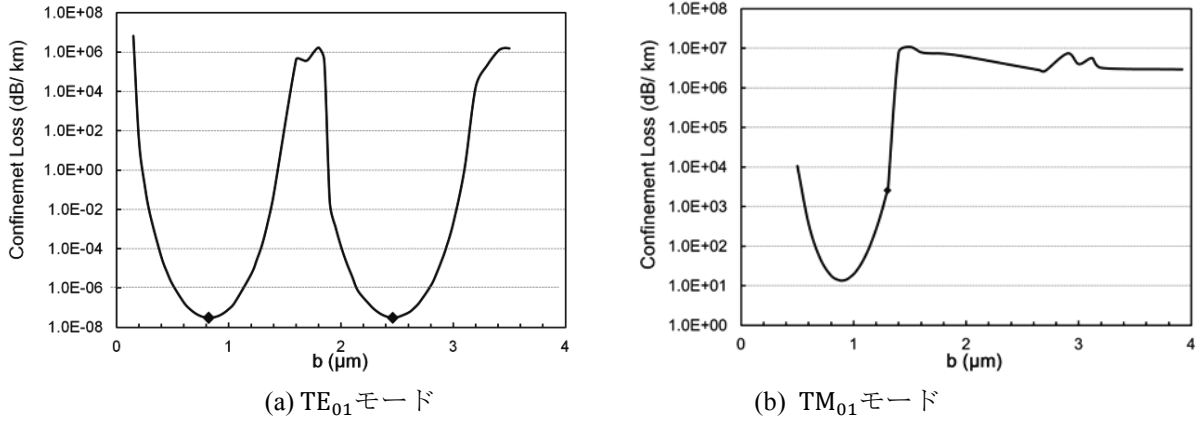
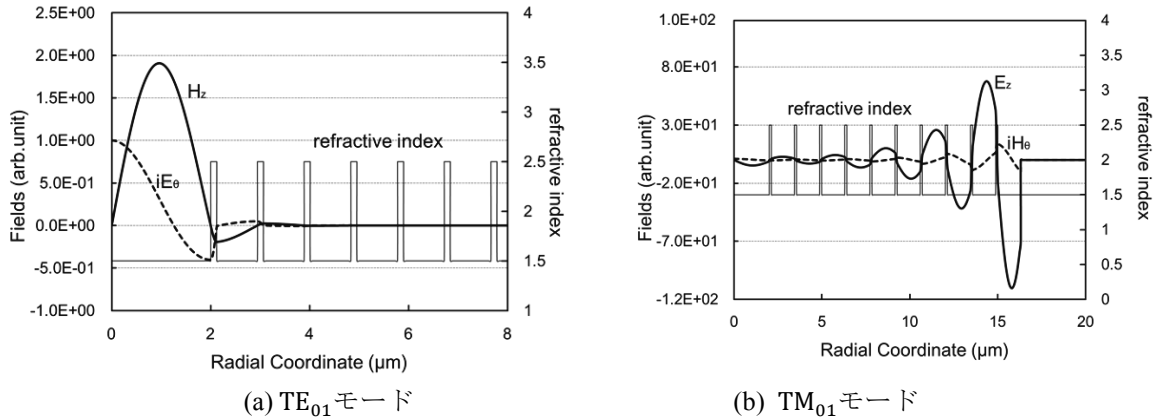
図 4.1  $n_c = n_b$ 条件下における閉じ込め損失のクラッド低屈折率層厚依存性

図 4.1(a)において、TE<sub>01</sub>モードに対する閉じ込め損失値は、クラッド低屈折率層厚が $b = 0.825$ 、 $2.470 \mu\text{m}$ あたりで極小値をとり、上下に変動している。このとき、一般化 QWS 条件を満たすクラッド低屈折率層厚は、 $b = 0.820 \mu\text{m}(q_2 - q_1 = 0)$ 、 $b = 2.460 \mu\text{m}(q_2 - q_1 = 1)$ であり、閉じ込め損失の極小値を示すクラッド低屈折率層厚との相対誤差は共に 0.5%程度であり、両者はほぼ一致している。これは、 $n_c = n_b$ 条件下における、TE<sub>01</sub>モードの一般化 QWS 条件が、低損失域の探索に関して有用であることを示す。

図 4.1(b)で、TM<sub>01</sub>モードにおける閉じ込め損失値は、 $b = 1.0 \mu\text{m}$ あたりを極小とし、その後で増加し、 $b = 1.6 \mu\text{m}$ あたりから緩やかに減少している。今の場合、一般化 QWS 条件を満たすクラッド低屈折率層厚は、 $b = 1.244 \mu\text{m}(q_2 - q_1 = 0)$ であり、閉じ込め損失の極小値からは大きくシフトしている。このときの  $b$  値の相対誤差は 45.2%である。これより大きな  $b$  値では、閉じ込め損失の極小値が確認できなかった。また、 $b = 3.0 \mu\text{m}$ あたりでの閉じ込め損失の増減は、計算上の誤差と考えられる。

これらより、TM<sub>01</sub>モードでは、ブラッグファイバにおけるクラッド低屈折率層の最適化が、 $n_c = n_b$ 条件下では一般化 QWS 条件を用いてできない。これは、式(2.3)の  $b$  層に関する一般化 QWS 条件から、 $n_c - n_b$ の項が消えることと関係している。一方、TE モードでは、閉じ込め損失が最小値を示すクラッド低屈折率層の値と、一般化 QWS 条件を満たすクラッド低屈折率層の値が、 $1 \leq n_c \leq n_b$ で、ほぼ一致することが確認されている[10]。それゆえ、TM モードにおける上記食い違いは、 $n_c - n_b$ の項の影響だけでは説明しきれない。

次に、TE・TMモード間の特性の違いを調べるため、一般化QWS条件を満たすクラッド構造における、電磁界の振る舞いを調べる。図4.2(a),(b)に、図4.1(a),(b)の一般化QWS条件を満たす構造の内、最小のクラッド低屈折率層厚に対する、TE<sub>01</sub>・TM<sub>01</sub>モードの電磁界分布を示す。左の縦軸は電磁界、右の縦軸は屈折率、横軸は半径座標を示している。構造パラメータは図4.1(a),(b)と同様である。

図 4.2  $n_c = n_b$ 条件下における一般化 QWS 条件を満たすクラッド構造における電磁界分布

TE<sub>01</sub>モードの電磁界分布では、ブラッグファイバのコアに電磁界が集中し、クラッド第2周期目あたりから電磁界の漏れが急激に減少している。また、電磁界はコア・クラッド境界で、極大・極小、もしくは零になっている[11]。これは、各クラッド層端からの反射波が、干渉によって強め合っているためである。一方、TM<sub>01</sub>モードの電磁界分布では、電磁界は半径座標 15 $\mu\text{m}$ 付近に集中しており、光波にとって、コアとクラッド低屈折率層の区別が曖昧になっている。

一般化QWS条件は、光波のコアへの閉じ込めを良くする条件である。TE<sub>01</sub>モードでは、図4.2(a)に示したように、コアへの強い光閉じ込めを実現している。また、図4.1(a)でも、閉じ込め損失の極小値を示すクラッド低屈折率層厚と、一般化QWS条件を満たすクラッド低屈折率層厚が、ほぼ一致している。しかし、TM<sub>01</sub>モードでは、図4.2(b)のように、コアの全領域に対する光パワ比が低くなり、電磁界はクラッド最外層あたりに集中している。これは、一般化QWS条件の前提であるコアでの干渉条件を満たさない。よって図4.1(b)の閉じ込め損失の極小値は、コアへの光閉じ込めとは別の要因によると考えられる。以上から、 $n_c = n_b$ 条件下のTM<sub>01</sub>モードでは、コアへの光閉じ込めを実現できない。この原因について、更に検討が必要である。

## 4.2 TM<sub>01</sub>モードでの閉じ込め損失のクラッド層厚依存性

4.1節の結果を受けて、TM<sub>01</sub>モードにおける、閉じ込め損失のクラッド高・低屈折率層厚依存性を考察する。本節の解析では、多層分割法での計算精度を向上させるため、層対数を  $N=20$  とした。

$n_c = n_b$ 条件下における、TM<sub>01</sub>モードの閉じ込め損失のクラッド高屈折率層厚依存性を図 4.3 に示す。解析に用いた主な構造パラメータは  $n_c = n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $n_a = 2.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $b = 1.306\mu\text{m}$ (QWS:  $q_2 - q_1 = 0$ ),  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ ,  $N=20$  である。縦軸は閉じ込め損失、横軸はクラッド高屈折率層厚である。また、図中の「◆」は、一般化 QWS 条件を満たすクラッド層厚を示している。図 4.3 から、閉じ込め損失値が、極小値を中心に、上下に変動しているのがわかる。また一般化 QWS 条件を満たすクラッド層厚と、閉じ込め損失の極小値を示すクラッド層厚は、ほぼ一致している。よって、クラッド高屈折率層厚の閉じ込め損失に関する最適化について、一般化 QWS 条件が有用であることが確認された。

図 4.4(a),(b)に、コア屈折率 $n_c = 1.45, 1.5$ での、閉じ込め損失のクラッド低屈折率層厚依存性を示す。パラメータは $n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $n_a = 2.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ ,  $N=20$  である。 $a$  は QWS 条件( $q_1 = 1$ )を満たし、 $n_c = 1.45(1.5)$ では $a = 0.1222(0.1244)\mu\text{m}$ である。縦軸は閉じ込め損失、横軸はクラッド低屈折率層厚である。

図 4.4(a)の $n_c = 1.45$ についての解析は、 $n_c = n_b = 1.5$ の条件に近く、 $n_c = 1.5$ の解析結果と比較する意図で行った。このときの、閉じ込め損失の極小値を与えるクラッド層厚と、一般化 QWS 条件を満たすクラッド層厚の相対誤差は、最小のクラッド低屈折率層厚( $q_2 - q_1 = 0$ )で 9.93%、2 番目に大きいクラッド低屈折率層厚( $q_2 - q_1 = 1$ )で 12.0%となった。一方、図 4.4(b)の $n_c = 1.5$ についての解析結果では、閉じ込め損失の極小値を与えるクラッド低屈折率層厚と、一般化 QWS 条件を満たすクラッド層厚の相対誤差は 30.6%であり、 $n_c = 1.45$ の場合と比較して大きい。以上から、TM<sub>01</sub>モードでは、 $n_c = n_b$ を満たす構造が、閉じ込め損失に関して、特殊な条件であることがわかる。

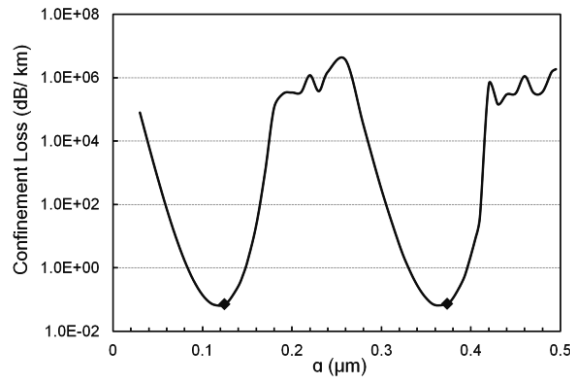
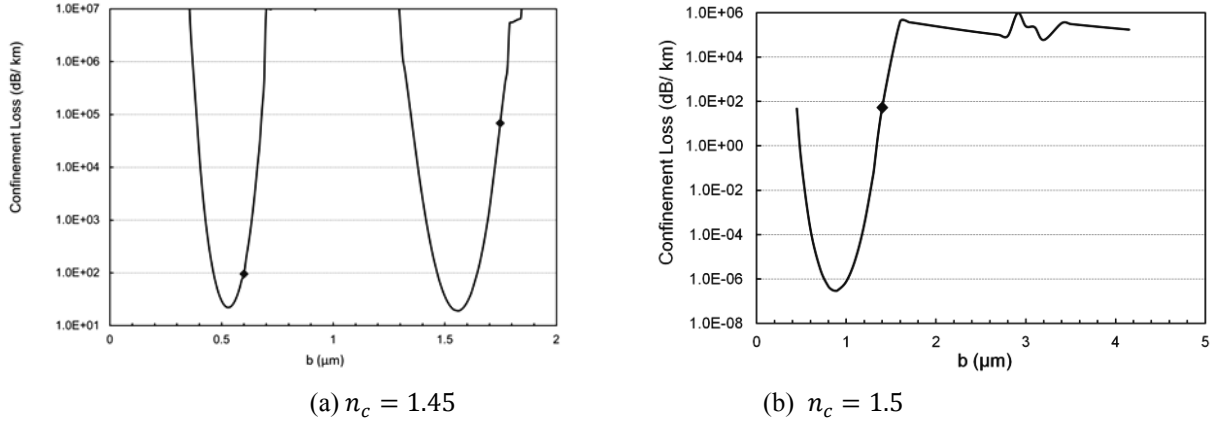


図 4.3 TM<sub>01</sub>モードにおける閉じ込め損失のクラッド高屈折率層厚依存性( $n_c = 1.5$ )


 図 4.4  $TM_{01}$ モードにおける閉じ込め損失のクラッド低屈折率層厚依存性( $n_b = 1.5$ )

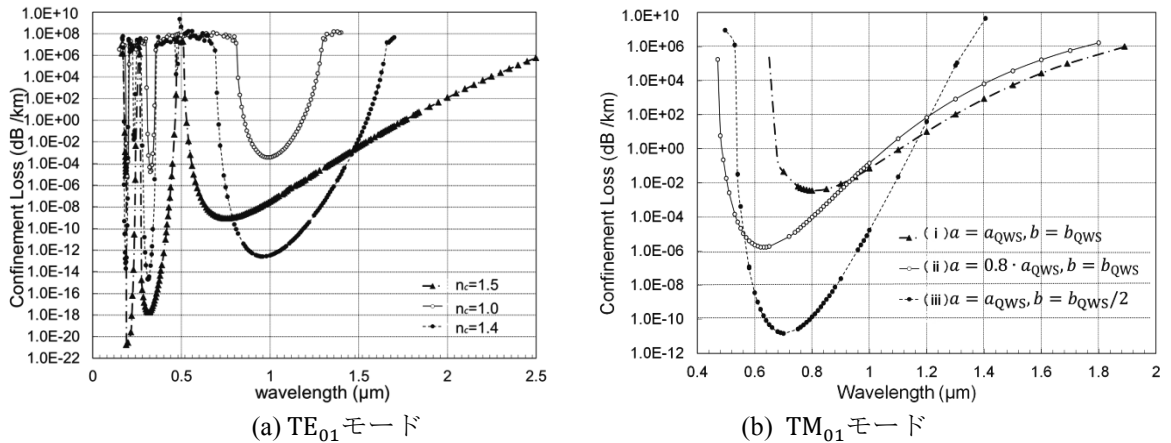
#### 4.3 $n_c = n_b$ 条件下における閉じ込め損失の波長依存性

前述したように、 $n_c = n_b$ 条件下ではクラッド低屈折率層における一般化 QWS 条件(式(2.3))から、 $n_c - n_b$ が消去される。このとき、一般化 QWS 条件から波長の情報が消え、クラッド低屈折率層厚は、波長に対して最適化されない。この条件が、閉じ込め損失に与える影響を調べるため、TE・TM モードにおける閉じ込め損失の波長依存性を調べる。

##### 4.3.1 TE モード

$TE_{01}$ モードの $n_c = n_b$ 条件下における、閉じ込め損失の波長依存性を図 4.5(a)に示す。解析に用いた主な構造パラメータは $n_a = 2.5$ ,  $n_c = n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0\mu m$ ,  $N = 10$ である。クラッド高・低屈折率層厚は、 $\lambda_0 = 1.0\mu m$ で QWS 条件を満たすように固定した後、波長のみを変化させた。縦軸は閉じ込め損失値、横軸は波長である。比較のため、コア屈折率 $n_c = 1.0, 1.4$ の結果を同時に示した。クラッド層厚は、 $n_c = 1.0, 1.4, 1.5$ に対してそれぞれ $a = 0.108, 0.119, 0.124\mu m$ ,  $b = 0.216, 0.404, 0.820\mu m$ である。

図 4.5(a)の $n_c = 1.5$ に関する閉じ込め損失の波長依存性では、 $\lambda_0 = 0.7, 0.31, 0.19\mu m$ 付近を、それぞれ極小値に、閉じ込め損失が増減している。特に、 $\lambda_0 = 0.7\mu m$ 近傍を極小値とする PBG は幅広く、長波長側でも比較的低い閉じ込め損失値を示している。また、ブラッグファイバ中を伝搬する光波に関する物理的な制約から、 $\lambda_\ell = \lambda_{QWS}/\ell$  ( $\ell$ : 奇数)を満たす時、閉じ込め損失が極小となることがわかっている[8]。しかし、 $n_c = n_b$ の場合には、閉じ込め損失の極小値を与える波長は、 $\lambda_\ell = \lambda_{QWS}/\ell$  ( $\ell$ : 奇数)と一致しない。ただし、短波長側では PBG 幅が狭くなるため、極小値を与える波長は見かけ上 $\lambda_\ell = \lambda_{QWS}/\ell$  ( $\ell$ : 奇数)に近い値を示している。


 図 4.5  $n_c = n_b$ 条件下における、閉じ込め損失の波長依存性



このような、 $n_c = n_b$ 条件下における閉じ込め損失の波長依存性は、クラッド低屈折率層厚に関する一般化QWS条件から、波長の情報が消去されることと関係していると推測できる。一般化QWS条件を満たすクラッド低屈折率層厚は、コア屈折率が $n_c = 1.5$ のとき $b = 0.819\mu\text{m}$ であり、 $n_c = 1.0$ での $b = 0.216\mu\text{m}$ と比較すると、約4倍大きい。これらの特性は、一般的にARROWモデルによって示唆された、高屈折率部の屈折率や厚さが、透過率バンドの主たる決定要因になるという結果[5,6]と良く符合している。

#### 4.3.2 TMモード

TM<sub>01</sub>モードの $n_c = n_b$ 条件下における、閉じ込め損失の波長依存性を調べる。TM<sub>01</sub>モードでは、4.2節で述べたように、QWS条件を満たすクラッド低屈折率層厚と、閉じ込め損失の極小値を示すクラッド低屈折率層厚が一致しない。この結果を考慮し、クラッド層厚がQWS条件を満たす場合と、そうでない場合を以下で比較する。 $n_a = 2.5$ ,  $n_c = n_b = n_{\text{ex}} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $N = 20$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ でQWS条件を満たすクラッド高屈折率層厚を $a_{\text{QWS}} = 0.1244\mu\text{m}$ 、クラッド低屈折率層厚を $b_{\text{QWS}} = 1.306\mu\text{m}$ と書くことにする。クラッド構造を (i)  $a = a_{\text{QWS}}$ ,  $b = b_{\text{QWS}}$ 、(ii)  $a = a_{\text{QWS}}$ ,  $b = b_{\text{QWS}}/2$ 、(iii)  $a = 0.8 \cdot a_{\text{QWS}}$ ,  $b = b_{\text{QWS}}$ の三種類に固定し、波長のみを変化させた。その解析結果を図4.5(b)に示す。

$n_c = n_b$ の場合、クラッド構造(i)では、TM<sub>01</sub>モードの場合も、図4.5(a)で示したTE<sub>01</sub>モードの結果と同様、閉じ込め損失の極小値を与える波長が、 $\lambda_\ell = \lambda_{\text{QWS}}/\ell$  ( $\ell$ : 奇数)と一致せず、短波長側にシフトしていることがわかる。クラッド構造(ii)では、QWS条件を満たすクラッド構造(i)と比較して、閉じ込め損失値は全体に減少し、極小値は相対的に短波長側にシフトしている。また、クラッド構造(iii)では、上の2つのクラッド構造と比較して、閉じ込め損失の極小値が最も短波長側にシフトしている。

よって、 $n_c = n_b$ 条件下では、TM<sub>01</sub>モードにおいてもTE<sub>01</sub>モードと同様に、 $\lambda_\ell = \lambda_{\text{QWS}}/\ell$  ( $\ell$ : 奇数)を満たす波長と、閉じ込め損失の極小値は一致しないことがわかる。しかし、クラッド構造(iii)の解析結果は、クラッド構造(ii)の解析結果と比較し、QWS条件を満たす構造から相対的に小さな変化にもかかわらず、閉じ込め損失の極小値は、短波長側に大きくシフトしている。これはクラッド低屈折率層厚の変化が、閉じ込め損失の波長依存性にあまり寄与しないことを示している。これは、前述した、 $n_c = n_b$ 条件下において、クラッド低屈折率層における一般化QWS条件から、 $n_c - n_b$ の項が消去されることと関係している。

### 5. 材料損失と閉じ込め損失の複合効果

本章では、非中空コアブラッグファイバにおける閉じ込め損失とコア材料損失の複合効果を、TE<sub>01</sub>モードについて説明する。閉じ込め損失と材料損失の複合効果を、本稿ではファイバ損失と呼ぶ。実際には、形成される材料による光の吸収効果は不可避である。近年、中空コアブラッグファイバに関して、クラッド層による材料損失と閉じ込め損失の複合効果の解析が行われた[12]。また、実際に作製された中空コアブラッグファイバでは、材料損失と閉じ込め損失間でのトレードオフが示された[13]。特に、非中空コアをもつブラッグファイバでは、クラッド材料損失だけでなく、コア材料損失と閉じ込め損失の競合関係が重要となる。

#### 5.1 コア材料損失のファイバ損失への寄与

本節では、コア材料損失のファイバ損失への寄与を調べるため、2つの解析結果を示す。

図5.1に、TE<sub>01</sub>モードのコア材料損失と閉じ込め損失の複合効果のコア半径依存性を、いくつかのコア屈折率について示す。コア屈折率は $n_c = 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5$ である。クラッド層厚は各コア屈折率においてQWS条件を満たすように決定した。また、コア材料損失は $\alpha_c = 10\text{dB/km}$ に固定し、クラッド材料損失は考慮していない。その他の構造パラメータは $n_a = 2.5$ ,  $n_b = n_{\text{ex}} = 1.5$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ ,  $N = 10$ である。縦軸はファイバ損失、横軸はコア半径である。

図5.1から、コア半径が増加するにつれ、ファイバ損失は減少し、コア材料損失値(10dB/km)に収束することがわかる。またコア屈折率が高いほど、相対的に小さなコア半径でも、良好な閉じ込め損失を示している。そして、 $n_c$ が大きいほど、相対的に小さいコア半径でコア材料損失の値に収束することがわかる。

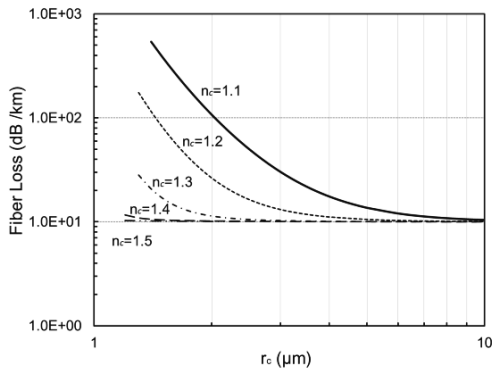


図 5.1 ファイバ損失のコア半径依存性  
(TE<sub>01</sub>モード)

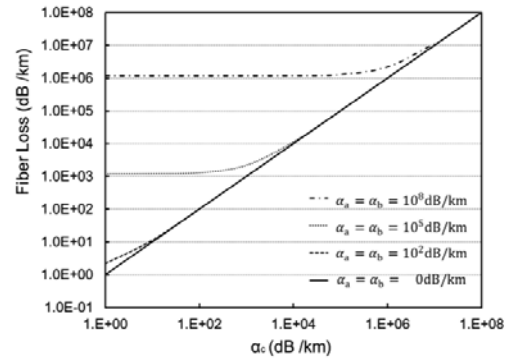


図 5.2 ファイバ損失のコア材料損失依存性  
(TE<sub>01</sub>モード)

図5.2に、TE<sub>01</sub>モードの各クラッド材料損失に対するファイバ損失のコア材料損失依存性を示す。解析に用いた主なパラメータは $n_a = 2.5$ ,  $n_c = n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ ,  $N = 10$ であり、クラッド層厚はQWS条件を満たすように決定した。この場合、コアとクラッド低屈折率層の屈折率が等しいことに留意せよ。縦軸は、コア材料損失と閉じ込め損失を考慮したファイバ損失、横軸はコア材料損失である。図中で、 $\alpha_a$ と $\alpha_b$ はそれぞれ、クラッド高・低屈折率層の材料損失を表す。

コア材料損失のみを考慮した場合では、ファイバ損失がコア材料損失に比例して増加している。また、コア材料損失がない場合、各クラッド損失を考慮したファイバ損失は、クラッド材料損失よりも約2桁高い値を示した。これは、コアへの光閉じ込めが強く、ファイバ損失がクラッド材料損失の影響を受けにくいためである。その後、コア材料損失の増加に伴って、各クラッド材料損失におけるファイバ損失が、コア材料のみを考慮した結果に漸近している。

これらの解析結果から、コア半径やコア屈折率の増加によって、ファイバ損失におけるコア材料損失の影響が強くなることがわかる。このように、コア材料損失の影響が強いとき、ファイバ損失に関して、コア材料損失が支配的であり、見かけ上、クラッド材料損失の影響をほとんど受けないことがわかる。

## 5.2 コア材料損失を考慮したファイバ損失の層対数依存性

中空コアブラッグファイバについて、クラッド材料損失を考慮したファイバ損失の層対数依存性が解析されている[12]。本稿では、非中空コアブラッグファイバにおける、コア材料損失を考慮したファイバ損失の層対数依存性の解析を行う。

図 5.3 に、 $n_c = 1.5$ の非中空コアブラッグファイバにおける、TE<sub>01</sub>モードに関するファイバ損失の層対数依存性を示す。コア材料損失は、 $\alpha_c = 0, 10, 100\text{dB/km}$ として解析を行った。その他の解析パラメータは、 $n_a = 2.5$ ,  $n_c = n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0\mu\text{m}$ ,  $\lambda_0 = 1.0\mu\text{m}$ である。クラッド層厚を、QWS 条件を満たすように固定した。縦軸は、コア材料損失を考慮したファイバ損失、横軸はクラッド層対数を示している。

図 5.3 でコア材料損失がない場合、層対数が増えるにしたがって、ファイバ損失値が指数関数的に低下しているのが確認できる。しかし、コア材料損失 $\alpha_c = 10, 100\text{dB/km}$ では、ある層数を境に、ファイバ損失は一定の値に落ち着いている。例えば、 $\alpha_c = 10\text{dB/km}$ では、ファイバ損失値は $N=4$ あたりで横ばいとなっている。このときのファイバ損失値は、コア材料損失値とほぼ同じ値であり、層対数 $N$ が増加するにしたがって、コア材料損失の影響が支配的になることがわかる。この傾向は、コア屈折率が大きくなるほど強くなる。

中空・非中空コアブラッグファイバの、TE<sub>01</sub>モードに対するファイバ損失のクラッド層数依存性を図 5.4 で比較する。中空コアブラッグファイバでは、クラッド材料損失のみを考慮している。また、非中空コアブラッグファイバでは、コアとクラッドの材料損失の両方を考慮した。なお、非中空コアブラッグファイバにクラッド材損失を付加しても、ファイバ損失値はほとんど変化しなかった。この理由は、5.1 節で示したように、コア屈折率が高い場合、コア材料損失がファイバ損失に対して支配的になるためである。

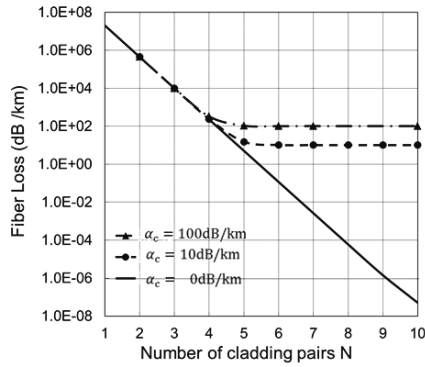


図 5.3 非中空コアブラッグファイバにおけるファイバ損失のクラッド層対数依存性

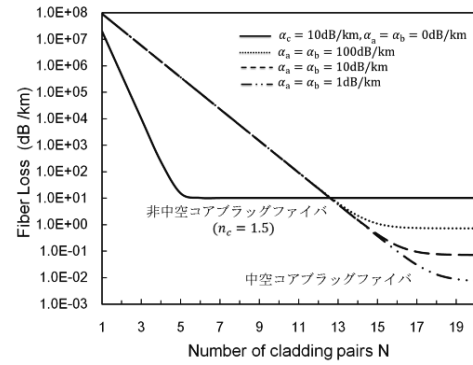


図 5.4 中空・非中空コアブラッグファイバにおけるファイバ損失の比較

図 5.4 から、クラッド層対数が 13 層対目に達するまでは、非中空コアブラッグファイバ( $n_c = 1.5$ )の方が低損失を実現できることがわかる。ただし、コア材料による光吸収の影響は大きく、13 層対目からは中空コアブラッグファイバの、ファイバ損失に関する優位性が伺える。もちろん、両者の優位性が逆転するクラッド層対数は、材料損失に依存することを付言しておく。

### 5.3 コア材料損失の有無によるファイバ損失の波長依存性比較

図 5.5 に、コア材料損失を考慮したファイバ損失の波長依存性を  $TE_{01}$  モードに対して示す。波長  $\lambda_0 = 1.0 \mu m$  で QWS 条件を満たすようにクラッド層厚を固定し、その後、波長のみを変化させて解析を行った。解析に用いた主な構造パラメータは  $n_a = 2.5$ ,  $n_c = n_b = n_{ex} = 1.5$ ,  $r_c = 2.0 \mu m$ ,  $N = 5$  である。コア材料損失は  $\alpha_c = 10 \text{ dB/km}$  とし、クラッド材料損失は考慮せずに解析を行った。

図 5.5 から、コア材料損失を付加した場合、波長の変化によらず、コア材料損失の影響を均一に受けているのが確認できる。ファイバ損失値は波長に依存せず、コア材料損失値の影響が顕著である。しかし、厳密には、様々な波長で非中空コアブラッグファイバを用いる場合、コア・クラッド屈折率は波長依存性をもつ。そのような効果は、近似的にセルマイヤーの分散式で与えられる。このように、各材料における屈折率の波長依存性によって、光の吸収効果が変化する。よって、実用化の際には、より厳密な解析が必要である。

## 6. まとめ

本稿では、非中空コアブラッグファイバにおける、閉じ込め損失とコア材料損失の特性について示した。非中空コアブラッグファイバでは、PBG と、コアの集光効果が光閉じ込めに寄与することを示した。また、コアやクラッド高屈折率層の屈折率が低いほど、PBG の光閉じ込めへの寄与が顕著である。この場合、

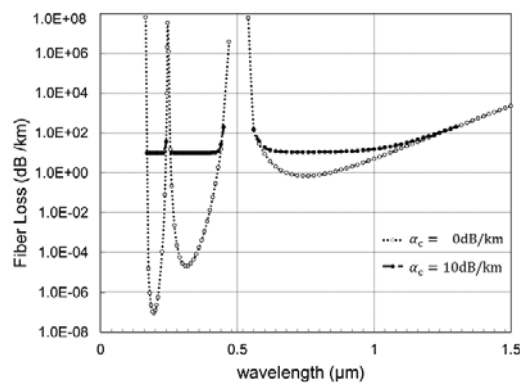


図 5.5 コア材料損失の有無によるファイバ損失の波長依存性 ( $TE_{01}$  モード)

QWS 条件がクラッド構造の最適化について重要になる。 $n_c = n_b$  条件下の非中空コアブラッグファイバでは、一般化 QWS 条件によるクラッド構造の最適化は、TE モードではクラッド高・低屈折率層に対して有効である。一方 TM モードでは、クラッド高屈折率層に対して有効であるが、低屈折率層に対してはあまり効果が見られない。本稿では、この理由について現象論的に説明を行った。今後もさらに検討が必要である。また、コア材料損失を考慮したファイバ損失の特性を示した。各種特性について、コア材料損失の影響が顕著であることを示した。

この結果から、長距離伝送用途には中空コアブラッグファイバの使用が有用であり、クラッド構造は一般化 QWS 条件を用いて、厳密に設計される必要がある。しかし、宅内配線やデバイス応用など、比較的低損失化が必要でない用途では、非中空コアブラッグファイバを用いる方が良い場合がある。それは、コアの集光効果が光閉じ込めに寄与し、少ないクラッド層対数で、厳密にクラッド層厚を設計しなくても、ある程度の低損失化を図れるためである。しかし、非中空コアブラッグファイバに関しても、ファイバレーザのような非線形デバイス応用では、コアへの強い光閉じ込めを実現する必要がある、一般化 QWS 条件が重要となる。上記で述べた、 $n_c = n_b$  条件下の非中空ブラッグファイバにおいて、一般化 QWS 条件と各伝搬モードとの関係を、明らかにする必要がある。これは、PBF 全体の定性的理解のためにも重要である。

## 参考文献

- [1] P. Yeh, A. Yariv, and E. Marom, "Theory of Bragg fiber," J. Opt. Soc. Am. **68**, 1196–1201 (1978).
- [2] J. Sakai, "Hybrid modes in a Bragg fiber: general properties and formulas under the quarter-wave stack condition," J. Opt. Soc. Am. B, **22**, 2319–2330 (2005).
- [3] J. Sakai, "Electromagnetic interpretation of the quarter-wave stack condition by means of the phase calculation in Bragg fibers," J. Opt. Soc. Am. B, **23**, 1029–1036 (2006).
- [4] J. L. Archambault, R. J. Black, S. Lacroix, and J. Bures, "Loss calculations for antiresonant waveguides," J. Lightwave Technol. **11**, 416–423 (1993).
- [5] N. M. Litchinitser, A. K. Abeeluck, C. Headley, and B. J. Eggleton, "Antiresonant reflecting photonic crystal optical waveguides," Opt. Lett. **27**, 1592–1594 (2002).
- [6] N. M. Litchinitser, S. C. Dunn, B. Usner, B. J. Eggleton, T. P. White, R. C. McPhedran, and C. M. de Sterke, "Resonances in microstructured optical waveguides," Opt. Express, **11**, 1243–1251 (2003).
- [7] K. J. Rowland, S. V. Afshar, and T. M. Monro, "Bandgaps and antiresonances in integrated-ARROWs and Bragg fibers; a simple model," Opt. Express, **16**, 17935–17951 (2008).
- [8] J. Sakai and Y. Suzuki, "Equivalence between in-phase and antiresonant reflection conditions in Bragg fiber and its application to antiresonant reflecting optical waveguide-type fibers," J. Opt. Soc. Am. B, **28**, 183–192 (2011).
- [9] J. Sakai and H. Niino, "Confinement loss evaluation based on a multilayer division method in Bragg fibers," Opt. Express, **16**, 1885–1892 (2008).
- [10] J. Sakai, "Analytical expression of confinement loss in Bragg fibers and its relationship with generalized quarter-wave stack condition," J. Opt. Soc. Am. B, **28**, 2740–2754 (2011).
- [11] J. Sakai and J. Sasaki, "Hybrid modes in a Bragg fiber: dispersion relation and electromagnetic fields," J. Opt. Soc. Am. B, **23**, 1020–1028 (2006).
- [12] J. Sakai and N. Nishida, "Confinement loss, including cladding material loss effects, in Bragg fibers," J. Opt. Soc. Am. B, **28**, 379–386 (2011).
- [13] B. Ung, A. Dupuis, K. Stoeffler, C. Dubois, and M. Skorobogatiy, "High-refractive-index composite materials for terahertz waveguides: trade-off between index contrast and absorption loss," J. Opt. Soc. Am. B, **28**, 917–921 (2011).



## 線虫 *Caenorhabditis elegans* の発生ステージにおける 定量プロテオーム解析

物部香奈美<sup>1)</sup>, 遠里由佳子<sup>1,2)</sup>, 早野俊哉<sup>1,3)</sup>, 伊藤将弘<sup>1,2)</sup>

---

## Quantitative Proteomic Analysis of 3 Developmental Stages in *Caenorhabditis elegans*

Kanami Monobe<sup>1)</sup>, Yukako Tohsato<sup>1,2)</sup>, Toshiya Hayano<sup>1,3)</sup>, Masahiro Ito<sup>1,2)</sup>

*Caenorhabditis elegans* is a model multicellular organism, and its genome sequencing project was completed in 1998. The genome is the blueprint of the life system. However, directly elucidating the life system from the genome is difficult, even with the recent advances in biotechnology. The proteome, which is directly related to biological functions, has become important for understanding the life system of multicellular organisms. We initiated a nematode proteome project for comparing and analyzing protein expression at different developmental stages and culture temperatures in 2 nematodes—*C. elegans* and *C. briggsae*. In this study, we focused on the 3 developmental stages of *C. elegans*—the embryo stage, larval 1 stage (L1), and adult stage—for comparative proteome analysis using 2D-DIGE and iTRAQ. By performing 2D-DIGE, 1,214 spots were detected reproducibly in 3 developmental stages and 204 spots of them were identified. By shotgun analysis using iTRAQ, 1,239 proteins were identified. These spots and proteins indicating differing protein expression levels at the 3 developmental stages were analyzed by the Tukey-Kramer test and were classified to functional annotation.

Keywords: Proteomics, *Caenorhabditis elegans*, Development, 2D-DIGE, iTRAQ, LC-MS/MS

Email: maito@sk.ritsumeai.ac.jp (M. Ito)

---

<sup>1)</sup> 立命館大学大学院理工学研究科情報理工学専攻生命情報科学コース

<sup>2)</sup> 立命館大学生命科学部生命情報学科, <sup>3)</sup> 立命館大学生命科学部生命医科学科

<sup>1)</sup> Graduate School of Science and Engineering, Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

<sup>2)</sup> Department of Bioinformatics, Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

<sup>3)</sup> Department of Biomedical Sciences, Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

## 目的

1990年にヒトの全ゲノムを解読するヒトゲノムプロジェクトが発足し、2001年にはドラフトゲノム配列が、2003年には完全ゲノム配列が解読された[1]。線虫 *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) は、ヒトゲノムプロジェクトのパイロット的な位置づけで、全ゲノム配列の解析が進められ、1998年に多細胞生物としては初めて全ゲノム配列が決定された[2]。ゲノムには生命の設計図が刻まれていることから、得られたゲノム配列から生命システムの解明が試みられたが、ゲノム配列や比較ゲノムの解析だけでは解明することは困難であることもわかってきた。すなわち、ゲノム配列は生物の情報に過ぎず、転写や翻訳、更には翻訳後修飾などのいくつかの発現調節を受けたタンパク質が生体内の機能を担うため、ゲノムと機能との関係はあまりにも間接的すぎるのである。よって、生命システムの解明には直接的なプロテオーム解析が必須となる。また、タンパク質は時期や環境などの条件によって発現する種類や量は異なるため[3][4]、従来の定性的な情報に加えて定量的な情報も獲得しなければならない。

上述した1998年に多細胞生物として初めて全ゲノム配列が決定された線虫 *C. elegans* は、成虫で体長1 mmほどの小さな多細胞生物で、無色透明なため細胞や組織を直接観察することができる。その利点を生かし、微分干渉顕微鏡を用いて細胞分裂の追跡が行われた結果、生物として初めて全細胞系譜が解明された[5]。また、筋肉、消化管、神経系や上皮など動物として基本的な体制を持っており、更に、最適生育温度20℃でライフサイクルが約3日[6]と短く、雌雄同体の1個体から多くの卵が産卵されるため、研究室で大量培養するのに適している。これらの事実から、*C. elegans* は多細胞生物の生命システムを理解する上で最適なモデル生物の1つである。本研究では、多細胞生物を用いた生命システムの解明と理解を目指し、線虫 *C. elegans* とその近縁種の *Caenorhabditis briggsae* を用いて、発生ステージと培養温度ならびに種間といった異なる3つの観点からの大規模なタンパク質発現の比較解析を行うプロジェクトを進めている。

本研究では、プロジェクトを進めるにあたり比較を行う際の軸となる、生育最適温度である20℃で培養した *C. elegans* の胚発生期と幼虫第1期、並びに成虫期の3発生ステージにおける定量的なプロテオーム解析を行った。タンパク質の網羅的な解析には、2D-DIGE (Two-Dimensional Difference Gel Electrophoresis) と iTRAQ (Isobaric Tag for Relative and Absolute Quantitation) の2つのツールを用いて定量的なデータを取得した。これら2つのツールを用いて得られた定量情報から、統計的手法により各発生ステージで有意に発現しているタンパク質を抽出し、これらが持つ機能から発生におけるシステムの解明を目指した。

## 方法

### 試料採取

20℃で培養した *C. elegans* のN2株を用い、下記手法により胚発生期、幼虫第1期及び成虫期の3発生ステージの試料を採取した。まず、親虫が腹部に卵を3-4個持った時期にアルカリブリーチ法にて卵を回収し、その一部を胚発生期の試料とした。次に、残りの卵を20℃、135 rpmでS Basalにて一晩培養し、翌日孵化した線虫の一部を採取し、幼虫第1期の試料とした。更に、残りの線虫の個体数を数え、S Basalと餌である大腸菌 OP50を加えて培養を行い、線虫が腹部に3個程度持った時期に、スクロース浮遊法にて親虫を回収し、成虫期の試料とした。

## 2D-DIGE

採取した各試料を超音波処理により破碎し、2-D Clean-Up Kit (GE Healthcare) を用いてタンパク質を精製した。次に DC Protein Assay (BIO RAD) を用いてタンパク質を定量し、各試料のタンパク質量を 40  $\mu\text{g}$  になるよう分取した。各ステージ別日に 3 回採取した全 9 種類の試料を等タンパク量ずつ混合したものを内部標準とし Cy2 で蛍光標識し、Cy3 と Cy5 で各試料を標識した (表 1)。これら標識した 3 種類の試料を混合し、1 次元目に pH3-10 の IPG ストリップゲル (BIO-RAD)、2 次元目に 10 %ポリアクリルアミドゲルを用いて 2D-DIGE を行った。泳動後のゲルを Typhoon9400 (GE Healthcare) を用いて画像を取り込み、スポットを検出し、ゲル間のマッチングを行った。マッチングできたスポットのうち、3 発生ステージすべてにおいて 3 枚中 2 枚以上のゲルで発現しているスポットのみを解析対象とし、発現量を取得した。各スポットにおける発現量は、ゲル毎に内部標準に対する各試料スポットの正規化後の発現量比を底 2 で対数を算出し、各発生ステージで平均を取った値を用いた。

表 1. 泳動試料と標識試薬の組み合わせ

| ゲル名 | Gel 1    | Gel 2 | Gel 3    | Gel 4    | Gel 5 |
|-----|----------|-------|----------|----------|-------|
| Cy2 | 内部標準     | 内部標準  | 内部標準     | 内部標準     | 内部標準  |
| Cy3 | 胚発生期①    | 成虫期①  | 幼虫第 1 期② | 胚発生期③    | 成虫期③  |
| Cy5 | 幼虫第 1 期① | 胚発生期② | 成虫期②     | 幼虫第 1 期③ | —     |

### タンパク質の発現量変化に基づいた分類

Tukey-Kramer 法を用いた多重比較解析により、各発生ステージ間の発現量変化に有意差があるか検定 ( $q < 0.1$ ) を行った。この結果に基づき、発現量変化を分類した (図 1)。

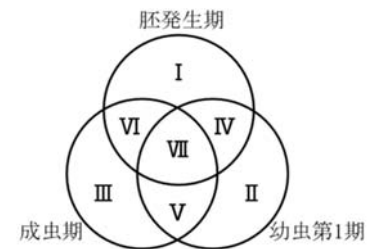


図 1. 発現量変化に基づいた分類

### タンパク質の同定

発現量変化に有意差が見られたスポットを泳動ゲルから切り出し、ペプチドを抽出するためにトリプシン消化を行った。得られたペプチド試料を脱塩した後、LC-MS/MS を用いてペプチド質量の測定を行った。ProteinPilot (Applied Biosystems) を用いてデータベース検索を行い、タンパク質を同定した。

### 機能アノテーション

分類毎に DAVID Bioinformatics Resource (<http://david.abcc.ncifcrf.gov/>) を用いて、Gene Ontology (GO) による機能アノテーションを行った。解析には各分類で同定されたタンパク質のデータを用いて、生物学的プロセス (Biological process) の 2 階層目を参照した。

### iTRAQ を用いたショットガン解析

上記と同様に試料のタンパク質精製・定量を行い、各発生ステージの試料 50  $\mu\text{g}$  に対し、トリプシン消化した後、得られたペプチドを発生ステージ毎に異なる iTRAQ 試薬にて標識した。これらの試料を混合し、強陽イオン交換カラムクロマトグラフィーにて 9 画分に分画し、脱塩した後 LC-MS/MS にてペプチド質量を測

定した。得られた測定結果から、ProteinPilot でデータベース検索しタンパク質の同定を行った。この解析を 3 回行った。同定タンパク質の発現量は、ProteinPilot から取得した胚発生期に対する他ステージの発現量比データに対して底が 2 の対数を求め、各発生ステージで平均を取った値を用いた。

#### タンパク質の発現量変化に基づいた分類と機能

2D-DIGE と同様にタンパク質の発現量変化から、Tukey-Kramer 法を用いてベン図に分類した。また、分類に基づいて DAVID を用い、GO による機能アノテーションを行った。

## 結果

2D-DIGE を行った結果において、3 発生ステージ全てにおいて 3 枚中 2 枚以上で発現している再現性の高い 1,214 スポットを獲得した。これらのスポットの発現量データに対して Tukey-Kramer 法による多重比較解析を行った結果、477 スポットにおいて発生ステージ間で発現量に有意な差を示した。これらのスポットは、発生において特徴的なタンパク質である可能性が高いため、LC-MS/MS を用いて 204 スポットから 115 種のタンパク質を同定した。その内の 28

表 2. 各分類のスポット数と同定数

| 分類  | スポット数 | 同定<br>スポット数 | 同定<br>タンパク質数 |
|-----|-------|-------------|--------------|
| I   | 167   | 36          | 10           |
| II  | 67    | 24          | 17           |
| III | 65    | 34          | 28           |
| IV  | 5     | 1           | 1            |
| V   | 128   | 80          | 64           |
| VI  | 45    | 28          | 8            |

タンパク質は、複数のスポットから同定された (図 1, 表 2)。これらタンパク質の発生ステージ毎の特徴を調べるために、DAVID で GO による機能アノテーションを行った (表 3)。

表 3. 2D-DIGE で同定されたタンパク質の各ステージの特徴

| 発生ステージ             | GO term                                                                                                                                                                                                          | タンパク質                                                                                                                                                                                              |
|--------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 胚発生期<br>(分類 I)     | Multicellular organismal development<br>Positive regulation of growth<br>Regulation of growth<br>Positive regulation of biological process<br>Catabolic process                                                  | PAS-4, SIP-1, PBS-1, F17C11.9, HSP-4, VIT-2,<br>NUO-5, T05H10.6                                                                                                                                    |
| 幼虫第 1 期<br>(分類 II) | Organelle organization<br>Post-embryonic development                                                                                                                                                             | FTT-2, PAR-5, TBB-1, SGT-1, LEV-11, RPT-3,<br>RPS-0, UNC-27                                                                                                                                        |
| 成虫期<br>(分類 III)    | Cellular metabolic process<br>Primary metabolic process<br>Regulation of growth<br>Catabolic process<br>Positive regulation of growth<br>Positive regulation of biological process<br>Post-embryonic development | ACO-1, AAGR-3, EFT-2, C04C3.3, EEF-1a.2,<br>ALH-8, BCAT-1, EFT-3, R07H5.8, UCR-2.1,<br>PMT-2, ECH-6, UCR-1, R11A5.4, GDH-1,<br>CTH-2, GTA-1, ALDO-2, CTS-1, TKT-1,<br>AHCY-1, PDI-1, SAMS-1, HSP-3 |

更に網羅的プロテオーム解析を iTRAQ によるショットガン解析を計 3 回行った。その結果、合計 1,239 のタンパク質の同定結果と定量情報を獲得した。3 回中 2 回の測定で同定された 436 タンパク質に対して、上述の 2D-DIGE と同様の分類 (図 2) と機能アノテーション (表 4) を行った。

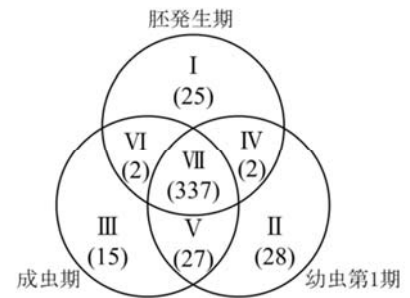


図 2. 多重比較解析による分類

表 4. iTRAQ で同定されたタンパク質の各ステージの特徴

| 発生ステージ             | 生物学的プロセス                                                                                                                               | タンパク質                                                                                                                                                         |
|--------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 胚発生期<br>(分類 I)     | Embryonic development<br>Multicellular organismal development<br>Determination of adult life span<br>Aging                             | ZK1236.5, F55A11.1, ATP-3, F32E10.6, CDC-37, DSS-1, TPXL-1, RPS-4, RPS-10, ICD-1, F27D4.1, PBS-7, SIP-1, C29E4.12, RPL-27, ATP-4, VIT-2, RPL-36, CYN-7, RPL-5 |
| 幼虫第 1 期<br>(分類 II) | Organelle organization<br>Positive regulation of biological process                                                                    | C08H9.2, RPS-17, C34E7.4, UCR-2.3, C53C9.2, ANC-1, LEV-11, F56D1.3, LMN-1, VHA-13, DEB-1, TAG-192                                                             |
| 成虫期<br>(分類 III)    | Positive regulation of growth<br>Regulation of growth<br>Positive regulation of biological process<br>Regulation of biological process | C15C7.5, IFA-2, RPL-24.2, RPL-25.1, T02H6.11, PDI-1, NPA-1, GDH-1                                                                                             |

※タンパク質は各発生ステージで見出された GO term の中に含まれるものから重複を除いて記載

## 考察

3 発生ステージにおいて網羅的なタンパク質発現量データを獲得するために、2D-DIGE を用いてタンパク質の分離・可視化を行った。再現性の高いスポットを 1,214 獲得し、多重比較解析を行い、477 スポットにおいて発生ステージ間に有意な差が見られた。発現量変化に有意差があるスポットを中心に質量分析計を用いて解析を行った結果、204 スポットのタンパク質を同定したが、その数は約 60 %に当たる 115 個であった。28 タンパク質が複数のスポット (平均 4.2 スポットから 1 タンパク質) から同定された。それらの多くは、等電点や分子量の移動度が異なっていた (図 3)。その原因は、タンパク質のリン酸化や糖鎖修飾などの翻訳

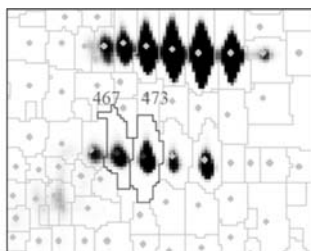


図 3. EFT-2 が同定された 2 スポット

後修飾による影響と考えている[7][8]。そこで複数のスポットから同定された 28 タンパク質に対しての修飾サイトを UniProt で調査したところ、5 タンパク質の 10 アミノ酸サイトで翻訳後修飾されることがわかった (表 5)。更に、PhosphoPep (<http://www.phosphopep.org/index.php>) を用いてリン酸化部位の予測を行ったところ、8 タンパク質 9 サイトがリン酸化部位であると予測された。以上より、今回の同定で複数のスポットで同定されたタンパク質では翻訳後修飾されていることが示唆された。今後、これらのタンパク質に対して質量分析



計を用いた翻訳後修飾の解析も必要である。

表 5. 修飾サイトが確認できたタンパク質

| タンパク質名 | 機能                            | 修飾 (残基番号)                                                        |
|--------|-------------------------------|------------------------------------------------------------------|
| VIT-2  | 初期発生中の栄養分の源である卵黄タンパク質 YP170   | N-linked Glycosylation (1268)                                    |
| VIT-6  | 初期発生中の栄養分の源である卵黄タンパク質 YP88    | N-linked Glycosylation (252, 1288)                               |
| EFT-2  | 翻訳伸長因子, GTP 結合タンパク質           | Phosphothreonine (57, 59)<br>Diphthamide (709)                   |
| VHA-13 | 液胞 ATPase の周辺複合体 V1 の触媒サブユニット | N-acetylalanine (2)                                              |
| ASP-6  | アスパラギン酸プロテアーゼ                 | N-linked Glycosylation (74)<br>Disulfide bond (102+106, 312+344) |

一方, iTRAQ 解析では, 1,239 タンパク質を同定したが, その数は *C. elegans* の総遺伝子数の高々約 5 % であった. その原因の 1 つとして, 今回の測定試料には親水性のタンパク質のみを解析したことがあげられる. *C. elegans* は, 全タンパク質の約 30 % が膜タンパク質と予測されており [9], 疎水性タンパク質を含めた網羅的な解析も行う必要がある.

次に, 発生ステージでの特徴的を見出すため, 胚発生期, 幼虫第 1 期, 成虫期について DAVID における生物学的プロセスの GO term を用いて機能アノテーションを行った (表 3, 4). 胚発生期では, 2D-DIGE と iTRAQ の両方で時間経過とともに多細胞生物の発生に関係するタンパク質を意味する Multicellular organismal development が特異的な機能アノテーションであった. 例えば, Proteasome subunit alpha type-7 (PAS-4) は細胞質と核に分布しているタンパク質であるが, *pas-4* の欠損は酸化ストレスへの応答を制御するためのタンパク質である skinhead-1 (SKN-1) の活性をもたらす. 同様に Proteasome beta subunit (PBS-1) も胚発生期で高発現であった. この *pbs-1* (RNAi) でも SKN-1 が活性化される. 例に挙げた 2 つのプロテアソーム関連遺伝子は, 欠損すると胚致死になることから初期胚発生には重要であり, 本研究で発生ステージにおける定量的なデータを得られたことは有意義である. また, mRNA レベルで卵母細胞と胚で強発現する分子シャペロンの Stress-induced protein 1 (SIP-1) も胚発生期特異的なタンパク質であると同定され, その定量的データを獲得した. 更に, iTRAQ により同定された 20 のタンパク質のうち 5 つはリボソームタンパク質であった. 特に, Ribosomal protein, small subunit (*rps-10*), Ribosomal protein, large subunit (*rpl-36*), Ribosomal protein, large subunit (*rpl-5*) の 3 つは胚致死の変異体を示すため, これらの胚発生期特異的に発現するリボソームが, 胚発生期に重要なタンパク質を合成していると考えられる. 他に, ATP synthase subunit (ATP-3), 26S proteasome complex subunit dss-1 (DSS-1) やプログラム細胞死に関わる Transcription factor BTF3 homolog (ICD-1), 細胞分裂に関わる Hsp90 co-chaperone cdc37 (CDC-37) と TPX2 (Targeting Protein for Xenopus Klp2)-Like (TPXL-1) などのタンパク質も胚発生期で高発現していた. 胚発生期特異的に同定されたタンパク質の約 70 % は欠損させると胚致死になることがわかり, 本研究ではそれらタンパク質の定量的データを獲得できた. また, 幼虫第 1 期で有意に同定されたタンパク質の多くは, 生物学的プロセスの Organelle organization (細胞内のオルガネラの分解や組立と構成成分の配置やその結果細胞レベルでの機能) に含まれていた. 例えば, Tubulin beta-1 chain (TBB-1) やアクチン結合ドメインを持つ Nuclear anchorage protein 1 (ANC-1), トロポミオシン関連の



Levamisole resistant protein 11 (LEV-11) や Troponin I 2 (UNC-27) などが有意に高発現していた。これらの表現型は、幼虫の停止や幼虫致死など幼虫期に特異的であった。それ以外でも、特筆する点として運動や形態に異常となる表現型を示した。従ってこれらタンパク質群は幼虫第 1 期で重要な役割を担っている可能性が高い。また、体細胞分裂時の核膜の分解、再構成に関与する線虫で唯一の Lamin-1 (LMN-1) も iTRAQ 解析の結果で見られた。ラミンのリン酸化、脱リン酸化により核膜の内面を強化する中間径フィラメント核ラミナの分解と再生は制御され、有糸分裂に深く関わっている[10]。 *C. elegans* では孵化直後の体細胞数は 558 であるが、成虫の体細胞数は 959 になるため幼虫期にも盛んに体細胞分裂が行われていることに関連して LMN-1 の発現量が幼虫第 1 期で増加していると考えられる。更に、成虫期では Cellular metabolic process と Primary metabolic process に属する代謝関連のタンパク質が有意であったので、代謝データベース Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG, <http://www.genome.jp/kegg/>) を用いて、これらタンパク質が担

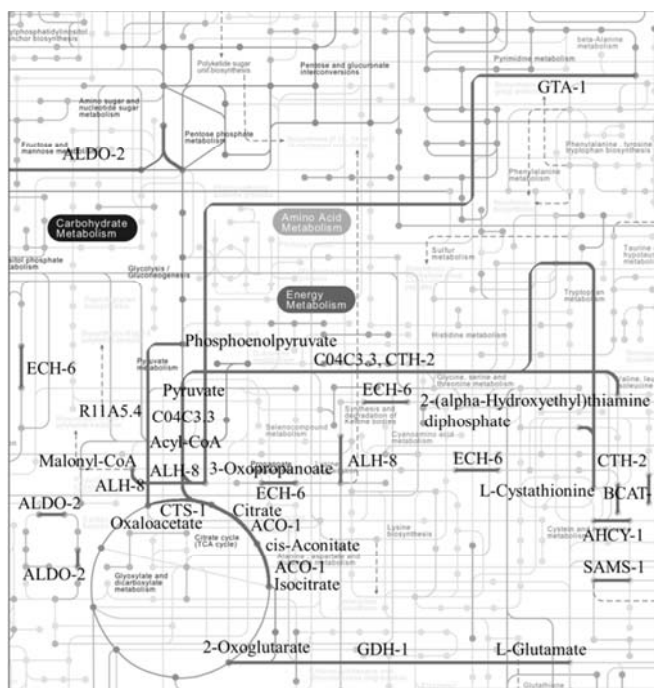


図 4. 代謝マップと同定タンパク質が担う経路



図 5. *R11A5.4* の *in situ* ハイブリダイゼーション  
*in situ* ハイブリダイゼーションにより *R11A5.4* の mRNA が発現している箇所が黒く色づいている

う代謝経路を調査した結果、多くがエネルギー生産に直接関わる中央代謝系に関連していることが見出された (図 4)。即ち、成虫期では他の発生ステージに比べ、エネルギー生産が活発に行われ消費されていると考えられる。これらのタンパク質の発現部位を mRNA レベルであるが The Nematode Expression Pattern DataBase (NEXTDB, <http://nematode.lab.nig.ac.jp/>) を用いて調べた結果、腸、産卵口や生殖腺を中心に体全体に発現していることを確認した。図 5 に例を示す。これらの結果から、成虫期で発現が有意であったタンパク質の多くは、生殖腺の成熟、精子形成や卵形成のためのエネルギー生産に機能している可能性が示唆される。また、成虫期で同定されたタンパク質の約 50 %は欠損させると不妊に関連する表現型が表れるので、成虫期で重要な機能である生殖に関連したタンパク質の定量データを取得できた。

2D-DIGE と iTRAQ の 2 つの手法を用いて、各ステージにおける特徴的なタンパク質を同定した。今後、これらのタンパク質の局在や機能を RNAi や遺伝子組み換え実験などを用いて解明していくことで、各ステージでの重要な機能を見出せると考えている。

## 参考文献

- [1] International Human Genome Sequencing Consortium, Finishing the euchromatic sequence of the human genome, *Nature*, 2004; 431 (7011): 931-45
- [2] *C. elegans* Sequencing Consortium, Genome Sequence of the Nematode *C. elegans*: A Platform for Investigating Biology, *Science*, 1998; 282 (5396): 2012-2018
- [3] Gygi SP, Rochon Y, Franza BR, Aebersold R, Correlation between Protein and mRNA Abundance in Yeast, *Mol. Cell Biol.*, 1999; 19 (3): 1720-1730
- [4] Futcher B, Latter GI, Monardo P, McLaughlin CS, Garrels JI, A Sampling of the Yeast Proteome, *Mol Cell Biol.*, 1999; 19 (11): 7357-7368
- [5] Sulston JE, Schierenberg E, White JG, Thomson JN, The embryonic cell lineage of the nematode *Caenorhabditis elegans*, *Dev Biol.*, 1983: 64-119
- [6] L. Byerly, R.C. Cassada, R.L. Russell, The life cycle of the nematode *Caenorhabditis elegans*: I. Wild-type growth and reproduction, *Dev Biol.*, 1976: 51: 23-33
- [7] Taylor NL, Heazlewood JL, Millar AH, The Arabidopsis thaliana 2-D gel mitochondrial proteome: Refining the value of reference maps for assessing protein abundance, contaminants and post-translational modifications, *Proteomics*, 2011; 11(9):1720-33
- [8] Chandramouli KH, Mok FS, Wang H, Qian PY, Phosphoproteome analysis during larval development and metamorphosis in the spionid polychaete *Pseudopolydora vexillosa*, *BMC Dev Biol*, 2011; 11:31
- [9] Wallin E, Heijne GV, Genome-wide analysis of integral membrane proteins from eubacterial, archaean, and eukaryotic organisms, *Protein Sci.*, 1998; 7: 1029-1038
- [10] Zastrow MS, Flaherty DB, Benian GM, Wilson KL, Nuclear titin interacts with A- and B-type lamins in vitro and in vivo, *J Cell Sci.*, 2006; 119(Pt 2):239-49

## 相互情報量とSVMを用いた酵素反応における EC番号の推定法の開発

松田祥彦<sup>1)</sup>, 伊藤将弘<sup>1,2)</sup>, 遠里由佳子<sup>1,2)</sup>

---

## Prediction of EC Numbers for Enzymatic Reactions using Mutual Information and Support Vector Machine

Yoshihiko Matsuta<sup>1)</sup>, Masahiro Ito<sup>1,2)</sup>, Yukako Tohsato<sup>1,2)</sup>

Enzyme Commission (EC) numbers play key roles for prediction and classification of enzymatic reaction in proteins as an alternative approach to sequence analysis. However, there are numerous reactions known to be present in enzymatic databases with incomplete or without any EC numbers owing to the fact that they are manually assigned based on enzyme assays. In this study, we propose a new method to predict EC numbers for enzymatic reactions. The proposed method automatically computes similarity between two chemical reactions considering the similarity of chemical structures between substrates and products in the reaction using a maximal common substructure algorithm, and predicts EC numbers for a targeted reaction using mutual information and support vector machine based unknown enzymatic reactions. Jackknife cross-validation test was adopted to evaluate the performance of our method. As the result, 86.1% sensitivity, 87.4% precision, and 100% coverage achieved for the prediction for the first three digits of the EC number. Furthermore, we predicted to the reaction assigned multiple EC numbers and confirmed the effectiveness of our approach.

Keywords: Enzyme Commission assignment, enzymatic reaction, mutual information, MCS, SVM

Email: yukako@sk.ritsumei.ac.jp

---

1) 立命館大学大学院理工学研究科情報理工学専攻生命情報科学コース

2) 立命館大学生命科学部生命情報学科

1) Dept. of Bioinfo., Graduated School of Sci. and Eng., Ritsumeikan Univ.

2) Dept. of Bioinfo., Institute of Sci. and Eng., Ritsumeikan Univ.

## 緒言

酵素反応とその反応を触媒する酵素には、EC (Enzyme Commission) 番号[1] という分類キーが割り当てられており、酵素機能や反応形式は階層的に分類されている。EC 番号は、反応特異性と基質の違いにより四層で構成され、第1階層は反応特異性で6種類に分類される。このとき、EC 1は酸化還元、EC 2は転移、EC 3は加水分解、EC 4は付加脱離、EC 5は異性化、EC 6は合成反応にあたる。第2階層以降は、第1階層によって分類基準が異なるが、一般的には第2階層は酵素の基質特異性や反応特異性、第3階層は基質の結合の詳細な種類で割り振られ、第4階層では特定の酵素を示すシリアル番号となる。

既知の酵素において、二次構造の含有率や活性部位のアミノ酸配列といった種々の特徴をEC番号別に解析することで、触媒機能によって有意に差のある重要な特徴が示唆されたことから[2]、EC番号は酵素活性の予測や反応の類似性の指標にも用いられてきた。先行研究[3]でもEC番号の3階層目が一致する酵素反応組における基質と生成物間の化合物変化の類似性が確認されている。しかしながら、完全なEC番号は国際生化学分子生物学連合の酵素委員会 (NC-IUBMB) によって手動で割り当てられる。その一方、EC番号は実験的に活性を確認することによって決定されるため、不完全なEC番号や全くEC番号が割り当てられていない場合がある。それが代謝マップ内の既知の酵素反応の増加とEC番号の割り当てとの隔たりを生んでおり、EC番号を用いた種々の解析を行う上で問題となっている[4]。

そのため、代謝データベースに蓄積された知見を活かし、対象とする反応のEC番号を予測する手法がいくつか提案されている。なかでもE-zyme[5]は、KEGG/RPAIRデータベース[6]を用いて、酵素反応を構成する基質と生成物間の化合物構造の違いを、反応の前後で保存された原子、変化した原子、その中心となる原子の変化パターンとして扱い、EC番号別にそれらのパターンが出現する反応の数をまとめた特徴ベクトルを生成する。そして、特徴ベクトル間の相関によりEC番号の予測を行う。しかし、あらかじめ定義したパターンに一致しない反応はEC番号を予測できない。そこで、化合物の類似度をランダムウォークカーネルにより計算し、EC番号を予測する手法[7]も提案されているが、高い精度を発揮するにはKEGGの酵素反応において主要な基質と生成物の組み合わせの情報が必要である。一方、MOLMAP[8]は、基質や生成物の物理化学的・幾何学的性質を独自に特徴ベクトルとして表現し、自己組織化マップを用いてEC番号の予測を行っているが、他の手法と比較して予測できるEC番号の種類が少ない。

そこで本研究では、酵素反応を構成する基質と生成物間の化合物構造の違いを、MCS (Maximum Common Substructure)[9] アルゴリズムで抽出し、それをビット列情報に変換することで、相互情報量 (Mutual Information)[10] と SVM (Support Vector Machine)[11] によりEC番号を予測する手法を開発した。本手法を用いて、EC番号の3階層目までの予測を行い、既存手法との比較を行ったところ、提案手法は、既知の反応にはない部分構造の変化を持つ反応に対してもEC番号を予測する柔軟性と、高い予測精度を示した。

## 方法

任意の反応に対するEC番号の予測は、主に三つの手続きで行った。(1) MCS アルゴリズムによる酵素反応からの部分構造の抽出。(2) 相互情報量を用いたEC番号の候補リストの生成。(3) 上位2つの候補となるEC番号を対象としたSVMによるEC番号の予測。以下に各手続きの詳細を述べる。

### 部分構造の抽出とビット列の生成

酵素反応を構成する基質と生成物間における最大共通部分は MCS アルゴリズム[9] により算出される。MCS は二つのグラフ間における最大一致部分を求めるアルゴリズムである。MCS アルゴリズムを酵素反応における基質と生成物に適用し、抽出された MCS を反応前後において「保存された部分構造」、残りの部分を反応前後において「変化した部分構造」とし、特に「保存された部分構造」と隣接する部分を「反応近傍の部分構造」として抽出した(図 1)。このとき、原子数 3 以下の分子(水、酸素、二酸化炭素、アンモニア、ハロゲン、金属イオンなど)の変化に対して、MCS アルゴリズムを適用すると酵素反応の定義に合わない部分構造を得ることになるため、これらの分子は「小分子」の変化として分類する。この段階でそれぞれの部分構造は基質側と生成物側で少なくとも二つ生じるが、基質側と生成物側の対応する部分構造を組にし、それぞれの部分構造をあわせて 1 つのビット列に変換した。このとき、変化した部分構造の組は複数生じる可能性があるが、そのような場合でもすべての部分構造の組み合わせをビット列として形成する。部分構造のビット列への変換方法は CDK (Chemistry Development Kit Ver. 1.2.5)で実装された MACCSKey[12] を適用した。

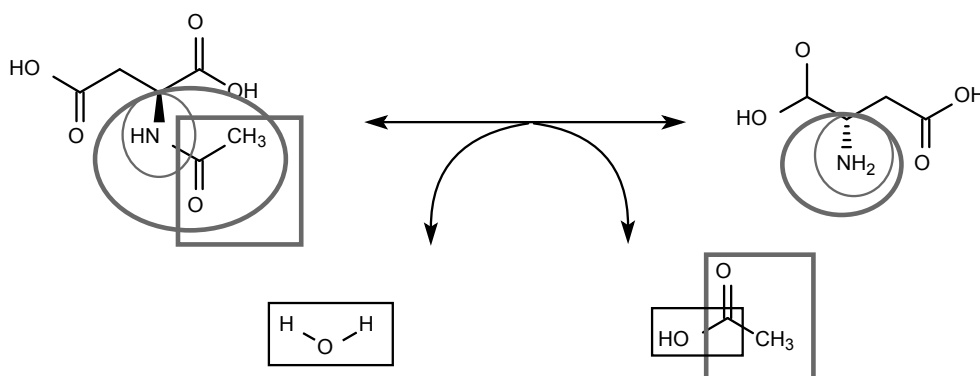


図 1. 抽出される部分構造の種類：保存された部分構造（線が太い四角）、変化した部分構造（線が太い丸）、反応近傍の部分構造（丸）、小分子（四角）にあたる。

### 相互情報量を用いた EC 番号の候補リストの生成

相互情報量は、2 つの要素が共起して現れやすい度合いを統計的に数値化したものである[10]。本研究では、この相互情報量を、部分構造の組と各 EC 番号間の共起の強さの指標として用いた。具体的には、既知の酵素反応に出現する部分構造の組  $s$  と EC 番号  $e$  間の相互情報量  $I(s; e)$  を式(1)で算出した。

$$I(s; e) = \sum_{i \in \{1,0\}} \sum_{j \in \{1,0\}} p(s=i, e=j) \log_2 \frac{p(s=i, e=j)}{p(s=i)p(e=j)} \quad (1)$$

ここで、各 EC 番号と共起する部分構造の組ほど値が大きくなる。

相互情報量  $I(s; e)$  を用いて、EC 番号を予測する対象の反応  $r$  から抽出された部分構造の組  $S_r = \{s_1, s_2, \dots, s_n\}$  に対し、EC 番号  $e$  ごとに式(2)のスコア  $W$  を計算し、スコアの降順でその EC 番号を並べることで、EC 番号の「候補リスト」を生成した。

$$W(S_r, e) = \sum_{s \in S_r} \exp \left( I(s; e) - \frac{1}{|E|} \sum_{e \in E} I(s; e) \right) \quad (2)$$

ここで、シグモイド関数は、反応  $r$  から抽出された部分構造の組  $s$  と対象の EC 番号  $e$  の相互情報量の値が、全 EC 番号の平均値を上回ればスコアをより大きく、そうでない場合はより小さくする重みとして用いた。



ただし、相互情報量の値  $I(s; e)$  が 0 のとき、スコア  $W$  を 0 とする。

候補リストを生成する場合に、予測対象の反応から得られる部分構造の組が、既知の反応から抽出された部分構造の組に存在しない場合は、最も類似する部分構造の組で代用する。そのため、式(3)の Tanimoto 係数 [13] を用いてビット列間の類似度を計算し、既知のデータから最もスコアが大きい部分構造の組で代用した。

$$T(x, y) = \frac{N_z}{N_x + N_y - N_z} \quad (3)$$

$N_x$  と  $N_y$  はビット列  $x$  と  $y$  の 1 のビットの数、 $N_z$  はビット列  $x$  と  $y$  に共通して 1 となるビットの数を表している。定義より、 $T(x, y)$  は 0 から 1 までの数となり、1 に近づくほどビット列間の類似度は高い。

### SVM による EC 番号の予測

前節に示した相互情報量による候補リストの作成段階では、EC 番号間の依存性を考慮していない。そこで EC 番号の予測に SVM を導入した。SVM は機械学習の一種であり、既知データを二分類するための境界線を決定できる。具体的には、EC 番号の候補リストから相互情報量が 1 位と 2 位の EC 番号を選択し、その EC 番号に属する他の酵素反応を SVM に学習させる。その際、各反応は、出現する部分構造の組を種類（保存、変化、近傍、小分子）ごとに集約し連結した長さ 1328 のビット列として与える。これにより、2 つの EC 番号間で反応を構成する基質と生成物から抽出された部分構造の組全体の差異を考慮することができる。なお SVM の実装は libSVM ver 3.0 を用い、SVM の学習に必要なパラメータ  $C$  および  $\gamma$  は grid-search [14] により学習データにとって最適な値を設定した ( $C=128$ ,  $\gamma=0.0078125$ )。カーネルは RBF (Radial Basis Function) カーネルを使用した。

### 提案手法の評価方法

提案手法の評価は、すべての酵素反応に対して、3 階層までの EC 番号をジャック・ナイフ法により予測し、表 1 のような予測結果が正解の EC 番号か否かによる 2x2 分割表をもとに  $TP$  (True Positive),  $FP$  (False Positive),  $FN$  (False Negative),  $TN$  (True Negative) を求め、感度 ( $Sensitivity=(TP/(TP+FN))*100$ ) および精度 ( $Precision=(TP/(TP+FP))*100$ ) を算出した。

表 1.  $TP, FP, FN, TN$  の定義

|      |            | EC 番号に属する | EC 番号に属さない |
|------|------------|-----------|------------|
| 予測結果 | EC 番号に属する  | $TP$      | $FP$       |
|      | EC 番号に属さない | $FN$      | $TN$       |

## 結果と考察

### データの前処理

予測には、代謝データベースである KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) [6] (Release 58.1) の EC 番号が 3 階層目まで割り当てられている酵素反応を利用した。5,643 反応とそれを構成する 4,978 化合物から、2,744 の保存された部分構造、5,860 の変化した部分構造、3,391 の反応近傍の部分構造、388 の小分子が抽出された。



## 相互情報量とSVMの予測結果の比較

相互情報量により候補リストで一位になった EC 番号と SVM で予測された EC 番号をそれぞれ  $EC_{mi}$ ,  $EC_{svm}$  とし, 各予測結果から感度と精度を算出した (表 2). 表 2 はすべての酵素反応および酵素反応を各 EC 番号の 1 階層目でも分けたときの感度と精度の平均を示している. 相互情報量での予測に SVM を導入することで感度および精度の両方で向上が見られた (感度 86.1%, 精度 87.4%). また, 未登録の部分構造の組を含む反応に対してのみの, 感度と精度も同様に算出した (表 3). 未登録の反応に対する感度と精度は 80.3%と 80.6% となり, すべての反応に対する感度と精度と比較して, その低下は小さい値にとどまった. EC 番号別にみると, EC 2 の酵素反応の予測は感度と精度が高い (表 2, 表 3). これは EC 2 の反応数が多いため, 様々な炭化水素鎖の転移を表す部分構造の組を利用することができ, 類似する転移反応は部分構造の組を見つけやすいためと考えられる. 一方, EC 5 は著しく感度が低下しているが, これは EC 5 が異性化反応であり, 他の EC 番号と比較して特殊な反応形式で分類されるため, 予測に有効な類似構造を見つけにくいと考えられる. 第 2 階層目で見ると特に EC 5.4 (分子内転移) と EC 5.5 (分子内リアーゼ) の感度は 18.8%, 12.5% であり, 低感度であった. しかしながら, MCS の算出時に異性化反応に特化した属性値を追加したことによって, EC 5.1 (光学異性変換) と EC 5.2 (シス・トランス変換) の感度は, それぞれ 68.2%, 37.5% と改善が見られた.

表 2. 感度と精度の評価結果

| 予測段階       | 分類  | 全体   | EC 1 | EC 2 | EC 3 | EC 4 | EC 5 | EC 6 |
|------------|-----|------|------|------|------|------|------|------|
|            | 反応数 | 5643 | 2015 | 1816 | 917  | 535  | 213  | 202  |
| $EC_{mi}$  | 感度  | 84.0 | 81.5 | 92.4 | 81.7 | 77.3 | 60.8 | 85.9 |
|            | 精度  | 85.3 | 81.4 | 90.0 | 84.1 | 87.7 | 87.2 | 80.1 |
| $EC_{svm}$ | 感度  | 86.1 | 87.1 | 88.9 | 86.0 | 80.3 | 67.0 | 85.9 |
|            | 精度  | 87.4 | 87.2 | 92.0 | 84.7 | 79.7 | 89.3 | 81.6 |

% : 感度, 精度

表 3. 未登録の部分構造の組が混在する反応に対する感度と精度の評価結果

| 予測段階       | 分類  | 全体   | EC 1 | EC 2 | EC 3 | EC 4 | EC 5 | EC 6 |
|------------|-----|------|------|------|------|------|------|------|
|            | 反応数 | 2406 | 550  | 990  | 440  | 266  | 72   | 88   |
| $EC_{mi}$  | 感度  | 79.2 | 70.3 | 91.5 | 76.5 | 62.4 | 43.7 | 87.6 |
|            | 精度  | 79.5 | 68.5 | 86.7 | 77.6 | 77.2 | 77.5 | 80.4 |
| $EC_{svm}$ | 感度  | 80.3 | 75.6 | 88.2 | 81.5 | 67.3 | 42.3 | 85.4 |
|            | 精度  | 80.6 | 74.4 | 89.0 | 77.8 | 69.4 | 71.4 | 79.2 |

% : 感度, 精度

## 既存の予測手法と提案手法の比較

提案手法と既存の手法 (E-zyme[5], Reaction graph[7], MOLMAP[8]) の予測精度を比較した (表 4). 提案手法が最も高い精度を示しており, かつ分類可能な EC 番号の数 (網羅率) も広い. この高い網羅率は, EC

番号を予測した酵素反応から抽出された部分構造の組が既知のデータに存在しないとき、最も類似した部分構造の組で代用することで成り立っている（表 2，表 3）。

表 4. 提案手法と既存の予測手法との比較

| 手法                  | 分類数 | 網羅率  | 感度   | 精度   |
|---------------------|-----|------|------|------|
| 提案手法 ( $EC_{svm}$ ) | 162 | 100  | 86.1 | 87.4 |
| E-zyme[5]           | -*  | 93.4 | 79.4 | 85.1 |
| Reaction graph[7]   | 124 | 100* | -*   | 82.5 |
| MOLMAP[8]           | 110 | 100* | -*   | 85.0 |

\*論文中に値が明記されていない。%：網羅率，感度，精度

既存手法では植物の二次代謝経路中の EC 番号が存在しない 36 反応に対して予測が行われており，専門家の知見によって手動で割り当てた EC 番号の候補と比較することで手法の妥当性を検証していた[7]．そこで提案手法でもその 36 反応に対して同様の検証を行った（表 5）．手動での割り当てで，EC 番号の 3 階層目が 99 番になっている場合や割り当てられていない場合は，2 階層目までの一致を確認した．表 5 は各手法において，最大のスコアを持つ EC 番号が手動での割り当て結果と合致する反応数，候補リスト中の 3 位以内に手動での割り当て結果が存在する反応数，EC 番号自体を割り当てることができなかった反応数を示す．提案手法は，すべての反応に対して EC 番号を予測することができることから N/A となった結果はなく，既存手法と比較して，1 位の正解数も最も多かった。

表 5. 各手法における EC 番号が割り当てられていない反応に対する評価

|       | 提案手法 | Reaction graph[7] | E-zyme[5] |
|-------|------|-------------------|-----------|
| 1 位   | 13   | 10                | 8         |
| 3 位以内 | 2    | 2                 | 4         |
| N/A   | 0    | 0                 | 14        |

#### 複数の EC 番号が割り当てられた反応への予測結果

EC 番号が複数割り当てられている反応に対する候補リストのさらなる活用を検討するため，該当する反応に対して生成された候補リストの上位に正解の EC 番号が含まれるかを確かめた．EC 番号の 3 階層目において，候補リストの 1 位が複数割り当てられている EC 番号のうちのいずれかである場合，複数割り当てられている EC 番号が過不足なくすべて候補リストのスコア上位に存在する場合，どの EC 番号とも一致しなかった場合，の反応数はそれぞれ 25，54，6 であった．いずれかの EC 番号が最大のスコアを持つ場合は多いが，複数の EC 番号が過不足なくスコア上位を占める割合は約六割である．これは割り当てられている EC 番号に属する反応が予測対象の反応のみといった，特定の EC 番号に対するデータ数が少ないことに起因する．また，反応に割り当てられている EC 番号の不均一さも予測が失敗した要因だと考えられる．図 2 の反応(a)は EC 3.1.4（リン酸ジエステルの加水分解），EC 4.6.1（P-O リアーゼ）が割り当てられているが，類似する反応

(b)には EC 3.1.4 のみが割り当てられている．反応(a)に対する提案手法の予測結果において，EC 3.1.4 はスコア最大となったが，EC 4.6.1 はスコア 9 位となり，他の加水分解反応やリン酸，糖転移反応が上位を占めていた．実際に反応(a)を触媒する酵素である EC 4.6.1.13 は細菌酵素であり，この活性は動物でも見つかったが，これは EC 3.1.4.11 (ホスホイノシチドホスホリパーゼ C) の存在によるものである．EC 3.1.4.11 は EC 4.6.1.13 (ホスファチジルイノシトールジアシルグリセロールリアーゼ) のようなホスファチジルイノシトールに対して活性を示すが，このような酵素特有の機能によって，類似する反応でも EC 番号の割り当てにおける不均一が生じていると考えられる．

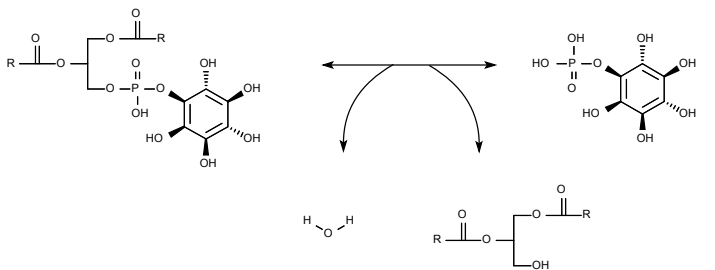
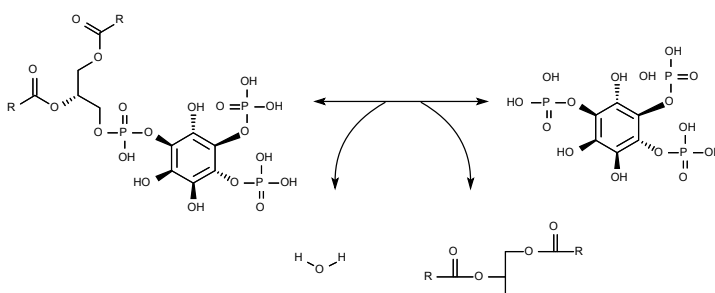
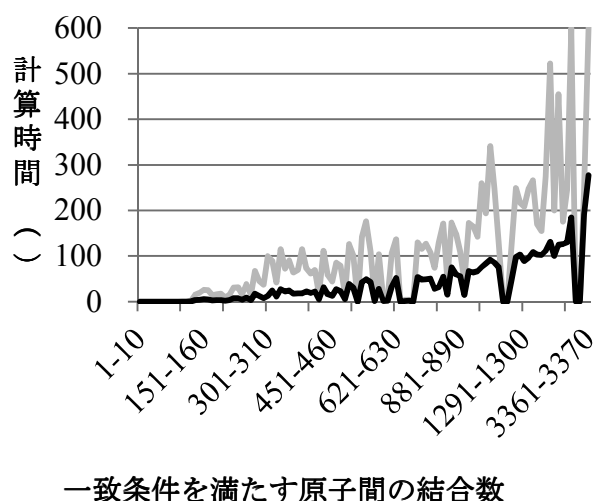
|                                                                                                                                                           |                                                                                     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>(a) EC 3.1.4 と EC 4.6.1 が付けられている反応</p> <p>KEGG Reaction ID: R03332</p> <p>反応名: 1-Phosphatidyl-D-myo-inositol inositolphosphohydrolase</p>              |   |
| <p>(b) EC 3.1.4 のみが付けられている反応</p> <p>KEGG Reaction ID: R03435</p> <p>反応名: 1-Phosphatidyl-1D-myo-inositol-4,5-bisphosphate inositoltrisphosphohydrolase</p> |  |

図 2. 類似する反応に割り当てられている EC 番号の不均一さを示す例

### MCS の算出に必要な計算時間

提案手法で用いる MCS アルゴリズムは，計算量が大きくその算出に非常に時間がかかることが知られている．そこで解析に用いた基質と生成物間の MCS の算出にかかる計算時間を求めた．計算時間の算出は，Intel Core i7-860, 4GB メモリの計算機上で行っている．比較する化合物間で一致条件を満たす原子間の結合の数に応じて計算時間が増加しており，MCS の探索で一致部分の数に上限を設けるなどの改良の必要性が考えられる．また，本研究では CDK の実装を改良し，演算結果のキャッシュとビット処理の簡易化によって，高速な MCS の算出を実現した (図 3)．



一致条件を満たす原子間の結合数

図 3. グラフの大きさに対する MCS の平均算出時間: CDK の実装 (灰), 改良版 (黒)

## まとめ

本研究では、酵素反応における EC 番号を高精度に予測する手法を開発した。提案手法は、予測対象の反応から得られる部分構造の組が登録されていない場合でも、類似する構造を代用することで高い精度を保つことが示された。また、複数の EC 番号が割り当てられた反応に対しても、候補リストの上位を占める割合が多く、妥当な予測結果が得られている。しかし、予測する EC 番号別にみると、異性化反応 (EC 5) に対する感度は一様に低く、変換するビット列に異性化反応に特化した情報を加えるなどの改善が必要である。

後、分類を起こした反応を詳細に調べ、提案手法の精度向上を目指すとともに、EC 番号の候補リストを反応類似性の指標として用いることで、酵素反応とその反応を触媒する酵素との関連性を見出したい。

## 考文

- [1] IUPAC-IUBMB Joint Commission on Biochemical Nomenclature (JCBN) and Nomenclature Committee of IUBMB (NC-IUBMB), *European Journal of Biochemistry*, 264, 607-609 (1999).
- [2] Bray T, Doig AJ and Warwicker J: Sequence and Structural Features of Enzymes and their Active Sites by ECClass, *J. Mol. Biol.*, 386, 1423-1436 (2009).
- [3] Tohsato Y and Nishimura Y: Reaction Similarities Focusing Substructure Changes of Chemical Compounds and Metabolic Pathway Alignments, *IPSJ Transactions on Bioinformatics*, 2, 15-24 (2009).
- [4] Green ML and Karp PD: Genome annotation errors in pathway databases due to semantic ambiguity in partial EC numbers, *Nucleic Acids Research*, 33, 4035-4039 (2005).
- [5] Yamanishi Y, Hattori M, Kotera M, Goto S, and Kanehisa M: E-zyne: Predicting Potential EC Numbers from the Chemical Transformation Pattern of Substrate-product Pairs, *Bioinformatics*, 25, 179-186 (2009).
- [6] Kanehisa M, Goto S, Furumichi M, Tanabe M, and Hirakawa M: KEGG for Representation and Analysis of Molecular Networks Involving Diseases and Drugs. *Nucleic Acids Research*, 38, D355-D360(2010).
- [7] Saigo H, Hattori M, Kashima H, and Tsuda K: Reaction graph kernels predict EC numbers of unknown enzymatic reactions in plant secondary metabolism, *BMC Bioinformatics*, 11(1):S31 (2010).
- [8] Latino DARS and Aires-de-Sousa J: Assignment of EC Numbers to Enzymatic Reactions with MOLMAP Reaction Descriptors and Random Forests, *Journal of Chemical Information Modeling*, 49, 1839-1846 (2009).
- [9] Tonnelie C, Jauffret P, Hanser T and Kaufmann G: Machine Learning of Generic Reactions: 3. An Efficient Algorithm for Maximal Common Substructure Determination, *Tetrahedron Computer Methodology*, 3, 351-358 (1990).
- [10] Steuer R, Kurths J, Daub CO, Weise J, and Selbig J: The mutual information: Detecting and Evaluating Dependencies between Variables, *Bioinformatics*, 18, 231-240 (2002).
- [11] Burges CJC: A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition, *Data Mining and Knowledge Discovery*, 2, 121-167 (1998).
- [12] MDL Information Systems, Inc., 14600 Catalina Street, San Leandro, CA 94577.
- [13] Gasteiger J, Engel T, : モイソフォマテックス, 丸善 式会, 45-49 (2005).
- [14] Hsu CW, Chang CC, and Lin CJ: A Practical Guide to Support Vector Classification, *Bioinformatics*, 1, 1-16 (2010).

## 高分解能中エネルギーイオン散乱と第一原理計算による

### 3C-SiC(001)-3×2 再構成表面の原子構造解析

松田太志、奥村英樹、田上正崇、光原圭、

Anton Visikovskiy、城戸義明

=====

## 3C-SiC(001)-3×2 Reconstructed Surface Structure Analysis by High -resolution Medium Energy Ion Scattering Combined with the First Principles Calculations

Taishi Matsuda, Hideki Okumura, Masataka Tagami, Kei Mitsuhashi,  
Anton Viskovskiy, Yoshiaki Kido

The atomic structure of 3C-SiC(001)-3×2 reconstructed surface was determined by High-resolution Medium Energy Ion Scattering (MEIS) and the first principles calculations using Vienna *ab initio* Software Package (VASP). Present MEIS analysis clearly shows that the (3×2) reconstructed surface consists of 1<sup>st</sup> Si adlayer (1/3 ML) on 2<sup>nd</sup> Si adlayer (2/3 ML) sitting on the bulk Si terminated surface and this result supports the two-adlayer asymmetric dimer model (TAADM). Further precise analysis of the observed MEIS spectra led to improvement of this model. The modified version of the TAADM contains long and short dimers in the 2<sup>nd</sup> adlayer which is consistent with the model proposed by grazing incident X-ray diffraction. Interestingly the *ab initio* calculations using VASP preferred symmetric dimers in the 2nd layer in contradiction with the above MEIS analysis. This is attributed to the fact that the *ab initio* calculations performed at 0 K tend to optimize the total energy by taking more symmetric structures.

Key Words; 3C-SiC(001)-3×2, Surface, Medium Energy Ion Scattering, *ab-initio* calculation

E-mail: rp008075@ed.ritsumei.ac.jp (Taishi Matsuda)

=====

立命館大学理工学研究科  
Graduate School of Science and Engineering, Ritsumeikan University,  
Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

## 1. はじめに

これまでの情報化社会の発展を支えてきたのはシリコン(Si)半導体をベースとしたエレクトロニクスである。しかし、近年では、デバイスの性能向上が Si の持つ物性的限界より困難になっている事や社会的な省エネルギー化への要求から、よりバンドギャップの大きいシリコンカーバイド(SiC)や窒化ガリウム(GaN)といったワイドバンドギャップ半導体に関する研究が活発におこなわれている[1-3]。

SiC は、組成は等しく積層順序の異なるポリタイプが発現することが知られており、主なポリタイプは立方晶型の 3C-SiC や六方晶型の 4H-、6H-SiC などである。現在最も応用が進んでいるのは 4H-SiC(0001)基板であり、ショットキーバリアダイオードなどは実際に商品化されている。そんな中、3C-SiC は、SiC のポリタイプの中で最も速い飽和ドリフト速度(Si の 2 倍以上)を持ち、高速かつ高効率なデバイスへの利用に適していることや、Si と結晶構造が同じであり安価なウエハ製造が期待できることから、耐圧 1kV 以下のデバイス用材料として注目されている。そして、近年の CVD 法の改善により良質な 3C-SiC 単結晶の Si 基板上の成長が可能となったことで、結晶欠陥や表面に関する研究が盛んにおこなわれるようになった[1-3]。

全ての SiC 単結晶に共通する特徴が、表面の Si と C の組成比の違いによる様々な再構成表面の形成である。3C-SiC(001)清浄表面に関しても Si-rich な  $3\times 2$  や  $c(4\times 2)$ 、C が再表面となる  $c(2\times 2)$ などの再構成表面が報告されている[4-6]。表面が最も Si-rich である  $(3\times 2)$ 再構成表面に関しては、Dayan ら[7]によるオージェ電子分光法(AES)や低エネルギー電子線回折(LEED)などを用いた報告を最初として、走査型トンネル顕微鏡(STM)[8,9]や光電子分光(PES)[10,11]といった様々な実験や第一原理に基づく理論計算[6,12-14]が行われている。最近では、微小角 X 線回折法(GIXRD)[15]と光電子回折法(PED)[16]によって表面構造に関する精密な分析結果が報告されている。しかしながら、これらの解析では、多くのフィッティングパラメータによる実データの再現が行われており、その一意性において十分な信頼性があるとは言いがたい。 $(3\times 2)$ 清浄表面の構造に関して、これまで主に 5 種類の構造モデル(図 1 参照)が提案されているが、その完全な検証は未だ行われていない。

これまで我々は、高分解能中エネルギーイオン散乱(MEIS)や光電子分光を用いて、6H-SiC(0001)、6H-SiC(0001) 及び 6H-SiC(1120) 表面の構造と電子状態を明らかにしてきた[17-20]。我々の開発したトロイダル静電偏向分析器は、優れたエネルギー分解能をもち、単結晶表面での原子の位置分解能として 0.001 nm が得られている[21]。上記 3C-SiC(001)の再構成表面の微細構造を分析するに最適なツールである。本研究では、新たに 3C-SiC(001)- $3\times 2$  表面の構造を MEIS による分析によって検証することを試みた。また、MEIS の解析によって最適化した構造モデルと、VASP(Vienna *ab initio* Software Package) [22,23]を用いた第 1 原理計算による結果との比較検討も併せて行った。

## 2. 3C-SiC(001)- $3\times 2$ 清浄表面の構造モデル

3C-SiC(001)- $3\times 2$  再構成表面に関しては、上記の通り、様々な研究手法によって数種類の構造モデルが提案されている。まずは、これらの構造モデルについて説明する。これまで報告されたモデルの主な違いとしては、 $3\times 2$  単位胞当りの Si 原子の数の違いが挙げられる。図 1 は、これまで提案されている  $(3\times 2)$  再構成表面の 5 種類のモデルの概略図である。



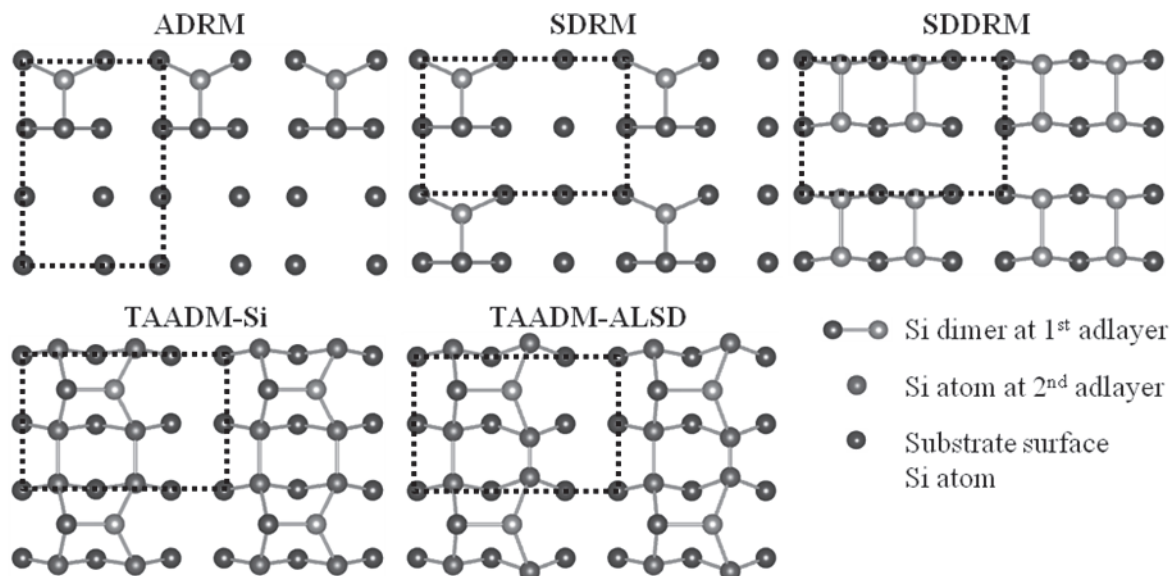


図 1 3×2 清浄表面に関する構造モデル

(1) Alternate Dimer Row Model(ADRM)[12]と(2) Single Dimer Row Model(SDRM)[4,14]では、単位胞当たり 1 つの Si dimer が存在する (図 1 参照)。ADRM と SDRM の違いは、ADRM では Si dimer が×2 方向に並んでいるのに対して、SDRM では並ぶ方向が×3 方向になっている点である。その他に、(3) Symmetric Double Dimer Row Model(SDDRM)[7,8,10]は単位胞あたりに 2 つの dimer を持つモデルであり、2 つの Si dimer は対称 dimer である。以上に加えて、表面の Si 原子の量が最も多く、Si 原子が 1/3 原子層(ML)と 2/3 ML の 2 層を形成しているとする (4) Two Adlayer Asymmetric Dimer Model-Si (TAADM-Si)[6,13]と(5) Two Adlayer Asymmetric Dimer Model-Alternating Long and Short Dimer (TAADM-ALSD)[15,16]が提案されている。前者は第 1 原理計算より予測した構造モデルであり、後者は GIXRD および PED により得られた結果である。(4)と(5)は基本的には類似しているが、その違いは 2 層目の adlayer 中の 2 つの Si dimer の長さが TAADM-Si では同じであるのに対して、TAADM-ALSD では異なる点にある。また TAADM-ALSD モデルにおいても、2 層目の dimer 長に関しては、GIXRD[15]と PED[16]による解析では異なる値が出されている。

### 3. 測定及び解析方法

清浄表面の作製と MEIS 測定は、立命館大学 SR センターの BL-8(SORIS)において、超高真空下 ( $< 2 \times 10^{-10}$  Torr) で行った。このビームラインは、光電子分光部のほかに、MEIS システム、赤外線による試料加熱部、分子線エピタキシー蒸着部 (高速反射電子線回折装置 (RHEED) 付き) が各々独立したパートとして結合されており、清浄表面の作製から測定までの全工程を、試料を大気に晒すことなく *in situ* で進めることができる。MEIS 測定においては、Toroidal 静電偏向型分析器を使用することで、 $\Delta E/E = 9 \times 10^{-4}$  の高エネルギー分解能が得られ、これによって高精度で表面原子の配列構造を分析することができる。SORIS および MEIS システムに関する詳細は他の文献を参照していただきたい[21,24,25]。

3C-SiC(001)-3×2 清浄表面の作製は、先ず大気中で RCA 洗浄後、超高真空中 600°C で脱ガスし、その後 1050°C で 10 分の加熱で表面の酸素を除去した。次いで、MBE によって室温で約 6 ML の Si を蒸着後、950°C で 4 分間加熱することにより 3×2 清浄表面を得た。表面が 3×2 シングルドメインであることは、RHEED パターンで確認した。

MEIS 測定では、入射エネルギー 120 keV の He<sup>+</sup> イオンを(1).[112]軸(入射角 54.7°(試料の法線方向より))と(2).[011]軸(入射角 45.0°)で入射し、出射角を大きくとることで表面近傍の位置分解能を高めた。測定条件 (1).では、出射角を 86.0°と 85.0°、条件(2)では出射角を 86.0°とした。

MEIS スペクトルは、入射ビーム量を  $Q$  とすると、次の散乱収量  $Y_{sim}^{(i)}$  の式より計算することができる(式 1)。

$$Y_{sim}^{(i)} = Q \frac{d\sigma}{d\Omega} \rho \Delta x \Delta \Omega \varepsilon \eta^+ P(n) \dots (1)$$

ここで、 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  は散乱断面積、 $\Delta \Omega$  は検出器の立体角、 $\varepsilon$  は検出器の検出効率、 $\eta^+$  は散乱された粒子の He<sup>+</sup> fraction であり、測定の条件により決定するパラメータである。 $\rho \Delta x$  は標的粒子数、 $P(n)$  は各層の Si 原子の近接衝突確率(Pcl) (再表面原子の Pcl を 1 と規格化)であり、仮定する構造モデルによって値が異なる。Pcl については、表面を文献により報告されている各構造モデルで、バルク側を Si-C の bilayer を 5 層仮定し、モンテカルロシミュレーションを用いて各構造モデルに対応する値を算出した。この Si 原子の Pcl を用いることで、構造モデルを反映した MEIS スペクトルを得ることができる。ADRM、SDRM、SDDRM の各 dimer 長には第一原理計算の結果[13]を用いた。そして、TAADM-Si の構造モデルには Pollmann らによる第一原理計算の結果[6]を仮定し、TAADM-ALSD の構造モデルには PED[16]により報告された値を使用した。入射ビーム量と検出器の立体角は既知なので、MEIS スペクトルを直接構成することはできるが、ここでは深い層からの散乱成分(例：出射エネルギー：108 - 111 keV)を実スペクトルに合わせることで MEIS スペクトルを導出した。C 原子からの散乱成分は低エネルギー領域に現れ、深い層の Si からの散乱成分と重なり統計が悪くかつ再構成表面に寄与しないことから、分析の対象より除外している。

測定値とシミュレーションのベストフィットの定量的評価は、次のような  $R$  factor 値(式 2)を定義することで行った。

$$R = \frac{\sum_i |Y_{exp}^{(i)} - Y_{sim}^{(i)}|}{\sum_i Y_{exp}^{(i)}} \times \frac{Y_{exp}^{(i)}}{Y_{exp}^{max}} \dots (2)$$

ここで、 $Y_{exp}^{(i)}$  は MEIS の測定値、 $Y_{exp}^{max}$  は測定値の最大値、 $Y_{sim}^{(i)}$  は式(1)で計算したシミュレーションの値である。 $Y_{exp}^{(i)} / Y_{exp}^{max}$  は、ピーク位置の寄与を大きく考慮するための規格化である。

#### 4. 結果と考察

3C-SiC(001)-3×2 に対して提案されている 5 つのモデルの最も大きな違いが表面の Si 原子数の差である。斜出射で測定した MEIS スペクトルの Si 表面ピークは、明確に層分解することが可能である。これらの特性を利用して、まず、提案されている(3×2)構造モデルを仮定した MEIS スペクトルのフィッティングを行い、(3×2)再構成表面に最も適した構造モデルの選定を行った。その後、MEIS スペクトルの  $R$  factor を用いた詳細な解析を行うことで、構造モデルの最適化を行った。最後に、最適化を行ったモデルと第一原理計算の結果の比較を行った。

入射エネルギーを 120keV とし、 $[\bar{1}1\bar{2}]$ 軸入射、 $86^\circ$ 出射で測定した MEIS スペクトルと、それに対して ADRM、SDRM と SDDRM を仮定してフィッティングを行った結果のスペクトルを図 2 に示す。ただし、ADRM に関しては解析条件の面内方向を  $90^\circ$ 回転させ、 $[\bar{1}1\bar{2}]$ 軸入射、 $86^\circ$ 出射でフィッティングを行った。ADRM と SDRM は再表面が(1/3+1) ML、SDDRM は(2/3+1) ML の 2 層の Si 原子層で形成されている。

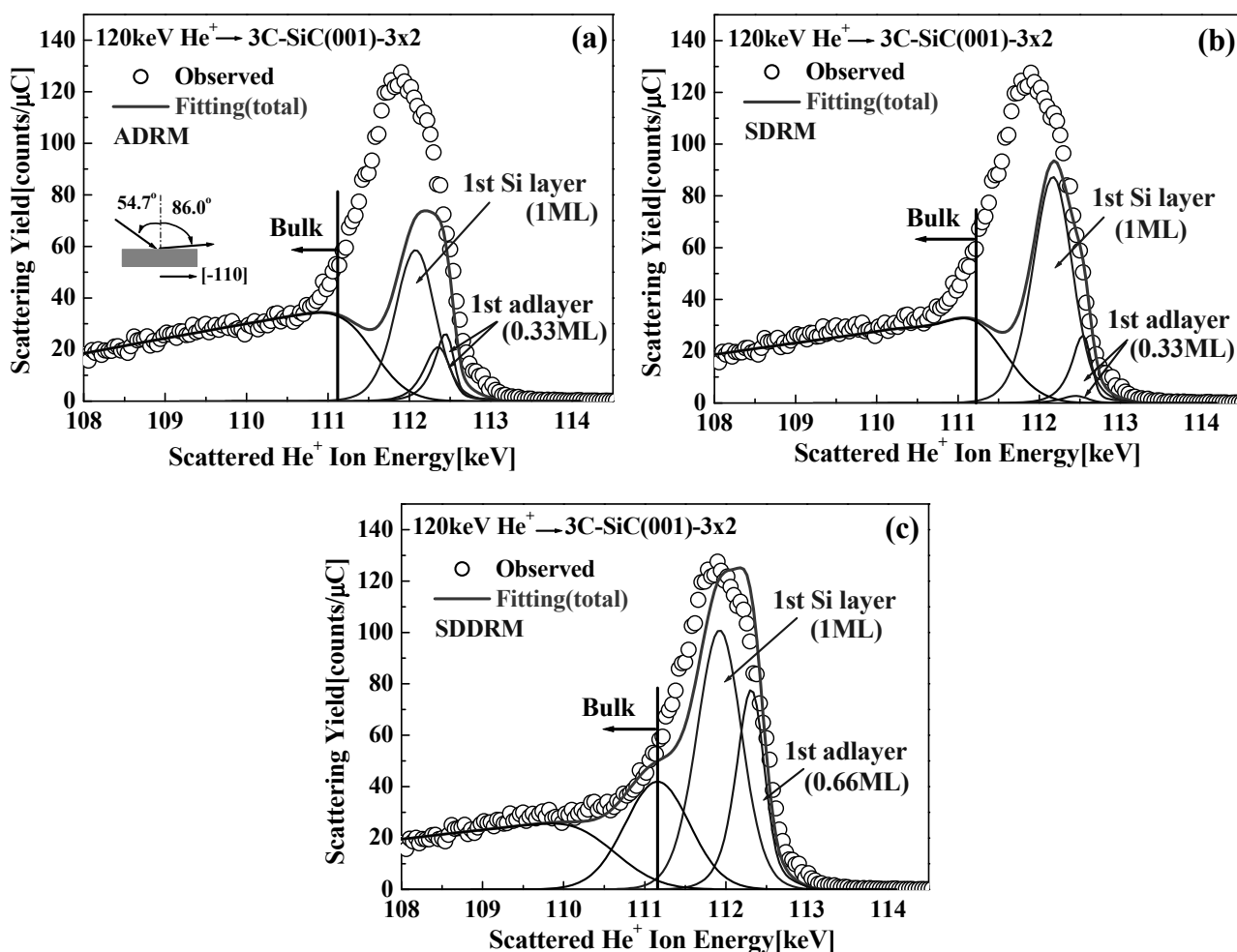


図 2 120keV の  $\text{He}^+$  イオンを 3C-SiC(001)-3×2 に、 $(11\bar{2})$ 面に沿って  $54.7^\circ$ 入射、 $86^\circ$ 出射で測定した MEIS スペクトルと(a) ADRM、(b) SDRM、(c)SDDRM を仮定したフィッティング結果

図 2(a,b)の ADRM と SDRM を用いたフィッティング結果ではスペクトルの再現が不可能である。特に、ピークの低エネルギー側の再現性が無いことから、仮定した再表面の Si 原子数が少ないことが明らかである。また、SDDRM を仮定した際にも同様の結果が表れており、これは条件を変えて測定した MEIS スペクトルの解析でも同様である。次に、図 3 に 2 種類の TAADM を仮定してフィッティングした結果を示す。

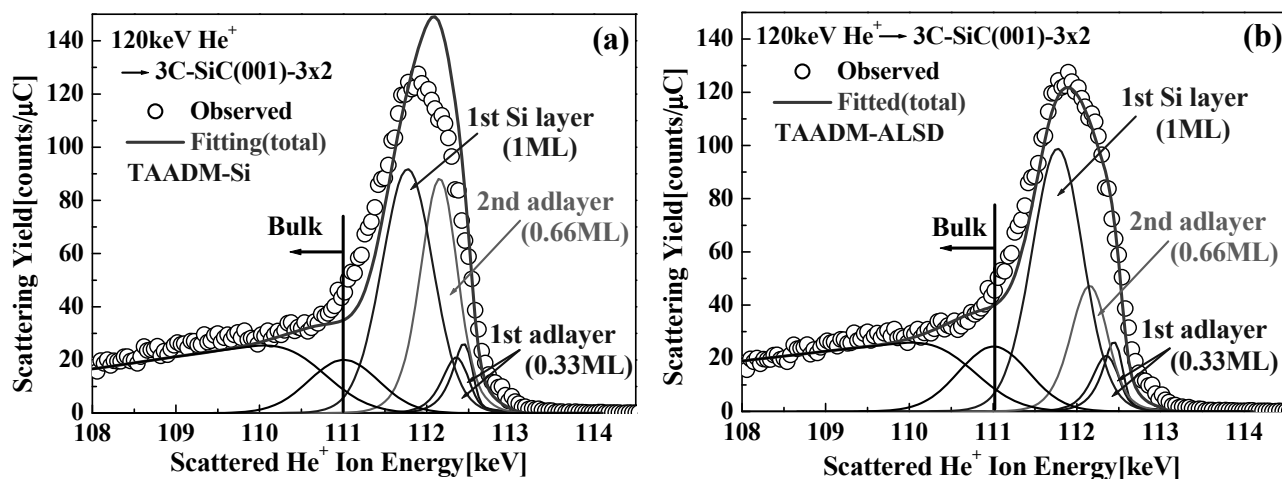


図 3 120keV の  $\text{He}^+$  イオンを 3C-SiC(001)-3 $\times$ 2 に、 $(11\bar{2})$ 面に沿って  $54.7^\circ$ 入射、 $86^\circ$ 出射で測定した MEIS スペクトルと(a) TAADM-Si、(b)TAADM-ALSD を仮定したフィッティング結果

表面に 2 ML の Si 原子層がある TAADM を仮定することで表面ピークの再現が可能である。図 2、3 より(3 $\times$ 2)再構成表面のモデルとしては再表面が(1/3+2/3+1) ML の Si 層で形成されている TAADM が適していると考えられる。したがって、それ以外の 3 つのモデルは今後の議論の対象から除外する。

これまでの結果から、(3 $\times$ 2)再構成表面の構造モデルとしては TAADM が適しているとした。しかし、図 3 の(a) TAADM-Si と(b) TAADM-ALSD では、ALSD を用いたフィッティングの精度が高いことがわかる。これは、図 4 に示す TAADM の dimer 長や面間隔の違いにより、近接衝突確率が異なるからである。

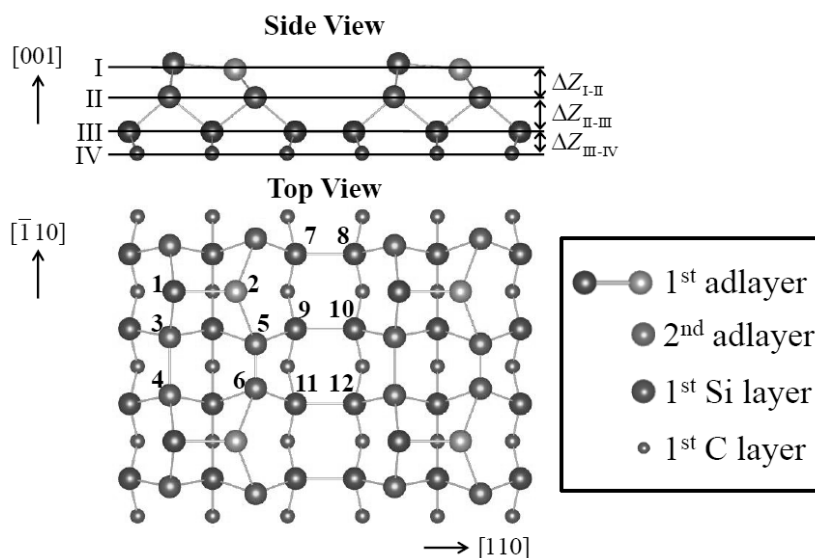


図 4 TAADM-ALSD の構造モデル。TAADM-Si と -ALSD の主な違いは  $d_{3,4}$  と  $d_{5,6}$  の長さである。

図 3(a)の TAADM-Si では、第一原理計算によって報告された構造[13]を仮定しており、(b)の TAADM-ALSD では PED によって報告された構造[16]を仮定している。これらの最も大きな違いは、-Si では  $d_{3,4}$ (=2.37 Å)と  $d_{5,6}$ (=2.38 Å)の長さが同じであるのに対して、-ALSD では  $d_{3,4}$  が 2.41 Å で  $d_{5,6}$  が 1.83 Å と長さが異なる点である(図4)。また、面間隔に関しても上記の2つ研究で異なる値が報告されている。これらのパラメータが異なることで、シャドーイング・フォーカシング効果による各 Si 原子の近接衝突確率の値が変化する。図 3 では、TAADM-ALSD の 2nd adlayer を形成する Si 原子の近接衝突確率がシャドーイング効果により減少するため、表面ピークの立ち上がりが-Si の立ち上がり比べて鈍くなっている。

図 5 に入射エネルギーを 120keV とし、(a)[ $\bar{1}1\bar{2}$ ]軸入射、85°出射、(b) [ $01\bar{1}$ ]軸入射、86°出射で測定した MEIS スペクトルを、TAADM-Si と TAADM-ALSD を仮定してフィッティングした結果を示す。図 4 に示したパラメータの差による-Si と -ALSD を仮定した際の MEIS スペクトルの再現性の違いを比較するために、最も近接衝突確率の値に差があった Si 原子層の成分も合わせて表示した。まず、両スペクトルにおいて、最表面の原子の近接衝突確率は 1 であるため 1st adlayer の dimer 長や高低差による MEIS スペクトルへの寄与は少ない。また、[ $\bar{1}1\bar{2}$ ]軸入射のスペクトル(図 5(a))の立ち上がりの違いは、図 3 の説明でも述べたように、2<sup>nd</sup> adlayer の近接衝突確率の違いのためであり、-Si ではフォーカシング効果により Pcl が上昇、-ALSD ではシャドーイング・ブロッッキング効果により減少している。実際に 2nd adlayer の近接衝突確率の値は、-Si で 1.56、-ALSD で 0.80 であった。次に、[ $01\bar{1}$ ]軸入射のスペクトル(図 5(b))では、2<sup>nd</sup> adlayer での近接衝突確率の差は少なく、1<sup>st</sup> Si layer とその下の Si 層の Pcl に大きな違いが生じた。これは、 $\Delta Z_{II-III}$ の値が第一原理計算では 1.59 Å、PED では 1.43 Å と約 10%の差があるために生じたと考えられる。このように MEIS スペクトルの解析結果から、2<sup>nd</sup> adlayer 中の dimer 長( $d_{5,6}$ )と 2nd adlayer と 1st Si layer の面間隔( $\Delta Z_{II-III}$ )が MEIS スペクトルの再現性に大きく寄与していることは明らかである。そこで、我々は  $d_{5,6}$  と  $\Delta Z_{II-III}$  をパラメータとして TAADM の構造を変化させながら、上記の R factor を用いた MEIS スペクトルの解析を行うことで、TAADM の最適化を試みた。

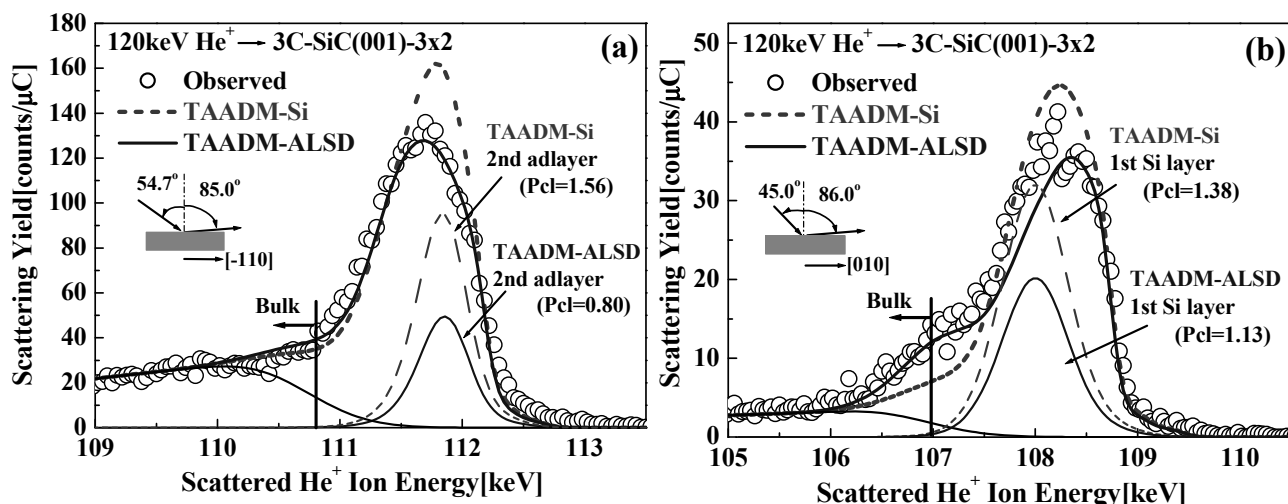


図 5 120keV の  $\text{He}^+$  イオンを用いて(a)[ $\bar{1}1\bar{0}$ ]方向に 54.7 入射、85.0 出射、(b)[ $01\bar{0}$ ]方向に 45.0 入射、86 出射で測定した 3C-SiC(001)-3×2 の MEIS スペクトル。それぞれ、破線は TAADM-Si、実線は-ALSD を用いたフィッティングである。比較のために Pcl の違いが最も大きい Si 層の成分を表示した。



$d_{5-6}$ をこれまで報告されている最小値である 1.83 Å から最大値の 2.40 Å まで、 $\Delta Z_{II-III}$ を 1.43 Å から 1.60 Å まで変化させながら、MEIS スペクトルを解析した結果の  $R$  factor 値を図 6 に示す。また、比較のために、これまで報告された値と MEIS スペクトルの  $R$  factor 解析による最適化の結果を表 1 に示す。測定した MEIS スペクトルの最も良い再現性は、 $d_{5-6}=2.05$  Å と  $\Delta Z_{II-III}=1.50$  Å を仮定することで得られた。

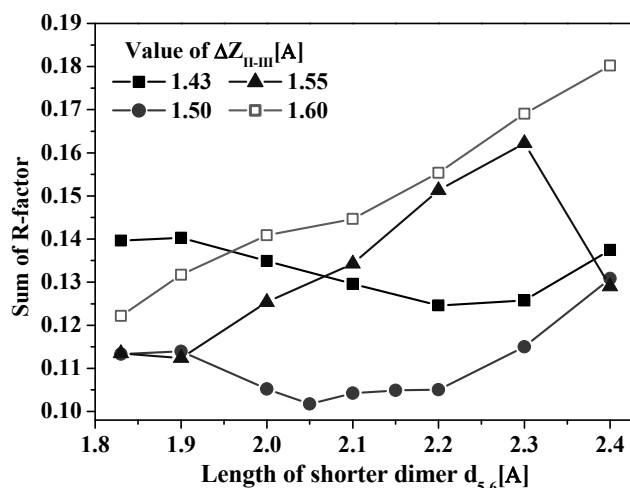


図 6 TAADM の  $d_{5-6}$  と  $\Delta Z_{II-III}$  をフィッティングパラメータとして、解析した MEIS のスペクトルから算出した  $R$  factor の合計値

表 1 3C-SiC(001)-3×2 清浄表面の MEIS による構造の最適化結果と各報告による値[Å]の比較

| Parameter           | MEIS            | DFT Calc.[6,13] | GIXRD[15]       | PED[15]         |
|---------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| $d_{5-6}$           | $2.05 \pm 0.03$ | 2.37            | $2.26 \pm 0.08$ | $1.83 \pm 0.20$ |
| $\Delta Z_{II-III}$ | $1.50 \pm 0.02$ | 1.59            | $1.56 \pm 0.04$ | $1.43 \pm 0.05$ |

MEIS の解析により得られた結果を、理論値と比較することで、物理的に重要な要点の考察が可能である。表 1 に示した Pollmann らによる報告[6,13]のみならず、実に様々なグループによって第一原理計算の結果が報告されているが、実際に比較するには詳細な計算条件を知っておく必要がある。そこで、我々も TAADM について VASP を用いた第 1 原理計算による計算を行った。我々の計算では、3×2 と 9 原子層を 1 つのユニットとし、裏面を水素終端させた。再構成表面の初期構造としては、Pollmann らによって報告された TAADM-Si[6,13]と PED により報告された値[16]を用いた。これらを VASP で原子間に働く力が 0.05eV/Å 以下になるまで構造を緩和させ、表面の dimer 長がどのように変化するかを比較することで、より安定な TAADM の構造を導き出すことを試みた。VASP においても、全エネルギーを電子密度分布の汎関数として、Kohn-Sham 方程式 [26] を自己無撞着的に解くことで、全エネルギーが極値を取る構造を求める。この過程を、高速かつ正確に解くため、これまで種々のアルゴリズムが提案されている。本計算では、基本的には平面波基底を取り、原子核から遠い場所では擬ポテンシャルに基づく振動のない擬波動関数を使うが、全エネルギー計算ではノードをもつ正しい原子波動関数を使用する PAW 法を採用した[27,28]。さらに、交換・相関ポテンシャルは Perdew-Wang[29] によって提案された Generalized Gradient Approximation (GGA)を、Brillouin Zone 内積分には、5×7×1 の Monkhorst-Pack [30]



の  $\vec{k}$  ポイントメッシュを、基底状態の計算の高速収束アルゴリズムとして、波動関数に対しては RMM-DIIS 法を採用し[23]、原子位置の収束計算には共役勾配法[31]を用いた。

初期条件として使用した再構成表面が TAADM-Si でも TAADM-ALSD でも、構造最適化後には TAADM-Si に収束し、その結果は用いた交換・相関ポテンシャルの違いより単純比較は難しいが、Pollmann らの第一原理計算の結果と 5%以内で一致した。3C-SiC は Zinc-Blende 型構造を取り、強い共有結合を有すが、局在性が強く交換・相関ポテンシャルの特定の難しい  $d, f$  電子を含まないことから、第一原理計算の結果が一致するのは納得のいく結果であると考えられる。また、いずれの計算でも絶対零度が仮定されており、熱振動の効果は含まれていない。このため、より対称性の高い TAADM-Si へと収束し、実験結果との 10%程度の不一致が生じたのであろう。MEIS による構造解析の結果は GIXRD で 4 - 8 %、PED に対して 5 - 13 %で、GIXRD の結果と比較的よく一致している。これは、GIXRD の精度が PED のそれよりかなりよいことから理にかなった結果と言えよう。

## 5. おわりに

3C-SiC(001)-3×2 清浄表面を高分解能 MEIS と VASP を用いた第一原理計算で分析し、構造の特定と  $R$  factor 解析を用いた構造最適化をおこなった。これまで報告されている 5 種類のモデルの中で、表面の Si adatom の量が 1/3ML である ADRM と SDRM と 2/3ML である SDDRM では MEIS のスペクトルを再現することができなかった。特に、表面ピークの低エネルギー側を高精度でフィッティングするには、より再表面の Si 原子量の多い TAADM を仮定する必要がある。したがって、MEIS 測定の結果より、3×2 の構造モデルとしては表面に 2 層の Si adlayer が存在するモデルである TAADM 構造が最適であることが結論された。また、TAADM 構造において 2nd adlayer 中の dimer の長さが異なる 2 つのモデル (TAADM-Si と -ALSD)が提案されているが、高分解能 MEIS 分析によって検証することができた。これは、フォーカシング、シャドウイング効果が表面の微細な構造に敏感なためである。得られた MEIS スペクトルを、TAADM の dimer 長や面間隔をパラメータとして再現することで、構造の最適化を行った。その結果、短い dimer と長い dimer が存在する TAADM-ALSD がより 3×2 清浄表面に適したモデルであることが明らかとなった。一方、VASP による理論計算では、TAADM-Si モデルを支持する結果となった。これは、第 1 原理計算では、通常絶対零度の条件下で行われるため、より高い対称性をもつ構造に最適化される傾向をもつためと考えられる。実際は、フォノン等が関与する室温での構造であり、必ずしも対称性の高い方が安定とは限らないことは、Si(001)-2×1 の非対称 dimer から明らかであろう。我々の MEIS による 3C-SiC(001)-3×2 の構造解析結果は、TAADM-Si 構造に比べて対称性の低い TAADM-ALSD モデルに比較的よく一致した。さらに、PED に基づいて提案されたモデルより精度の高い GIXRD から導出された TAADM-ALSD に一致したことは十分理にかなった結果と言えよう。

## 6. 謝辞

この研究は、渋谷誠氏（現在 ROHM (株) に勤務）の修士課程における仕事を引き継いだものであり、彼の多くの有益なアドバイスに感謝する。また、第 1 原理計算に関して、産総研・関西センターの香山正憲博士に貴重な助言をいただいたことに謝意を表したい。なお本研究の一部は、文部科学省・私学助成・学術フロンティア推進事業の支援のもとに行われた。

## 7. 参考文献

- [1] *Silicon Carbide Recent Major Advances*, edited by W. J. Choyke, H. Matsunami, and G. Pensl (Springer, 2004), and references therein.
- [2] *Silicon Carbide volume 1: Growth, Defects, and Novel Applications*, edited by P. Friedrichs, T. Kimoto, L. Ley, and G. Pensl (Wiley-VCH, 2009), and references therein.
- [3] *Silicon Carbide volume 2: Power Devices and Sensors*, edited by P. Friedrichs, T. Kimoto, L. Ley, and G. Pensl (Wiley-VCH, 2009), and references therein.
- [4] S. Hara, W. F. J. Slijberman, J. F. van der Veen, I. Ohdomari, S. Misawa, E. Sakuma, and S. Yoshida, *Surf. Sci. Lett.* **231**, L196 (1990).
- [5] P. Soukiassian, *Mater. Sci. Eng.*, **B 61**, 506 (1999).
- [6] P. Krüger and J. Pollmann, *Phys. Rev.* **B 73**, 035327 (2006).
- [7] M. Dayan, *J. Vac. Sci. Technol.* **A 4**, 38 (1986).
- [8] S. Hara, S. Misawa, S. Yoshida, and Y. Aoyagi, *Phys. Rev.* **B 50**, 4548 (1994).
- [9] F. Semond, P. Soukiassian, A. Mayne, G. Dujardin, L. Douillard, and C. Jaussaud, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2013 (1996).
- [10] H. W. Yeom, Y.-C. Chao, S. Terada, S. Hara, S. Yoshida, R. I. G. Uhrberg, *Phys. Rev.* **B 56**, R15525 (1997).
- [11] H. W. Yeom, Y.-C. Chao, I. Matsuda, S. Hara, S. Yoshida, and R. I. G. Uhrberg, *Phys. Rev.* **B 58**, 10540 (1998).
- [12] H. Yan, A. P. Smith, and H. Jónsson, *Surf. Sci.* **330**, 265 (1995).
- [13] W. Lu, P. Krüger, and J. Pollmann, *Phys. Rev.* **B 60**, 2495 (1999).
- [14] L. Pizzagalli, A. Catellani, G. Galli, F. Gygi, and A. Baratoff, *Phys. Rev.* **B 60**, R5129 (1999).
- [15] M. D'angelo, H. Enriquez, V. Yu. Aristov, and P. Soukiassian, *Phys. Rev.* **B 68**, 165321 (2003).
- [16] A. Tejeda, D. Dunham, F. J. García de Abajo, J. D. Denlinger, E. Rotenberg, E. G. Michel, and P. Soukiassian, *Phys. Rev.* **B 70**, 045317 (2004).
- [17] Y. Hoshino, S. Matsumoto, K. Ogawa, H. Namba and Y. Kido, *Phys. Rev.* **B 68**, 073308 (2003).
- [18] Y. Hoshino, R. Fukuyama, Y. Matsubara, T. Nishimura, S. Tanaka, M. Kohyama and Y. Kido, *Phys. Rev.* **B 71**, 195331 (2005).
- [19] F. Takeuchi, R. Fukuyama, Y. Hoshino, T. Nishimura and Y. Kido, *Surface Science* **601**, 2203 (2007).
- [20] Y. Hoshino, T. Okawa, M. Shibuya, T. Nishimura, and Y. Kido, *Surf. Sci.* **602**, 3253 (2008).
- [21] Y. Kido, T. Nishimura, Y. Hoshino, and H. Namba, *Nucl. Instrum. Methods* **B 161-163**, 371 (2000).
- [22] G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev.* **B 47**, 558 (1993).
- [23] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev.* **B 54**, 11169 (1996).
- [24] Y. Kido, H. Namba, T. Nishimura, A. Ikeda, Y. Yan, and A. Yagishita, *Nucl. Instrum. Methods* **B 136-138**, 798 (1998).
- [25] T. Nishimura, A. Ikeda, and Y. Kido, *Rev. Sci. Instrum.* **69**, 1671 (1998).
- [26] W. Kohn and L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [27] P.E. Blöchl, *Phys. Rev.* **B 50**, 17953 (1994).

- [28] G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. **B 59**, 1758 (1999).
- [29] J.P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. **B 45**, 13244 (1992).
- [30] H.J. Monkhorst and J.D. Pack, Phys. Rev. **B 13**, 5188 (1976).
- [31] D.M. Bylander, L. Lleinman, and S. Lee, Phys. Rev. **B 42**, 1394 (1990).



## ガラス研磨用エポキシ樹脂研磨パッドの開発

村田順二<sup>1)</sup>, 谷 泰弘<sup>1)</sup>, 広川良一<sup>2)</sup>, 野村信幸<sup>2)</sup>, 張 宇<sup>1)</sup>

### Development of epoxy resin polishing pads for glass polishing

Junji Murata<sup>1)</sup>, Yasuhiro Tani<sup>1)</sup>, Ryoichi Hirokawa<sup>2)</sup>,  
Nobuyuki Nomura<sup>2)</sup>, and Yu Zhang<sup>1)</sup>

This paper describes newly developed polishing pads for glass finishing that employs an epoxy resin instead of a conventional polyurethane resin. The porosity of the polishing pad was controlled by changing the amount of a chemical foaming agents mixed with a prepolymer epoxy resin. It was found that the removal rate of glass surface using epoxy polishing pad was approximately two times higher than those using urethane polishing pad, which means a 50 percent decrease in a usage of CeO<sub>2</sub> abrasives. The waviness and edge roll-off of polished glass surfaces were markedly improved by utilizing epoxy polishing pads, while the surface roughness of glass surfaces finished by epoxy pads was comparable to that finished by urethane pads. The investigation of substitute abrasive materials exhibited that the CeO<sub>2</sub> abrasives were completely substituted for ZrO<sub>2</sub> abrasives. The mechanism of higher removal rate of epoxy polishing pads was also investigated using measurement of contact angles, sliding angles and dynamic friction coefficient of polishing pads. These measurements indicate that abrasive grains are supported more strongly on the epoxy polishing pad than on the urethane polishing pad, namely, higher relative velocity between workpiece surface and abrasive grains to be obtained.

Keywords; Ultra-precision Machining, Polishing, Tool, Abrasive Grain, Polishing Pad, Epoxy Resin, Glass

E-mail: murata06@fc.ritsumei.ac.jp (J. Murata)

<sup>1)</sup>立命館大学理工学部機械工学科, <sup>2)</sup>九重電気株式会社

<sup>1)</sup>Department of Mechanical Engineering, Ritsumeikan University,  
Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

<sup>2)</sup>Kokonoe Electric Co., Ltd.,  
16 Suzukawa, Isehara, Kanagawa 259-1146, Japan



## 1. 緒 言

液晶テレビ用フラットパネルディスプレイ基板や磁気ディスク基板、レンズやプリズムなどの各種光学素子などのガラス製品は所定の形状に加工された後、最終的には研磨によって表面が平滑化される。ガラスの鏡面研磨には、高い研磨能率が得られることや高品位仕上げが可能であることから、従来から酸化セリウム ( $\text{CeO}_2$ ) 砥粒が広く用いられている。その金属元素であるセリウムは、希土類金属（レアアース）の一つであり、中国が 97%以上の供給量を占めている。昨今のレアアースの輸出制限を受け、酸化セリウム砥粒の供給が不足しており、国内における価格が急騰しているのが現状である。このような背景のもと、ガラスの精密研磨における酸化セリウムの使用量を低減する技術や、他の砥粒に代替する技術の開発が急務となっている。そこで、高機能研磨パッドの開発の一つとして、従来のウレタン樹脂パッドに代わる材料としてエポキシ樹脂を採用した研磨パッドの開発を行っている<sup>(1)</sup>。エポキシ樹脂は接着剤や半導体の封止剤として広く用いられている<sup>(2)</sup>他、レジンボンド砥石の結合剤<sup>(3)</sup>として用いられている。しかし、エポキシ樹脂を用いた研磨パッドの報告例は少なく<sup>(4)</sup>、また、実用的な製品が開発されていないのが現状である。本論文では、熱硬化によりガラスの研磨に適したエポキシ樹脂研磨パッドを開発し、その研磨特性の評価を行うとともに、従来のウレタンパッドとの性能比較を行った。また、エポキシ研磨パッドを用いることにより、酸化セリウムを代替する砥粒の可能性について検討を行った。さらに、エポキシ樹脂研磨パッドを用いた際に、高い研磨特性が得られる原因について、研磨パッドの材料物性の観点から考察を行ったので報告する。

## 2. エポキシ樹脂研磨パッドの作製

熱硬化によりエポキシ樹脂研磨パッド（以下、エポキシパッドとする）の作製を行った。エポキシ樹脂のプレポリマ、硬化剤および気孔を形成するための発泡剤等を混合しそれを金型に注型した後、所定の温度に加熱し、発泡および硬化を行う。硬化した樹脂を金型より離型し、一定の厚さにスライスを行った後、用いる研磨機に合わせた形状に切断を行う。本研究では、樹脂に配合する発泡剤の添加量を変更した複数のエポキシパッドを作製した。表 1 に代表的なエポキシパッドの樹脂配合量を示す。エポキシ樹脂のプレポリマ 100 に対して、硬化剤を 55 の割合で配合した。研磨パッドの発泡率（密度）を変化させるため、発泡剤の割合を変化させた。図 1 に作製した直径 200mm の大きさのエポキシパッドおよび市販のセリア含有発泡ポリウレタン研磨パッド（九重電気㈱製、KSP-66A、以下ウレタンパッドとする。）の外観写真を示す。表 1 の研磨パッドの機械的物性値に示すように、発泡剤の添加量を変えることで、研磨パッドの気孔率（密

Table1 Properties of urethane and epoxy polishing pads

|                                    |               | Urethane | Low-foamed epoxy | High-foamed epoxy |
|------------------------------------|---------------|----------|------------------|-------------------|
| mixing<br>ratio                    | Resin         | -        | 100              | 100               |
|                                    | Curing agent  | -        | 55               | 55                |
|                                    | Foaming agent | -        | 2                | 5                 |
| Density ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ) |               | 0.40     | 0.63             | 0.40              |
| Hardness (JIS-A)                   |               | 78       | 97               | 90                |
| Tensile strength (MPa)             |               | 3.9      | 4.9              | 1.9               |
| Young's modulus (MPa)              |               | 49       | 225              | 78                |

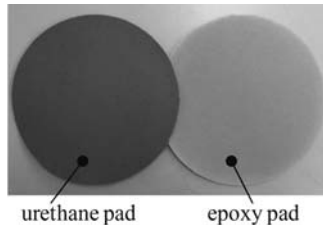
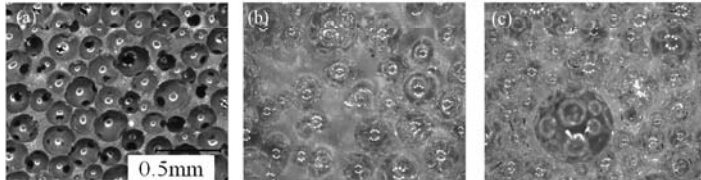
Fig. 1 Appearance of polishing pads ( $\phi 200\text{mm}$ )

Fig. 2 Optical microscope images of polishing pad surfaces. (a) urethane pad, (b) low-foamed epoxy pad, and (c) high-foamed epoxy pad.

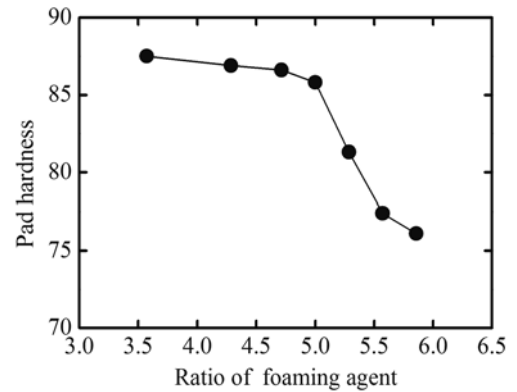


Fig. 3 Relationship between pad hardness and ratio of foaming agent

度)の調整が可能であり、それに伴い硬度や引張強度などの物性値が異なっていることがわかる。ウレタンパッドと比較して、同じ密度でもエポキシパッドの方がやや硬度が高いが、引張強度は低くなっている。それぞれの研磨パッドを光学顕微鏡により観察したものが図2である。発泡剤を添加することにより、研磨パッド内部および表面に気孔が形成されていることがわかる(図2(b, c))。気孔径は数百 $\mu\text{m}$ のオーダーであり、ウレタンパッド(図2(a))と同程度のものが得られた。また、発泡剤の量を変化させることで、気孔率が異なってくることが確認された。図3に樹脂量100に対する発泡剤添加率と硬化後のエポキシパッドの硬度の関係を示す。発泡剤添加量の増加に伴い、研磨パッド内の気孔率が増加するため、結果としてエポキシパッドの硬度が低下する傾向にあることがわかった。

### 3. ガラスの研磨特性の評価

作製したエポキシパッドによりガラスの研磨実験を行い、その研磨特性の評価を行った。表2に研磨実験条件を示す。研磨機には、定盤径200mmの片面精密ラッピング装置(㈱ナノファクタ製, NF-300)を用いた。工作物にはソーダガラスを用い、3点の工作物を直径90mmのワークホルダに対し、中心から半径35mmの位置に等間隔で貼付けた。工作物表面は、前処理として#1200の緑色炭化珪素(GC)砥粒を用いたラッピングにより表面粗さ $R_a$ を約 $0.4\mu\text{m}$ に加工した。研磨パッドの表面は、研磨機上において刃先曲率半径1mmのバイトを用いて、切込み量 $150\mu\text{m}$ 、バイト送り速度 $0.5\text{mm/s}$ 、パッド回転速度 $100\text{rpm}$ の条件で切削(フェイシング)を行った。その後、#100のダイヤモンド電着ドレッサを用いて、ドレッサ/パッド回転速度 $90\text{rpm}$ の条件でドレッシングを10分間行った。研磨能率は加工前後の工作物の質量差によって算出した。研磨後工作物の表面粗さは、白色式位相シフト干渉顕微鏡(Zygo, Newview 5032)を用いて、カットオフ値 $0.08\text{mm}$ の高域フィルタを適用して評価した。

#### 3・1 研磨能率の評価

図4に作製したエポキシパッドの研磨能率および研磨後工作物表面粗さとパッド硬度の関係を示す。開発したエポキシパッドはおおむねウレタンパッドと比較して高い研磨能率が得られており、パッド硬度が小さくなると共に研磨能率が増加することがわかる。特に、ウレタンパッドと同程度の硬度(78)を持つエポキシパッドの研磨能率が最も高く、市販ウレタンパッドと比較して2倍強の能率が得られた。一般に

Table 2 Polishing condition

|                         |                                                                           |
|-------------------------|---------------------------------------------------------------------------|
| Polishing machine       | Lapping machine NF-300<br>Nano Factor Co.,Ltd                             |
| Workpiece               | Sodalime glass: $\phi$ 20mm×t10mm<br>Surface roughness: $R_a$ 0.4 $\mu$ m |
| Pressure                | 20kPa                                                                     |
| Work/Lap rotation       | 90rpm/90rpm                                                               |
| Polishing time          | 30min                                                                     |
| abrasives               | 1.2 $\mu$ m CeO <sub>2</sub> (SHOROX A-10<br>Showa Denko K.K.)            |
| Concentration of slurry | 3.0wt% in deionized water                                                 |
| Supply rate of slurry   | 25mL/min                                                                  |

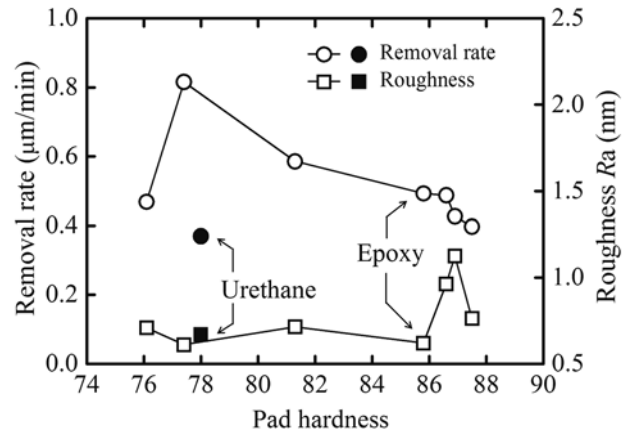


Fig. 4 Polishing performance as a function of pad hardness

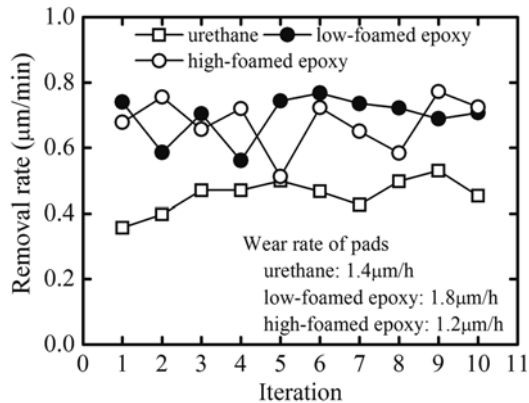


Fig. 5 Transition of removal rate as a function of iteration count

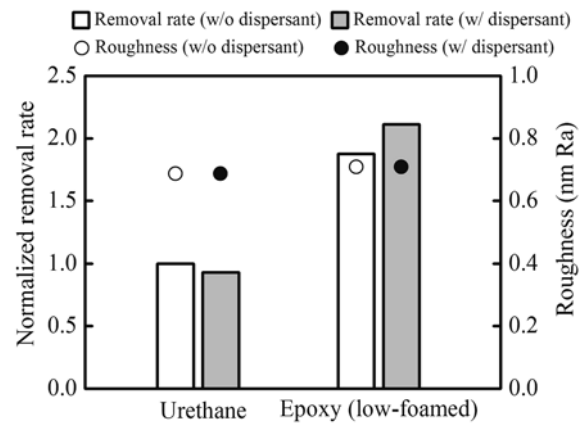


Fig. 6 Effect of the dispersant on polishing performance

研磨パッドの硬度が高くなると工作物への当たりが悪くなり研磨能率が減少する。本研究では、一般的に高硬度なエポキシ樹脂を市販ウレタンパッドと同程度まで硬度を低下させた結果、エポキシ樹脂の持つ性質を発現でき高い研磨能率が得られたと考える。ウレタンパッドと酸化セリウムを用いた場合、同様の研磨条件下での研磨能率はおおむね 0.1-0.5 $\mu$ m/min であることが報告されており<sup>(6)</sup>、これらの値と比較してもエポキシパッドが高い研磨能率を持つことがわかる。詳細については後述するが、ウレタンパッドよりも高い研磨能率が得られた要因としては、エポキシパッドのセルフドレス性が高いことやパッド表面のスラリーに対する親和性が高く、砥粒の保持力が高いことなどが考えられる。エポキシパッドの硬度を 78 以下にすると、高い気孔率のためパッド表面の摩耗が激しく、研磨能率が低下した。ウレタンパッドに対し、2 倍の研磨能率が得られたことは、同一量を研磨するのに必要な時間が半減したことを意味する。スラリーの供給量は同一であるため、結果として 50%の酸化セリウム使用量の低減を実現したことになる。

次に各研磨パッドの研磨能率の経時変化を評価した。一般的に研磨パッドは一定時間研磨を行うと研磨能率が徐々に低下するため、所定時間経過後にドレッシングを実施する。本実験では、1 回目の研磨実験前のみドレッシングを行い、30 分間の研磨実験を同条件で繰り返し実施した。各研磨実験毎のドレッシングは行っていない。図 5 に各研磨パッドの研磨能率と実験回数の関係を示す。エポキシパッドは、各実験毎のバラツキが認められるが、平均的にはウレタンパッド以上の研磨能率を有していることがわかる。これらの研磨能率のバラツキは、研磨回数が 5 回目までが顕著であり、それ以降は比較的安定している。こ

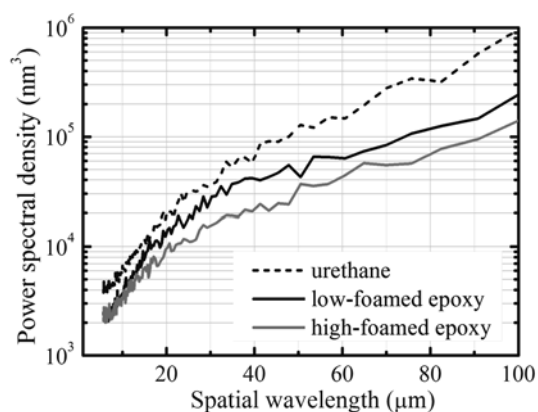


Fig. 7 Power spectral density profiles of polished glass surfaces.

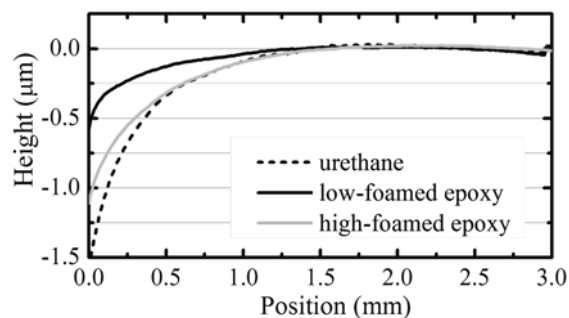


Fig. 9 Cross-sectional profiles of polished glass edges.

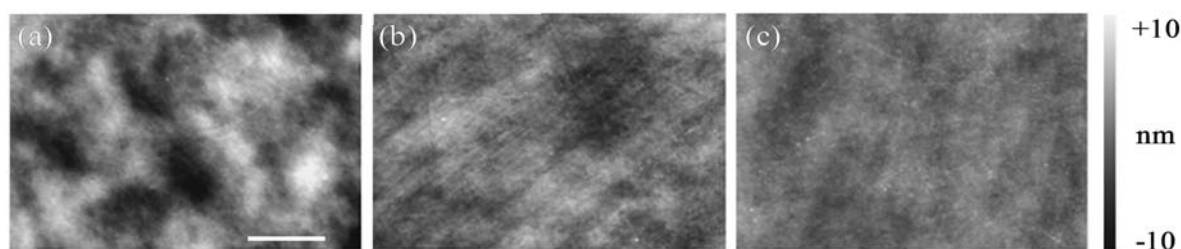


Fig. 8 Optical interferometer images of glass surfaces polished using (a) urethane pad (Wa:3.841nm), (b) low-foamed epoxy pad (Wa: 1.645nm), and (c) high-foamed epoxy pad (Wa:0.985nm).

のことから、研磨パッド表面の状態が研磨能率のバラツキの原因であると考えられ、それぞれの研磨パッドに適したコンディショニング条件を見出すことによりバラツキが抑制できると考えられる。5時間の研磨実験の後、研磨パッドの厚さを測定し算出した摩耗率を図5に併せて示す。いずれの研磨パッドでも摩耗率は $1\mu\text{m}/\text{h}$ 程度であり、ウレタンパッドとエポキシパッドの摩耗量の差は小さいことがわかった。一般的にエポキシ樹脂はウレタン樹脂などの弾性体と比較して硬脆材料であることが知られているが、本研究で作製したエポキシ研磨パッドは摩耗量が小さく、従来のウレタンパッドと同様の条件において使用が可能であることが確認された。このことから、エポキシパッドのセルフドレス性はウレタンパッドと同程度であり、これが高研磨能率の要因ではないと判断された。

また、スラリーに対する分散剤の添加が研磨特性に与える影響を評価した。酸化セリウム砥粒は比重が $6.8\text{g}/\text{cm}^3$ と大きいことから、水への分散性が悪く攪拌を行わなければただちに沈殿が生じる。そのため、研磨の現場においては、スラリーに対し分散剤を添加して使用される。砥粒はこれまで使用した酸化セリウム砥粒に対し分散剤処理を施したもの（昭和電工樹製、SHOROX A-10 KT）を用いた。その他の研磨条件は表2と同様である。図6に示すように、ウレタンパッドを用いた場合、分散剤の添加により砥粒が滑りやすくなり、砥粒の保持力が低下するため研磨能率がわずかに減少した。それに対し、エポキシパッドを用いた際には、分散剤を添加しても砥粒の保持力が維持されたと考えられ、分散剤無添加の砥粒と同等以上の研磨能率が得られることが明らかとなった。このことは、エポキシパッドが実際の生産現場においても、適用可能であることを示唆する結果である。

### 3・2 研磨後工作物表面の評価

開発した研磨パッドにより研磨を行ったガラス工作物表面の評価を行った。位相シフト干渉顕微鏡により $0.91 \times 0.68\text{ mm}^2$ の領域を評価した表面粗さを図4に示す。硬度77のエポキシパッドで研磨したガラスは



Table 3 Properties of abrasives

| Abrasives                      | Mean diameter (μm) | Product name, company                      |
|--------------------------------|--------------------|--------------------------------------------|
| SiO <sub>2</sub>               | 0.5                | SO-C2, Admatechs Co., Ltd.                 |
| Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 0.5                | FE-227101, Nilaco Corporation              |
| Mn <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 1.1                | 020-47425, Kishida chemical Co., Ltd.      |
| ZrO <sub>2</sub>               | 1.3                | ZIROX, K-BC0007, Universal Photonics, Inc. |
| CeO <sub>2</sub>               | 1.2                | SHOROX A-10, Showa Denko K.K.              |

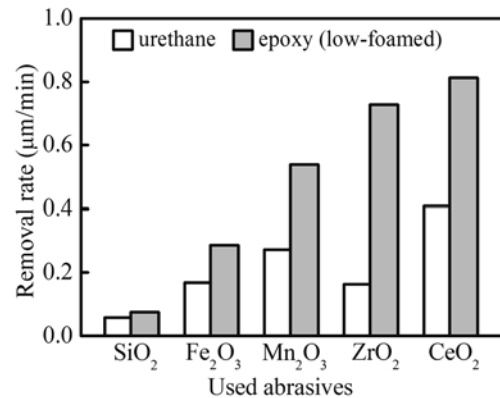
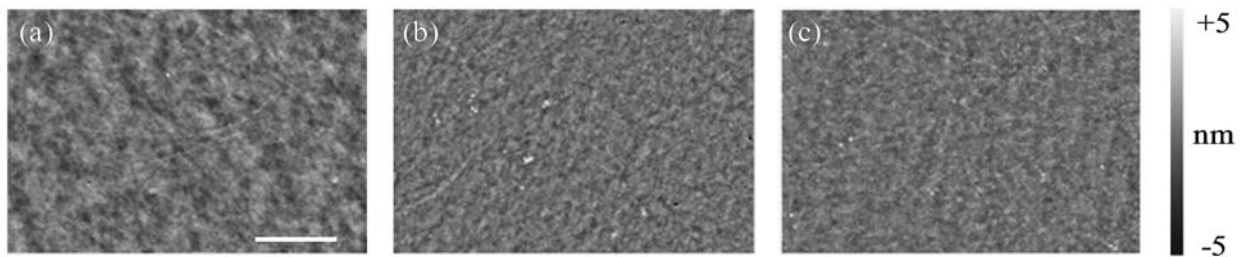


Fig. 10 Comparison of removal rates using various abrasives

Fig. 11 Optical interferometer images of glass surfaces polished using (a) CeO<sub>2</sub> with urethane pad (Ra:0.676nm), (b) CeO<sub>2</sub> with epoxy pad (Ra:0.609nm) and (c) ZrO<sub>2</sub> with epoxy pad (Ra:0.62 nm)

0.7 nm Ra 程度の粗さであり、市販ウレタンパッドと遜色ない表面粗さが得られることがわかった。また研磨後ガラス表面の形状に関する空間周波数（Power spectral density; PSD）解析<sup>6)</sup>を実施した。PSD 解析は特定の空間周波数での振幅強度に関連するパラメータで表面を解析するものであり、空間周波数帯ごとの粗さを考慮した解析である。図 7 に研磨後ガラス表面を位相シフト干渉顕微鏡により測定したデータを元に、PSD 解析を行った結果を示す。測定した空間波長である数 μm から 100μm 程度の全領域において、パッドの密度に関わらずウレタンパッドよりエポキシパッドで研磨したガラス表面の方がパワースペクトル密度が小さく、エポキシパッドにより高い形状精度が得られることがわかった。エポキシパッドはウレタンパッドと比較して剛性が高いため、数十 μm の長空間波長領域において差が顕著に現れていることが確認された。図 8 に示す各研磨パッドで研磨したガラス表面の位相シフト干渉顕微鏡像からも明らかに、ウレタンパッドで研磨した表面はうねり成分が大きい（Wa : 3.841nm）のに対し、エポキシパッドで研磨した表面はうねり成分が小さい（Wa : 2nm 以下）ことが確認された。

さらに、研磨後ガラス表面のふち形状の評価を行った。一般的に、研磨加工後の工作物は、工作物の周辺部に応力が集中し選択的に加工されるため、縁部が丸みをおびた形状（縁ダレ）となる。この縁ダレが大きいと最終製品として利用できる領域が小さくなるため、縁ダレを抑制する必要がある。図 9 にそれぞれの研磨パッドで研磨したガラスの縁形状を示す。ウレタンパッドで研磨したガラスは、1.5μm 程度の縁ダレが生じていることがわかる。それに対し、低気孔率のエポキシパッドで研磨したガラスの縁ダレは 0.5μm 程度と小さいことがわかる。エポキシパッドの気孔率の増加に伴い、縁ダレは大きくなるもののウレタンパッドと比較して縁ダレの小さい工作物が得られた。これは、使用したエポキシパッドの硬度が高いため、工作物のパッドに対する沈みこみが小さく、縁への応力集中が小さくなったためであると考えられる。

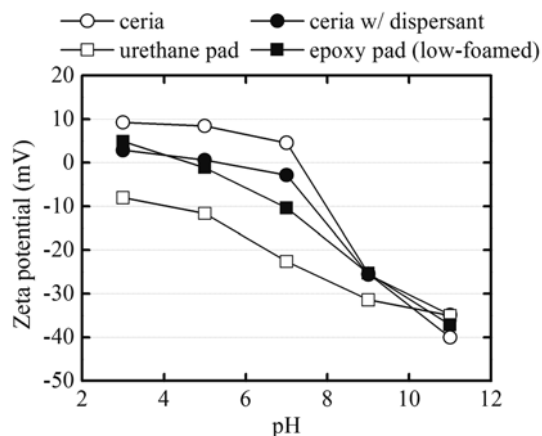


Fig. 12 Zeta potential of ceria abrasives and polishing pads as a function of pH

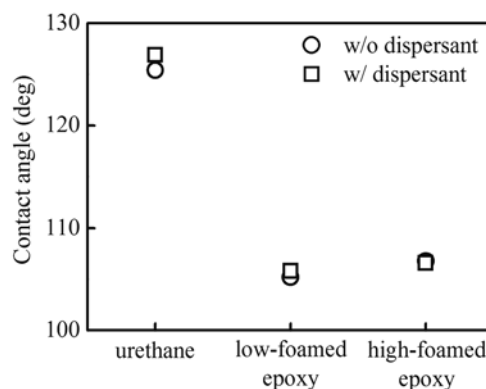


Fig. 13 Contact angles of polishing pads

以上のように、エポキシパッドで研磨したガラス表面は、ウレタンパッドと比較して粗さは同程度であり、うねりやふち形状の点で大きな優位性を有しており、仕上げ用研磨パッドとしての利用が期待できる。

#### 4. 酸化セリウム代替砥粒の検討

これまでに述べたように、酸化セリウムを用いた研磨特性評価の結果から、エポキシパッドが従来のウレタンパッドと比較して高い研磨特性を有することが明らかとなった。そこで酸化セリウム以外の砥粒でもエポキシパッドを利用した際に、研磨能率が向上することが期待される。エポキシパッドと代替砥粒の組み合わせにより、ウレタンパッドと酸化セリウムを用いた従来研磨と同等以上の研磨能率が達成できれば、酸化セリウムを完全に代替することが可能である。そこで、各種酸化物砥粒とエポキシパッドを用いてガラスの研磨特性の評価を行い、酸化セリウムに代わる代替砥粒の検討を行った。表3に使用した酸化物砥粒の種類と粒径を示す。シリカや酸化鉄、酸化ジルコニウムなどの研磨に使用される砥粒を用いた。各砥粒の粒径はおおむね  $1\mu\text{m}$  前後である。研磨実験は、ウレタンパッドおよびエポキシパッドを用いて、各砥粒において同条件で実験を実施した。各砥粒のスラリー濃度は  $3.0\text{wt}\%$  で統一した。その他の実験条件は表2に示すものと同様である。図10に各種砥粒のガラスに対する研磨能率を示す。それぞれの砥粒において、ウレタンパッドよりもエポキシパッドを用いた場合におおむね2倍程度の研磨能率が得られることがわかる。特に、市販の酸化ジルコニウム砥粒（ユニバーサルフォトリクス社製，ZIROX, K-BC0007）を用いた場合、ウレタンパッドと比較してエポキシパッド使用時に約4倍の研磨能率が得られた。またウレタンパッドと酸化セリウム砥粒を使用した従来研磨に比べて、研磨能率が7割程度向上する結果が得られた。図11(c)に酸化ジルコニウム砥粒とエポキシパッドを用いて研磨したガラス表面の干渉顕微鏡像を示す。表面にはスクラッチも存在せず、表面粗さは  $0.629\text{nm Ra}$  であった。これは、ウレタンパッドと酸化セリウム砥粒の組み合わせ（図11(a)）やエポキシパッドと酸化セリウム砥粒の組み合わせ（図11(b)）により研磨した表面と遜色ない値であることが確認された。エポキシパッドの製造時間や材料のコストは、従来のウレタンパッドとほぼ同程度であり、また酸化ジルコニウム砥粒の価格も酸化セリウム砥粒より安価（2010年12月現在）である。これらを考慮すると、エポキシパッドを使用することにより仕上げ面品質を維持しながら、酸化セリウム砥粒を酸化ジルコニウム砥粒に完全に代替することが可能であると判断される。



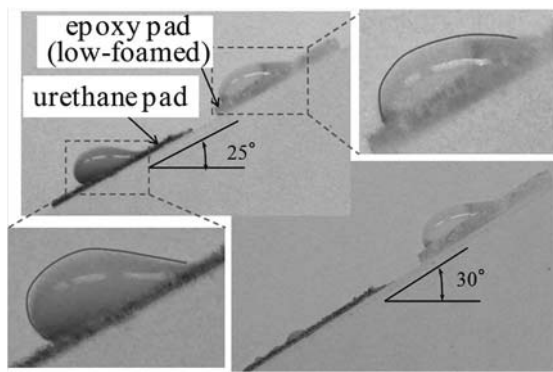


Fig. 14 Result of inclination test of polishing pads with  $\text{CeO}_2$  slurry

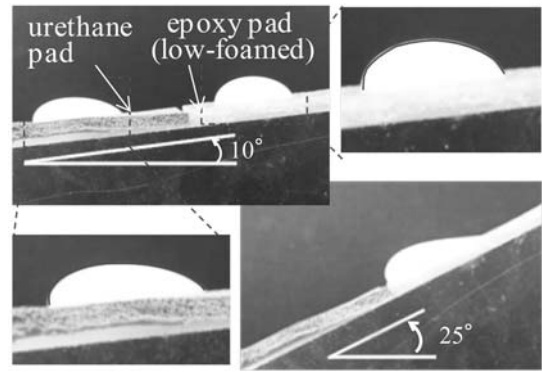


Fig. 15 Result of inclination test of polishing pads with  $\text{ZrO}_2$  slurry.

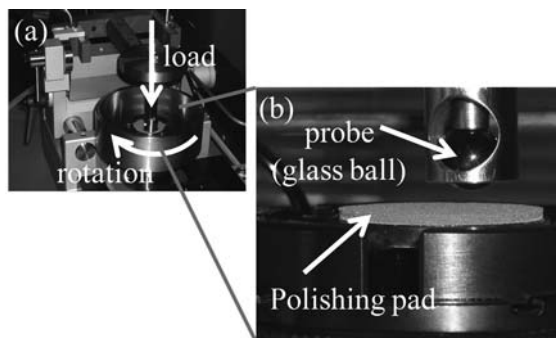


Fig. 16 Experimental apparatus for measuring the dynamic friction coefficient of polishing pads. (a) overall view, (b) detail view of measurement area

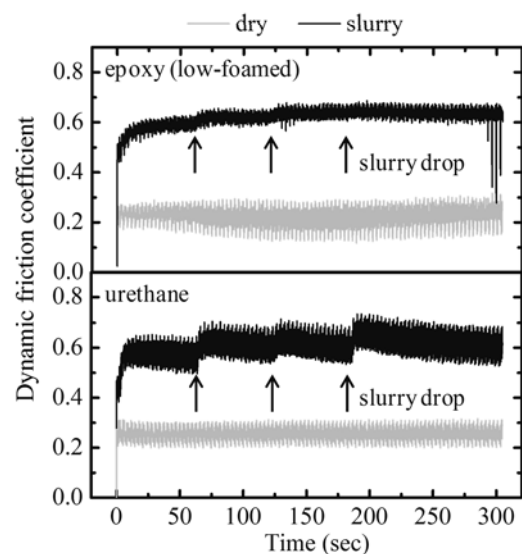


Fig. 17 Dynamic friction coefficient of polishing pad surfaces as a function of time

## 5. 高研磨能率の原因究明

これまでに述べたように、開発したエポキシパッドは従来のウレタンパッドと比較して高い研磨特性を有していることが明らかとなった。また、酸化ジルコニウム砥粒とエポキシパッドを利用することにより、従来研磨（酸化セリウム砥粒とウレタンパッド）の研磨能率を上回ることが確認され、酸化セリウムの代替砥粒としての可能性が確認された。本章では研磨パッドの表面ゼータ電位や接触角、動摩擦係数などの材料特性を評価し、エポキシパッドで高い研磨能率が得られる要因について考察を行った。

### 5・1 研磨パッド表面のゼータ電位の評価

研磨パッド表面および酸化セリウム砥粒をゼータ電位計（大塚電子(株)製，ELSZ-2R）により評価した。測定は常温の純水中で行った。また、測定溶液の pH を 0.1mol/L の塩酸および水酸化カリウム水溶液で変化させ、各 pH におけるゼータ電位を評価した。図 12 に各試料のゼータ電位と pH の関係を示す。分散剤が添加されていない酸化セリウムスラリーの pH は 7 であり、この pH における酸化セリウム砥粒のゼータ電位は +4.55mV と正の値を示した。同じ pH では、ウレタンパッドが -22.6mV、エポキシパッドが -10.4mV であり共に負の電位値を示したが、ウレタンパッドの方が絶対値が大きいことがわかった。つまり、ウレタンパッド

の方がパッド表面と砥粒間の引力が大きいことを示している。それに対し、分散剤を添加した酸化セリウムスラリーの pH はおよそ 10 であった。この pH においては、ウレタンパッドおよびエポキシパッド共に -35mV 程度のゼータ電位であり、二つのパッドで大きな差異は認められなかった。しかし、第 3 章で述べたように、分散剤を添加した酸化セリウム砥粒を使用した場合においても、エポキシパッドはウレタンパッドよりも 2 倍以上の研磨能率が得られている。研磨パッド表面のゼータ電位は pH が 7 において差があったものの、pH が 10 では差がなく、これらの結果から判断すると、パッド表面のゼータ電位の違いが高い研磨能率の支配要因ではないと結論づけられる。

## 5・2 スラリーの滞留性の評価

スラリーの滞留性に関して確認を行うため、研磨パッド表面の接触角およびスラリーの滑落に関する評価を行った。接触角の測定は、研磨パッド表面をフェイシングおよびドレッシングした後、接触角計（協和界面科学(株)製, CA-DT）を用いて行った。図 13 に各研磨パッド表面の水に対する接触角を示す。ウレタンパッドと比較すると、気孔率に関わらずエポキシパッドの接触角が小さく、親水性が高いことがわかる。また、分散剤を添加した砥粒を用いても、接触角の変化は小さかった。次に、酸化セリウムスラリーを 60 $\mu$ L 滴下した研磨パッドを傾斜させてスラリーの流動を観察した様子を図 14 に示す。傾斜角 25 度ではスラリーは流れ落ちず（図 14 (a)）、研磨パッド上にとどまっていたが、ウレタンパッドの場合は液滴が下に大きくせり出した状態（図 14 (b)）となった。傾斜角を 30 度にしたところ、ウレタンパッド上の液滴は滑落してしまった。一方、エポキシパッド上の液滴は傾斜角を 55 度にしても滑落しないことが確認できた。また分散剤添加スラリーにおいてもほぼ同様の傾向が確認された。以上の評価の結果、エポキシパッドはウレタンパッドと比較して酸化セリウムスラリーに対する親和性が高く、高いスラリー保持力を有することが確認された。同様の傾向は酸化ジルコニウムスラリーを用いた試験でも確認された。図 15 に示すように酸化ジルコニウムスラリーの場合でも、やはりエポキシパッドがウレタンパッドに比べ大きな滑落角を持つことがわかった。ウレタンパッド上ではおよそ 25 度の傾斜角でスラリーが滑落したのに対し、エポキシパッド上での滑落角はおよそ 40 度であった。このように酸化ジルコニウムスラリーの滑落角は酸化セリウムスラリーよりも小さいことがわかった。それぞれのパッドとスラリーの組み合わせにおける滑落角を小さい順から並べると、研磨能率の順と同じであり正の相関が認められた。このことから、滑落角が大きい、つまり砥粒の保持力が高いことがエポキシパッドで高い研磨能率が得られた要因であると言える。

## 5・3 研磨パッド表面の動摩擦係数の評価

次に研磨能率と比較的相関関係が強いと言われている(7)研磨パッド表面の動摩擦係数の評価を行った。摩擦係数の計測は図 16 に示すトライボ試験機（Center for tribology 社, UMT-2M）を用い、ボールオンディスク方式（JIS R1613-1993）により試験を行った。各研磨パッドの表面は実際の研磨実験を再現するため、測定前にフェイシングおよびドレッシングを施しており、乾式状態および酸化セリウムスラリーを滴下した湿式状態で計測を行った。研磨パッドの回転速度は 10mm/s であり、ガラスボール（直径 5mm）のパッドに対する接触荷重は 200g とした。湿式状態の試験は、研磨パッドをスラリー中に 24 時間浸漬させたのち、測定直前にスラリーを 1mL 滴下し、その後 1 分毎に 1mL ずつ 3 分までスラリーを滴下しながら実施した。図 17 にそれぞれの研磨パッドの動摩擦係数と時間の関係を示す。二つの研磨パッドで共通して、乾式状態と比較して湿式状態では摩擦係数が高くなっていることがわかる。スラリー中において、ウレタンパッドの摩擦係数はスラリー滴下後、時間と共に低下し、再びスラリーを滴下すると高くなる傾向が確認された。これは、ウレタンパッド上ではスラリーがすぐに排出され滞留性が悪いことを示している。それに対し、エポキシパッド

の摩擦係数はほぼ一定の値を維持していることがわかった。この傾向は、エポキシパッドの気孔率に関わらず確認された。これは、スラリーの滞留性がよくパッド表面上に保持されていることを示唆する結果である。

以上の結果を統合すると、エポキシパッドはウレタンパッドと比較してスラリーの保持力が高く、工作物表面により多くの砥粒が作用すると考察される。そのため、ウレタンパッドと比較してエポキシパッドにより高い研磨能率が得られたと結論づけられる。

## 6. 結 言

本研究では、ガラスの精密研磨用途として、エポキシ樹脂研磨パッドの開発を行った。研磨特性の評価を行い、従来のウレタン研磨パッドと比較した。また、酸化セリウムを代替する砥粒に関する検討を行った他、高い研磨能率が得られる要因について調査を行った。以下に、本研究で得られた結果をまとめる。

(1) 樹脂に配合する発泡剤の割合を変化させることによりエポキシパッドの物性値を変化させることが可能であり、発泡剤の添加量を増加させるとパッドの硬度が低下することがわかった。

(2) 作製したエポキシパッドを用い、ガラスの研磨特性の評価を行った。その結果、市販のウレタンパッドと比較して、2 倍程度の高い研磨能率が得られた他、高い幾何学的精度が得られることがわかった。

(3) 酸化セリウム代替砥粒の評価を行った。いずれの砥粒を使用してもエポキシパッド使用時に研磨能率の向上が確認された。特に酸化ジルコニウム砥粒とエポキシパッドの組み合わせの研磨能率が高く、酸化セリウムを代替する可能性が見出された。

(4) エポキシパッドの高研磨能率の要因について考察した。接触角や滑落角の評価、動摩擦係数の評価の結果、エポキシパッドはスラリーの保持力が高く、これが高研磨能率の要因であることがわかった。

## 謝 辞

本研究の一部は、経済産業省/NEDO（新エネルギー・産業技術総合開発機構）希少金属代替材料開発プロジェクト「精密研磨向けセリウム使用量低減技術開発及び代替材料開発」の援助を受けて行われました。ここに深く謝意を表します。

## 文 献

- (1) 村田順二, 張 宇, 谷 泰弘, “多孔質エポキシ樹脂研磨パッドの最適化に関する研究”, 2010 年度砥粒加工学会学術講演会講演論文集, pp. 105-106.
- (2) エポキシ樹脂技術協会編, 総説 エポキシ樹脂, 第一巻 (2003), p.16, エポキシ樹脂技術協会.
- (3) 岡田昭次郎, “研削砥石の結合剤としてのエポキシ樹脂の応用”, 高分子論文集, vol. 32, No. 3 (1975), pp. 142-146.
- (4) 男澤麻子, 河田研治, 榎本俊之, 谷 泰弘, 鈴木真里, 盧, 毅申, “複合粒子研磨法の開発 -樹脂工具プレートに関する検討-”, 砥粒加工学会誌 vol. 48, No. 9 (2004), pp 495-499.
- (5) 土肥俊郎, 黒河周平, 大西 修, 山崎 努, “超精密研磨/CMP 技術とその最新動向 (その 2) -最新の CMP 技術とトライボケミカル応用-” トロイボロジスト, vol. 55, No. 11 (2010), pp. 809-813.
- (6) 角田均, “シリコンウエハー表面マイクロラフネスの評価-パワースペクトル解析の応用-”, 応用物理, vol. 12, No. 12 (1997), pp. 1316-1319.
- (7) 朴栽弘, 羽場真一, 木下正治, 丁海島, “各種研磨パッドの摩擦特性による CMP の研究”, 2004 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp. 955-956.

## ガラス研磨における酸化セリウムの代替砥粒開発

李 承福<sup>1)</sup>, 桐野 宙治<sup>1)</sup>, 谷 泰弘<sup>2)</sup>, 村田 順二<sup>2)</sup>

---

## Development of Alternative Abrasives of Cerium Oxide for Glass Polishing

SeungBok Lee<sup>1)</sup>, Okiharu Kirino<sup>1)</sup>, Yasuhiro Tani<sup>2)</sup> and Junji Murata<sup>2)</sup>

In glass polishing process, cerium oxide ( $\text{CeO}_2$ ) abrasives are widely used because both high removal rate and high-quality surface finish can be easily obtained by using  $\text{CeO}_2$  abrasives. The metal component cerium (Ce), however, is one of the rare earth elements. Recently, because of the problems of the skyrocketing price increase and the supply risk of the  $\text{CeO}_2$ , the development on alternative materials/technologies and reducing consumption of cerium oxide abrasives have been strongly requested. In response to the requests, the authors have proposed the zirconium oxide ( $\text{ZrO}_2$ ) abrasive as the alternative abrasive of the cerium oxide. Even under the low slurry supply rate, a larger number of effective abrasives between the work and pad can realize the better polishing characteristics. Two methods have been proposed to increase the number of effective abrasives on the polishing pad. The first method is to use the cohesive abrasives during polishing and the second is increasing stagnation of the abrasives during processing. Based on these results, it has been confirmed that the zirconium oxide abrasives have the possibility as alternative abrasive of the cerium oxide for glass polishing. This paper describes that the results of the series of tests proved high polishing characteristics in terms of the surface roughness and removal rate for soda-lime glass.

Keywords: Polishing, Abrasive Grain, Polishing Pad, Surface Roughness, Removal Rate, Cerium Oxide, Zirconium Oxide, Alternative Material, Tool, Glass

E-mail: murata06@fc.ritsumei.ac.jp (J. Murata)

---

<sup>1)</sup>株式会社クリスタル光学, <sup>2)</sup>立命館大学理工学部機械工学科

<sup>1)</sup> Crystal Optics Inc.

3-4-25 Imakatata, Otsu, Shiga, 520-0241 Japan

<sup>2)</sup> Department of Mechanical Engineering, Ritsumeikan University,  
Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

## 1. 結 言

通常ガラス加工における最終仕上げには、高品位仕上げ面や高い研磨能率が得られることから酸化セリウム砥粒の遊離砥粒を用いた研磨加工技術が広く用いられている。その砥粒の金属成分がセリウム(Ce)であり、これは代表的な希土類金属（レアアース）の一つである。この希土類金属は、世界の生産量の 90% 以上を中国が占めており、この供給寡占状況は近年ますます強まり、2009 年度には 97% 以上を占めている。更に、2010 年 7 月に中国が 2010 年第 2 期レアアース輸入枠の公表以来、供給問題で世界のレアアース価格が急騰し、レアアースの資源を取り巻く世界情勢は一変している。このように、レアアースは圧倒的な生産シェアを持つ中国の動向が世界の動向に大きく影響を及ぼすという異例の供給構造となっている。日本は世界需要の約半分を占めるが、その大部分を中国から輸入している。このような背景でガラスの仕上げ加工における酸化セリウム砥粒の使用量低減技術やその代替砥粒の開発が強く要望されている。村田らはこのような現状に対応策の一つとして、ガラス研磨用エポキシ樹脂研磨パッドを開発し、この研磨パッドと酸化ジルコニウム砥粒と組み合わせ、酸化セリウム砥粒の使用量低減および代替砥粒についての可能性を報告している<sup>(1)</sup>。しかし、いまだ実用的なエポキシ樹脂研磨パッドの製品が市販されていないことから現場では未だウレタン樹脂研磨パッドが使用されている。また、ウレタン樹脂研磨パッドと酸化ジルコニウム砥粒の組み合わせに関する報告例も少ないのが現状である<sup>(2)</sup>。そこで著者らは酸化ジルコニウム砥粒に着目し、既存のウレタン樹脂研磨パッドを用いて酸化セリウム砥粒の代替砥粒としての可能性について検討を行った。

本研究では、従来の酸化セリウム砥粒の研磨特性に対し、酸化ジルコニウム砥粒を用いて種々の添加材や化学溶剤を加えて研磨スラリーの調整と実験を行いながらその研磨特性を調べた。その結果について報告する。

## 2. 酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性の比較

### 2・1 酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒のガラスの基本研磨特性

はじめに、従来の酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性を調べるため、表 1 の実験条件（以下、すべての実験はこの条件で行った）で研磨加工を行った。実験装置は(株)エム・ユー・ティ社製の卓上型片面 CMP 研磨機である。研磨パッドには市販の発泡ウレタン樹脂パッド（九重電気(株)製 KSP90、含有砥粒無し、A 硬度 90）を用いた。研磨パッドは実験前に#100 のダイヤモンド電着リング(Φ150mm)を用いて、工

Table 1 Polishing Conditions

|           |                                                                                    |
|-----------|------------------------------------------------------------------------------------|
| Machine   | MAT - BC15 Single side<br>Desk top CMP machine                                     |
| Pad       | KSP90 (Polyurethane)                                                               |
| Time      | 30 min                                                                             |
| Pressure  | 20 kPa                                                                             |
| Speed     | Lap plate (Φ380mm) : 60 rpm<br>Work holder (Φ100mm) : 60 rpm                       |
| Workpiece | Sodalime glass piece<br>Φ23mm x 5mm x 3 pieces<br>Surface roughness : 0.4μm Ra     |
| Slurry    | Concentration of abrasives : 3wt%<br>Supply rate : 25 mL/min<br>Fluid : Pure water |

CeO<sub>2</sub> : ○ Surface roughness □ Average removal rate for 30 minutes  
ZrO<sub>2</sub> : ● Surface roughness ■ Average removal rate for 30 minutes

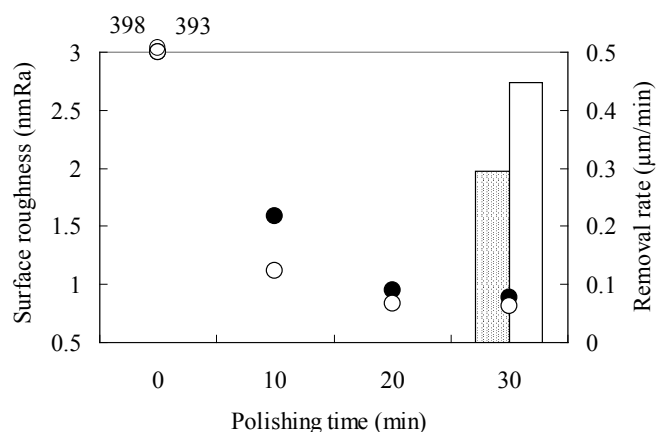


Fig. 1 Polishing characteristics of CeO<sub>2</sub> and ZrO<sub>2</sub> abrasives



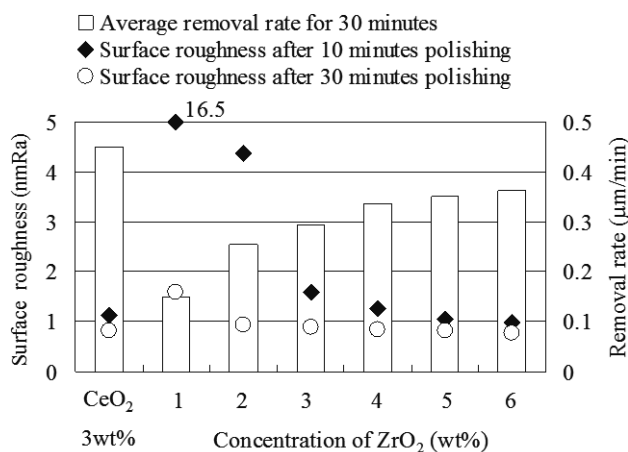
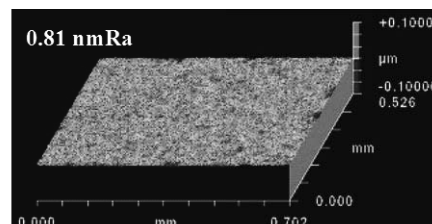
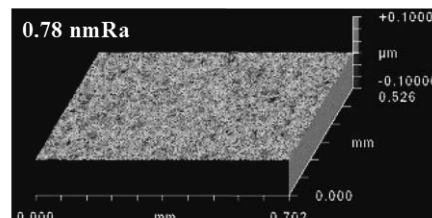


Fig. 2 Change of polishing characteristics with concentration of  $ZrO_2$  abrasives



(a) Case of  $CeO_2$  (3wt%)



(b) Case of  $ZrO_2$  (6wt%)

Fig. 3 Finished surfaces after 30 minutes polishing

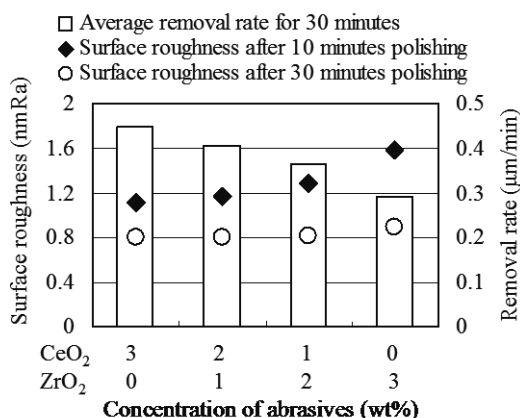


Fig. 4 Polishing characteristics using combination of  $CeO_2$  and  $ZrO_2$  abrasives

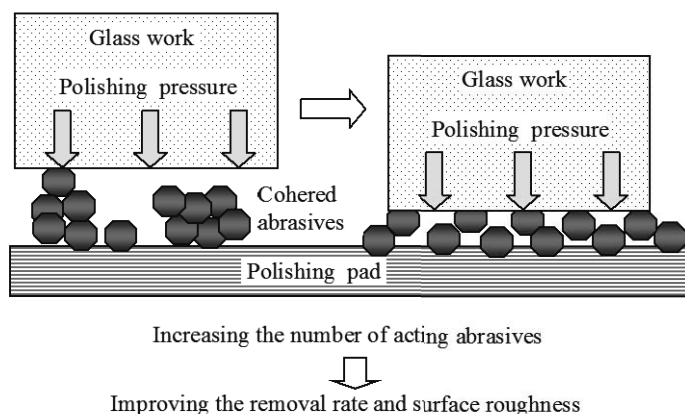


Fig. 5 Schematic of improving the polishing characteristics by means of formation of cohered abrasives

具およびテーブル回転数 60rpm の条件で 10 分間ドレッシングを行った。工作物には摩耗度 100 の基準的なガラスであるソーダガラスを使用し、前加工面は FO#2000 (株式会社フジインコーポレーテッド社製、平均粒径  $4.7\mu m$ ) を用いた LAP 加工にて  $0.38 \sim 0.41\mu mRa$  の面に仕上げた。研磨能率(除去能率)は加工前後の工作物の重量を電子天秤により計測し、その差により評価した。研磨後の表面粗さは、白色式位相シフト干渉顕微鏡 (Zygo 社製、New View 7200) により  $0.702mm \times 0.526mm$  の範囲において、カットオフ値  $80\mu m$  の高域フィルタを適用して評価した。

仕上げ面粗さの経時的な向上の様子と研磨能率に関して、酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒を用いた場合を比較した結果を図 1 に示す。棒グラフは、30 分での平均的な研磨能率を表している。点グラフは加工前および 10 分、20 分、30 分加工後の表面粗さを表している。この図から酸化ジルコニア砥粒(平均粒径  $1.3\mu m$ 、比重 5.4、ユニバーサルフォトリソクス社製、ZIROX K-BC0007)は酸化セリウム砥粒(平均粒径  $1.4\mu m$ 、比重 7.1、昭和電工(株)製、SHOROX A-10)と比べて研磨能率は約 3 割劣っているが、研磨後の工作物表面粗さは酸化セリウム砥粒よりわずかに悪い程度であることが分かった。また、2 種類の砥粒での表面粗さは、10 分後の表面粗さも酸化セリウム砥粒の方が  $1.12nmRa$ 、酸化ジルコニウム砥粒の方が  $1.59nmRa$  と大差がなく、研磨面も潜傷等がない高品位な面であることが分かった。またいずれの場合も 20 分で飽和状態になることが分かった。仕上げ面の向上の程度を評価するためにこの 10 分後の表面粗さに着目し、酸化セリウム砥粒での値より優れることおよび高品位面を目標として酸化ジルコニア砥粒を用いて酸化セリウム砥粒の代替砥粒としての可能性について、次節以降の研究を行った。

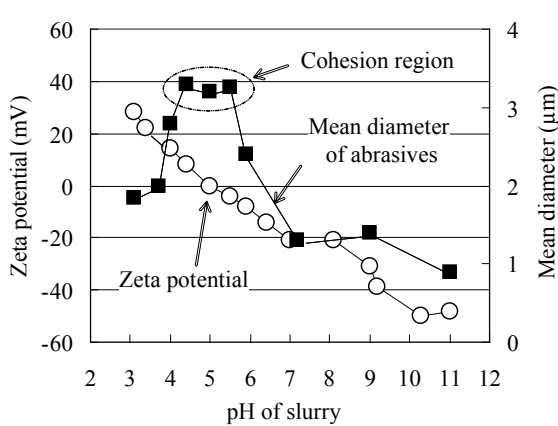


Fig.6 Change of zeta potential and mean diameter of  $\text{ZrO}_2$  abrasives with pH value

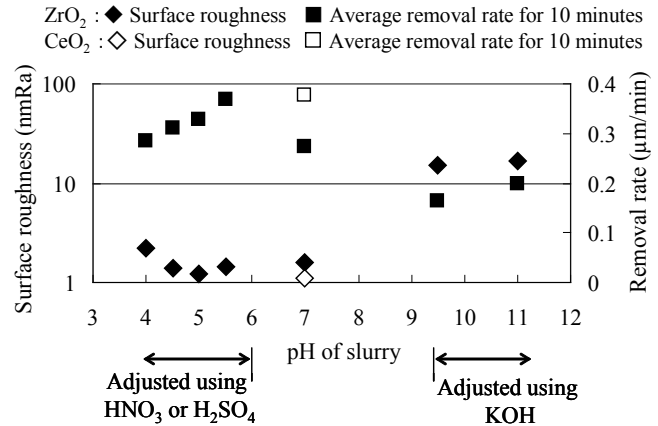


Fig.7 Change of polishing characteristics with pH value using  $\text{ZrO}_2$  abrasives

## 2・2 酸化ジルコニウム砥粒によるガラス研磨特性の濃度依存性

酸化ジルコニウム砥粒の濃度による研磨特性を調べるため、スラリー濃度を変えながら実験を行った。目標としては研磨 10 分後と 30 分後の仕上げ面粗さが酸化セリウム砥粒より優れることとした。その結果を図 2 に示す。点グラフは各研磨時間の仕上げ面粗さで、棒グラフは 30 分間の平均研磨能率である。この図から酸化ジルコニウム砥粒の濃度が 5wt% 以上であれば、酸化セリウム砥粒の 3wt% より研磨能率は劣るものの、研磨 10 分後と 30 分後の表面粗さは優れることが分かった。図 3 に 3wt% の酸化セリウム砥粒と 6wt% の酸化ジルコニウム砥粒を用いた 30 分研磨後の仕上げ面粗さおよび表面状態を示す。酸化セリウム砥粒と同じく前加工面が完全に取れていることと仕上げ面粗さの値はより優れた値となることが確認できた。このように酸化ジルコニウム砥粒はガラスの鏡面研磨に適した砥粒で、濃度が濃い状態では酸化セリウム砥粒の代替となりうる可能性を大いに秘めていることが判明した。

## 2・3 酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の混合砥粒の研磨特性

次に酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒を用いた混合砥粒の研磨特性を調べるため研磨実験を行った。混合砥粒の添加率を 3wt% とし、それぞれの砥粒の濃度を 0wt% から 3wt% まで変化させて実験を行った。図 4 にその実験結果を示す。点グラフは研磨時間ごとの仕上げ面粗さで、棒グラフは 30 分間の平均研磨能率である。この結果から酸化セリウム砥粒の添加量が 3wt% から 0wt% まで減ることに伴い、研磨能率が単調に低くなることと研磨 10 分後の表面粗さが悪くなる傾向にあることが分かった。しかし 30 分後の表面粗さはわずかではあるが、単独の砥粒を使用した場合よりも混合砥粒を用いた方が優れることが分かった。これは 2 種類の砥粒の間で何らかの干渉が起きているためと考えられる。

## 3. 砥粒の滞留性による研磨特性の向上

### 3・1 酸化ジルコニウム砥粒の凝集による研磨特性の変化

実験に用いた酸化セリウム砥粒は比重が 7.1 であり、酸化ジルコニウム砥粒は 5.4 である。その比重の差による砥粒の滞留性（研磨パッド上での砥粒の動きにくさ）が異なることで 10 分後の研磨特性に大きな差が出たのではないかと考えた。研磨のメカニズムに関しては、図 2 にも示されているが、砥粒濃度が高い（加工に作用する砥粒数が多くなる）ほど研磨能率と仕上げ面粗さが良くなる報告がある<sup>(3)・(4)</sup>。そこで、酸化ジルコニウム砥粒は酸化セリウム砥粒より比重が軽いことから、砥粒の弱い結合体である凝集現象を利用し、凝集体になった砥粒が沈降特性を早め砥粒の滞留性を高めることで、研磨に係わる砥粒数が増え研磨特性をよくすることを考えた。図 5 に示すように凝集砥粒を研磨圧力で崩し、研磨に作用する砥粒数を増やすことができれば、最終的には研磨特性向上に繋がるものと考えられる。

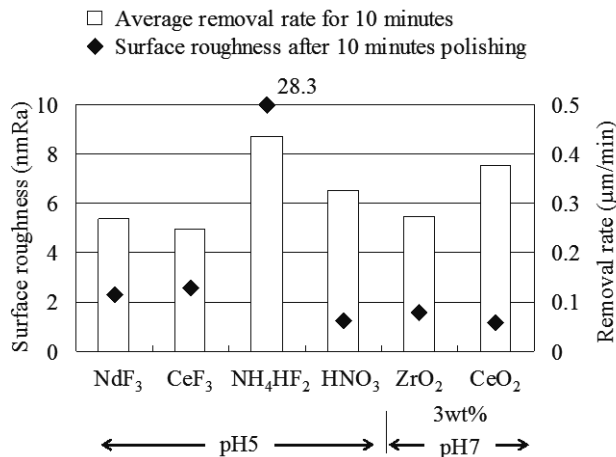
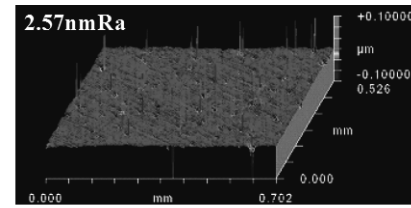
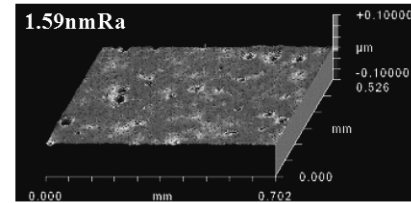


Fig.8 Effect of adding fluorides and HNO<sub>3</sub> on polishing characteristics in pH5 using ZrO<sub>2</sub> abrasives



(a) Addition of CeF<sub>3</sub> in pH5



(b) Conventional polishing only using ZrO<sub>2</sub> in pH7

Fig. 9 Finished surfaces after 10 minutes polishing in case of adding CeF<sub>3</sub> to ZrO<sub>2</sub> abrasives

実験に用いた酸化ジルコニウム砥粒の pH によるゼータ電位と平均粒径の変化を調べるため、大塚電子(株)製の装置 (Zeta potential and particle analyzer, Photol ELSZ-2) を用いて測定を行った。その測定結果を図 6 に示す。この結果から酸化ジルコニウムの等電点に近い pH4 から pH 5.5 の領域において砥粒の凝集が起きることが分かる。この凝集の現象を利用するためには、酸化ジルコニウム砥粒を純水に混ぜたスラリーは pH7 に近いことから、酸性液の添加による pH 調整が必要であると考えた。本研究では、著者らの化学研磨によるガラス研磨の実験報告からガラス表面粗さの改善に効果のある硝酸(HNO<sub>3</sub>、再現性の実験には硫酸(H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>)も用いた)を添加することでスラリーの pH 調整を行った<sup>(5)</sup>。

図 7 に酸化ジルコニア砥粒(添加量 3wt%)を用いて pH 調整を行ったスラリーで研磨実験を行った、10 時間の平均研磨能率と 10 分研磨後の表面粗さを示す。酸性領域では上述のように硝酸を用いて pH4 - pH5.5 の範囲に調整し、アルカリ領域では水酸化カリウムを用いて pH9.5 - pH11 の範囲に調整を行った。凝集が始まる pH4 - pH5.5 の範囲での研磨能率は pH が高いほど向上する傾向となることが分かった。また、10 分研磨後の表面粗さも pH4.5 以上の時には酸化ジルコニア砥粒のみ(pH7)の値より良い表面粗さが得られた。よって、この pH 範囲での一連の実験から、pH 調整により砥粒の凝集作用を促進させ、研磨能率と表面粗さの向上が可能となることが分かった。しかし、目標とした酸化セリウム砥粒の結果と比較すれば、表面粗さは同等であるが研磨能率が劣ることと前加工面が完全に取れていないことも分かった。これらの結果は硫酸を用いた場合も同様の傾向であった。水酸化カリウムで調整を行った pH9.5 - pH11 の範囲での表面粗さは中性よりもさらに悪く、研磨能率もかなり劣ることから、アルカリ領域では研磨特性が向上しないことが確認できた。

### 3・2 フッ化物添加による酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性

研磨能率の更なる向上を目的として、化学研磨によるガラス研磨の実験報告<sup>(5)</sup>からガラスと反応性(溶解作用)が強いフッ化物を添加し、同様の実験を行った。酸化ジルコニア砥粒(添加量 3wt%)にそれぞれフッ化ネオジム(NdF<sub>3</sub>)、フッ化セリウム(CeF<sub>3</sub>)、フッ化水素酸アンモニウム(NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>)を 1wt%添加し、前節と同様に硝酸を用いて pH を 5 に調整したスラリーで研磨実験を 10 分間行った。その実験結果を酸化ジルコニウム砥粒のみの場合と比較した結果を図 8 に示す。この結果からフッ化水素酸アンモニウムを添加した場合、酸化ジルコニウム砥粒のみの場合より高い研磨能率が得られることが判明した。更に、これは酸

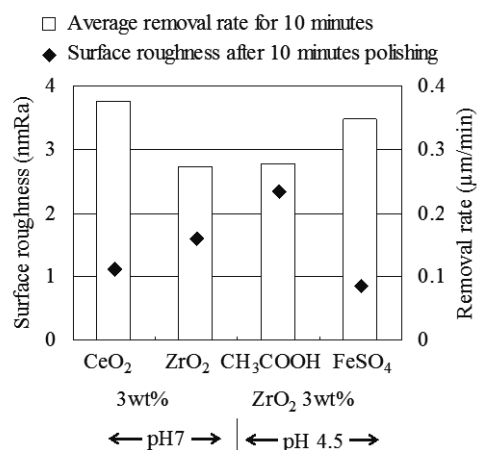


Fig.10 Polishing characteristics in addition of CH<sub>3</sub>COOH and FeSO<sub>4</sub> to ZrO<sub>2</sub> abrasives

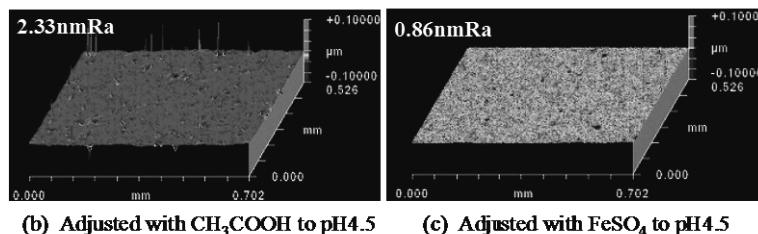
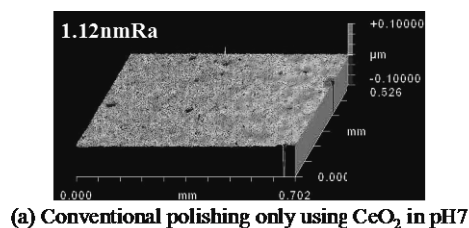


Fig.11 Finished surfaces after 10 minutes polishing in case of adding CH<sub>3</sub>COOH and FeSO<sub>4</sub> to ZrO<sub>2</sub> abrasives

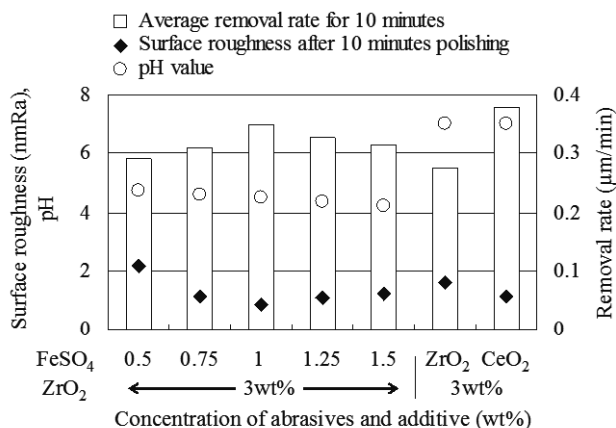


Fig.12 Effect of FeSO<sub>4</sub> concentration on polishing characteristics using ZrO<sub>2</sub> abrasives

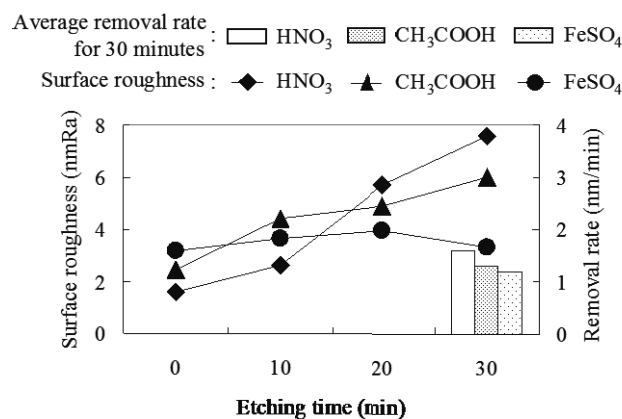


Fig.13 Etching characteristics using three kinds of etchant

化セリウム砥粒と比較しても高い結果である。しかしながら、表面粗さが 20nmRa 以上と極端に悪い結果であった。その他のフッ化ネオジウム、フッ化セリウムのフッ化物添加の場合、表面粗さと研磨能率が酸化ジルコニウム砥粒より劣る結果となった。図 9 に示すのは、pH5 に調整し 10 分間研磨後のフッ化セリウムの表面状態(a)と酸化ジルコニウム砥粒のみ 10 分研磨後の表面状態(b)である。この干渉顕微鏡画像に示すように表面状態(a)にはピットと微小突起が数多く発生しており、表面状態(b)には微小突起はないがまだ前加工面が完全に取れてないことが確認できた。これらのことから前節の強酸(硝酸、硫酸)とフッ化物添加では良い品質の仕上げ面が得られないことが分かった。

### 3・3 弱酸および強酸塩添加による酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性

前節までの実験結果より、酸性物添加でスラリーの pH を 5 に近づけることで表面粗さの改善に、フッ化水素酸アンモニウムの添加は研磨能率の改善に効果的であることが分かった。しかし、フッ化物の場合は表面粗さが悪くなるという悪い効果をもたらすことも確認できた。そこで、このような問題を同時に改善することを考え、前節では強酸を用いたが、今回はエッチング作用の少ない弱酸である酢酸(CH<sub>3</sub>COOH)を用いて研磨特性を調べることにした。まず、酸化ジルコニア砥粒 3wt%に酢酸を用いて pH4.5 まで調整し 10 分間研磨実験を行った。図 10 にその実験結果を示す。比較のため、酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウ



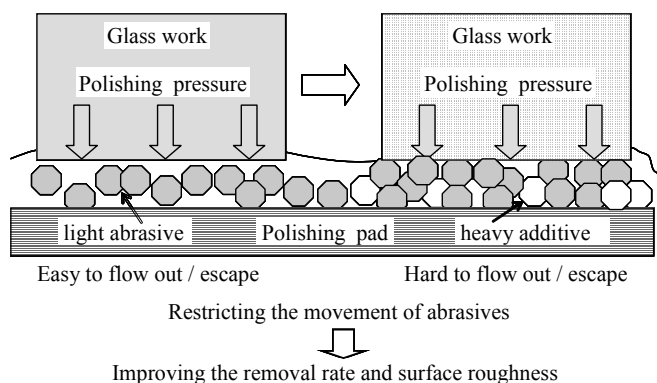


Fig.14 Schematic of improving the polishing characteristics adding the heavy additives

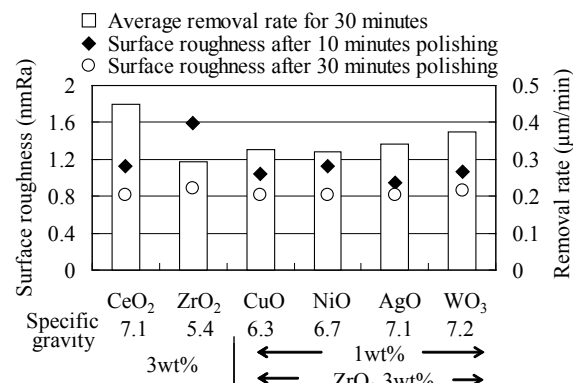


Fig.15 Polishing characteristics with heavy metal oxide additives using  $ZrO_2$  abrasives

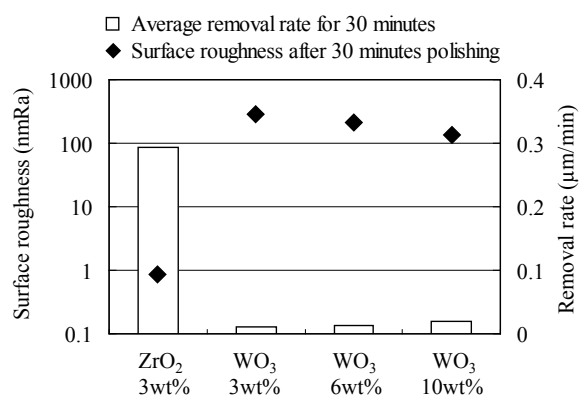


Fig.16 Polishing characteristics of  $WO_3$  as abrasives

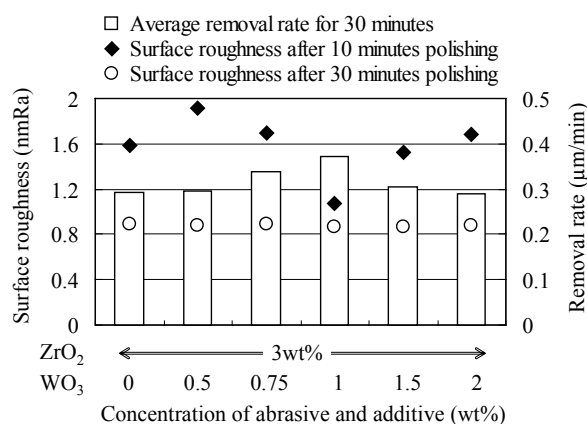


Fig.17 Effect of  $WO_3$  concentration on polishing characteristics using  $ZrO_2$  abrasives

ム砥粒の結果も一緒に表した。この結果から研磨能率は酸化ジルコニア砥粒の結果と同等であるものの表面粗さは悪くなっていることが分かった。また、酸化セリウム砥粒の結果と比較するといずれも劣っていることが分かった。これらのことから弱酸である酢酸を用いても研磨特性の向上ができないことが分かった。

次に強酸塩の硫酸第一鉄を用いることを試みた。硫酸第一鉄は代表的なマイルドな塩で食品添加物としても使用されている。酸化ジルコニア砥粒 3wt%に硫酸第一鉄を 1wt% (pH4.5) 添加したものの実験結果を図 10 に併記する。この図から硫酸第一鉄添加の場合は 10 分研磨後の研磨能率は酸化セリウム砥粒にわずかに劣る程度で、表面粗さは優れることが分かった。また、酸化ジルコニウム砥粒の結果および酢酸添加の結果と比較してもすべての研磨特性で完全に優位であることが確認できた。図 11 に示すのは 10 分研磨後のそれぞれの表面状態である。酸化セリウム砥粒（同図(a)）の場合前加工面が取れていることが確認でき、前節の酸化ジルコニウム砥粒より優れていることが分かった。酢酸（同図(b)）はピットと微小突起が発生してことが確認できる。これに対して硫酸第一鉄（同図(c)）の場合は微小突起の発生がないことや前加工面も完全に取れている最も品質の高い面であることが確認できる。硫酸第一鉄の添加による研磨特性向上が確認できたことより、次にその添加量と研磨特性について調べることにした。図 12 に示すように酸化ジルコニウム砥粒 3wt%に硫酸第一鉄を 0.5wt%から 1.5wt%まで添加しながら、それぞれの 10 分研磨後の研磨特性を調べた。比較のため、酸化ジルコニウム砥粒と酸化セリウム砥粒の結果も一緒に表した。この図から硫酸第一鉄の添加率を 0.75wt%から 1.5wt%とした際には酸化ジルコニウム砥粒に比べて研磨特性が優れることが分かった。このように添加量に最適値が出現するのは凝集が pH4.5 において最も顕著となるためと



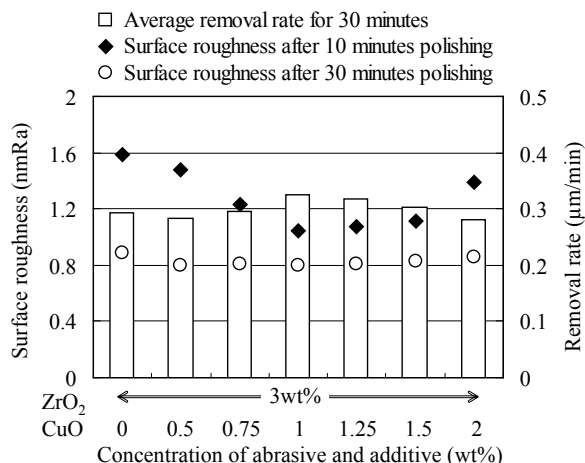


Fig.18 Effect of CuO concentration on polishing characteristics using ZrO<sub>2</sub> abrasives

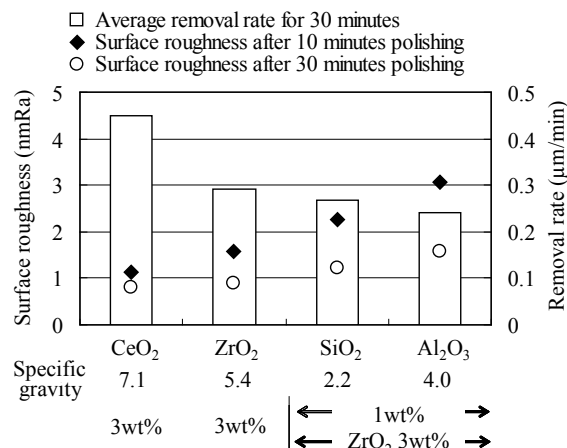


Fig.19 Change of polishing characteristics in addition of light metal oxides using ZrO<sub>2</sub> abrasives

思われる。以上の結果よりスラリーの pH を調整し、酸化ジルコニア砥粒の凝集作用を促進させることで、ガラス工作物の表面粗さはより優れたものとなることと研磨能率が酸化セリウム砥粒を用いた場合と同等以上まで向上できることが確認できた。これらは凝集効果により、砥粒の滞留性を高められた結果であると推察される。

硫酸第一鉄の添加によりガラス工作物の研磨特性が改善できたが、このことに硫酸第一鉄の化学的作用が寄与しているのか検証を行った。この検証に用いた添加剤は pH 調整用に添加した強酸の硝酸、弱酸である酢酸と硫酸第一鉄の 3 種類である。この検証の目的は、添加剤の作用が pH 調整のみであるか、あるいはその他にガラス工作物との反応にも作用しているかを明らかにするためである。検証の方法として、ビーカ実験を行った。3 種類の添加剤を純水にそれぞれ pH4.5 になるまで添加し、溶液のビーカの中にガラス工作物試料を入れてスターアで液を攪拌させながら 30 分までのガラスの表面粗さと除去量を調べた。表面粗さは 10 分、20 分、30 分と 3 回測定し、除去量は 30 分後に実験前後の重量の差で求めた。図 13 に検証実験結果を示す。この図から硝酸と酢酸の場合は、時間経過とともにガラスの表面粗さが悪化したのに対し、硫酸第一鉄の場合はほとんどガラスの表面粗さに変化がなかった。なお、除去量はいずれの場合もナノメータオーダで無視できるほど少なかった。3 種類の添加剤によるガラス工作物の表面状態を調べても、硝酸と酢酸の場合はガラス表面に突起の発生や粗さ変化が起きるが、硫酸第一鉄の場合は変化がほとんど起こらないことが確認できた。これらの検証実験結果から硫酸第一鉄は酸性物の添加剤と異なり、スラリー中でガラス工作物との反応はほとんど無く、酸化ジルコニウム砥粒の凝集促進にのみ寄与していることが確認できた。

#### 4. 高比重金属酸化物の添加によるガラス研磨特性の改善

##### 4・1 高比重金属酸化物の添加による研磨特性

前章では pH 調整による凝集現象を利用し、凝集体になった砥粒が沈降特性を高め砥粒の滞留性を高めることを行った。今度は別の観点から、作用砥粒の沈降特性を変える添加材を入れることで砥粒の挙動に制限をかけ、研磨パッド上での滞留性を上げ工作物の加工に作用砥粒数を増加させることを考えた。図 14 に高比重添加材により砥粒の滞留性を向上させて研磨特性を改善する概念を示す。実験に用いている酸化ジルコニウム砥粒の比重は 5.4 である。そこで、添加するのは親水性表面を持つ金属酸化物とし、その金属

Table 2 Properties of abrasives and additives used in polishing experiment

| Abrasive or additive     | SiO <sub>2</sub> | Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | ZrO <sub>2</sub> | CoO  | CuO  | NiO        | SnO <sub>2</sub> | CeO <sub>2</sub> | AgO        | WO <sub>3</sub> | Ta <sub>2</sub> O <sub>5</sub> | PbO        |
|--------------------------|------------------|--------------------------------|------------------|------|------|------------|------------------|------------------|------------|-----------------|--------------------------------|------------|
| Mean diameter [ $\mu$ m] | 1                | 1                              | 1.3              | 2.6  | 3.2  | 1.4        | 4.3              | 1.4              | 1.1        | 1               | 1.4                            | 4.1        |
| Specific gravity         | 2.2              | 4                              | 5.4              | 6.1  | 6.3  | 6.7        | 7                | 7.1              | 7.1        | 7.2             | 8.5                            | 9.5        |
| pH @1wt% slurry          | 7.1              | 7                              | 7                | 7.2  | 7    | 6.7        | 6.1              | 7                | 10         | 4.5             | 7                              | 10.1       |
| Color of slurry          | white            | white                          | white-cream      | gray | gray | light-gray | white-cream      | light-orange     | light-gray | light-green     | white-cream                    | light-gray |

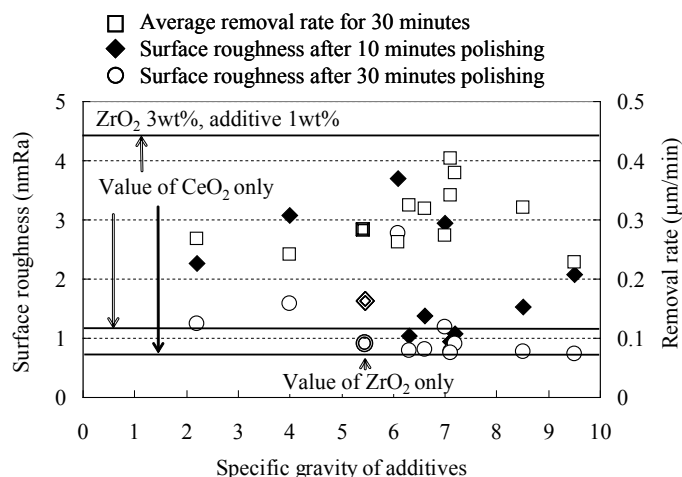
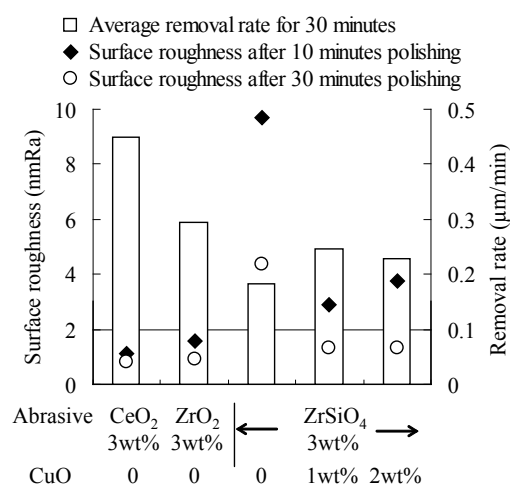


Fig. 20 Change of polishing characteristics in addition of metal oxides with various specific gravity

Fig. 21 Improvement of polishing characteristics in case of ZrSiO<sub>4</sub>

酸化物の比重はこの値より大きいものを選定することとした。図 15 に酸化タングステン(WO<sub>3</sub> : 比重 7.2), 酸化銀(AgO : 比重 7.1), 酸化ニッケル(NiO : 比重 6.7), 酸化銅(CuO : 比重 6.3)などの金属酸化物をそれぞれ 1wt%添加し実験を行った結果を示す。実験結果から表面粗さと研磨能率においては、酸化ジルコニウム砥粒のみの場合と比べ、高比重の金属酸化物を添加した方がすべて優位となることが確認できた。また、代替目標の酸化セリウム砥粒と比較しても研磨後の仕上げ面粗さはすべての高比重金属酸化物を添加した方の結果が同等以上か、あるいはより優れることが分かった。この実験結果から、使用砥粒より高比重の金属酸化物を添加することで砥粒の滞留性を向上させ研磨に作用する砥粒の増加につながり研磨特性向上が可能であることが確認できた。

高比重金属酸化物の添加による研磨特性向上の現象を調べるため、添加した金属酸化物の中、研磨能率が最も高かった酸化タングستنを用いて確認実験を行った。高比重金属酸化物が直接砥粒となり研磨加工に作用することも考え、酸化タングستنのみ 3wt%, 6wt%と 10wt%をそれぞれ添加し 30 分間ガラスの研磨実験を行った。

その実験結果を図 16 に示す。この実験結果から、酸化タングستنのみでは、いずれも仕上げ粗さ改善や除去能率向上はほとんど見られなかった。このことから、高比重金属酸化物は実際研磨を行う砥粒としての働きは無く、研磨に係わるメイン砥粒の滞留性向上に働いているものと考えられる。

次に、酸化ジルコニウム砥粒に添加した高比重酸化金属物の濃度による研磨特性の変化を調べることにした。図 17 に酸化ジルコニウム砥粒 3wt%に酸化タングستنの添加濃度を変えながら実験した結果を示す。この際スラリーの pH は pH4.5 - pH5 であった。この図から金属酸化物添加量にも最適値があることが

分かった。この実験の結果からは、添加量 1wt%の際に研磨能率と仕上げ面粗さが最も優れることが確認できた。これは、添加材が多すぎるとメイン砥粒の研磨作用を阻害するためと考えられる。

高比重金属酸化物として用いた酸化タングステンはスラリーの pH が pH4.5 - pH5 であったため、酸化ジルコニウム砥粒の凝集現象も同時に起きた可能性があると考えられる。そこで、高比重金属酸化物の添加材の中、スラリーの pH が酸化ジルコニウム砥粒のみである pH7 前後になるものを調べたところ、酸化銅を用いた際に中性領域の pH7 になることが分かった。そこで酸化ジルコニウム砥粒を 3wt%に固定し、そのスラリーへの酸化銅の添加量を 0.5 wt%から 2.0wt%まで変えながら実験を行った。図 18 にその結果を示す。結果は酸化タングステンの場合とほぼ同じで、0.75 wt%から 1.5wt%までの酸化銅添加で酸化ジルコニア砥粒 3wt%の研磨特性より優れる研磨特性が確認できた。酸化銅添加率の 0.5 wt%と 2.0wt%の場合に 30 分間の平均研磨能率が低下したのは滞留性に係わる酸化銅粒子の個数が少ないことと研磨に作用する酸化ジルコニア砥粒の個数が減ったためであると考えられる。また、添加率に関しては最適な混合比があり、この実験では酸化ジルコニア砥粒 3wt%と酸化銅 1wt%の混合比が最適となった。

#### 4・2 添加金属酸化物の比重による研磨特性の変化

前節の議論を深めるために酸化ジルコニウム砥粒より比重が軽い低比重金属酸化物も添加し、その研磨特性を調べることにした。選定したのは、酸化ケイ素( $\text{SiO}_2$ , 比重 2.2)と酸化アルミニウム( $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 比重 4.0)の 2 種類である。それぞれを酸化ジルコニウム砥粒 3wt%に 1wt%ずつ添加し、研磨実験を行った。その実験結果を図 19 に示す。2 種類の結果とともに酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の結果も比較のため、併記した。実験結果を見ると、2 種類ともに添加材による滞留性の改善効果が見られないことから、低比重金属酸化物を添加した研磨特性は、表面粗さと研磨能率でいずれも酸化ジルコニウム砥粒よりも劣る結果となった。このことにより、低比重の金属酸化物は添加しても砥粒の滞留性改善の効果は期待できないことが確認できた。

本研究の実験に用いた砥粒と添加した金属酸化物の種類、平均粒径、比重、スラリーの pH およびスラリーの色などを表 2 にまとめた。スラリーの pH は添加材が 1wt%の際のもので 3 章に述べた凝集が生じる領域か否かを知るために表示した。スラリーの色は現場が採用する際の判断基準となるために記述した。灰色のものは採用に多少の抵抗がある可能性がある。メイン砥粒である酸化ジルコニウムの砥粒径が  $1.3\mu\text{m}$  であることから、添加材の平均粒径もメインの砥粒の研磨作用を阻害しない  $1\mu\text{m}$  程度としたかったが、入手が困難で、一部は  $4\mu\text{m}$  を越える平均粒径となっているが、微細な添加材も含まれると考え、実験に用いた。図 20 は図 15 および図 19 の結果をまとめ、添加材の比重と研磨特性の相関関係を示したものである。また、比較のため、酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性も同時に図 20 に示した。酸化セリウム砥粒の研磨特性は目標であるため線で表し、上から研磨 30 分間の平均研磨能率、その次が研磨 10 分後の仕上げ面粗さ、最も下が研磨 30 分後の仕上げ面粗さである。酸化ジルコニウムのみの結果は比重 5.4 のところにプロットされているものである。この図から 30 分研磨後の到達仕上げ面粗さは高比重の添加材を加えるほど優れることが分かった。これは添加材の高比重による滞留性向上が原因であると考えられる。なお、研磨能率においては酸化セリウム砥粒の比重(7.1)の付近でピークとなり、その前後では下がる傾向も分かった。酸化ジルコニウム砥粒の滞留性を最も向上させるのは、酸化ジルコニウムよりわずかに比重の重い粒子であることが判明した。また、平均粒径の大きい添加材の場合いずれも研磨能率の向上の程度が低いことも分かった。

#### 4・3 珪酸ジルコニウム砥粒の研磨特性の改善

同様の効果は酸化ジルコニウム砥粒(比重 5.4)より軽い砥粒でも出現するのか確認するため、より低比重の珪酸ジルコニウム( $\text{ZrSiO}_4$ , 平均粒径  $1.4\mu\text{m}$ , 比重 4.7)砥粒を用いて研磨特性の変化を調べた。珪酸ジルコニウム砥粒 3wt%および珪酸ジルコニウム砥粒 3wt%に酸化銅をそれぞれ 1wt%と 2wt%ずつ添加し実験を行った。その実験結果を図 21 に示す。比較のため酸化セリウム砥粒と酸化ジルコニウム砥粒の研磨特性も一緒に表示した。この図から珪酸ジルコニウム砥粒を用いた場合、研磨特性はいずれも酸化セリウム砥粒および酸化ジルコニウム砥粒には劣ることが分かった。しかし、珪酸ジルコニウム砥粒のみの場合と比べると、酸化銅を添加した場合に研磨特性が大きく改善されることが確認できた。特に表面粗さに関しては、酸化銅の添加により飛躍的な改善が見られた。これらの結果から低比重砥粒でも滞留性の確保により研磨特性の向上が可能であることが確認でき、代替砥粒可能性の幅が広がるものと考えられる。

### 5. 結 論

本研究では、ガラス研磨において多用されている酸化セリウム砥粒の代替砥粒開発を目的とし、その代替砥粒として酸化ジルコニア砥粒を選定して研磨特性の評価を行った。研磨パッドは既存の発泡ウレタン樹脂パッドを用いて代替砥粒に関する実験を行った。特に、研磨に作用する砥粒の滞留性に着目し、滞留性改善の方法として、用いた酸化ジルコニウム砥粒のゼータ電位と pH による粒径変化を調べ、凝集を起こし作用砥粒の個数を多くすることを提案した。また、高比重金属酸化物を添加することで研磨加工中の砥粒の動きを抑制・制御し作用砥粒数を多くすることも提案した。以下に、本研究で得られた結果をまとめる。

- (1) 酸化ジルコニウム砥粒を用いたスラリーを pH4 から pH5 付近に調整し、凝集作用を促進させることで、砥粒の滞留性効果でガラス工作物の表面粗さと研磨能率の向上が確認できた。しかし、酸性物(強酸・弱酸)やガラス工作物と反応性が強いフッ化物を添加した場合、研磨能率が向上するものの、表面にピットが発生し、研磨後の仕上げ面粗さは悪化した。
- (2) 凝集用の添加剤としてマイルドな強酸塩である硫酸第一鉄を用いることで、酸化セリウムより短時間で高品位の面粗さの達成が可能であることが確認できた。
- (3) 砥粒の滞留効果を一層高める方法として、高比重金属酸化物を添加材として入れることを提案し、実験で確かめたところ、表面粗さは短時間で向上するようになることが分かった。なお、用いる砥粒の酸化ジルコニウムより比重の低い金属酸化物の添加では、砥粒の滞留効果が無く、表面粗さと研磨能率は劣ることが確認できた。
- (4) 酸化ジルコニウム砥粒に金属酸化物の添加材としては、粒径が酸化ジルコニウム砥粒径より小さく、比重はわずかに重いものが望ましいことが確認できた。以上のことから、既存のウレタン樹脂パッドと酸化ジルコニウム砥粒の組合せで、酸化セリウム砥粒の代替が可能となることが確認できた。
- (5) 珪酸ジルコニウム砥粒のように、さらに低比重の砥粒の場合にも高比重の金属酸化物の添加により研磨特性の向上が確認できた。

### 謝 辞

本研究は、経済産業省／NEDO(新エネルギー・産業技術総合開発機構)希少金属代替材料開発プロジェクト「精密研磨向けセリウム使用量低減技術開発及び代替材料開発」の援助を受けて行われました。ここに関係各位に深く謝意を表します。

## 文 献

- (1) 村田順二, 谷 泰弘, 広川良一, 野村信幸, 張 宇, 宇野純基, “ガラス研磨用エポキシ樹脂研磨パッドの開発”, 日本機械学会論文集 C 編, Vol. 77, No. 777 (2011), pp. 533-541.
- (2) 李 承福, 桐野宙治, 谷 泰弘, “ジルコニア砥粒を用いた化学援用研磨の加工特性”, 2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集 (2011), pp. 757-758.
- (3) Komanduri R., Lucca D. A., and Tani Y., “Technological advances in fine abrasive processes”, *CIRP, Annals*, Vol. 46, No. 2 (1997), pp. 545-596.
- (4) 浜元伸二, 土肥俊郎, 尾形謙次, “SiC 基板の研磨加工におけるダイヤモンドスラリーの加工特性に関する研究(第 2 報)”, 2005 年度埼玉大学地域共同研究センター紀要, 第 6 号 (2006), pp. 8-9.
- (5) 李 承福, 桐野宙治, 谷 泰弘, “化学研磨におけるガラス研磨の代替可能性”, 2010 年度日本機械学会第 8 回生産加工・工作機械部門講演会講演論文集 (2010), pp.139-140.



## 土壌肥沃度指標 (SOFIX) に基づくデータベースから見た日本農地

堀井幸江<sup>1)</sup>、松野敏英<sup>1)</sup>、久保田謙三<sup>1)</sup>、福原優樹<sup>1)</sup>、松宮芳樹<sup>1)</sup>、平川潤<sup>2)</sup>、  
松田文雄<sup>3)</sup>、北村實彬<sup>4)</sup>、久保幹<sup>1)</sup>

=====

### Database of Japanese Agricultural Soil analyzed by SOFIX

Sachie Horii<sup>1)</sup>, Toshihide Matsuno<sup>1)</sup>, Kenzo Kubota<sup>1)</sup>, Yuki Hukuhara<sup>1)</sup>, Yoshiki Matsumiya<sup>1)</sup>,  
Jun Hirakawa<sup>2)</sup>, Bunyu Matsuda<sup>3)</sup>, Chikayoshi Kitamura<sup>4)</sup> and Motoki Kubo<sup>1)</sup>

The evaluation method of soil fertility (Soil Fertile Index; SOFIX) had been developed for the measurement of the material circulation activity in agricultural soil. Soil bacterial number, Nitrogen circulation activity, phosphorous circulation activity, and nutritional components (SOFIX) in soil were analyzed for construction of database of the Japanese agricultural soil. The range of bacterial number was between detection limit ( $7.8 \times 10^6$  cells/g) to  $1.9 \times 10^9$  cells/g, and the average number was  $6.4 \times 10^8$  cells/g. The average value of nitrogen circulation activity and phosphorus circulation activity was 26 points and 43 points, respectively. The average values of all samples suggest that material circulation activity of Japanese agricultural soil was low level. For the efficient and reproductive organic agricultural system, the total evaluation of agricultural soil should be needed.

Key words; Environmental DNA, Material circulation, SOFIX, Japanese agricultural soil

E-mail: kubo@sk.ritsumeai.ac.jp (M. Kubo)

=====

<sup>1)</sup> 立命館大学生命科学部生物工学科、<sup>2)</sup> 新江州株式会社、

<sup>3)</sup> 立命館大学研究部リサーチオフィス (BKC)、<sup>4)</sup> 近畿アグリハイテク

<sup>1)</sup> Department of Biotechnology, Faculty of life Sciences, Ritsumeikan University,  
1-1-1, Nojihigashi, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

<sup>2)</sup> Shingoshu CO., LTD,

759-3, Kawamiticho, Nagahama, Shiga 526-0111, Japan

<sup>3)</sup> Research Office (BKC), Division of Research, Ritsumeikan University,  
1-1-1, Nojihigashi, Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

<sup>4)</sup> NPO Kinki Agri-hightech,

15, Shimogamo Morimotocho, Sakyou, Kyoto 606-0805, Japan

## 1. はじめに

20 世紀以降、多くの先進国では化学肥料の普及によって、農作物の生産量の増大および生産性の向上が可能になった。しかし現在、化学肥料の連用や過剰施肥に起因する様々な問題が顕在化してきている。例えば、土壌生産力の低下 (団粒構造の減少、土壌の硬質化) や、肥料成分の流出に伴う地下水汚染の発生、河川・湖沼あるいは閉鎖性海域での富栄養化などが挙げられる (1, 2, 3)。そのため、一部の先進国では、化学肥料の使用量が減少してきており、西ヨーロッパでは、カリウムの化学肥料の使用量が 1999 年から 2008 年の 9 年間で 23.5% 減少している (4)。このように、環境保全への取り組みも進められてきている。また、世界的な化学肥料の需要に伴う地下資源の枯渇問題から、化学肥料価格も高騰しており、必要経費の増大は生産者の経済的負担を招いている。

このような環境意識の高まりと生産コストの高騰に伴い、堆肥等の有機質肥料の積極的利用が考えられている。堆肥等の有機質肥料は有機態および無機態の成分を含有しており、植物が有機態成分を直接吸収することはできない。そのため、有機質肥料を利用するには、土壌中の微生物による有機態成分の無機化が必要である。土壌中では、多種多様な生物や微生物によって物質循環が行われており (図 1)、有機物は生物の作用によって、無機物に分解 (無機化) される。分解された無機物は植物によって吸収され、植物体内に貯蓄される。この循環系においては、無機成分の流出が少なく環境負荷が小さいため、循環型の食料生産においては、有機質肥料の利用が重要である。

しかし、堆肥などの有機質肥料は化学肥料と異なり肥料成分バランスの調整が非常に困難である。そのため、有機質肥料の使用においては、土壌中の肥料成分の過不足を見極めることが重要である (6)。また、生物による無機化が施肥効果に影響を及ぼすことから、土壌生物や土壌細菌の活性に起因する物質循環を考慮しなければならない。言い換えれば、有機質肥料の効率的な施用には土壌環境および堆肥環境を正確に把握する必要がある。

これまでに本研究室では、土壌の物質循環に寄与する生物活性に着目した総合的な土壌肥沃度指標 (Soil Fertile Index; SOFIX) を開発した (7)。SOFIX とは、土壌中の生物の活性に着目し、総細菌数や窒素循環活性およびリン循環活性等によって、土壌の生物的、化学的、物理的な総合評価を試みる指標である。本研究では、これまでに蓄積した分析結果をデータベース化し、その解析結果から日本の農地土壌の現状について報告する。

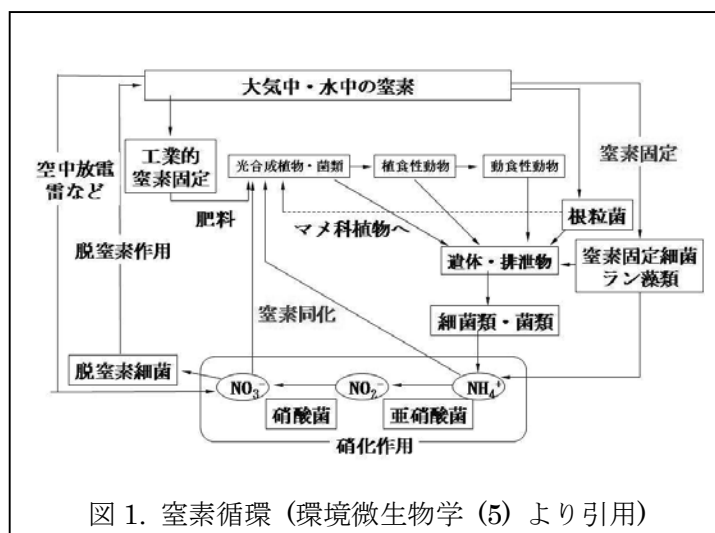


図 1. 窒素循環 (環境微生物学 (5) より引用)

## 2. 材料および方法

### 総細菌数の測定

供試土壌中の総細菌数は、土壌中の環境 DNA (environmental DNA; eDNA) の抽出および解析法に従って測定した (8, 9)。滅菌したチューブに供試土壌 1g、DNA 抽出緩衝液 8 mL、20% ドデシル硫酸ナトリウム溶液 1 mL を加え、攪拌機で攪拌 (1,500 rpm、室温、20 分間) した。攪拌した溶液 1.5 mL を遠心分離 (8,000 rpm、室温、10 分間) に供し、水層 700  $\mu$ L を新たなチューブに分取した。クロロホルム・イソアミルアルコール (24:1 (v/v))

700  $\mu$ L を添加し、緩やかに混和後、遠心分離 (14,000 rpm、室温、10 分間) した。水層 500  $\mu$ L を新たなチューブに分取して、2-プロパノールを添加し、緩やかに混和後遠心分離 (14,000 rpm、室温、20 分間) した。水層を除去後、70% (v/v) エタノール 1 mL を添加し、遠心分離 (14,000 rpm、室温、5 分間) した。水層を除去後、アスピレーターで減圧乾燥し eDNA を得た。1.0 %アガロースゲルを作製し、得られた eDNA 溶液および検量線作製のマーカーとして既知量の DNA を含む Smart Ladder (NIPPON GENE) をゲルに供した。電気泳動を行ったアガロースゲルは、エチジウムブロマイドで染色後 UV 照射し、DNA バンドを確認した。KODAK 1D Image Analysis software (KODAK) を用いて、エチジウムブロマイドを標識とした DNA バンドの蛍光強度測定を行った。アガロースゲル上の DNA 量の測定結果から、試料 1.0 ml あたりの eDNA 量を算出し、得られた eDNA 量と eDNA-総細菌数検量線 (土壌総細菌数 (cells/g-sample) =  $1.7 \times 10^8 \times \text{eDNA 量} (\mu\text{g/g-sample})$  ( $r^2 = 0.96$ )) を用いて、土壌総細菌数を算出した。

#### 窒素循環活性測定法

供試土壌の含水率を調整するために、土壌の最大保水容量を求めた。その後、水田土壌および畑土壌はそれぞれ最大保水容量の100%および60%の含水率に調整し、窒素循環活性の測定に用いた。土壌に硫酸アンモニウムあるいは亜硝酸カリウムをそれぞれ最終濃度が60  $\mu\text{g-N/g-soil}$  となるように添加し、25°Cで4日間静置した。1日目と4日目の土壌4 gから無機態窒素を1M KCl水溶液40 mLで抽出し、アンモニア態窒素濃度および亜硝酸態窒素濃度をそれぞれインドフェノール青法およびナフチルエチレンジアミン法を用いて測定した (10、11)。アンモニア態窒素および亜硝酸態窒素の減少率は下記の式に従って算出した。

$$\text{減少率 (\%)} = (\text{1 日目の } \text{NH}_4^+\text{-N 濃度あるいは } \text{NO}_2^-\text{-N 濃度} - \text{4 日目の } \text{NH}_4^+\text{-N 濃度あるいは } \text{NO}_2^-\text{-N 濃度}) / (\text{1 日目の } \text{NH}_4^+\text{-N 濃度あるいは } \text{NO}_2^-\text{-N 濃度}) \times 100$$

アンモニア態窒素および亜硝酸態窒素の減少率を、それぞれアンモニア酸化活性および亜硝酸酸化活性と定義して評価した。総細菌数の評価値は、総細菌数の平均値  $8.0 \times 10^8 \text{ cells/g}$  を100%として供試土壌の総細菌数の評価値を相対的に算出した。これら三つの評価値によるレーダーチャートの面積値を窒素循環活性の評価値とした (0-100点) (12)。

#### リン循環活性測定法

供試土壌は、窒素循環活性と同様に含水率を調整した。土壌にフィチン酸を終濃度 9.0  $\text{mg-P}_2\text{O}_5/\text{g-soil}$  となるように添加し、25°Cで4日間静置した。1日目と4日目の土壌1 gから無機態リン酸を蒸留水 20 mLで抽出し、水溶性リン酸濃度をモリブデンブルー法を用いて測定した (13)。リン循環活性は下記の式に従って算出した。

$$\text{リン循環活性 (点)} = (\text{4 日目の水溶性リン酸濃度} - \text{1 日目の水溶性リン酸濃度}) / 2.7 \times 100$$

#### 全分解

供試土壌は、硫酸、過酸化水素水分解法で分解を行った (14)。その後、全分解溶液のアンモニア態窒素濃度およびリン酸濃度をそれぞれインドフェノール青法およびモリブデンブルー法を用いて測定した (10、13)。また、全分解溶液のカリウム濃度は原子吸光光度計 (A-2300 形偏光ゼーマン原子吸光光度計, HITACHI) で測定した。

### 全炭素

供試土壌の全炭素は、固体試料燃焼装置 (SSM-5000A, Shimazu) を接続した全有機体炭素計 (TOC-V CPH, Shimazu) で測定した。検量線はグルコースを用いて作成した。

### 硝酸態窒素、水溶性リン酸および水溶性カリウム

硝酸態窒素濃度は、土壌 4 g に 1M KCl 水溶液 40 mL を加えて硝酸態窒素を抽出し、ブルシンスルファニル酸法で測定した (15)。水溶性リン酸濃度および水溶性カリウム濃度は、土壌 1 g に蒸留水 20 mL を加えて抽出し、それぞれモリブデンブルー法および原子吸光光度計で測定した (13)。

### pH

土壌 10 g に蒸留水 25 mL を加え、1 時間振とうして静置した後、pH メーター計 (pH METER F-52, HORIBA) で測定した (14)。

水田およびハウス栽培土壌を含む農地土壌を分析の対象とした。様々な土壌を分析するため、栽培作物や肥培管理、サンプリングの時期などは考慮せず多数の土壌を分析した。統計処理は、Excel ソフトを用いた。相関係数の評価は、石村 (16) に基づき、 $0 \leq |r| \leq 0.2$  (ほとんど相関がない)、 $0.2 \leq |r| \leq 0.4$  (やや相関がある)、 $0.4 \leq |r| \leq 0.7$  (かなり相関がある)、 $0.7 \leq |r| \leq 1$  (強い相関がある) と判断した。

## 3. 結果

### SOFIX 分析に基づく総細菌数データベース

農地土壌 206 サンプルの総細菌数は、eDNA 法の検出限界である  $7.8 \times 10^6$  cells/g-soil 以下から  $1.9 \times 10^9$  cells/g-soil の範囲であり、その平均は、 $6.4 \times 10^8$  cells/g-soil であった (図 2)。松野ら (17) は、農地、農地以外の土壌および石油汚染土壌の総細菌数を測定し、その範囲は検出限界以下から  $1.8 \times 10^{10}$  cells/g-soil の範囲で、総細菌数が土壌環境によって大きく異なることを報告している。今回は、農地のみを調査対象としたが、実際に耕作している農地であっても、その管理方法によって、土壌中の細菌数が大きく異なることが示された。また、窒素の循環においては、 $2.0 \times 10^8$  cells/g-soil 以上の総細菌数が必要であるとされており (12)、総細菌数が  $2.0 \times 10^8$  cells/g-soil 以下であった土壌は 30 サンプルであり、206 サンプルの約 15% を占めた。

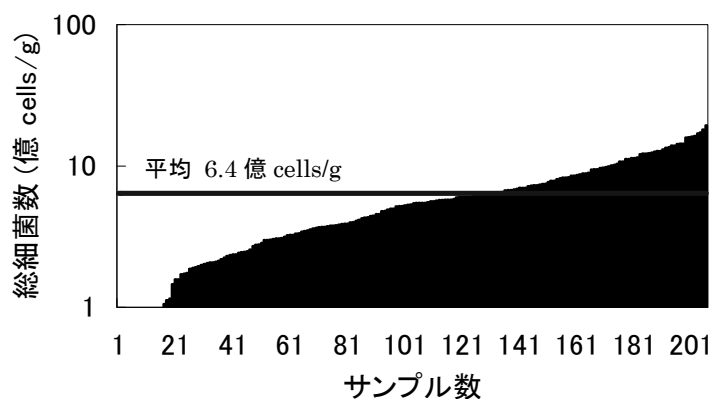


図 2. 農地土壌の総細菌数

### SOFIX 分析に基づく窒素循環活性データベース

農地土壌 152 サンプルの窒素循環活性は、0 点から 100 点の範囲であり、その平均は 26 点であった。既報 (12) の 47 土壌サンプルの平均 46 点よりも低い値であった (図 3)。その理由は、栽培管理が異なる多くの土壌を分析したためと思われるが、サンプリング時期についても考慮する必要があるのかもしれない。アンモニア酸化活性は、0 点から 99.5 点の範囲であり、その平均は 30.2 点であった。亜硝酸酸化活性は、0 点から 100 点の範囲であり、その平均は 56.7 点であった。多くの土壌で、アンモニア酸化活性が亜硝酸酸化活性よりも低かった。

アンモニアが窒素循環において蓄積傾向にあることは、これまでに多く報告されており、今回得られた結果はこれらの報告に合致するものである (12、18、19)。従って土壌の窒素循環では、アンモニアの酸化が律速段階であることが、本研究でも示唆された。

さらに津田ら (12) の分類に基づき、分析土壌を5つのタイプに分類した (図4)。最もサンプル数が多かったのは、Bタイプ (高総細菌数、高亜硝酸酸化活性、および低アンモニア酸化活性) の土壌で、全体の約39%であった。

Aタイプ (高総細菌数、高亜硝酸酸化活性および高アンモニア酸化活性) の土壌は全体の約26%であった。このことから、窒素循環活性の評価となる三角形の形態は、土壌環境によって異なり、アンモニア酸化活性が低い土壌が多くを占めることが示された。

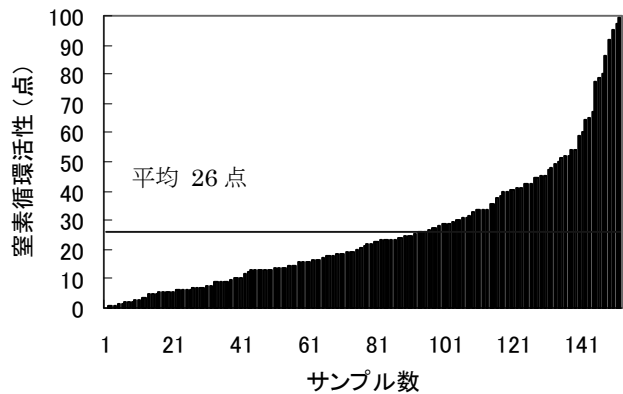
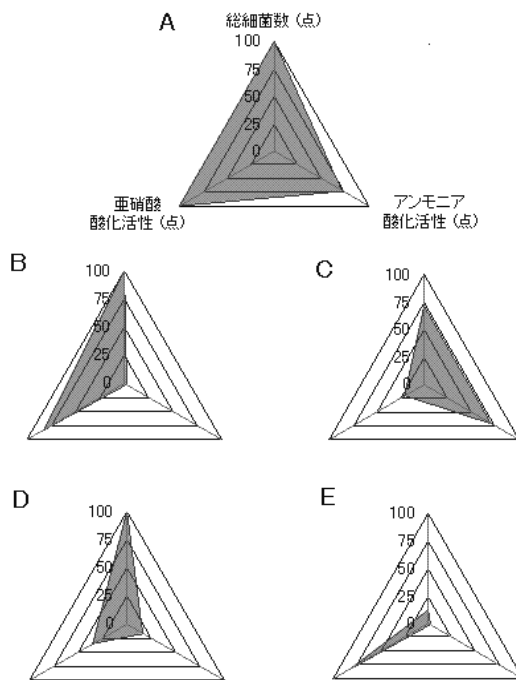


図 3. 農地土壌の窒素循環活性



- A: 高総細菌数、高 NOA、および高 AOA
- B: 高総細菌数、高 NOA、および低 AOA
- C: 高総細菌数、低 NOA、および高 AOA
- D: 高総細菌数、低 NOA、および低 AOA
- E: 低総細菌数、高 NOA、および低 AOA

(AOA: アンモニア酸化活性)  
(NOA: 亜硝酸酸化活性)

図 4. 土壌環境中における 5 タイプの窒素循環活性

#### SOFIX分析に基づくリン循環活性データベース

農地土壌152サンプルのリン循環活性は、0点から100点の範囲であり、その平均は43点であった (図5)。4日間の水溶性リン酸の増加量は、0 mg-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/g-soilから5.83 mg-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/g-soilの範囲であった。リン循環活性100点の基準値とした2.7 mg-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>/g-soil以上のサンプルの割合は、全サンプル中の約13%であった。

152サンプル中からランダムに選んだ60サンプルのリン循環活性および総細菌数を図6に示す。リン循環活性と総細菌数の相関は弱く ( $r=0.24$ )、リン循環活性には、フィチン酸を分解する特定の細菌の関与が示唆された。また、水田の土壌は、その他の土壌と比較してリン循環活性が高い傾向がみられた。サンプル数が少ないため、今後詳細な検討が必要である。これまでに研究室では、既にフィチン酸分解菌の単離・同定を行



っており、フィチン酸分解菌の定量方法を確立している。総細菌数だけでなく、土壌中のリン循環に関与する微生物数を正確に定量することで、土壌中のリン循環活性を改善し、リン循環活性の高い状態を維持する方法を提案できると思われる。

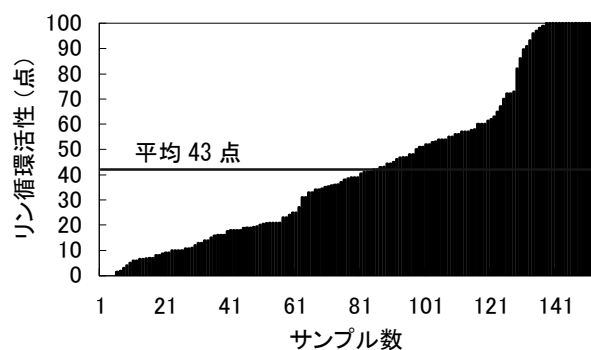


図 5. 農地土壌のリン循環活性

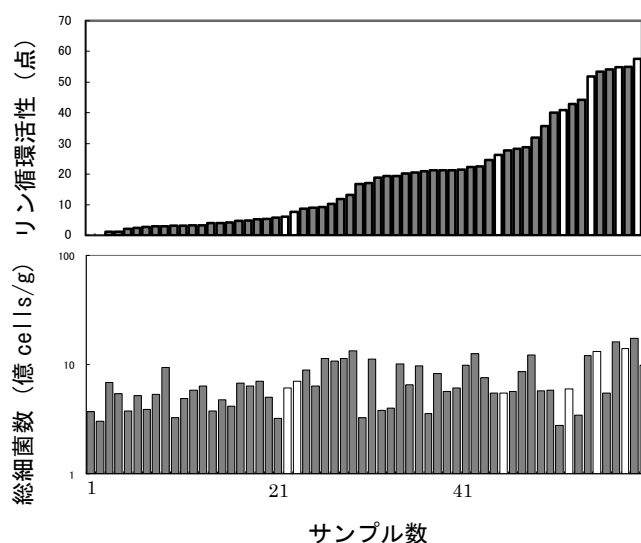


図 6. リン循環活性と総細菌数の関係  
□水田、■畑作地

#### SOFIX分析に基づく全炭素データベース

農地土壌183サンプルの全炭素量は、5,600 mg/kgから85,600 mg/kgの範囲であり、幅広い分布を示した (図7)。平均は24,000 mg/kgであった。土壌中の全炭素量と総細菌数の相関係数は $r=0.33$ で弱い相関が認められた (データ略)。総細菌数が、平均総細菌数の $6.4 \times 10^8$  cells/g-soil以上の土壌は全て、全炭素量が10,000 mg/kg以上であった。しかし、全炭素量が10,000 mg/kg以上であっても、総細菌数が $6.4 \times 10^8$  cells/g-soilより低い土壌も認められた。従って、全炭素量が10,000 mg/kg以上であることは、総細菌数の維持にとって必要条件であると言える。土壌中に一定量以上の細菌数を維持するには、10,000 mg/kg以上の全炭素量が必要である。また、全炭素量は全窒素量と高い相関 ( $r=0.85$ ) を示した (図8)。このことは、土壌においても“レッドフィールド比”類似の関係式が成り立つという報告 (20) と一致している。土壌に人為的もしくは自然に供給された有機物は、そのC/N比を大きく崩すことなく微生物によって分解され、土壌中で物質が循環している可能性があることが示唆された。

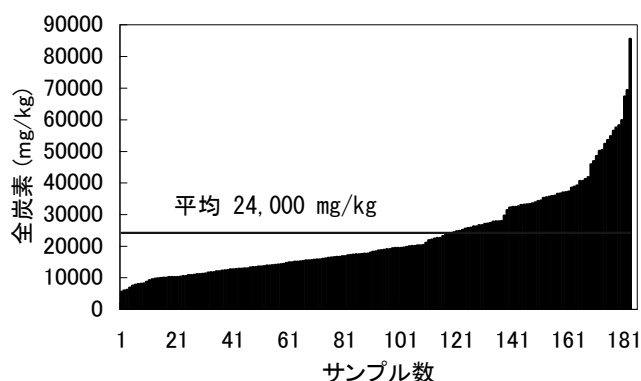


図 7. 農地土壌の全炭素量

#### SOFIX分析に基づく全窒素、全リン酸および全カリウムデータベース

農地土壌191サンプルの全窒素量は、390 mg/kgから10,600 mg/kgの範囲であり、平均は2,500 mg/kgであった (図9)。全リン酸量は、170 mg/kgから27,600 mg/kgの範囲であり、平均は4,600 mg/kgであった (図10)。全カリウム量は、90 mg/kgから20,500 mg/kgの範囲であり、平均は6,100 mg/kgであった (図11)。土壌中の全窒素量、全リン酸量および全カリウム量と総細菌数の関係を調べたところ、 $r=0.19$ 、 $-0.11$  および $-0.01$ で相関は認められなかった。全窒素量と総細菌数の相関は、全炭素量と総細菌数の相関と比較するとより低かった。

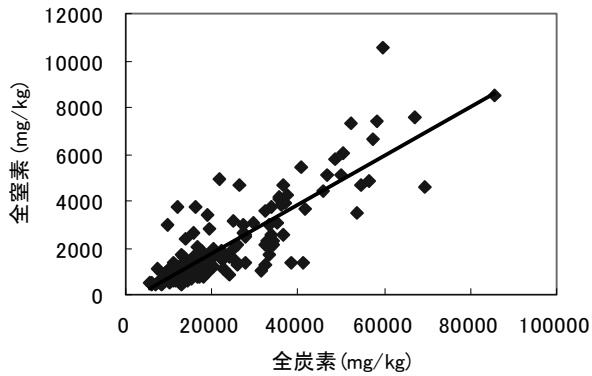


図 8. 農地土壌の全炭素量と全窒素量の関係

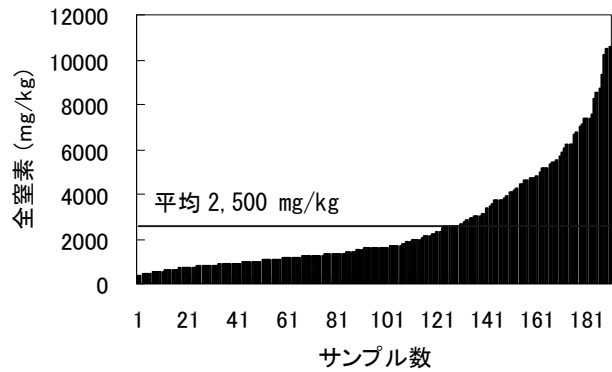


図 9. 農地土壌の全窒素量

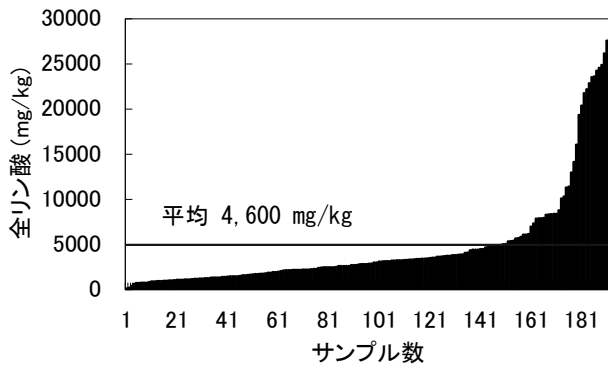


図 10. 農地土壌の全リン酸量

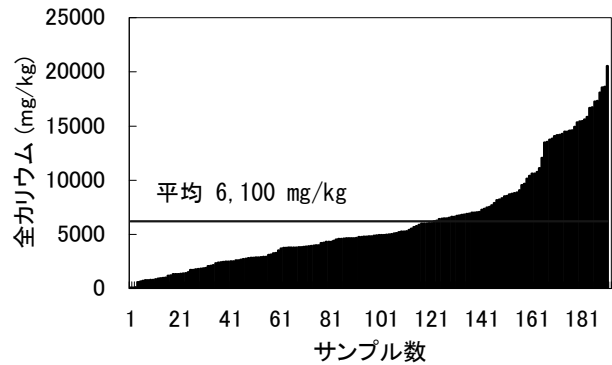


図 11. 農地土壌の全カリウム量

#### SOFIX分析に基づくC/N比データベース

農地土壌183サンプルのC/N比は、2から32の範囲であり、平均は12であった。土壌のC/N比と総細菌数には相関が認められなかった ( $r=-0.1$ )。

#### 4. 考察

各測定項目の平均値を表1に示す。どの項目も幅広い分布を示したことから、サンプルによって土壌環境が大きく異なることが示された。

C/N比が10から14のSOFIX推奨値であれば、総細菌数が $6.4 \times 10^8$  cells/g-soil 以上であった31サンプルのうち約71%は、全炭素量が10,000 mg/kgから20,000 mg/kg であった (図12)。一方、C/N比が9以下もしくは15以上の場合、総細菌数が $6.4 \times 10^8$  cells/g-soil 以上であった59サンプル中、全炭素量が10,000 mg/kgから20,000 mg/kg である土壌の割合は約44%であった。従って、土壌のC/N比が適切な値であれば、比較的少ない

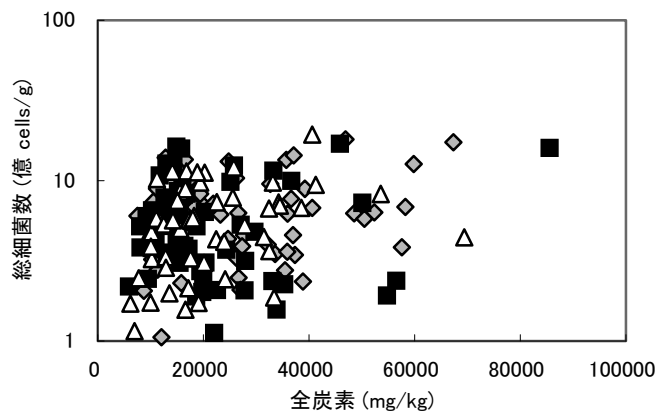


図 12. C/N 比、全炭素量、総細菌数の関係

◆ C/N<10, ■  $10 \leq C/N \leq 14$   
△ C/N>14

炭素量で土壌中の総細菌数を維持することができるものと思われる。また、C/N比が10から14のSOFIX推奨値であれば、総細菌数が $3.0 \times 10^8$  cells/g-soil 以上の場合、全炭素量と総細菌数に相関が認められた ( $r=0.35$ )。しかし、C/N比が9以下もしくは15以上の土壌では、全炭素量と総細菌数に相関が認められなかった ( $r=0.13$ 、 $r=-0.08$ )。従って、炭素と窒素のバランスがとれた土壌であれば、土壌に供試した炭素量に応じて総細菌数の増加が起こることが推察される。言い換えると、土壌への炭素施用効果を上げるためには、まず土壌のC/N比を整えることも重要である。

平均値から評価すると、日本農地は窒素成分が低い土壌が多く、物質循環の評価点も低かった。これらの土壌を改善するには、まずSOFIXのような総合的な土壌診断を行い、堆肥などの有機質肥料をデータに基づき適切に施用して、全炭素量を向上させ総細菌数を増加させることが必要であると思われる。

表1. 日本農地のSOFIX分析

| 測定項目                          | SOFIX 推奨値       | 平均分析値  | 評価 |
|-------------------------------|-----------------|--------|----|
| 植物生長に関する成分の実測値                |                 |        |    |
| 硝酸態窒素 (mg/kg)                 | 50 ~ 200        | 17     | ↓  |
| 水溶性リン酸 (mg/kg)                | 50 ~ 200        | 88     | ○  |
| 水溶性カリウム (mg/kg)               | 50 ~ 200        | 220    | ↑  |
| 物質循環に関する成分の実測値                |                 |        |    |
| C/N 比                         | 10 ~ 14         | 12     | ○  |
| 全炭素 (mg/kg)                   | 10,000 ~ 60,000 | 24,000 | ○  |
| 全窒素 (mg/kg)                   | 6,000 ~ 12,000  | 2,500  | ↓  |
| 全リン酸 (mg/kg)                  | 2,000 ~ 4,000   | 4,600  | ↑  |
| 全カリウム (mg/kg)                 | 2,000 ~ 4,000   | 6,100  | ↑  |
| 窒素循環活性評価値                     | 60 点以上/100 点    | 26     | ↓  |
| 総細菌数 ( $\times 10^8$ cells/g) | 8 以上            | 6.4    | ↓  |
| リン循環活性                        | 60 点以上/100 点    | 43     | ↓  |
| pH                            | 5.5 ~ 6.5       | 6      | ○  |

#### 引用文献

1. Widmer F., Rasche F., Hartmann M. and Fliessbach A. 2006. Community structures and substrate utilization of bacteria in soils from organic and conventional farming systems of the DOK long-term field experiment. Appl. Soil Ecol. 33:294-307.
2. Rigby D. and Cáceres D. 2001. Organic farming and the sustainability of agricultural systems. Agric. Syst. 68:21-40.
3. Kuroda A., Takiguchi N., Kato J. and Ohtake H. 2005. Development of technologies to save phosphorus resources

- in response to phosphate crisis. Jour. Environ. Biotech. 4:87-94. (In Japanese)
4. Fertilizer supply statistics of International Fertilizer Industry Association (<http://www.fertilizer.org/>)
  5. 久保幹・森崎久雄・久保田謙三・今中忠行. 2011. 環境微生物学 地球環境を守る微生物の役割と応用 化学同人.
  6. Watson C.A., Atkinson D., Gosling P., Jackson L.R. and Rayns F.W. 2002. Managing soil fertility in organic farming systems. Soil Use Manag. 18: 239-247.
  7. 特願 2011-504900 新規土壌診断方法
  8. Aoshima H., Kimura A., Shibutani A., Okada C., Matsumiya Y. and Kubo M. 2006. Evaluation of soil bacterial biomass using environmental DNA. Appl. Microbiol. 71: 875-880.
  9. 特願 2003-135012 環境診断方法及びこれを利用した環境診断システム
  10. Weatherburn M.W. 1967. Phenol-hypo- chlorite reaction for determination of ammonia. Anal. Chem. 39: 971-974.
  11. Al-Hatim A.A. 1990. Spectrometric determination of nitrite in aqueous solution by the diazotization-coupling method with p-Ami-nobenzophenone-N-(1-Naphthyl) -Ethylenediamine. Int. J. Environ. Anal. Chem. 38: 617-622.
  12. 津田治敏・松野敏英・久保田謙三・松宮芳樹・久保 幹. 2010. 土壌環境中における窒素循環活性の新規評価法. 立命館大学理工学研究所紀要 69: 39-46.
  13. Murphy J. and Riley J.P. 1962. A modified single solution for the determination of phosphorus from soil. Journal of Soil Science 6: 254-267.
  14. 財団法人 日本土壌協会. 2001. 土壌機能モニタリングのための土壌、水質及び植物体分析法 大雄社.
  15. Jenkins D. and Medsker L.L. 1964. Brucine method for determination of nitrate in ocean, estuarine, and fresh waters. Anal. Chem. 36: 610-612.
  16. 石村貞夫. 1993. すぐわかる統計解析 東京図書.
  17. 松野敏英・津田治敏・久保田謙三・松宮芳樹・久保幹. 2009. 農地土壌診断—有機農法のための農地物質循環の評価—. 立命館大学理工学研究所紀要 68: 85-90.
  18. Hojberg O., Binnerup S.J. and Sorensen J. 1996. Potential rates of ammonium oxidation, nitrite oxidation, nitrate reduction and denitrification in the young barley rhizosphere. Soil Biol. Biochem. 28: 47-54.
  19. Belser L.E. and Mays E.L. 1980. Specific inhibition of nitrite oxidation by chlorate and its use in assessing nitrification in soils and sediments. Appl. Environ. Microbiol. 39: 505-510.
  20. Cleveland C.C. and Liptzin D. 2007. C:N:P stoichiometry in soil: is there a "Redfield ratio" for the microbial biomass? Biogeochemistry 85: 235-252.





## Stochastic Equation on Pseudo-Sphere

Hiroshi Kuratsuji<sup>1)</sup> Masao Matsumoto<sup>2)</sup>

**Abstract.** Motivated by an application to quantum optical process, we study the stochastic equation for the pseudo-spin on pseudo-sphere accompanying the  $SU(1,1)$  coherent states. The pseudo-spin equation of motion turns out to be the Langevin equation in the presence of random forces, which is converted to the Fokker-Planck equation by using the functional integral technique under the assumption of the Gaussian white noise.

Keywords; coherent state, pseudo-sphere, Langevin equation, Gaussian white noise, Fokker-Planck equation, functional integral

E-mail: kra@se.ritsumei.ac.jp

<sup>1)</sup> Research Organization of Science and Engineering, Ritsumeikan University-BKC, Kusatsu City, 525-77, JAPAN

<sup>2)</sup> 1-12-32 Kuzuha Asahi, Hirakata City, Osaka 573, JAPAN

## 1. Introduction

The study of effect of random forces on equation of motion has been a long subject. The standard way is carried out by adopting the Langevin equation [1].

In this note we study the stochastic equation for the motion in the pseudo-sphere. This is inspired by several phenomena; e.g., the stochastic behavior of the photon excitation in quantum optics [2, 3] and the particle in strong magnetic field on pseudo-sphere [4].

In what follows, we consider the equation of motion of pseudo-spin, which stems from a concrete two-photon process in laser. By adding the random forces, this turns out to be the Langevin equation, and we get the Fokker-Planck equation by assuming the Gaussian white noise [5]. Based on the Gaussian noise, the Fokker-Planck equation is derived by using the functional integral.

## 2. Equation of motion on Lobachevsky space

### 2.1. $SU(1,1)$ coherent state

Having mind of application to the optical problem, we consider the pseudo-spin that is described by the  $SU(1,1)$  algebra in terms of a set of bilinear forms of boson creation and annihilation operators for a single-mode electromagnetic field;  $(a, a^\dagger)$ ; with commutation relation;  $[a, a^\dagger] = 1$ , that is, we define

$$\hat{K}_+ = \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger)^2, \quad \hat{K}_- = \frac{1}{2}\hat{a}^2, \quad \hat{K}_0 = \frac{1}{4}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}). \quad (1)$$

The physical system we take up here is the composed system of cavity mode and the squeezed state generating interaction. the Hamiltonian for the system is given by, for example,

$$\hat{H} = \hbar\omega_0(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) + \hbar[V^*(\hat{a}^\dagger)^2 + V\hat{a}^2], \quad (2)$$

where  $V$  is the interaction parameter including the effect of pumping light and can be controlled.

In order to describe the two photon system, it is suitable to use the quantum state; called the coherent state[4]. It is well known that the this is constructed from the irreducible representation is divided into two classes characterized by  $k = \frac{1}{4}$  or  $k = \frac{3}{4}$ . For  $l = \frac{1}{4}$ ,  $|\Phi_0\rangle$  coincides with the photon vacuum  $|\Phi_0\rangle = |0\rangle$  and  $\Phi_0 = a^\dagger|0\rangle$  does the state of photon number being one for  $k = \frac{3}{4}$ . Using this as a starting state, we have the squeezing state:

$$S(\zeta)|\psi_0\rangle = \exp[\zeta\hat{L}_+ - \zeta^*\hat{L}_-]|\psi_0\rangle = \exp[\frac{1}{2}(\zeta(\hat{a}^\dagger)^2 - \zeta^*\hat{a}^2)]|\psi_0\rangle \quad (3)$$

with a squeeze parameter  $\tanh|\zeta|$  and a rotating angle  $\phi/2$ . By applying the squeezing operator to the vacuum state,  $|\Phi_0\rangle \equiv |k, m=0\rangle$ , we have the  $SU(1,1)$  CS:

$$|z\rangle = e^{\zeta\hat{L}_+ - \zeta^*\hat{L}_-}|0\rangle = (1 - |z|^2)^l e^{z\hat{L}_+}|0\rangle, \quad (4)$$

Hereafter we take the one photon state as  $\Phi_0$ .

## 2.2. Action principle and equation of motion for pseudo-spin

The dynamics of pseudo-spin system is described by the variation equation[6]:

$$\delta \int \langle z | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} | z \rangle dt \equiv \delta \int L dt = 0 \quad (5)$$

where  $L$  is the Lagrangian. The second term is just the expectation of the Hamiltonian  $H = \langle z | \hat{H} | z \rangle$ , while the first term, which is called “canonical term”, is evaluated to be

$$i\hbar \langle z | \frac{\partial}{\partial t} | z \rangle = ik\hbar \frac{z\dot{z}^* - \dot{z}z^*}{1 - |z|^2} \quad (6)$$

By using the angle representation

$$z = \tanh\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp[-i\phi] \quad (7)$$

which just corresponds to the stereographic projection of two-dimensional sphere to the complex plane. The sphere is replaced by the pseudo-sphere( see below). In terms of the angular variable, the Lagrangian is written as

$$L(\theta, \phi) = \hbar k (\cosh \theta - 1) \dot{\phi} - H(\theta, \phi) \quad (8)$$

and the variation equation leads to

$$\dot{\phi} = \frac{1}{\hbar k \sinh \theta} \frac{\partial H}{\partial \theta}, \quad \dot{\theta} = -\frac{1}{\hbar k \sinh \theta} \frac{\partial H}{\partial \phi}. \quad (9)$$

The equation of motion derived in the above is nothing but the canonical equation of motion on the pseudo-sphere (which is denoted by  $PS^2$ ; the surface with constant negative curvature). We here some fact about the pseudo-sphere; the point of the surface is described by the equation in terms of the rectilinear coordinate;  $x^2 + y^2 - z^2 = -a^2$ , which is parametrically expressed as [8]

$$x = k \sinh \theta \cos \phi, y = k \sinh \theta \sin \phi, z = k \cosh \theta$$

The scalar product and the vector product (which is denoted by  $*$ ) are defined by

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= a_1 b_1 + a_2 b_2 - a_3 b_3, \\ \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} &= (a_2 b_3 - a_3 b_2, a_3 b_1 - a_1 b_3, -(a_1 b_2 - a_2 b_1)). \end{aligned} \quad (10)$$

Note that the 3-rd term in the scalar product has a minus sign compared with the spherical case. As for the vector product, the third component has minus sign. The triple product is written as

$$\mathbf{a} \otimes (\mathbf{b} \otimes \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} \quad (11)$$

Now, we introduce the pseudo-spin

$$K_1 = k \sinh \theta \cos \phi, K_2 = k \sinh \theta \sin \phi, K_3 = k \cosh \theta \quad (12)$$

Then the canonical equation of motion can be rewritten in terms of the pseudo-spin:

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = -\mathbf{K} \otimes \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}}. \quad (13)$$

If the dissipation effect is included, Eq.(13) turns out to be

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} = -\mathbf{K} \otimes \left( \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}} + \eta \frac{d\mathbf{K}}{dt} \right) \quad (14)$$

Multiplying  $\otimes \mathbf{K}$  to (14) and noting the vector product formula, we get

$$\mathbf{K} \otimes \frac{d\mathbf{K}}{dt} = -k^2 \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}} - \eta k^2 \frac{d\mathbf{K}}{dt} \quad (15)$$

From (14) and (15), the equation of motion for  $\mathbf{K}$  is derived as follows [7]:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{K}}{dt} + A(\mathbf{K}) &= 0 \\ A(\mathbf{K}) &\equiv \frac{1}{1 - \eta^2 k^2} \left( -\mathbf{K} \otimes \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}} - \eta k^2 \frac{\partial H}{\partial \mathbf{K}} \right) \end{aligned} \quad (16)$$

### 3. The FP equation on pseudo-sphere

#### 3.1. The Langevin equation and Functional integral

The Langevin equation is thus written

$$\frac{d\mathbf{K}}{dt} + A(\mathbf{K}) = \mathbf{c}$$

Here the random “torque”  $\mathbf{c}$  has the norm

$$\mathbf{c}^2 = c_1^2 + c_2^2 - c_3^2 \quad (17)$$

where the minus sign of the third term is a consequence of non-Euclidean metric on the pseudo-sphere. We adopt the Gaussian white noise for the random torque;

$$\langle c_i(t) \rangle = 0, \quad \langle c_i(t) c_j(t+u) \rangle = h \delta_{i,j} \delta(u). \quad (18)$$

This is an analogue of the random magnetic field, namely, the correlation on time-scales much smaller than the characteristic response time of the spin system. By putting the variance of  $\mathbf{c}$  as the form  $\langle \mathbf{c}^2 \rangle = 2h$ , which means that the probability distribution of  $\mathbf{c}$  may be given by

$$P[\tilde{\mathbf{c}}(t)] = \exp \left[ -\frac{m}{2} \int_0^t \mathbf{c}^2(t) dt \right] \quad (19)$$

with  $m = 1/h$ . Using this distribution, the propagator  $K$  between two definite spin states at two different times, is given by the functional integral [5]:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}[\mathbf{K}(t)|\mathbf{K}(0)] &= \int \prod_t \delta[\mathbf{F}(\mathbf{K}(t)) - \mathbf{c}(t)] \\ &\times \exp \left[ -\frac{m}{2} \int \mathbf{c}^2(t) dt \right] \mathcal{D}[\mathbf{K}] \mathcal{D}[\mathbf{c}(t)] \end{aligned} \quad (20)$$

with  $\delta$  the Dirac functional. By carrying out the Gaussian integral over the field  $\mathbf{c}(t)$ , we obtain a reduced form (see Appendix);

$$\mathcal{K}[\mathbf{K}(t)|\mathbf{K}(0)] = \int \exp \left[ -\frac{m}{2} \int_0^t \left( \frac{d\mathbf{K}}{dt} + \mathbf{A} \right)^2 dt \right] \mathcal{D}[\mathbf{K}] \quad (21)$$

Now expanding the square term inside the exponential term, one can put this functional integral under the usual form:

$$\mathcal{K} = \int \exp \left[ -\frac{m}{2} \int (\dot{\mathbf{K}}^2 + \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{K}} + V) dt \right] \mathcal{D}[\mathbf{K}] \quad (22)$$

with  $V = \frac{\mathbf{A}^2}{2}$ . The above form is analogous to the path integral for a particle in vector potential  $\mathbf{A}$  and the scalar potential  $V$ . This functional integral can be transcribed to the quantum mechanical path integral by putting  $t = i\tau$ ,

$$\mathcal{K} = \int \exp \left[ \frac{i}{h} \int \left( \frac{1}{2} \dot{\mathbf{K}}^2 + 2i\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{K}} + V \right) d\tau \right] \mathcal{D}[\mathbf{K}] \quad (23)$$

Furthermore, this is expressed in terms of the Euclidian form by replacing  $\mathbf{K}$  by  $\mathbf{L}$ ; for which  $\mathbf{L} = (iL_1, iL_2, L_3) = (K_1, K_2, K_3)$ ; then we have the path integral for a particle on sphere which satisfies the relation  $L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = k^2$ :

$$\mathcal{K} = \int \exp \left[ \frac{i}{h} \int \left( \frac{1}{2} \dot{\mathbf{L}}^2 + 2i\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{L}} - V \right) d\tau \right] \mathcal{D}[\mathbf{L}] \quad (24)$$

#### 4. Derivation of the Fokker-Planck equation

Following the analogous manner with the procedure to obtain the Schroedinger equation from the path integral expression, we can derive the Fokker-Planck equation for the pseudo-spon  $\mathbf{K}$ . Namely, the probability distribution of the vector  $\mathbf{K}$ ;  $P(\mathbf{L})$  satisfies the integral equation:

$$P(\mathbf{L}, t) = \int \mathcal{K}(\mathbf{L}', t | \mathbf{L}', 0) P(\mathbf{L}', 0) d\mathbf{L}' \quad (25)$$

Following the standard procedure of path integral, we find

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left[ \frac{\partial}{\partial \mathbf{L}} - i\mathbf{A} \right]^2 + V \right] P \quad (26)$$

which can also be put in the form:

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 P}{\partial \mathbf{L}^2} - \frac{\partial(\mathbf{A}(\mathbf{L})P)}{\partial \mathbf{L}} \quad (27)$$

which is a usual form of the evolution of probability distribution of a particle moving on a sphere that is submitted to the potentials  $(\mathbf{A}, V)$ . The Fokker-Planck (FP) equation of this form is essentially identical to the result that had been obtained many years ago[9]. Finally, we return to the original variable  $\mathbf{K}$  together with the real time

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 P}{\partial \mathbf{K}^2} - \frac{\partial(\mathbf{A}(\mathbf{K})P)}{\partial \mathbf{K}} \quad (28)$$

Using the spherical vortex case, we obtain

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{1}{\sinh \Theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \Theta} (\sinh \theta s_\theta) + \frac{\partial s_\phi}{\partial \Phi} \right\} \quad (29)$$



where the current is

$$\begin{aligned} s_\theta &= -h \frac{\partial P}{\partial \Theta} - \frac{P}{1 - \eta^2 K^2} \left( \eta K^2 \frac{\partial H}{\partial \Theta} - \frac{1}{\sinh \Theta} \frac{\partial H}{\partial \Phi} \right) \\ s_\phi &= -\frac{h}{\sinh \Theta} \frac{\partial P}{\partial \Phi} + \frac{P}{1 - \eta^2 K^2} \left( \frac{\partial H}{\partial \Theta} - \frac{\eta K^2}{\sinh \Theta} \frac{\partial H}{\partial \Phi} \right) \end{aligned} \quad (30)$$

The equation (29) is the starting basis to investigate the random behavior of the pseudo-spin. To carry out this will be discussed elsewhere.

## Appendix A. Reduction of functional integral

Here we note that the integration measure  $\mathcal{D}(\mathbf{L}(t))$  includes the Jacobian factor from  $\mathbf{L}(t)$  to  $\mathbf{F}(t)$ . The procedure to obtain the Jacobian factor is seen as follows: First we use the functional identity:

$$\det \left[ \frac{\delta \mathbf{F}(\mathbf{t})}{\delta \mathbf{K}(t)} \right]_{F=c} \int \prod_t \delta[\mathbf{F}(S) - \mathbf{c}(t)] D[\mathbf{K}(t)] = 1 \quad (A.1)$$

then

$$\begin{aligned} K &= \int \det \left[ \frac{\delta \mathbf{F}(\mathbf{t})}{\delta \mathbf{K}(t)} \right]_{F=c} \int \prod_t \delta[\mathbf{F}(t) - \mathbf{c}(t)] D[\mathbf{K}(t)] \\ &\quad \times \exp \left[ -\frac{m}{2} \int \mathbf{c}^2(t) dt \right] D[\mathbf{c}(t)] \end{aligned} \quad (A.2)$$

Here we can remove the constraint that attaches to the det, namely,  $F = c$ . Because, it can be obtained by the well known the relation for the delta function  $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$  Thus we have

$$\begin{aligned} K &= \int \det \left[ \frac{\delta \mathbf{F}(t')}{\delta \mathbf{K}(t)} \right] \int \prod_t \delta[\mathbf{c}(t) - \mathbf{F}(\mathbf{K}(t))] \\ &\quad \times \exp \left[ -\frac{m}{2} \int \mathbf{c}^2(t) dt \right] D[\mathbf{c}(t)] D[\mathbf{K}(t)] \end{aligned} \quad (A.3)$$

This is a correct form functional integral form including the Jacobian factor. The determinant factor is generally a functional of  $\mathbf{L}(t)$ , so it does not depends on  $\mathbf{c}(t)$  any more. Next we use an integral identity  $\delta[g(x)] = \int \exp[i\lambda g(x)] d\lambda$ , the above is further rewritten as the functional integration over three variables  $\mathbf{K}, \mathbf{c}, \lambda$  is shown to be given as

$$\begin{aligned} K &= \int \exp \left[ i \int \lambda(\mathbf{t}) \cdot \{\mathbf{F}(\mathbf{t}) - \mathbf{c}(\mathbf{t})\} d\mathbf{t} \right] \exp \left[ -\frac{m}{2} \int \mathbf{c}^2(\mathbf{t}) d\mathbf{t} \right] D[\lambda(\mathbf{t})] \\ &\quad \times \det \left[ \frac{\delta \mathbf{F}(t)}{\delta \mathbf{K}(t)} \right] D[\mathbf{c}(t)] D[\mathbf{K}(t)] \end{aligned} \quad (A.4)$$

By accomplishing the two Gaussian functional integrals for  $\mathbf{c}$  and  $\lambda(\mathbf{t})$  successively, we get the functional integral (21).

## References

- [1] R.Kubo, M.Toda and N.Hashizume, *Statistical Physics II*, 2-nd edition, Springer, New York, 1985.
- [2] See e.g. C. M. Caves, Phys. Rev. **D23** (1981)1693.
- [3] P. D. Drummond and D. F. Walls, J.Phys. **A13** (1980)725.
- [4] A. Perelomov, *Generalized Coherent States*, Springer, Berlin, 1986.
- [5] M.Fibich and E.Helfand, Phys.Rev.**183**(1969)265.
- [6] H. Kuratsuji, Phys. Rev.Lett.**61**(1988)1687.
- [7] M. Matsumoto and H.Kuratsuji, Phys.Lett.**A195**(1994)18.
- [8] B.Iversen, *Hyperbolic Geometry*, London Mathematical Society, Student Texts 25, Cambridge University Press, 1992.
- [9] W.F.Brown, Phys.Rev.**130**(1963)1677.



# Maximum Output Operation by Equivalently Field Weakening and Optimal Parameters of BLDC Motor

Komatsu Yasuhiro<sup>1)</sup>, Syed Abdul Kadir Zawawi<sup>1)</sup>, and Yoshihiko Araki<sup>1)</sup>

Permanent-magnet brushless direct-current motors are easy of maintenance, compared with direct-current motors. Therefore, they are attracting attention. In this paper, the authors discuss a non-salient pole brushless direct-current motors. Usually, the quadrature armature current which contributes to torque generation is supplied in this motor. But, in this case that the source voltage cannot be increased, by supplying the direct armature current, that is, equivalently field weakening, a quadrature armature current can be increased. Consequently, the motor torque increases.

In the case that the load characteristics are settled, the motor torque can have a maximum  $T_m$  by adjusting a direct armature current. At this time the rotational speed and output are maximum also.  $T_m$  changes with the change of the motor parameters. Consequently, the motor parameters which maximize  $T_m$  are optimal. In this paper, the authors have clarified an optimal parameter determination method considering of the load torque-speed characteristics and armature resistance, and the power factor and efficiency where the motor has optimal parameters and generates the maximum output. Further, the authors have verified the obtained theory through experiment.

Keywords: Brushless DC (BLDC) motor, Equivalently field weakening, Load characteristic, Maximum output, Optimal Constant.

Email: [komatsu@se.ritsumei.ac.jp](mailto:komatsu@se.ritsumei.ac.jp)

<sup>1)</sup>Department of Science and Engineering, Ritsumeikan University,  
Kusatsu, Shiga 525-8577 Japan

# Maximum Output Operation by Equivalently Field Weakening and Optimal Parameters of BLDC Motor

Komatsu Yasuhiro, Syed Abdul Kadir Zawawi, and Yoshihiko Araki

Permanent-magnet brushless direct-current motors excel in maintenance and control, compared with direct-current motors. Therefore, they are attracting attention today. In this paper, the authors discuss a non-salient pole brushless direct-current motors. Usually, the quadrature armature current which contributes to torque generation is supplied in this motor. But, in this case that the source voltage cannot be increased, by supplying the direct armature current, that is, equivalently field weakening, a quadrature armature current can be increased. Consequently, the motor torque increases.

In the case that the load characteristics are settled, the motor torque can have a maximum  $T_m$  by adjusting a direct armature current. At this time the rotational speed and output are maximum also.  $T_m$  changes with the change of the motor parameters. Consequently, the motor parameters which maximize  $T_m$  are optimal. In this paper, the authors have clarified an optimal parameter determination method considering of the load torque-speed characteristics and armature resistance, and the power factor and efficiency where the motor has optimal parameters and generates the maximum output. Further, the authors have verified the obtained theory through experiment.

**Keywords:** Brushless DC (BLDC) motor, Equivalently field weakening, Load characteristic, Maximum output, Optimal Constant.

## 1. Introduction.

The operation of weakening field control of DC motors increases the armature current by decreasing the field current when the source voltage of the armature circuit cannot be increased; it decreases the field system magnetic flux. The generation torque is increased by it, and the rotational speed increases. However, the operating range, whose rate enhancement is possible by this method, is limited when the torque-velocity characteristic of the load has been determined. This method is effective in regions where the field system magnetic flux exceeds a threshold value. Although the armature current increases due to a weakening field, generation torque and rotational speed reversely decrease when the field system magnetic flux is smaller than this threshold value.

The permanent-magnetic BLDC motor whose

maintainability and controllability outperform the DC motor is mainly utilized today. By improving the characteristic of the permanent magnet material, this motor's characteristic are also improved. This motor is mainly used in the factory automation field. In the BLDC motor, equivalent weakening field control, which closely resembles the above DC motor, is also established.

In this paper, we consider the non-salient BLDC motor in which the permanent magnet is located on the rotor surface. Since only quadrature axis armature current  $i_q$  contributes to the torque, only  $i_q$  generally flows. However, when the source voltage reaches maximum value, the field system is equivalently weakened by running direct-axis armature current  $i_d$ . When the load's torque-velocity characteristic has been determined, the region where the rotational speed increase has

been limited as the field system is equivalently weakened. If this limit is exceeded by weakening field system,  $i_q$  reversely decreases, the motor generation torque and the rotational speed decrease. Therefore, the  $i_{dm}$  of optimum value  $i_d$ , in which  $i_q$  takes maximum value  $i_{qm}$  exists. When  $i_q=i_{qm}$ , motor generation torque,  $T$  also becomes maximum value  $T_m$ . Naturally, rotational speed  $\omega$  also takes maximum value  $\omega_m$  at this time. Furthermore, the value of  $T_m$  varies due to the motor constant value. A motor constant that maximizes  $T_m$  can be considered the optimal constant.

The equivalently weakening field system is operated before the source voltage reaches maximum value, in the case of the structure of a BLDC motor, where the permanent magnet was embedded in the rotor, reluctance torque operates effectively and high efficient operation becomes possible [1].

In the case of equivalently field weakening control, the optimal value of the d-axis inductance is determined using a different method [2]. In other words, when the maximum armature current value (rated value) is given, the optimal value of the d-axis inductance is determined by this rated value and the armature magnetic flux linkage number of permanent magnets. The load's torque-velocity characteristics are supposed to be optionally chosen in that determination. Furthermore,  $r_a$  is disregarded because the effect of the voltage drop by armature resistance  $r_a$  of the BLDC motor is slight in order to examine them in the high speed area.

In this paper, we adopt a non-salient type BLDC motor and examine the determination method of an optimal motor constant value that maximizes the output in equivalent weak field control. However, in the case of the acceleration and deceleration's operation, we can run the armature current over the rated value for a short time, without setting the maximum armature current value which is generally done. In reality, there are many cases in

which the load's torque-velocity characteristic has been determined; hence in this paper, we can assume it has been determined. Since most BLDC motors are small type less than dozens of kW, there are cases where  $r_a$  is comparatively big. Therefore,  $r_a$  cannot always be disregarded. Consequently,  $r_a$  is analyzed and not disregarded. In addition, the condition in which load's characteristic does not influence the optimum constant value is clarified. Furthermore, when generating maximum output, the value of armature currents, the power factor, and efficiency can be calculated. Finally, this theory is verified by experiments.

## 2. Locus of current vector.

For fan and pump loads, the load torque becomes a function of the rotational speed in the steady state. These are the loads of BLDC motors. In this section, we consider the locus of the current vector during rotational speed increases: in other words, the locus drawn by the current vector's tip.

The load torque is given as a sum of the unrelated term  $T_1$  at the rotational speed and term  $D\omega$  in proportion to the rotational speed.

Equation (1) is established since the motor's generation torque and load torque are equal in the steady state. The positive direction of the magnetic flux and current uses the right-hand rule, Eqs. (2)~(5) show the fundamental equations of the per-unit system when we assume that the q-axis is  $90^\circ$  further than the d-axis. However, we assumed that the non-salient pole machine is at a steady state.

$$T = D\omega + T_1 \dots\dots\dots(1)$$

$$v^2 = v_d^2 + v_q^2 \dots\dots\dots(2)$$

$$v_d = -\omega L i_q + r_a i_d \dots\dots\dots(3)$$

$$v_q = \omega \phi + \omega L i_d + r_a i_q \dots\dots\dots(4)$$

$$T = \phi i_q \dots\dots\dots(5)$$

Here,  $v$  is the terminal voltage,  $v_d$  is the direct-axis component of  $v$ ,  $v_q$  is the quadrature-axis component of  $v$ ,  $L$  is the synchronous inductance,



and  $\psi$  is the number of armature magnetic flux linkages due to the permanent magnet.

The following equation is obtained by substituting Eqs. (3) and (4) into Eq. (2):

$$\left\{ i_d + \frac{\omega^2 \phi L}{\omega^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 + \left\{ i_q + \frac{\omega \phi r_a}{\omega^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 = \left\{ \frac{v}{\sqrt{\omega^2 L^2 + r_a^2}} \right\}^2 \dots \dots \dots (6)$$

Figure 1 shows the circle Eq. (6) in the  $i_d$ - $i_q$  plane. (a,b) is the circle center coordinate, and c is the circle's radius. The locus of the center coordinate becomes (d,0) when  $\omega$  changes. Now, the origin point is the central point when  $\omega$  is 0, and it becomes (e,0) when  $\omega$  is infinite. However, a~e of the superscription is given in the following equation.

$$\begin{aligned} a &= \frac{-\omega^2 \phi L}{(\omega^2 L^2 + r_a^2)} \\ b &= \frac{-\omega \phi r_a}{(\omega^2 L^2 + r_a^2)} \\ c &= \frac{v}{\sqrt{(\omega^2 L^2 + r_a^2)}} \\ d &= \frac{-\phi}{2L} \\ e &= \frac{-\phi}{L} \end{aligned}$$

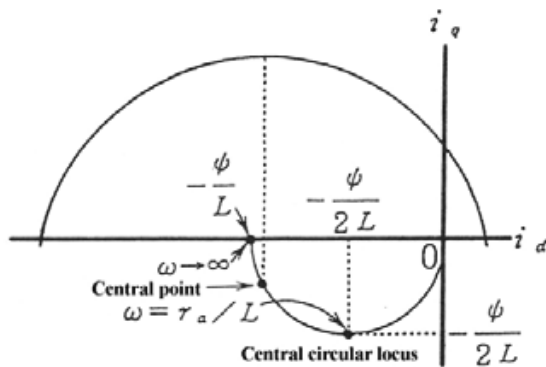


Fig. 1. Circle shown by Eq. (6)

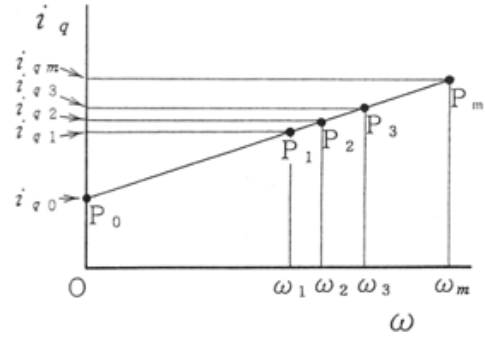


Fig. 2. Relation between  $\omega$  and  $i_q$

The following equation is obtained from Eqs. (1) and (5):

$$i_q = (D\omega + T_l) / \phi \dots \dots \dots (7)$$

From Eq. (7), the relation between  $\omega$  and  $i_q$  is shown (Fig. 2). In the same figure, the operating point of  $\omega=0$  and  $i_q=i_{q0}$  is determined by  $P_0$  and so on. The maximum rotational speed in this load is determined by  $\omega_m$  of point  $P_m$ . Therefore,  $P_0 \sim P_m$  becomes the operable region.

When point  $P_0$  extends to point  $P_m$  in Fig. 2, the locus of current vector at the  $i_d$ - $i_q$  plane (Fig. 3) can be determined. Since the load torque is small at region  $\omega=0 \sim \omega_1$ , an equivalently field weakening method is unnecessary; we can assume  $i_d=0$ . Therefore, in Fig. 3, the operating point of  $A_0$  and  $A_1$  in the  $i_d$ - $i_q$  plane consists in proportion to point  $P_0$  and  $P_1$ . Operating point  $A_0$  is the intersection point between the circle made by Eq. (6) and the  $i_q$ -axis.  $v$  may be increased to move the operating point from  $A_0$  to  $A_1$ . Assume  $v$  becomes maximum value  $V_m$  at operating point  $A_1$ . In other words, circle  $C_1$  is the figure made when  $v=V_m$ ,  $\omega=\omega_1$  in Eq. (6).

$i_q$  must be increased from  $i_{q1}$  to  $i_{q2}$  to increase  $\omega$  from  $\omega_1$  to  $\omega_2$  in Fig. 2. The intersection point between straight line  $i_q=i_{q2}$  and circle  $C_2$  from Eq. (8) becomes the operating point  $A_2$  in Fig. 3.

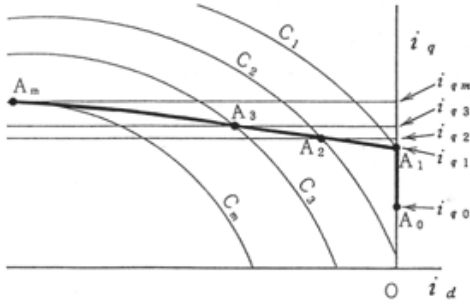


Fig. 3. Current vector locus when load characteristics are settled.

$$\left\{ i_d + \frac{\omega_2^2 \phi L}{\omega_2^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 + \left\{ i_q + \frac{\omega_2 \phi r_a}{\omega_2^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 = \left\{ \frac{V_m}{\sqrt{\omega_2^2 L^2 + r_a^2}} \right\}^2 \dots\dots\dots(8)$$

Two values of  $|i_d|$  which are small and big, exist as an intersection point. Between these two intersection points, small  $|i_d|$  is more efficient; hence it becomes operating point A<sub>2</sub>.  $i_q$  can be increased by generating negative  $i_d$ . Consequently, rotational speed increases. The operating point A<sub>3</sub> from Fig. 3 can be determined using the same method.

$i_q$  must be increased to  $i_{qm}$  to move operating point P<sub>3</sub> to P<sub>m</sub> in Fig. 2. Straight line  $i_q = i_{qm}$  meets circle C<sub>m</sub> from Eq. (9) at operating point A<sub>m</sub> in Fig. 3.

$$\left\{ i_d + \frac{\omega_m^2 \phi L}{\omega_m^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 + \left\{ i_q + \frac{\omega_m \phi r_a}{\omega_m^2 L^2 + r_a^2} \right\}^2 = \left\{ \frac{V_m}{\sqrt{\omega_m^2 L^2 + r_a^2}} \right\}^2 \dots\dots\dots(9)$$

Operating point A<sub>m</sub> has a maximum point of  $i_q$  in circle C<sub>m</sub>. Coordinate ( $i_{dm}$ ,  $i_{qm}$ ) of operating point A<sub>m</sub> can be determined from Eq. (9). They become the following equation:

$$i_{dm} = -\frac{\omega_m^2 \phi L}{\omega_m^2 L^2 + r_a^2} \dots\dots\dots(10)$$

$$i_{qm} = \frac{V_m \sqrt{\omega_m^2 L^2 + r_a^2} - \omega_m \phi r_a}{\omega_m^2 L^2 + r_a^2} \dots\dots\dots(11)$$

The following equations are obtained from Eqs. (10) and (11) when  $r_a = 0$ :

$$i_{dm} = -\phi / L \dots\dots\dots(12)$$

$$i_{qm} = V_m / \omega_m L \dots\dots\dots(13)$$

The next fact is proven from Eqs. (12) and (13). When  $r_a$  is small,  $i_{dm}$  is almost determined by motor constant, and  $i_{qm}$  is determined by the motor constant and load characteristics.

Equation (14), which is the 6<sup>th</sup> algebraic equation of maximum rotational speed  $\omega_m$  given from Eqs. (7) and (11) may be solved to obtain the value of  $\omega_m$  from the machine constant and the load characteristic.

$$\begin{aligned} & D^2 L^4 \omega_m^6 + 2DL^4 T_l \omega_m^5 \\ & + L^2 \{ L^2 T_l^2 + 2Dr_a(Dr_a + \phi^2) \} \omega_m^4 \\ & + 2L^2 T_l r_a \times (2Dr_a + \phi^2) \omega_m^3 \\ & + \left\{ r_a^2 (Dr_a + \phi^2)^2 + L^2 (2T_l^2 r_a^2 - V_m^2 \phi^2) \right\} \omega_m^2 \\ & + 2T_l r_a^3 \times (Dr_a + \phi^2) \omega_m \\ & + r_a^2 (T_l^2 r_a^2 - V_m^2 \phi^2) = 0 \dots\dots\dots(14) \end{aligned}$$

As stated above, if the load characteristic is determined, the locus of the current vector reaches maximum speed operating point A<sub>m</sub> after passing points A<sub>1</sub>, A<sub>2</sub>, and A<sub>3</sub> from point A<sub>0</sub>. Operating point A<sub>m</sub> is also the maximum output operating point.  $d\omega/di_d$  is 0, since gradient  $di_q/di_d$  in operating point A<sub>m</sub> is 0. The gradient (absolute value) of the circular locus of the current vector during a field weakening system is small. Therefore, a large absolute value of  $i_d$  is required to slightly increase  $i_q$ . We must adopt armature current,  $\sqrt{i_{dm}^2 + i_{qm}^2}$ , which is determined from Eqs. (10) and (11), as a short-time rated current of a BLDC motor.

### 3. The optimal constant.

As shown in Section 2, points A<sub>m</sub> and P<sub>m</sub> in Figs. 3 and 2 becomes the maximum values of  $i_{qm}$  and  $\omega_m$

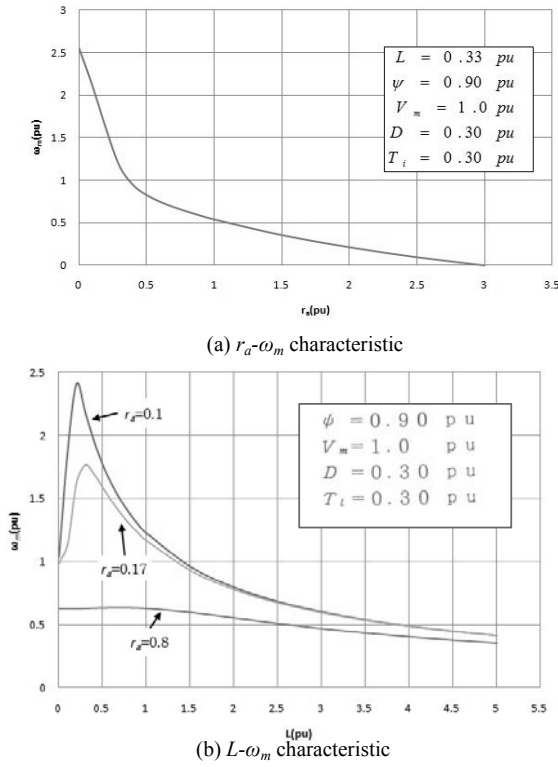


Fig. 4. Variation of  $\omega_m$  caused by change of motor parameters.

of the motor when  $i_{dm}$  in Eq. (10) flows. These maximum values vary by the motor's constant value. In this paper, such motor's constant value is called the optimal constant.

As  $r_a$  changes, the change of  $\omega_m$  can be determined from Eq. (14) and is shown in Fig. 4(a). As  $r_a$  increases,  $\omega_m$  decreases, and finally becomes 0. The relationship between  $\omega_m$  and  $L$  is shown in Fig. 4(b) using the same method. As  $L$  increases,  $\omega_m$  also increases; after it becomes a maximum value, it will decrease. This tendency is more remarkable, as is smaller.

In this section, we examine the  $L$  value that maximizes  $\omega_m$  (the optimal value of  $L$ ). The following equation, which shows  $L$ 's optimal value  $L_0$  by differentiating both sides in Eq. (11) by  $L$ , is substituted for  $d\omega_m/dL = di_{qm}/dL = 0$ , and maximizes  $\omega_m$  of  $L$ .

$$L_0^2 = \frac{V_m^2 - 4i_{qmm}^2 r_a^2}{4i_{qmm}^2 \omega_{mm}^2} \dots\dots\dots (15)$$

However,  $\omega_{mm}$  is  $\omega_m$  at  $L=L_0$ .  $i_{qmm}$  is  $i_{qm}$  at  $L=L_0$ .

In Eq. (11), the following equation is established when  $L$  becomes  $L_0$  in Eq. (15):

$$\omega_{mm} = \frac{V_m^2}{4r_a i_{qmm}^2} \dots\dots\dots (16)$$

The following equation is obtained from Eqs. (7) and (16):

$$\omega_{mm} = \frac{\sqrt{r_a^2 T_l^2 + r_a D V_m^2} - r_a T_l}{2r_a D} \dots\dots\dots (17)$$

The following equation is obtained from Eqs. (15)~(17):

$$L_0^2 = \frac{4r_a^2}{V_m^2} \left\{ \frac{\varphi^2 - r_a D - 2r_a T_l (r_a T_l + \sqrt{r_a^2 T_l^2 + r_a D V_m^2})}{V_m^2} \right\} \dots\dots\dots (18)$$

$L_0$  can be determined by substituting various constants in Eq. (18).

The  $r_a$ - $L_0$  characteristic, which is determined using Eq. (18), is shown in Fig. 5(a). Eq. (18) is justified since Fig. 5(a) and the result from Fig. 4(b) match.  $L_0$  strongly receives the effect of  $r_a$ . Generally,  $r_a$ 's value is approximately 0.2. If  $r_a$  has such a value,  $L_0$  is approximately proportional to  $r_a$ . If  $r_a$  is larger than 0.964,  $L_0$  and  $\omega_{mm}$  cannot exist because  $\omega_m$  at Fig. 4(b) becomes a monotonically decreasing function in  $L$  if  $r_a$  increases. In that case,  $\omega_m$  becomes maximum at  $L=0$ . However, in reality,  $r_a$  cannot exceed 0.964 (pu).

The  $\psi$ - $L_0$  characteristic, which is determined using Eq. (18), is shown in Fig. 5(b). Generally,  $\psi$ 's value is approximately 1. Therefore,  $L_0$  is approximately proportional to  $\psi$ . The  $D$ - $L_0$  characteristic, where the parameters are  $r_a$  and  $\psi$ , is shown in Fig. 5(c). Similarly, the  $T_l$ - $L_0$  characteristic is shown in Fig. 5(d). The next fact is proven from both figures.

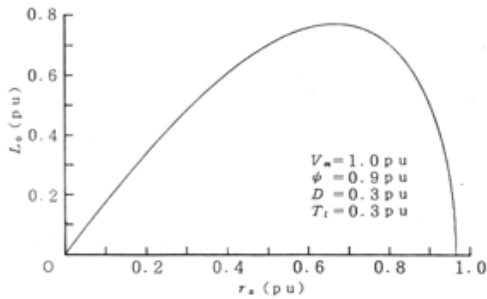
In case the load has small  $D$ ,  $T_l$ ,  $L_0$  is large, and the decrease of  $L_0$  is so slight that even  $D$ ,  $T_l$  increases.  $L_0 = L_{00}$  when  $D$  and  $T_l$  is 0.  $L_{00}$  can be shown by the following equation, when Eq. (18) is used.

$$L_{00} = 2r_a \phi / V_m \dots \dots \dots (19)$$

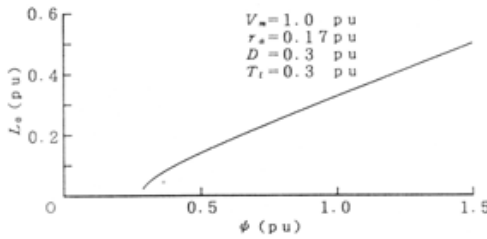
The condition in which  $L_0 \doteq L_{00}$  is established, even if  $D$  and  $T_1$  increases, is that  $r_a$  is small and  $\phi$  is large.

#### 4. Examination of power factor and efficiency.

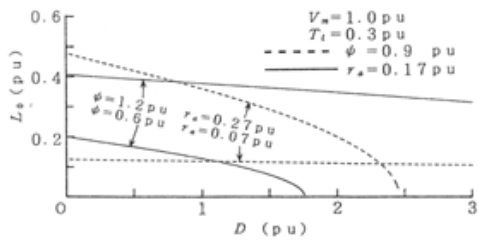
In this section, we examine the armature currents, the power factor, and the efficiency during the maximum output operation of an equivalently field weakening method when  $L$  takes the optimal value  $L_0$ .



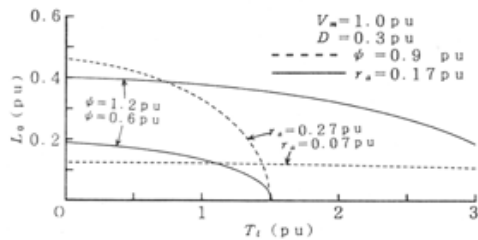
(a)  $r_a$ - $L_0$  characteristic



(b)  $\phi$ - $L_0$  characteristic



(c)  $D$ - $L_0$  characteristic



(d)  $T_1$ - $L_0$  characteristic

Fig. 5. Variation of  $L_0$  caused by change of parameters. When  $L=L_0$ , armature current  $i_{mm}$  during the

maximum output operation is determined.  $i_{qmm}$  at this time can be derived from Eq. (16) and is shown by the following equation:

$$i_{qmm} = \frac{V_m^2}{4r_a \phi \omega_{mm}} \dots \dots \dots (20)$$

Direct-axis armature current  $i_{dmm}$ , which is determined from Eqs. (10), (15), and (20), can be shown by the following equation:

$$i_{dmm} = -\frac{V_m \sqrt{4\phi^2 \omega_{mm}^2 - V_m^2}}{4r_a \phi \omega_{mm}} \dots \dots \dots (21)$$

$\omega_{mm}$  at Eqs. (20) and (21) is calculated from Eq. (17).  $i_{mm} (= \sqrt{i_{dmm}^2 + i_{qmm}^2})$ , which is determined from Eqs. (20) and (21), can be shown by the following equation:

$$i_{mm} = V_m / (2r_a) \dots \dots \dots (22)$$

Eq. (22) can be transformed like the following equation using Eq. (19).

$$i_{mm} = \phi / L_{00} \dots \dots \dots (23)$$

Next, the power factor is calculated for carrying out the maximum output operation at  $L=L_0$ . This time  $v_d$ ,  $v_q$  is respectively made to be  $v_{dmm}$ ,  $v_{qmm}$ . The following equation is calculated from Eqs. (3) and (4):

$$\begin{cases} v_{dmm} = -\omega_{mm} L_0 i_{qmm} + r_a i_{dmm} \\ v_{qmm} = \omega_{mm} \phi + \omega_{mm} L_0 i_{dmm} + r_a i_{qmm} \end{cases} \dots \dots \dots (24)$$

The following equation is calculated from Eqs. (15), (20), (21) and (24):

$$\frac{v_{qmm}}{v_{dmm}} = -\frac{V_m}{\sqrt{4\phi^2 \omega_{mm}^2 - V_m^2}} \dots \dots \dots (25)$$

The following equation is calculated from Eqs. (20) and (21).

$$\frac{i_{qmm}}{i_{dmm}} = -\frac{V_m}{\sqrt{4\phi^2 \omega_{mm}^2 - V_m^2}} \dots \dots \dots (26)$$

The phase of the voltage and current vectors corresponds to each other by understanding Eq. (25), and (26). The power factor becomes 1. The following equation on  $v_{qmm}$  is calculated from Eqs. (2) and (25):

$$v_{qmm} = V_m^2 / (2\phi\omega_{mm}) \dots\dots\dots (27)$$

Next, motor efficiency  $\eta_{mm}$  is calculated for carrying out the maximum output operation at  $L=L_0$ . For simplicity, core losses, mechanical loss, etc. are ignored: only the copper loss is considered.  $\eta_{mm}$  is given by the following equation:

$$\eta_{mm} = \frac{\omega_{mm}\phi i_{qmm}}{r_a i_{mm}^2 + \omega_{mm}\phi i_{qmm}} \dots\dots\dots (28)$$

The following equation is determined by substituting Eqs. (20), and (22) into Eq. (28):

$$\eta_{mm} = 0.5 \dots\dots\dots (29)$$

Therefore, motor efficiency falls to 50% for the following reasons. The increase of the armature current is getting larger when equivalently weakening field control is executed. However, the increase of the motor output does not increase very much. The output of operating point  $A_m$  in Fig. 3 and the output of the maximum output operating point  $A_1$  without equivalently weakening field control does not change very much. However, the absolute value of direct-axis current  $i_{dmm}$  of operating point  $A_m$ , which does not contribute to the torque, greatly increases. As a result, the copper loss of armature current  $i_{mm}$  increases, and lowers  $\eta_{mm}$ .

## 5. Experimental result

A ferrite magnet and four poles of a non-salient BLDC motor were used in the experiment. The rated capacity was 500 [W], the rated line voltage was 100 [V], the rated current was 2.89 [A], and the rated motor speed was 2000 [rpm]. The measured

values of the various parameters of the tested machine are shown in Table 1.

The command voltage signal is generated from a PC to a place voltage vector in an optional angle with regards to the d-axis of the rotor. A PWM signal is made by comparing this and the triangular wave. The motor is driven by a transistor inverter. The carrier frequency is 2 [kHz]. A separately excited DC generator is used as the motor load. The measured load constants are  $D=0.319$  [pu] and  $T_l=0.295$  [pu].

The synchronous inductance of the BLDC motor, which was 0.334 [pu] (Table 1) can equivalently be increased by connecting the reactor to each phase of the motor in a series. By doing this, the L of the identical motor can be increased by 0.334 [pu].

With regards to value L, the size of voltage vector was fixed at ( $V_m=0.600$ ), and the angle between the d-axis and the voltage vector was changed.  $v_d$ ,  $v_q$ ,  $i_d$ ,  $i_q$ , and  $\omega$  change due to this angle's change. By doing this, the operating point was determined at which rotational speed  $\omega$  became the highest. This  $\omega$  is  $\omega_m$ . The value of each  $\omega_m$  is obtained in the same way with regards to several L's value, and Fig. 6 is determined. The solid line in the same figure is the calculation result obtained from Eq. (14). The calculation and measurement results approximately agree and  $\omega_m$  of maximum value  $\omega_{mm}$  exists. From Eq. (18),  $L_0$  becomes 0.457 (Fig. 6).

Next, we examined various characteristics when the maximum output operation is carried out as L takes optimum value  $L_0$ .  $V_m$  is set to 0.807 [pu]. From Eq. (18),  $L_0=0.334$  [pu]: the value of L in a single motor.

Table 1. Parameters of tested machine

|                                                                       |       |
|-----------------------------------------------------------------------|-------|
| Armature resistance $r_a$                                             | 0.169 |
| Number of armature magnetic flux linkages of permanent magnets $\phi$ | 0.876 |
| Synchronous inductance L                                              | 0.334 |

Then, the maximum output operating point when the reactor is not connected in the motor is searched. In this case, the waveforms of the command voltage

and the motor current are recorded in Fig. 7. From this figure, the phase difference of the voltage and the current is approximately 0, and hence the experiment and theory approximately agree.  $i_{mm}$  changes to 2.37 [pu] from the current waveform shown in this figure.  $i_{mm}$ , which is calculated from Eq. (22), is 2.39 [pu], and both values are almost the same.  $\omega_{mm}$  is 1.12 [pu], since the frequency in Fig. 7 is 74.8 [Hz].  $i_{qmm}$  becomes 0.981, if such measured values as  $V_m$  and  $\omega_{mm}$  are substituted in Eq. (20). If these values are substituted in Eq. (28),  $\eta_{mm}$  becomes 0.487, and it almost agrees with 0.5 of the theoretical value.

## 6. Postscript.

When the torque-velocity characteristic of the load does not change in the BLDC motor, the output can be maximized by equivalent weak field control. Furthermore, the maximum value is changed by the motor constant value, and the motor constant value that maximized it is called the optimum value.

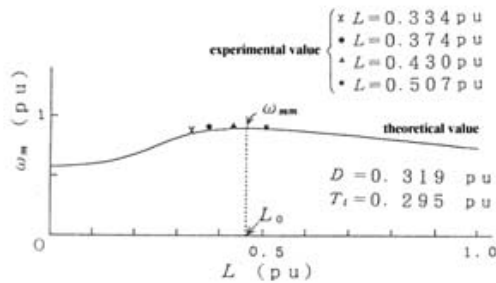


Fig. 6. Measurement results of  $L$ - $\omega_m$  characteristics

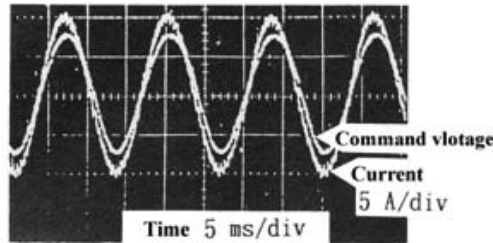


Fig. 7. Relation between voltage and current when

$$\omega_m = \omega_{mm}$$

In this paper, we analyzed the characteristics of synchronous inductance optimum value and maximum output operation in terms of a

non-salient pole BLDC motor. The results are summarized below.

- (1) When the torque-velocity characteristic of the load is constant, it gives  $i_{dm}$ ,  $i_{qm}$  value from  $i_d$ ,  $i_q$  of maximum rotating speed  $\omega_m$ . The value of  $i_{dm}$  is always negative. Therefore, the rotating speed is always maximum due to equivalent field weakening control. The motor output also becomes maximum when the rotating speed is maximum. Equations  $i_{dm}$  and  $i_{qm}$  can be deduced.
- (2) When the armature current becomes optimum value  $i_{dm}$ ,  $i_{qm}$  while the load's torque-velocity characteristic is constant, maximum value rotating speed  $\omega_m$  changes due to the values of the motor constant value.  $\omega_m$  increases when  $r_a$  is small.  $\omega_m$  becomes maximum value  $\omega_{mm}$ , when  $L$  becomes optimum value  $L_0$ . Equations  $\omega_{mm}$  and  $L_0$  can be deduced.  $\omega_{mm}$  is determined by  $V_m$ ,  $r_a$  and the load constant.  $\omega_{mm}$  does not receive the effect of  $\phi$ .
- (3)  $L_0$  becomes almost  $L_{00}$  ( $=2r_a \phi / V_m$ ) without receiving the effect of the load characteristic, when  $\phi$  is big and  $r_a$  is small.  $L_0$  is almost proportional to  $r_a$ .
- (4) The armature current becomes  $V_m/(2r_a)$  when the maximum output operation is conducted due to equivalent field weakening at  $L=L_0$ . Moreover, the power factor becomes 1, and the efficiency becomes 50% when only the copper loss is considered.
- (5) An experiment was conducted based on the above theory, and both approximately agree.

## References

- [1] T.M. Jahns, G.B. Kliman & T.W. Neumann : "Interior Permanent Magnet Synchronous Motors for Adjustable Speed Drives," IEEE Transactions on Industry Application, IA-22, 738 (1986)
- [2] S. Morimoto, Y. Yuge, Y. Takeda, T. Hirasu : "Motor Parameters and Operating Limits of PM Motor," IEEJ D, vol. 110, No. 11, 1990 (Japan)





# クーロメトリーによる酢酸菌が触媒するエタノール酸化反応の解析

上田 康介<sup>1)</sup>、高木 一好<sup>1)</sup>

---

## Coulometric analysis of ethanol oxidation reactions catalyzed by acetic acid bacteria

Kosuke Ueda<sup>1)</sup>, Kazuyoshi Takagi<sup>1)</sup>

*Gluconobacter oxydans* has a characteristically active respiratory chain oxidizing ethanol to accumulate acetic acid in the culture medium. Acetic acid fermentation from ethanol by acetic acid bacteria is accomplished by two sequential catalytic reactions of membrane-bound dehydrogenases. The function of *G. oxydans* cells was combined with electrode process by immobilizing *G. oxydans* cells on the carbon fiber electrode surface, where  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  was used as an electron transfer mediator. We also discuss unsolved issues and future prospects related to this bioelectrochemical system.

Key words; Acetic acid bacteria, Coulometry, Electron transfer mediators

E-mail: ktakagi@sk.ritsumei.ac.jp (K. Takagi)

---

<sup>1)</sup> 立命館大学 生命科学部 応用化学科

<sup>1)</sup> Department of Applied Chemistry, Ritsumeikan University  
Kusatsu, Shiga 525-8577, Japan

## 1. はじめに

酢酸菌は、エタノールやD-グルコースをはじめとする様々なアルコールや糖を酸化し、結果として生じる酢酸やD-グルコン酸などを細胞内に蓄積する。他の細胞における通常の代謝では、有機物がCO<sub>2</sub>まで完全に酸化されるのに対し、酢酸菌細胞内には酸化的代謝中間体が定量的に蓄積することになり、そういった意味で「不完全酸化」とも呼ばれる。酢酸菌が触媒する不完全酸化反応については、古くから知られ、研究対象ともなり、また、食酢製造をはじめとして、食品生産・工業品生産に広く利用されてきた。

酢酸菌が触媒する不完全酸化反応は、本菌の呼吸鎖に連結した物質酸化系によって成り立っている。食酢製造にも用いられるエタノールから酢酸への酸化反応は、細胞膜結合型アルコールデヒドロゲナーゼ (ADH) と、同じく細胞膜結合型アルデヒドデヒドロゲナーゼ (ALDH) が触媒する連続した2つの酸化反応によって構成され、2つのデヒドロゲナーゼから細胞膜内に存在するユビキノン (UQ) に電子が流れ、末端酸化酵素においてユビキノール (UQH<sub>2</sub>, 還元型ユビキノン) の酸化とO<sub>2</sub>の還元が行われると同時に、細胞質側からペリプラズム側へのプロトン輸送が行われ、全体として短絡的な呼吸鎖が成り立っている (図1)。

エタノールから酢酸への酸化反応において機能する酵素として、1978年にADHが精製され<sup>1), 2)</sup>、本酵素は新しいコファクターであるピロロキノリンキノン (PQQ) を有することでも注目され、詳細な酵素化学的研究が展開された<sup>3), 4)</sup>。一方、ALDHについては、ADHと同時期に精製され<sup>5), 6)</sup>、一時期は、ADHと同様にPQQとヘムcを有するキノヘモプロテインであると考えられていた。しかし、近年、ALDHの分子特性について再検討が必要であると考えられるようになり、一方で、精製酵素を用いた研究は進んでおらず、疑問は残されたままである。

本研究では、酢酸菌が触媒するエタノールから酢酸への酸化反応について、電子受容体としてO<sub>2</sub>を利用する場合と、フェリシアン化物イオン (Fe(CN)<sub>6</sub><sup>3-</sup>) などの外部から加えられる人工電子受容体を利用する場合について、電気化学的分析手法 (酸素電極を用いたアンペロメトリー、ならびに、酢酸菌吸着カーボンフェルト電極を用いたフロー全電解分析 (クーロメトリー)) を用いることにより、新たな視点からの解析が可能になると考え、予備的実験を行った。酢酸菌をはじめとする細菌細胞を、「酵素が入った袋」として考えて、外部から加えられる還元型基質 (電子供与体) や人工電子受容体との反応を定量的に扱うことが可能であることが示されている<sup>7)</sup>。本研究では、これまでの研究のように、バイオセンサーやバイオ電池への応用を検討するだけでなく、細胞内代謝調節の解析手法としての利用を考え、それに基づいた物質生産への応用を目指す。

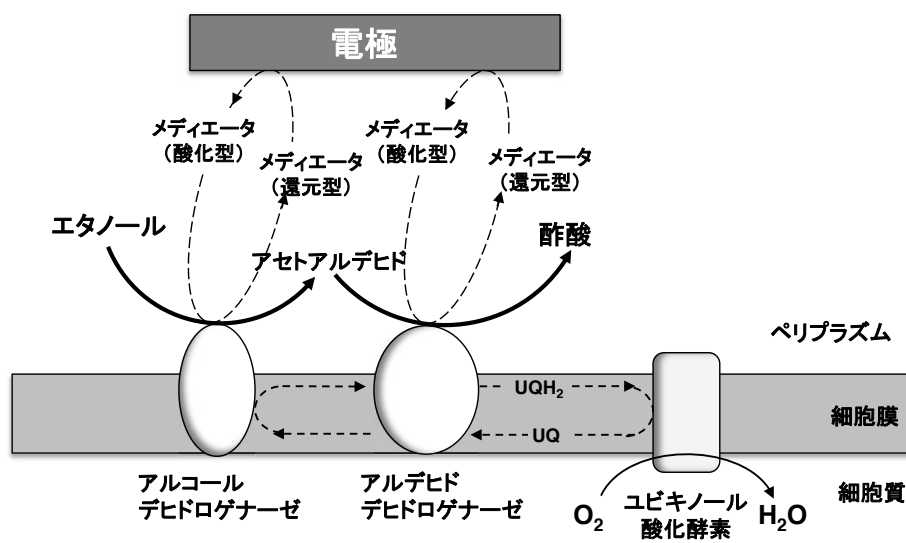


図1. 酢酸菌のエタノール酸化反応と電気化学反応の共役

## 2. 実験方法

### 酢酸菌の培養

*Gluconobacter oxydans* NBRC 12528 は、(独) 製品評価技術基盤機構バイオテクノロジーセンター生物資源課 (NBRC) より購入し、本研究では、酢酸菌として本菌株のみを用いた。本菌株の培養には、既報に示されている組成の培地を使用し、好氣的に培養を行った<sup>8), 9)</sup>。菌体の増殖が対数増殖期後期か定常期にさしかかったことを確認し、遠心分離機を用いて集菌し、10 mM リン酸カリウム緩衝液 (pH 6.0) を用いて2度洗浄し、冷蔵庫内で保存したものを休止菌体として使用した。測定に際しては、上記緩衝液を用いて菌体湿重量 0.1 g/mL の懸濁液を調製し、それを用いた。

### 電気化学測定

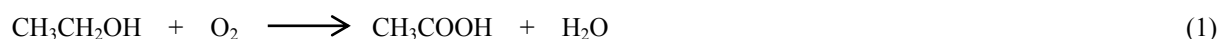
酢酸菌の酸素呼吸活性の測定には、市販のクラーク型酸素電極 (電解セル一体型, Rank Brothers 社製 溶存酸素電極 OXY042A) を用い、電気化学アナライザー (ALS 社製 612A 型) を用いて白金作用電極に  $-0.7$  V vs.  $\text{Ag}|\text{AgCl}|\text{sat. KCl}$  の電位を印加し、電解セル内溶液中の溶存酸素に依存した電流値を計測し、酸素消費速度を見積もった。

フロー全電解分析には、カーボンフェルト作用電極 (直径: 12 mm, 厚さ: 5 mm, 表面積: 約  $850 \text{ cm}^2$ ) を備えた市販のフロー全電解セル (イーシーフロンティア社製 VF-1 型) を用い、HPLC 用送液ユニット (島津製作所製 LC-10ATvp) を用いて溶液を送液し、ポテンショスタット (扶桑製作所製 1112 型) を用いてカーボンフェルト作用電極に電位を印加した。電流値は、ポテンショスタットを通してクロマトデータ処理システム (ケーワイエテクノロジー社製スマートクロム) でモニターし、同システムを用いて、電荷量 (電流-時間曲線におけるピーク面積) を解析した。

## 3. 結果と考察

### 酢酸菌の酸素呼吸活性

電解セル内の緩衝液 (10 mM リン酸緩衝液 (pH 6.0)) に酢酸菌懸濁液を添加し、続いて、エタノール水溶液を添加し、酸素消費を観測した。集菌、洗浄後の細菌細胞には、通常、NADH をはじめとする内在性還元物質が含まれているため、菌体懸濁液を添加するだけで酸素消費が開始される場合が多いが、今回の実験では、菌体懸濁液添加による酸素消費は観測されず、基質 (エタノール) の添加により酸素消費が開始された。本反応は、基質であるエタノールが消費されて枯渇するまで、あるいは、最終電子受容体である溶存酸素が消費されて枯渇するまで進行し、基質濃度変化と溶存酸素濃度変化の比較から、(1) 式で示されるように、エタノールを電子供与体、溶存酸素を電子受容体とした 4 電子反応が進行し、エタノールは最終的に酢酸まで酸化されていることが確認された。



上記緩衝液に、人工電子受容体としての  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  を添加した場合も、同様の酢酸菌細胞による酸素呼吸が観測された。この場合、基質 (エタノール) 存在下、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  は、ADH、あるいは、ALDH の電子受容体反応部位において還元され、電子のリークが生じ、酸素呼吸活性が低下することが予想されたが、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  が

共存しない場合と比較して、酸素消費初速度として数%の低下にとどまった。このことは、酢酸菌細胞内で、ADH,あるいは、ALDHの生理的電子受容体として機能していると考えられるユビキノン (UQ) と比較して、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  が有効な電子受容体として機能していないことによると考えられる。より詳細な議論を行うためには、嫌気条件下での、酢酸菌細胞を用いたエタノール酸化反応速度を測定し、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  を電子受容体とした場合とユビキノン類（例えば  $\text{UQ}_0$ ）を電子受容体した場合を比較し、正確に見積もった反応速度パラメータを比較する必要がある。本実験については、現在、電気化学的手法、ならびに、分光学的手法を用いた反応系で検討中である。

### 酢酸菌吸着カーボンフェルト電極を用いたフロー全電解分析

酢酸菌のカーボンフェルト電極への固定は、単に、カーボンフェルト電極を酢酸菌懸濁液に冷蔵庫内で一晩浸し、酢酸菌細胞を電極表面に吸着させる方法を用いた。細菌細胞の種類にも依存すると考えられるが、酢酸菌細胞とカーボンフェルト電極との親和性は高く、別途、固定化用に反応試薬を加えて化学的に固定する必要もなく、また、酢酸菌細胞のカーボンフェルト電極からの脱着を防ぐ装置上の工夫も必要なく、一日のうちの数回の測定を行ううえでは、上記酢酸菌吸着カーボンフェルト電極が良好に機能した。本電極をフロー全電解セルに装着し、10 mM リン酸カリウム緩衝液 (pH 6.0) を 0.1 mL/min の流速で HPLC ポンプを用いて送液し、フロー全電解セルの下流に接続した紫外可視検出器でモニターしながら酢酸菌細胞の脱着が生じていないことを確認した。

次に、移動相を 1 mM  $\text{K}_3\text{Fe}(\text{CN})_6$  を含む 10 mM リン酸ナトリウム緩衝液 (pH 6.0) に変更し、カーボンファイバー電極には +0.4 V vs.  $\text{Ag}|\text{AgCl}|\text{sat. KCl}$  の電位を印加した。この電位は、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}/\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$  の本条件下における式量電位より十分に正であるため、移動相に含まれる  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  は電極による酸化還元反応を受けず、安定した電流-時間曲線（ベースライン）が観測された。

ここへ、既知量のエタノール水溶液を、マイクロシリンジを用いてインジェクターより注入した結果、カーボンフェルト電極上に吸着した酢酸菌によってエタノール酸化反応が生じ、同時に、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  を還元して  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$  が生成する。生成した  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$  はカーボンフェルト電極により迅速に再酸化され、電流として観測される。観測された典型的な電流-時間曲線を図 3 に示す。流速 0.1 mL/min の条件下、電流値は急激に上昇し、約 2 分後に最大値に達し、その後は約 15 分後まで減少を続けた。電流-時間曲線におけるピーク形状が典

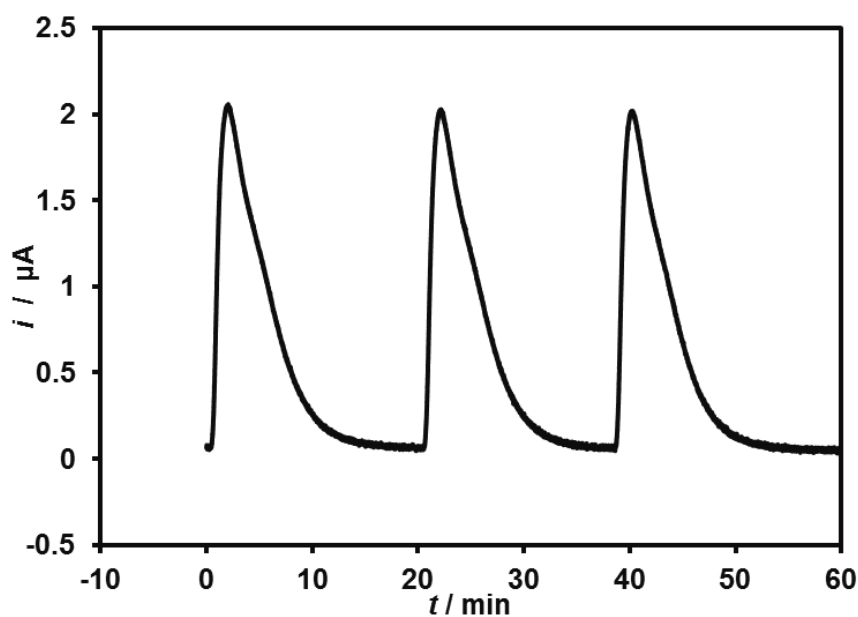
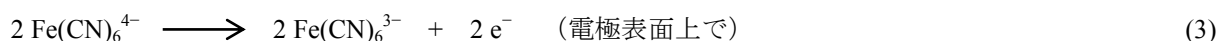


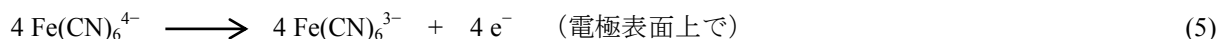
図 2. 酢酸菌吸着カーボンフェルト電極を用いたフロー全電解分析における典型的な電流応答（電流-時間曲線）。

典型的なテーリングの形状を示していることは、カーボンフェルト電極上に吸着した酢酸菌によって触媒反応が進行し、反応の進行とともに基質であるエタノールの濃度が減少し、反応速度が減少していることに起因すると考えられる。理想的には、注入したエタノールが、酢酸菌吸着カーボンフェルト電極上ですべて還元され、注入したエタノールの物質質量に応じた電荷量が得られるはずである。流速の影響について検討を行った結果、流速を 0.1 mL/min より高速にすると、得られる電荷量が減少し、流速を 0.1 mL/min より低速にすると、得られる電荷量が安定しないことが明らかとなった。流速以外にも、電解効率に大きな影響を与える要因として、電子伝達メディエーター（この場合は  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$ ）の濃度、カーボンフェルト電極の形状、などが考えられるが、この点については、現在、検討中である。

図 3 のように、典型的な電流－時間曲線が得られた場合、電荷量を電流－時間曲線におけるピーク面積として計算し、検討を行った。 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  の再酸化反応が、酢酸菌細胞内の ADH のみによって触媒されると考えた場合は、下記 (2), (3) 式に従った反応が進行すると考えられる。



一方、 $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  の再酸化反応が、ADH のみならず ALDH によっても触媒されると考えた場合は、下記 (4), (5) 式に従った反応が進行すると考えられる。



(2), (3) 式に従った場合は、1 mol のエタノールから 2 mol の電子をリークできたことになり、(4), (5) 式に従った場合は、1 mol のエタノールから 4 mol の電子をリークできたことになる。今回の実験では、たとえ (1) 式に従った反応が進行したとを考えても、最大でも約 70%の電解効率しか得られないという結果になった。このことは、上記の酸素電極を用いた実験で得られた結果からも明らかのように、電子受容体として、 $\text{O}_2$  と  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  が共存した場合、 $\text{O}_2$  の方が圧倒的に有利に機能しており、カーボンフェルト電極を用いた実験でも、溶液から溶存酸素を徹底的に除去しない限り、エタノール酸化反応によって得られた電子が  $\text{O}_2$  に流れてしまうということに大きな要因があると考えられる。一方で、酸素電極を用いた実験を行った場合は、ある基質（エタノール）濃度条件下、 $\text{O}_2$  と  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  の共存下で、数%の電子が  $\text{O}_2$  には流れずに  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  に流れているという結果が得られたが、カーボンフェルト電極を用いた実験では、エタノール由来の相当量の電子が  $\text{O}_2$  には流れずに  $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$  に流れているという結果が得られたことになる。フロー全電解分析反応系において、酢酸菌細胞への  $\text{O}_2$  のアクセスが制限されたか、あるいは、溶液中に遊離に存在する酢酸菌細胞と比較して、カーボンフェルト電極上に吸着した酢酸菌細胞の電子受容体特性が変化したのか、今後、検討する必要がある。上記の点を明らかにするためには、酢酸菌細胞を用いたエタノール酸化反応について、異なる電子受容体を用いた場合の反応速度パラメーターを正確に見積もると同時に、フロー全電解分析反応系においても、絶対嫌気条件を達成し、あるいは、末端酸化酵素阻害剤を用いるなどにより、より精密な実験と解析が必要になると考える。



本研究では、実験系の改良が必要であることが明らかとなったが、酢酸菌吸着カーボンフェルト電極を用いた反応系を電気化学的バイオリアクターとして用い、物質生産系へ応用することも可能であろう。6-ヒドロキシニコチン酸の生産に適した *Pseudomonas fluorescens* TN5 を用いた既報<sup>10)</sup>のように、酢酸菌の幅広いアルコール類、糖類に対する酸化能を利用して、目的の物質生産に有利な反応系を構築することも可能であると考えられる。

#### 4. 参考文献

- 1) O. Adachi, K. Tayama, E. Shinagawa, K. Matsushita, M. Ameyama, Purification and characterization of particulate alcohol dehydrogenase from *Gluconobacter suboxydans*, *Agric. Biol. Chem.*, **42** (11), 2045–2056 (1978)
- 2) O. Adachi, E. Miyagawa, E. Shinagawa, K. Matsushita, M. Ameyama, Purification and properties of particulate alcohol dehydrogenase from *Acetobacter aceti*, *Agric. Biol. Chem.*, **42** (12), 2331–2340 (1978)
- 3) K. Matsushita, T. Yakushi, H. Toyama, E. Shinagawa, O. Adachi, Function of multiple heme *c* moieties in intramolecular electron transport and ubiquinone reduction in the quinohemoprotein alcohol dehydrogenase-cytochrome *c* complex of *Gluconobacter suboxydans*, *J. Biol. Chem.*, **271** (9), 4850–4857 (1996)  
(代表的な報文として)
- 4) T. Yakushi, K. Matsushita, Alcohol dehydrogenase of acetic acid bacteria: structure, mode of action, and applications in biotechnology, *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, **86** (5), 1257–1265 (2010) (最近の総説として)
- 5) O. Adachi, K. Tayama, E. Shinagawa, K. Matsushita, M. Ameyama, Purification and characterization of membrane-bound aldehyde dehydrogenase from *Gluconobacter suboxydans*, *Agric. Biol. Chem.*, **44** (3), 505–515 (1980)
- 6) M. Ameyama, K. Osada, E. Shinagawa, K. Matsushita, O. Adachi, Purification and characterization of aldehyde dehydrogenase of *Acetobacter aceti*, *Agric. Biol. Chem.*, **45** (8), 1889–1890 (1981)
- 7) T. Ikeda, T. Kurosaki, K. Takayama, K. Kano, K. Miki, Measurements of oxidoreductase-like activity of intact bacterial cells by an amperometric method using a membrane-coated electrode, *Anal. Chem.*, **68** (1), 192–198 (1996) (代表的な報文として)
- 8) M. Ameyama, O. Adachi, Alcohol dehydrogenase from acetic acid bacteria, membrane-bound, *Methods Enzymol.*, **89**, 450–457 (1982)
- 9) M. Ameyama, K. Matsushita, E. Shinagawa, O. Adachi, Sugar-oxidizing respiratory chain of *Gluconobacter suboxydans*. Evidence for a branched respiratory chain and characterization of respiratory chain-linked cytochromes, *Agric. Biol. Chem.*, **51** (11), 2943–2950 (1987)
- 10) M. Torimura, H. Yoshida, K. Kano, T. Ikeda, T. Yoshida, T. Nagasawa, Bioelectrochemical transformation of nicotinic acid into 6-hydroxynicotinic acid on *Pseudomonas fluorescens* TN5-immobilized column electrolytic flow system, *J. Mol. Catal. B: Enzym.*, **8** (4–6), 265–273 (2000)

# 大型研究装置成果報告書

装置名；S R 光電子分光・イオン散乱複合分析装置

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                                                                                                                                                                                       |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 城戸 義明                                                                                                                                                                                                                                 |
| 部門名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                                                                                                                                                       |
| 研究テーマ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 高分解能中エネルギー・イオン散乱装置とS R ー光電子分光による固体表面の構造と表面化学反応過程の解析                                                                                                                                                                                   |
| 研究の概要                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | <p>2011 年度の研究テーマは下記の 3 項目である。</p> <p>(1) 金ナノ粒子の d-band の構造、特に d-band center のサイズ依存性を調べ、d-band モデルの検証を行う。</p> <p>(2) 還元された TiO<sub>2</sub>(110)に現れるギャップ内欠陥準位の起源を明らかにする。</p> <p>(3) rutile TiO<sub>2</sub>(110)上での CO 酸化の反応パスを特定する。</p> |
| <p>利用成果</p> <p>2011 年度の研究成果は以下の通り。</p> <p>論文)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Electronic d-band Properties of Gold Nano-clusters Grown on Amorphous Carbon, A. Visikovskiy, H. Matsumoto, K. Mitsuahara, T. Nakada, T. Akita and <u>Y. Kido</u>, Physical Review <b>B 83</b> (2011) 165428 (1-9).</li> <li>2. Oxygen Deficiency and Excess of Rutile Titania (110) Surfaces Analyzed by Ion Scattering Coupled with Elastic Recoil Detection, K. Mitsuahara, T. Matsuda, H. Okumura, A. Visikovskiy, and <u>Y. Kido</u>, Nucl. Instrum. Methods <b>B 269</b> (2011) 1859 - 1864.</li> <li>3. Reaction of CO with O Adatoms on Rutile TiO<sub>2</sub>(110) Surfaces, K. Mitsuahara, H. Okumura, A. Visikovskiy, M. Takizawa, and <u>Y. Kido</u>, Chemical Physics Letters <b>513</b> (2011) 84-87.</li> <li>4. The d-Band Structure of Pt Nano-Clusters Correlated with the Catalytic Activity for Oxygen-Reduction Reaction, E. Toyoda, R. Jinnouchi, T. Hatanaka, Y. Morimoto, K. Mitsuahara, A. Visikovskiy, <u>Y. Kido</u> J. Phys. Chem. <b>C 115</b> (2011) 21236-21240.</li> </ol> <p>国際会議)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. <u>Y. Kido</u>, K. Mitsuahara, A. Visikovskiy, “Oxygen Deficiency and Excess on Rutile TiO<sub>2</sub>(110) Surfaces Studied by Ion Scattering and Elastic recoil Detection Analysis” Invited Talk at The 6-th Int. Workshop on “High-resolution Depth Profiling” , Paris, France, June 28, 2011)</li> </ol> |                                                                                                                                                                                                                                       |

2. K. Mitsuhashi, H. Okumura, A. Visikovskiy and Y. Kido, “Hydrogen Detection by Medium Energy  $N^+$  and  $Ne^+$  Impacts” The 6-th Int. Workshop on “High-resolution Depth Profiling”, (Paris, France, June 29, 2011)
3. A. Visikovskiy, K. Mitsuhashi, M. Hazama, H. Yamada and Y. Kido, “The Study of NiO/Au Structural and Electronic Properties by MEIS, ab initio Calculations and Photoelectron Spectroscopy” The 6-th Int. Workshop on “High-resolution Depth Profiling”, (Paris, France, June 29, 2011).
4. A. Visikovskiy, H. Matsumoto, K. Mitsuhashi, T. Nakada, T. Akita, and Y. Kido, “Study of the Size Dependent Electronic d-band Behavior of Gold Nano-clusters” (Asian School-Conference on “Physics and Technology of Nano-structured Materials” held at Vladivostok, August 21 - 28, in 2011): Young Scientist Award

#### 国内会議

##### 依頼講演：

1. 城戸義明  
「イオン散乱・弾性反跳による金属ナノ粒子・コア・セルの分析と触媒活性化機構の解明」(第19回エレクトロニクス基礎研究所シンポジウム、大阪電通大、11月9日、2011)
2. 光原圭、田上正崇、松田太志、奥村英樹、Anton Visikovskiy、城戸義明、  
「Rutile  $TiO_2(110)$  表面における気相反応」(マイクロビームアナリシス第141委員会第146回研究会、立命館大学 BKC キャンパス、11月24日、2011)
3. 城戸義明、西村智朗、Wade Naylor, 松本征史、  
「動的カシミア効果の実験的検証に向けて」(イオンビーム解析特別研究会、東大生産技研、12月9, 10日、2011)

##### 一般講演：

1. 松田太志、奥村英樹、光原圭、Anton Visikovskiy、城戸義明、  
「中エネルギーイオン散乱による立方晶  $SiC(001)$  再構成表面の構造解析」(物理学会秋季講演会、富山大学、9月21日、2011)。
2. 光原圭、松田太志、田上正崇、奥村英樹、Anton Visikovskiy、城戸義明、  
「 $TiO_2(110)$  および  $Au/TiO_2(110)$  に対する  $CO$  酸化の反応機構」(物理学会秋季講演会、富山大学、9月22日、2011)。
3. 奥村英樹、松田太志、光原圭、Anton Visikovskiy、城戸義明、  
「中エネルギー  $N^+$ 、 $Ne^+$  入射・弾性反跳による表面水素も検出」(物理学会秋季講演会、富山大学、9月24日、2011)。
4. A. Visikovskiy, H. Matsumoto, K. Mitsuhashi, T. Nakada, T. Akita, Y. Kido,  
”Size Dependence of d-band Properties of the Gold Nano-clusters Grown on Amorphous Carbon Support”(JPS Fall Meeting at Toyama University, September 24, 2011)

装置名 放射線研究施設（レクセル）「非密封RI取扱施設」

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 生物工学科 教授 森崎久雄                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| 部門名   | 共同利用施設                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 研究テーマ | <p>非密封 RI を用いた生化学的、生理学的、分子生物学的、微生物学的研究、薬物動態学的および神経化学的研究</p> <p>1) 環境微生物のフロラおよび機能解析</p> <p>2) ミドリゾウリムシ細胞内共生藻に関する研究</p> <p>3) アクチン結合タンパク質であるエズリンの生理機能についての研究</p> <p>4) 中枢神経系におけるジ・トリカルボン酸トランスポーターの機能解析</p> <p>5) アシクロビルのアミノ酸プロドラッグ Val-acyclovir の輸送機構の解明</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| 研究の概要 | <p>本学で唯一非密封 RI を取り扱える施設として、以下の研究を展開するとともに、学生・院生に RI 取り扱いに関する教育・訓練の機会を提供している。</p> <p>具体的研究内容：</p> <p>1) 環境微生物の群集構造および機能解析</p> <p>琵琶湖の種々の場所に見られるバイオフィルムの微生物フロラを 16SrDNA の塩基配列より解析した。培養できない微生物については PCR-DGGE 法により微生物遺伝子の特定部分を直接増幅し、変性剤濃度勾配ゲル中のサンプル DNA の移動パターン、特定バンドの塩基配列決定により、微生物の群集構造解析を行った。また、バイオフィルムの持つ無機化活性を二重バイアル法により測定した。今後、これらデータを統合し、琵琶湖環境を微生物学的に特徴づけてゆく予定である。また、イネ植物体に棲息する微生物の群集構造、活性を解析し、種々の興味ある知見を得ることが出来た。</p> <p>2) ミドリゾウリムシ細胞内共生に関する研究</p> <p>ミドリゾウリムシ共生藻には幾つかの特徴が挙げられ、塩基性で炭酸固定が上昇することその一つである。光合成活性測定を酸素電極による酸素発生速度と放射性同位体を用いた炭酸固定で行った所、短時間では塩基性の方が両測定法共に低かった。しかし、90 分近くになると酸素発生速度は変化しないままに、炭酸固定のみが上昇するといった特異な現象が起こることを発見した。自由生活型のクロレラではこの様な現象は見られないことから、共生クロレラ特有の性質と考えられ、原因を検討中である。</p> <p>3) アクチン結合タンパク質であるエズリンの生理機能についての研究</p> <p>アクチン結合タンパク質であるエズリンは、細胞膜とアクチン細胞骨格とを連結する働きを持ち、細胞接着、膜融合、膜輸送などに働く。遺伝的にエズリンの発現を抑制したマウスを用いて解析を行った結果、腎尿細管における燐酸の再吸収阻害が観察された。</p> <p>4) 中枢神経系におけるジ・トリカルボン酸トランスポーターの機能解析</p> <p>エネルギー代謝の非常に大きな脳では、citrate、<math>\alpha</math>-ketoglutarate、malate 等の各種 TCA 回路中間体がエネルギー供給源として大変重要である。これまでに、ニューロン、アストロサイトへの TCA 回路中間体の輸送特性および TCA 回路中間体の輸送に関与するトランスポーター (NaC2 および NaC3)</p> |

|             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|             | <p>の同定を進めてきた。中枢神経系に高濃度存在する <i>N</i>-acetyl-L-aspartyl-L-glutamate (NAAG) はジペプチド誘導体であると同時にトリカルボン酸でもあることから、NaC2 あるいは NaC3 の基質となる可能性も考えられる。本研究では、マウス大脳皮質より単離した初代培養アストロサイトにおける NAAG の輸送特性について検討を行った。NAAG は、ニューロンにおいて NaC2 を介した succinate の輸送を濃度依存的に阻害したが、NAAG 自身は輸送されない可能性が示唆され、現在、NaC2 発現系を用いて詳細を検討中である。</p> <p>5) アシクロビルのアミノ酸プロドラッグ Val-acyclovir の輸送機構の解明<br/>ヘルペスの治療薬として臨床適用されているアシクロビルのバリネエステルプロドラッグ valacyclorir (Val-acyclovir) は、消化管においてジペプチド輸送トランスポーター PEPT1 を介して能動的に輸送されることが明らかとなっている。しかしながら、消化管での Val-acyclovir の輸送には、他のトランスポーターの関与も示唆されており、本研究では消化管下部に存在する中性塩基性アミノ酸トランスポーター ATB<sup>0,+</sup> に着目してこの輸送系を介した Val-acyclovir を検討した。Val-acyclovir は PEPT1 の基質となることを確認した後、ATB<sup>0,+</sup> を発現している細胞株 MCF7 を用いて、arginine 輸送に対する Val-acyclovir の阻害効果を検討したが、有意な阻害効果は認められなかった。現在、ATB<sup>0,+</sup> 発現系を用いて、詳細な輸送機構を検討中である。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| <p>利用成果</p> | <p>&lt; 著書 &gt;</p> <p>&lt; 論文 &gt;</p> <p>Seasonal change of bacterial community structure in a biofilm formed on the surface of the aquatic macrophyte (<i>Phragmites australis</i>). Tsuchiya Y., A. Hiraki, C. Kiriyaama, T. Arakawa, R. Kusakabe, H. Morisaki (2011). <i>Microbes and Environments</i>, 26 (2), 113-119, 2011.</p> <p>Yutaka Kato and Nobutaka Imamura, "Identification of algal carbon fixation-enhancing factor extracted from <i>Paramecium bursaria</i>", <i>Zeitschrift fur Naturforschung</i>, <b>66 c</b>, 491-498, 2011.</p> <p>Ryo Hatano, Kimitaka Onoe, Masaya Obara, Mitsunobu Matusbara, Yoshikatsu Kanai, Shigeyuki Muto and Asano, S. "Sex hormones induce gender-related difference in renal expression of a novel prostaglandin transporter, OAT-PG, influencing basal PGE<sub>2</sub> concentration." <i>Am. J. Physiol. Renal Physiol.</i> <b>302</b>, F342-F349 (2012)</p> <p>Yousuke Matsumoto, Hiroki Murakami, Naoki Hattori, K Yoshimoto, Shinji Asano, and Masatoshi Inden. "Excessive expression of hippocampal ezrin is induced by intrastriatal injection of 6-hydroxydopamine." <i>Biol. Pharm. Bull.</i> <b>34</b>, 1753-1758 (2011)</p> <p>Hiroto Yamamoto, Kenichi Mukaisho, Hiroyuki Sugihara, Takenori Hattori, and Shinji Asano, S., "Down -regulation of FXRD3 is induced by transforming growth factor-β signaling via ZEB1/δEF1 in human mammary epithelial cells. <i>Biol. Pharm. Bull.</i> <b>34</b>, 324-329 (2011)</p> <p>Shinji Asano, "Molecular basis of gastric acid secretion in parietal cells." <i>Membrane</i> <b>36</b>, 278-285 (2011).</p> <p>Hiroshi Kodaira, Hiroyuki Kusuhara, Takuya Fujita, Junko Ushiki, Eiichi Fuse, and Yuichi Sugiyama. Quantitative evaluation of the impact of active efflux by P-gp and Bcrp at the BBB on the predictability of the unbound concentrations of drugs in the brain using cerebrospinal fluid concentration as surrogate. <i>Journal of Pharmacology and</i></p> |



|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p><i>Experimental Therapeutics</i>, <b>339</b> (3), 935-944 (2011).</p> <p>Hiroyuki Kusuvara, Hidetoshi Furuie, Akihiro Inano, Akihiro Sunagawa, Sakiko Yamada, Chungyong Wu, Shinya Fukizawa, Ichiro Ieiri, Mariko Morishita, Kiminobu Sumida, Hiroshi Mayahara, Takuya Fujita, Kazuya Maeda, and Yuichi Sugiyama. Pharmacokinetic interaction study of sulfasalazine in healthy subjects and the impact of curcumin as an in vivo inhibitor of BCRP. <i>British Journal of Pharmacology</i>, in press (2012).</p> <p>Atsushi Hosomi, Takeo Nakanishi, Takuya Fujita, and Ikumi Tamai. Extra-renal Elimination of Uric Acid via Intestinal Efflux Transporter BCRP/ABCG2. <i>PLoS ONE</i>, in press (2012).</p> <p>&lt;国際学会&gt;</p> <p>Ezrin is Essential for the Phosphate Reabsorption in the Renal Proximal Tubule. R. Hatano, A. Tamura, H. Segawa, K. Miyamoto, S. Tsukita, and S. Asano., Kidney Week 2011 (Philadelphia, PA, USA 12 November 2011)</p> <p>The roles of an actin-binding protein, ezrin, in the epithelial transport and architecture. S. Asano, International Joint Meeting of Cellular and Molecular Physiology in Epithelia. (Tokyo, Japan 31 July 2011)</p> <p>&lt;国内学会&gt;</p> <p>2011年度日本鉄鋼協会第162回秋季講演大会 (2011 9/22 大阪大学)<br/>シンポジウム「バイオフィームおよび微生物が材料に及ぼす影響」講演<br/>バイオフィームとは 森崎久雄</p> <p>同上<br/>バイオフィーム研究の展望と課題 森崎久雄</p> <p>2011年度日本水産学会シンポジウム (2011 11/2 長崎大) 招待講演<br/>バイオフィームの諸特性とそこから見えるもの 森崎久雄</p> <p>2011 年度第 27 回日本微生物生態学会 (2011 10/7-10 京都大学)<br/>Analysis of ion adsorption/desorption characteristics to/from biofilm<br/>Andi Kurniawan, Tatsuya Yamamoto, Yuki Tsuchiya and Hisao Morisaki</p> <p>2011 年度第 27 回日本微生物生態学会 (2011 10/7-10 京都大学)<br/>バイオフィーム間隙水中の栄養物質と細菌の増殖<br/>桐山智帆, 上乃良, 土屋雄揮, 森崎久雄</p> <p>2011 年度第 27 回日本微生物生態学会 (2011 10/7-10 京都大学)<br/>バイオフィームによる周囲の水からの栄養塩除去<br/>大嶋紫, 桐山智帆, 土屋雄揮, 森崎久雄</p> <p>2011 年度第 27 回日本微生物生態学会 (2011 10/7-10 京都大学)<br/>バイオフィームに生息する様々な大きさの細菌<br/>林田裕樹, 吉水祐里, 土屋雄揮, 奥田修二郎, 森崎久雄</p> <p>2011 年度第 27 回日本微生物生態学会 (2011 10/7-10 京都大学)<br/>16S rDNA配列からのゲノム推定とパスウェイ解析<br/>奥田修二郎, 土屋雄揮, 桐山智帆, 伊藤真純, 森崎久雄</p> <p>2011年度土壌微生物学会 (2011 11/25-26 宮城県鳴子)</p> |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>「様々な産地・品種のイネ種子エンドファイト」<br/>池永誠1、金子智史、森崎久雄</p> <p>2011年度土壌微生物学会 (2011 11/25-26 宮城県鳴子)<br/>トマト有機水耕栽培における根面バイオフィルムの機能<br/>山本祥子、林田和明、土屋雄揮、近藤健史、森崎久雄</p> <p>第 44 回日本原生動物学会 (2011 11/11-13、奈良女子大学)、<br/>ミドリラッパムシ共生藻の特性<br/>佐藤江美、柴田あいか、楠岡泰、今村信孝</p> <p>第 44 回日本原生動物学会 (2011 11/11-13、奈良女子大学)<br/>日本産ミドリゾウリムシと共生藻間の化学的共生要因について<br/>柴田 あいか、今村 信孝</p> <p>日本薬学会第 132 年会 (2012 3/28-31、北海道大学)<br/>脂肪細胞分化抑制作用を有する放線菌由来化合物の探索研究<br/>近藤 義幸、松尾 洋孝、中川 和也、今村 信孝</p> <p>日本薬学会第 132 年会 (2012 3/28-31、北海道大学)<br/>放線菌由来抗ミズカビ活性物質の探索研究<br/>中川 和也、松尾 洋孝、原 兆子、徳永 真治、高田健太郎、今村 信孝</p> <p>浅野真司、波多野亮、田村淳、月田早智子、瀬川博子、宮本賢一“ アクチン結合タンパク質エズリンのリン酸代謝に対する働き” 第 33 回生体膜と薬物の相互作用シンポジウム (岡山)、2011 年 3 月 24 日</p> <p>浅野真司、“ アクチン結合タンパク質エズリンの上皮機能構築における役割” 日本薬学会第 131 年会 (静岡)シンポジウム、2011 年 3 月 28 日</p> <p>浅野真司、波多野亮、田村淳、月田早智子、向所賢一、服部隆則、“ アクチン結合タンパク質エズリンの上皮輸送、組織構築に対する働き” 2011 年度生理学研究所研究会「上皮細胞の恒常性維持機構におけるイオン・物質輸送の新しい分子生理」(岡崎)、2011 年 11 月 21 日</p> <p>宮島真理、楠原洋之、高橋佳代、細谷孝充、高島忠之、渡辺恭介、藤田卓也、J.D. Shuetz、杉山雄一.“ アロマターゼ阻害剤の血液脳関門を介した輸送機構の解析” 日本薬剤学会第26年会 (東京)、2011年5月29-31日</p> <p>細見篤史、生川幸司、中西猛夫、藤田卓也、玉井郁巳.“ 消化管における能動的尿酸分泌” 日本薬物動態学会第26回年会 (広島)、2011年11月15-17日</p> <p>宮島真理、楠原洋之、高橋佳代、細谷孝充、高島忠之、渡辺恭良、藤田卓也、シュッツ ジョン、杉山雄一.“ アロマターゼ阻害剤の脳内暴露を規定する要因の解析” 日本薬物動態学会第26回年会 (広島)、2011年11月15-17日</p> <p>&lt; 修士論文 &gt;<br/>大嶋紫「バイオフィルムによる周囲の水からの栄養塩除去」<br/>桐山智帆「バイオフィルム間隙水中の栄養物質と細菌の増殖」<br/>林田裕樹「フィルターを用いたバイオフィルム中の細菌の分別と諸性質」<br/>阿部慎平「日本産ミドリゾウリムシ共生クロレラの光合成活性について」<br/>岡井武史「<i>Parachlorella kessleri</i> を用いた高効率バイオマス生産法の検討」</p> |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|  |                                                                                                                                                                                                                      |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>近藤義幸「放線菌が生産する脂肪細胞分化誘導阻害物質に関する研究」</p> <p>山口幸祐「放線菌の二次代謝誘導についての研究」</p> <p>石原雄人「マウス中枢神経系における <i>N</i>-acetyl- L-aspartyl-L-glutamate (NAAG) の輸送特性に関する検討」</p> <p>江畠基毅「PEPT1 および ATB0,+を介した Valacylovir 輸送特性に関する研究」</p> |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

装置名； 強力X線装置

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 生命科学部・准教授・花崎知則（管理責任者）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 部門名   | 四軸部門、小角部門                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| 研究テーマ | <ol style="list-style-type: none"> <li>1) 大環状ポリオキソモリブデートを骨格材料とした有機 - 無機ハイブリッドナノ材料の創製<br/>(堤治(生命科学部・准教授)、宇野健二郎(R-GIRO 博士研究員))</li> <li>2) 液晶性金錯体の創製と発光材料への展開<br/>(堤治(生命科学部・准教授)、藤沢香織(R-GIRO 博士研究員))</li> <li>3) シロキサン系液晶の合成, 構造, および ER 効果<br/>(花崎知則(生命科学部・准教授)、宇野健二郎(R-GIRO 博士研究員))</li> <li>4) 非対称型液晶性フェロセン誘導体の合成, 物性および構造<br/>(花崎知則(生命科学部・准教授)、宇野健二郎(R-GIRO 博士研究員))</li> <li>5) イオン液体の合成, 構造, および物性<br/>(花崎知則(生命科学部・准教授)、宇野健二郎(R-GIRO 博士研究員))</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| 研究の概要 | <ol style="list-style-type: none"> <li>1) 大環状ポリオキソモリブデートが異方的な分子形状を有することに着目し, 光応答性または液晶性を付与した有機分子とハイブリッド化することによって, 外部刺激によるナノ構造制御が可能な有機 - 無機ハイブリッドナノ材料の創製を目的として研究を行っている。今年度は大環状ポリオキソモリブデートと有機分子を複合化し, 複合体のナノ構造を制御できることを明らかにした。特に, 複合化する有機分子の構造と複合化のプロセスにより, 形成するナノ構造が制御できることを見いだした。本装置は, ナノ構造の観察に利用した。</li> <li>2) 金原子を導入した化合物(金錯体)を合成し, 液晶挙動と発光特性について調べた。金錯体の構造により, ネマチック相, スメクチック相あるいはディスコチックカラムナー相を発現することが分かった。特に, 本装置を用いた単結晶 X 線構造解析の結果より分子構造・会合構造と液晶相の関係を明らかにした。また, これら錯体の発光挙動を観察し, 凝集構造(結晶および液晶相構造)と発光挙動に相関があることを示し, 凝集構造を変化させることで発光挙動を制御できる画期的な材料であることを学会等で報告した。</li> <li>3) 分子両末端に同種のメソゲン基を持ち, これらを, 中央部にシロキサン結合を有する柔軟鎖で結合させた対称型ダイマー液晶に関する研究を前年度に引き続き行った。前年度に得られた結果については, 今年度, 論文としてまとめて発表した。さらに, それらの化合物の液晶状態における ER 効果の測定, ならびに本装置を用いた構造研究を行い, ER 効果と構造との相関について現在検討を行っている。</li> <li>4) 有機金属錯体の一つであるフェロセンの 1 位と 1' 位とにそれぞれ異なるメソゲン基, すなわち液晶相発現に本質的な役割を演ずる原子団を導入した, 非対称型 1, 1' - 二置換フェロセン誘導体の合成を行った。その結果, これまでに知られている液晶性フェロセン誘導体に比べて比較的低</li> </ol> |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | <p>い温度範囲で液晶相を発現する化合物を合成することに成功した。さらに、それらの化合物の、電場印加下における相転移挙動を明らかにした。本装置は、これらの液晶相の同定に用いた。</p> <p>5) 新規な液体として種々の応用が注目されているイオン液体には、いくつかの種類が知られている。本研究では比較的融点が高く、室温において結晶としての取り扱いが可能な <i>N,N</i>-ジエチル-<i>N</i>-メチル-<i>N</i>-(2-メトキシエチルアンモニウム)のヨウ化物塩の単結晶作成に成功し、その X 線構造解析を行い、結晶構造を明らかにした。現在、臭化物塩ならびに塩化物塩の合成と単結晶作成を行っており、これらの結晶構造を明らかにすることにより、構造と物性との相関について検討する予定である。</p> |
| <p>利用成果</p> <p>&lt;論文&gt;</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Kenjiro Uno, and Osamu Tsutsumi, "Crystal Structure and Phase Transition Behavior of Dioctadecyldimethylammonium Chloride Monohydrate, <i>Mol. Cryst. Liq. Cryst.</i>, in press.</li> <li>2) Kaori Fujisawa, Yuichi Izumi, Akira Nagamatsu, Kenjiro Uno, and Osamu Tsutsumi, "Liquid-Crystalline Behavior and Photoluminescence Properties of Gold(I) Complex with Isocyanide Ligand: Relationship between Aggregation Structure and Properties", <i>Mol. Cryst. Liq. Cryst.</i>, in press.</li> <li>3) Osamu Tsutsumi, Keitarou Yamamoto, Koji Ohta, Kaori Fujisawa, Kenjiro Uno, Takeshi Hashishin, Chihiro Yogi, Kazuo Kojima, "Self-Organization of Gold Nanoparticles Coated with a Monolayer of Azobenzene Liquid Crystals", <i>Mol. Cryst. Liq. Cryst.</i>, <b>550</b>, 105-111 (2011).</li> <li>4) T.Hanasaki, Y.Kamei, A.Mandai, K.Uno, and K.Kaneko, "The phase transition behavior and electro-rheological effect of liquid crystalline siloxane dimers", <i>Liquid Crystals</i>, <b>38</b>(7), 841-848(July 2011).</li> </ol> <p>&lt;招待講演&gt;</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Asuna Kuranari, Koji Ota, Yasunori Yoshioka, Keitarou Yamamoto, Osamu Tsutsumi, "Self-Organization of Gold Nanoparticles with Liquid Crystals on Solid Substrates: Effects of Structures of Liquid-Crystalline Molecules", <i>2011 French-Japanese Workshop on Advanced Functional Liquid Crystalline Materials</i>, Strasbourg, France, January 31, 2011.</li> <li>2) Osamu Tsutsumi, Masakazu Tamaru, Kaori Fujisawa, Kenjiro Uno, "Development of Novel Liquid-Crystalline Trinuclear Gold Complexes: Relationship between Their Aggregation Structure and photoluminescence Properties", <i>2011 French-Japanese Workshop on Advanced Functional Liquid Crystalline Materials</i>, Strasbourg, France, January 31, 2011.</li> </ol> <p>&lt;国際会議&gt;</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) Asuna KURANARI, Koji OTA, Yasunori YOSHIOKA, Keitarou YAMAMOTO, Osamu TSUTSUMI, "Aggregation Structures of Gold Nanoparticles Controlled by Surface Anchoring Effects of Liquid Crystal Molecules on Solid Surfaces", 7<sup>th</sup> International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programed Pigments</li> </ol> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

(SNCPP11), Kusatsu, June 10 ~ 12, 2011.

- 2) Kaori Fujisawa, Masakazu Tamaru, Yuichi Izumi, Kenjiro Uno, Osamu Tsutsumi, "Effects of Aggregation Structures on Emission Behavior of Cyclic Trinuclear Gold Complexes", 7<sup>th</sup> International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programed Pigments (SNCPP11), Kusatsu, June 10 ~ 12, 2011.
- 3) Kenjiro Uno, Makoto Muto, Sho Wakana, and Osamu Tsutsumi, "Ordered Inorganic-Organic Hybrid Thin Films Composed of Giant Ring-Shaped Polyoxomolybdates and Liquid-Crystalline Organic Molecules", 7<sup>th</sup> International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programed Pigments (SNCPP11), Kusatsu, June 10 ~ 12, 2011.
- 4) Kaori Fujisawa, Masakazu Tamaru, Yuichi Izumi, Kenjiro Uno, Osamu Tsutsumi, "Luminescence Properties of Trinuclear Gold Complexes: Effects of Aggregation Structures on Luminescence", ADMD2011, Kumamoto, June 30 ~ July 1, 2011.
- 5) Kenjiro Uno, Makoto Muto, Sho Wakana, and Osamu Tsutsumi, "Arrangement of Inorganic Nano-Rings in Hybrid Thin Films with Liquid-Crystalline Organic Molecules", ADMD2011, Kumamoto, June 30 ~ July 1, 2011.

<国内学会>

- 1) 倉成亜沙, 吉岡靖典, 太田浩司, 堤治, 「液晶性金ナノ微粒子の固体基板上における凝集構造の観察」, 2011年日本液晶学会討論会, 東京都市大学世田谷キャンパス, 2011年9月11日～ 9月13日
- 2) 田丸雅一, 藤澤香織, 宇野健二郎, 堤治, 「環状多核金錯体のカラムナー相における発光挙動」, 2011年日本液晶学会討論会, 東京都市大学世田谷キャンパス, 2011年9月11日～ 9月13日
- 3) 泉裕一, 川上直也, 藤澤香織, 宇野健二郎, 堤治, 「液晶性棒状金錯体の合成と液晶相における発光挙動」, 2011年日本液晶学会討論会, 東京都市大学世田谷キャンパス, 2011年9月11日～ 9月13日
- 4) 宇野健二郎, 武藤誠, 若菜翔, 堤治, 「液晶性有機分子との複合化による大環状ポリオキソモリブデートの配列制御」, 第60回高分子討論会, 岡山大学, 2011年9月28日～ 9月30日
- 5) 田丸雅一, 藤澤香織, 宇野健二郎, 堤治, 「環状三核金錯体の液晶挙動と相転移を利用した発光特性制御」, 錯体化学会第61回討論会, 岡山理科大学, 2011年9月17日～ 9月19日
- 6) 藤澤香織, 宇野健二郎, 堤治, 「三核金錯体の外場による発光制御」, 錯体化学会第61回討論会, 岡山理科大学, 2011年9月17日～ 9月19日
- 7) 泉裕一, 藤澤香織, 宇野健二郎, 堤治, 「棒状金錯体の液晶性と発光挙動」, 錯体化学会第61回討論会, 岡山理科大学, 2011年9月17日～ 9月19日
- 8) 倉成 亜沙, 太田 浩司, 吉岡 靖典, 山本 景太郎, 堤 治, 「液晶分子を結合した金ナノ微粒子の固体基板上における凝集構造」, 第 60 回高分子学会年次大会, 大阪国際会議場, 2011 年 5 月 25 ~ 27 日, 1Pa087
- 9) 藤澤 香織, 宇野 健二郎, 堤 治, 「三核金錯体の凝集構造が発光挙動に及ぼす影響」, 第 60 回高分子学会年次大会, 大阪国際会議場, 2011 年 5 月 25 ~ 27 日, 2H02
- 10) 泉 裕一, 川上 直也, 藤澤 香織, 堤 治, 「棒状金錯体の液晶性と発光挙動」, 第 60 回高分子学会年次大会, 大阪国際会議場, 2011 年 5 月 25 ~ 27 日, 2H03
- 11) 田丸 雅一, 宇野 健二郎, 藤澤 香織, 堤 治, 「環状多核金錯体のディスコチック液晶挙動と光物性」, 第 60 回高分子学会年次大会, 大阪国際会議場, 2011 年 5 月 25 ~ 27 日, 2H04



- 12) 宇野 健二郎,武藤 誠,若菜 翔,堤 治,「大環状ポリオキソモリブデートを基盤とする液晶性ハイブリッド材料の創製」,第60回高分子学会年次大会,大阪国際会議場,2011年5月25~27日,2Pd062
- 13) 倉成亜沙,太田浩司,吉岡靖典,山本景太郎,堤治,「液晶の界面配向規制力を利用する金ナノ微粒子の凝集構造制御」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日
- 14) 藤澤香織,宇野健二郎,堤治,「環状三核金錯体の凝集構造と発光挙動」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日
- 15) 田丸雅一,藤澤香織,宇野健二郎,堤治,「環状三核金錯体のカラムナー液晶相における発光特性」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日
- 16) 川上直也,泉裕一,藤澤香織,堤治,「棒状金錯体の合成と光物性」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日
- 17) 宇野健二郎,武藤誠,堤治,「大環状ポリオキソモリブデートを骨格材料としたナノマイクロメータースケールでの自発的構造形成」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日
- 18) 若菜翔,武藤誠,宇野健二郎,堤治,「大環状ポリオキソモリブデートと液晶性有機分子の複合材料の構築」,日本化学会第91春期年会,日本化学会第91春季年会(2011)講演予稿集,2011年3月11日

<修士論文>

倉成亜沙, 液晶分子を結合した金ナノ微粒子の光による凝集構造制御

泉裕一, 棒状金錯体の液晶性と発光挙動

山本茂樹, 分子末端および側方に極性基を有する液晶性 1,1'-二置換フェロセン誘導体の合成と物性

装置名；質量分析計（QSTAR Elite）

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 生命科学部 教授 早野俊哉                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 部門名   | 生命科学部                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 研究テーマ | ① リボソーム生合成過程の解析<br>② 細胞質分裂期における RCC2 の機能解析<br>③ 線虫 <i>C.elegans</i> と <i>C.briggsae</i> の発生プロテオーム解析                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 研究の概要 | <p>ヒトリボソーム生合成に関与するトランス作用因子の相互作用タンパク質を網羅的に同定することによりリボソーム生合成前駆体の動態を解析し、同過程の全容解明を進めた。近年、リボソーム生合成過程とがんをはじめとするさまざまな疾患との関わりが多数報告されていることから、同過程の詳細な解析により、これらの疾病の発症機構の解明が進むことが期待される。</p> <p>細胞質分裂期（M期）における RCC2（Regulator of chromosome condensation 2）の相互作用タンパク質の網羅的解析により、RCC2 のM期における未知の機能の解明を進めた。厳密な細胞周期の制御の乱れが細胞死や細胞老化を引き起こすことから、細胞周期の調節に関わる多様なタンパク質の機能解析により、細胞死や細胞老化の機構の解明が進むことが期待される。</p> <p>線虫 <i>Caenorhabditis elegans</i> とその近縁種の <i>Caenorhabditis briggsae</i> を用いて、発生ステージと培養温度ならびに種間といった異なる 3 つの観点からの大規模なタンパク質発現の比較解析を行うプロジェクトを進めた。本研究により、モデル生物を用いた生命システムの解明と理解が進むことが期待される。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 利用成果  | <p>論文</p> <p>① Splicing Factor 2-Associated Protein p32 Participates in Ribosome Biogenesis by Regulating the Binding of Nop52 and Fibrillarin to Preribosome Particles.Yoshikawa, H., Komatsu, W., Hayano, T., Miura, Y., Homma, K., Izumikawa, K., Ishikawa, H., Miyazawa, N., Tachikawa, H., Yamauchi, Y., Isobe, T., Takahashi, N. (2011) <i>Mol Cell Proteomics</i> <b>10</b></p> <p>② 石堂佑典, 物部香奈美, 寺澤彩子, 遠里由佳子, 早野俊哉, 伊藤将弘, “培養温度 25 度における線虫 <i>Caenorhabditis elegans</i> の発生プロテオーム解析“, 立命館大学理工学研究所紀要, <b>69</b>, 81-88. (2011 年 3 月)</p> <p>③ 眞崎優作, 伊藤将弘, 遠里由佳子, “大腸菌の中央代謝経路モデルと実数型遺伝的アルゴリズムを用いたパラメータ調節機構の構築“, 立命館大学理工学研究所紀要, <b>69</b>, 89-97. (2011 年 3 月)</p> <p>④ 西尾匡, 小島寿夫, 遠里由佳子, 寺内白梅薫, 杉田陸海, 糸乗前, 伊藤将弘, “セイヨウミツバチ <i>Apis melligera</i>（蛹 20 日齢, 雄）スフィンゴ糖脂質の構造解析“, 立命館大学理工学研究所紀要, <b>69</b>, 99-108. (2011 年 3 月)</p> <p>⑤ 寺澤彩子, 石堂佑典, 遠里由佳子, 早野俊哉, 伊藤将弘, “2D-DIGE と iTRAQ を用いた線虫</p> |

*Caenorhabditis briggsae* の発生過程における比較定量プロテオーム解析”, 立命館大学理工学研究所紀要, **69**, 109-116. (2011 年 3 月)

- ⑥ Yukako Tohsato, Kanami Monobe, Toshiya Hayano, Ichiro Kawasaki, Masahiro Ito  
“Proteomic analysis identifies differentially expressed proteins in *Caenorhabditis elegans*  
*pgl-1* mutants grown at 20°C and 25°C” (*J. Proteomics*への投稿準備中)

国際学会

- ① Kanami Monobe, Yusuke Ishido, Ayako Terasawa, Yukako Tohsato, Toshiya Hayano,  
Masahiro Ito, “Comparative proteome analysis of *Caenorhabditis elegans* cultured at 2  
different temperatures – 20°C and 25°C”, 18th International C. elegans Meeting, (2011 年  
06 月)
- ② Ayako Terasawa, Yukako Tohsato, Yusuke Ishido, Toshiya Hayano, Masahiro Ito,  
“Quantitative Proteomic Analysis of 3 Developmental Stages of *Caenorhabditis briggsae* by  
Using 2D DIGE and iTRAQ”, 18th International C. elegans Meeting, (2011 年 06 月)

国内学会

- ① 小野祐嗣、小川琢史、緒方祐也、別府正悠、早野俊哉 「Regulator of chromosome condensation  
2 proteome reveals its multiple roles during the cell cycle」第34回日本分子生物学会年会  
(2011年12月)
- ② 吉川治孝、小 渡、早野俊哉、三浦豊、本間桂一、泉 桂一、石川英明、宮澤直樹、舘川 宏之、  
山内芳雄。磯辺俊明、高橋信弘「Involvement of p32, fibrillarin, and Nop52 in pre-90S particle  
separation during human ribosome biogenesis」第34回日本分子生物学会年会 (2011年12月)
- ③ 宮澤直樹、吉川治孝、馬替恵美、石川英明、泉川桂一、照喜名悟朗、鈴木愛、中村沙理、三浦  
豊、早野俊哉、磯辺俊明、渡辺亮、油谷浩幸、高橋信弘「Human cell growth regulator LYAR  
accelerates ribosome biogenesis」第34回日本分子生物学会年会 (2011年12月)
- ④ 遠里由佳子、物部香奈美、早野俊哉、川崎一郎、伊藤將弘「Quantitative Proteomic Analysis  
of *Caenorhabditis elegans* *pgl-1* Mutants Grown at 20°C and 25°C」第34回日本分子生物学会  
年会 (2011年12月)
- ⑤ 物部香奈美、石堂佑典、遠里由佳子、早野俊哉、伊藤將弘「Quantitative Proteomic Analysis of  
3 Developmental Stages in *Caenorhabditis elegans*」第34回日本分子生物学会年会 (2011年  
12月)

修士論文

- ① 小林雅幸「低分子量 G タンパク質 Rac1 および Rac3 の新規相互作用タンパク質の解析」(2012  
年 2 月)
- ② 大松洋平「低分子量 G タンパク質 Rho ファミリータンパク質の M 期における新規制御機構の  
解明」(2012 年 2 月)
- ③ 物部香奈美「*Caenorhabditis elegans* の 3 つの発生ステージにおけるタンパク質の定量的変動  
解析」(2012 年 2 月)

装置名；半導体極微構造評価装置

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 理工学部・准教授 荒木 努                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| 部門名   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 研究テーマ | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 窒化物半導体の極微構造・光学的特性評価</li> <li>2. カルコゲナイド材料・薄膜の形成と太陽電池への応用</li> <li>3. 有機薄膜トランジスタの作製と評価</li> <li>4. 有機太陽電池の作製と薄膜の形状及び結晶性評価</li> <li>5. 微粒子捕捉のための円錐加工光ファイバ評価</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| 研究の概要 | <p>本装置は X 線回折装置 (PANalytical 製 XPertMRD)、走査電子顕微鏡 (HITACHI 製 S-4300SE)、カソードルミネッセンス (CL) 測定システム (GATAN 製 MONO-CL2)、EBIC 測定システム (GATAN 製) から構成されており、半導体材料分野を中心に幅広い領域で研究活動に活用された。各テーマの研究概要を以下に示す。</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. RF-MBE 法、ECR-MBE 法、MOCVD 法を用いて作製した InN、InGa<sub>N</sub>、Ga<sub>N</sub>、AlGa<sub>N</sub>、InGa<sub>N</sub> および AlGa<sub>N</sub> 系ヘテロ構造、量子井戸構造、ナノコラム構造などに対し、X 線回折装置を用いた結晶性、混晶組成、格子歪の精密評価、SEM を用いた表面モフォロジー評価、CL を用いた極微構造と発光特性の関連性評価などを行い、これら材料の結晶高品質化、物性解明への知見を得た。</li> <li>2. カルコゲナイドである CuInSe<sub>2</sub> 系材料、CuInS<sub>2</sub> 系材料、SnS の薄膜をさまざまな方法で成長させている。特に、蒸着法や合金のカルコゲン化法によって薄膜を形成し、その結晶粒の成長、結晶相の同定を SEM と XRD を用いて分析した。また、バクテリアを利用して CuInSe<sub>2</sub> を合成するというバイオプロセスの検討も行った。</li> <li>3. 蒸着法により得られた非晶質ルブレンを熱処理により改質し高移動度の有機薄膜トランジスタを作製した。また、貼り合わせ法により微細なトップコンタクト型ペンタセン薄膜トランジスタを作製した。</li> <li>4. ITO 基板 (カソード) / Ag 薄膜 / BCP (バソクプロイン、バッファ層) / C60 (フラーレン、n 型層) / CuPc (銅フタロシアニン、p 型層) / Ag (アノード) という、p 型層と n 型層の積層順序を逆にした逆転有機太陽電池をベースにして、バッファ層を横断する電子キャリアの輸送メカニズムに対する新しい提案を行った。すなわち、電子キャリア輸送は、バッファ層の LUMO を越えて行われ、これはカソード電極の仕事関数に依存することを明らかにした。</li> <li>5. 微粒子を二次元、三次元で光補足するための円錐加工光ファイバを化学エッチングにより作製し、その形状観察を SEM により行った。</li> </ol> |

## 利用成果

### 【学術論文】

- K. Wang, N. Miller, R. Iwamoto, T. Yamaguchi, M. A. Mayer, T. Araki, Y. Nanishi, K. M. Yu, E. E. Haller, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, Mg Doped InN and Confirmation of Free Holes in InN, Appl. Phys. Lett. 98, (2011) 042104-1.
- T. Yamaguchi, T. Araki, Y. Nanishi, Growth and Fabrication of InN-Based III-Nitride Device Structure Using Droplet Elimination Process by Radical Beam Irradiation, Proceedings of SPIE photonic West 2011 7939 (2011) 793904.
- T. Yamaguchi, H. Umeda, T. Araki, and Y. Nanishi, Application of Droplet Elimination Process by Radical-Beam Irradiation to InGaN Growth and Fabrication of InN/InGaN Periodic Structure, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 04DH08-1-4.
- T. Kimura, E. Fukumoto, T. Yamaguchi, K. Wang, M. Kaneko, T. Araki, E. Yoon and Y. Nanishi, Investigation on InN Mole Fraction Fluctuation in InGaN Films Grown by RF-MBE, phys. stat. sol. (c) 8 (2011) 1499-1502.
- K. Tsutsumi, T. Minemoto, K. Uzawa, K. Yaginuma, F. Makuta, H. Takakura, Effect of Cu/In Ratio in Crystal Growth of CuInSe<sub>2</sub> Thin Films Fabricated by Reduction and Selenization Using Cu and In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Paste Materials, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 121201.
- T. Minemoto, S. Harada, H. Takakura, Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> superstrate-type solar cells with (Zn,Mg)O buffer layers, Current Applied Physics 12 (2012) 171-173.
- T. Minemoto, A. Okamoto, H. Takakura, Sputtered ZnO-based buffer layer for band offset control in Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> solar cells, Thin Solid Films 519 (2011) 7568-7571.
- Y. Abe, T. Minemoto, S. Osada, H. Takakura, Lift-off process reducing crack formation and its Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin film solar cell applications, Solar Energy 85 (2011) 2101-2107.
- S. Fukamizu, T. Kondo, Y. Oda, T. Minemoto, H. Takakura, Surface morphology and device performance of CuInS<sub>2</sub> solar cells prepared by single and two step evaporation methods, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 04DP11.
- A. Okamoto, T. Minemoto, H. Takakura, Application of sputtered ZnO<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> buffer layer for Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> solar cells, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 04DP10.
- Y. Abe, T. Minemoto, H. Takakura, Origin of Crossover in Current Density Voltage Characteristics of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> Thin Film Solar Cell Fabricated Using Lift-Off Process, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 040201.
- T. Minemoto, Y. Wakisaka, H. Takakura, Grain Boundary Character Distribution on the Surface of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> Thin Film, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 031203.
- S. Osada, T. Minemoto, H. Takakura, Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> Solar Cells with Superstrate Structure using Lift-off Process, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 95 (2011) 223-226.
- T. Oida, T. Naito, Y. Miyagawa, M. Sasaki, and K. Harafuji, Air-Stable Inverted Organic Solar Cells with Pentacene Anode Buffer Layer, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 081601.

- K. Harafuji and K. Kawamura, Molecular Dynamics of Ion Incident Angle Dependence of Sputtering Yield in Chlorine-Adsorbed GaN Crystal, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 08JG03.

#### 【学会発表】

- K. Wang, T. Yamaguchi, T. Araki, E. Yoon, and Y. Nanishi, Growth of InN Nanocolumns on GaN Templates and Sapphire by RF-MBE, 5th Asia-Pacific Workshop on Widegap Semiconductors (Toba, Japan, May 2011)
- K. Wang, T. Yamaguchi, T. Araki, E. Yoon, and Y. Nanishi, Investigation of InN Nanocolumns Grown on GaN Templates by Molecular Beam Epitaxy, The 9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9) 2011 (Glasgow, Scotland, July 2011)
- T. Yamaguchi, N. Uematsu, R. Iwamoto, T. Araki, E. Yoon and Y. Nanishi, Proposal of Thick InGa<sub>N</sub> Film Growth Using Advanced Droplet Elimination Process by Radical-Beam Irradiation, The 9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9) 2011 (Glasgow, Scotland, July 2011)
- T. Araki, S. Yamashita, T. Yamaguchi, E. Yoon, and Y. Nanishi, Fabrication of Nano-structure of A-plane InN on Patterned A-plane GaN Template by ECR-MBE, The 9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9) 2011 (Glasgow, Scotland, July 2011)
- T. Araki, T. Sakamoto, A. Miki, N. Uematsu, Y. Takamatsu, T. Yamaguchi, Y. Eoon and Y. Nanishi, Reduction of Threading Dislocation Density by Regrowth on In-Polar InN, SPIE Photonics West 2012 (San Francisco, USA, Jan. 2012)
- K. Harafuji and K. Kawamura, Molecular Dynamics of Sputtering Yield as a Function of Ion Incident Angle in GaN Crystal, 20th Int. Symp. Plasma Chemistry (ISPC 20) (Philadelphia, USA, July 2011).
- T. Suzuki, S. Amakawa, and K. Harafuji, Degradation of Organic Solar Cells by Repetitive Illuminations, 2011 KJF Int. Conf. on Organic Materials for Electronics and Photonics (Gyeongju, Korea, Sept. 2011).
- N. Hashimoto, Y. Saburi, and K. Harafuji, Hetero-Structure Organic Solar Cells with Twin Cathode Buffer Layers, 2011 KJF Int. Conf. on Organic Materials for Electronics and Photonics (Gyeongju, Korea, Sept. 2011).
- T. Oida, and K. Harafuji, Carrier Transport Mechanism through a Cathode Buffer in Organic Solar Cells, 2011 KJF Int. Conf. on Organic Materials for Electronics and Photonics (Gyeongju, Korea, Sept. 2011).
- 大久保源志郎、廣瀬靖彦、小林大祐、牧野淳平、今井茂、真空蒸着により堆積したルブレンを用いたトップコンタクト型の OFET の製作、第 72 回応用物理学会学術講演会, 2011 年 9 月, 1a-R-3.
- 小林大祐、大久保源志郎、今井茂、Ar 雰囲気下で熱処理を施したルブレン蒸着膜を用いた OTFT の作製、平成 22 年電気関係学会関西連合大会, 2011 年 10 月, 30P4-3.
- 牧野淳平、廣瀬靖彦、大久保源志郎、今井茂、貼り合わせによる高性能な OTFT の製作、平成 22 年電気関係学会関西連合大会, 2011 年 10 月, 30P4-8.

#### 【修士論文】

- 秋元靖：深紫外 LED の高出力に向けた素子作製プロセスの見直し



- ・ 上松尚：DERI 法を用いた厚膜 InGaN 成長および InGaN/InGaN 量子井戸構造の作製
- ・ 勝木拓郎：DERI 法を用いた高品質 InN 結晶成長とラジカルモニタリングへの応用
- ・ 櫻井秀昭：Mg ドープ InN および AlGaIn/GaN HEMT の電気的特性評価
- ・ 三木彰：InN のウエットエッチングを用いた加工および InN pn 接合の作製と評価
- ・ 油谷匡胤：A 面 GaN テンプレート上 A 面 InN の結晶成長と特性評価
- ・ 濱崎亮介：三元系 Zn 系窓層及び透明導電膜を用いた CuInS<sub>2</sub> 太陽電池
- ・ 室谷真平：印刷法を用いた CuInSe<sub>2</sub> 薄膜太陽電池の作製
- ・ 岡本晃：スパッタ法による ZnO<sub>1-x</sub>S<sub>x</sub> 窓層を用いた Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> 太陽電池の評価
- ・ 深水昇平：サーファクタントを用いた CuInS<sub>2</sub> 薄膜の作製と太陽電池への応用
- ・ 水野孝則：電着法によるカルコパイライト構造半導体太陽電池の作製
- ・ 中出瑛太：Physical Vapor Transport により基板に直接成長させたペンタセン単結晶を用いたトランジスタの製作
- ・ 大久保源志郎：真空蒸着により堆積したルブレノを用いたトップコンタクト型 OTFT の製作
- ・ 廣瀬靖彦：ゲート絶縁膜として CYTOP を用いた貼り合わせ法による pentacene OFET の製作
- ・ 宮田昂一郎：Physical Vapor Transport により基板上に直接成長させたルブレノ単結晶を用いた OFET の製作
- ・ 老田竜也：有機緩衝層による有機薄膜太陽電池の高効率化と長寿命化
- ・ 寺嶋太祐：有機太陽電池における電気特性の経時劣化に関する研究
- ・ 内藤龍裕：有機薄膜太陽電池におけるバッファ層の効果の研究
- ・ 松浦裕亮：銅フタロシアニンの昇華精製と電気特性に関する研究
- ・ 宮川佑紀：有機太陽電池における電流電圧特性にあらわれる S 字カーブの要因
- ・ 森田知哉：有機太陽電池における積層膜の配向制御に関する研究
- ・ 八木義真：有機太陽電池における電流電圧特性のドナー材料純度依存性
- ・ 戸塚優文：アキシコンファイバを用いた FD-CPOCT に関する研究
- ・ 野村祐貴：ケミカルエッチングによるファイバ先端加工と光捕捉に関する研究

装置名；ヒューマンカロリーメーター・低酸素チャンバー（人工環境試験室）

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 真田 樹義                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 部門名   | スポーツ健康科学部                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 研究テーマ | 身体活動とメタボリックシンドロームリスク，体力，生活習慣病関連遺伝子多型との関係                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| 研究の概要 | <p>本研究の目的は，生活活動，歩行活動による身体活動量および身体不活動時間とメタボリックシンドロームリスクおよび体力との関係を横断的（実験 1）および縦断的（実験 2）に検討することであった．</p> <p>横断研究における被験者は，若年男性 17 名，および中高年男性 19 名を対象とし、縦断研究における被験者は、男子大学生 6 名を対象とした．安静時計測としては，収縮期血圧および拡張期血圧，採血から総コレステロール，HDL コレステロール，トリグリセリド，空腹時血糖値，グリコヘモグロビン(HbA1c)を測定した．体組成は DXA 法を用いて，体重と体脂肪量から体脂肪率 (%fat) を算出した．体力測定項目は，握力，脚伸展パワー，長座体前屈および最高酸素摂取量であった．最高酸素摂取量は Breath-by-breath 法によって測定した．身体活動量の計測は，3 軸加速度計（アクティブスタイルプロ，オムロンヘルスケア Active Style Pro HJA-350IT）を用いて、生活活動、歩行活動および身体不活動に分画した．</p> <p>横断研究の結果，若年者の生活活動による身体活動量は脚伸展パワーとの間に有意な相関が認められた．中高年者の生活活動時間は最高酸素摂取量との間に有意な相関が認められ，生活活動による身体活動量は HbA1c との間に有意な相関が認められた．さらに縦断研究の結果，若年者の生活活動による身体活動量の増加は，柔軟性および空腹時血糖値を改善させた．つまり，生活活動による身体活動量の増加と身体不活動時間の減少を組み合わせることで，低強度，短期間であっても柔軟性の向上および糖尿病の予防に貢献できる可能性が示唆された．</p> |

## 利用成果

### <論文>

Fuku N, Iemitsu M, Murakami H, Sanada K, Miyachi M. Mitochondrial Macrohaplogroup Associated with Muscle Power in Healthy Adults. *Int J Sports Med*, In press

Murakami H, Iemitsu M, Sanada K, Gando Y, Ohmori Y, Kawakami R, Sasaki S, Tabata I, Miyachi M. Associations among objectively measured physical activity, fasting plasma homocysteine concentration, and MTHFR C677T genotype. *Eur J Appl Physiol*, 2011 Mar 31. [Epub ahead of print]

Sanada K, Iemitsu M, Murakami H, Tabata I, Yamamoto K, Gando Y, Suzuki K, Higuchi M and Miyachi M. PPAR $\gamma$ 2 C1431T genotype increases metabolic syndrome risk in young men with low cardiorespiratory fitness. *Physiological Genomics*, 43, 103-109, 2011.

真田樹義. 生活習慣病予防のためのテーラーメイド運動処方プログラム. バイオメカニズム学会誌、Vol.35(2)、98-106、2011

### <国内学会>

真田樹義. 日本人成人男女を対象としたサルコペニア簡易評価法の開発、第 66 回日本体力医学会 (学会賞 2011)、山口、2011. 09

真田樹義. 健康づくりの現場で必要とされる体力科学—有資格者からの提言—第 66 回日本体力医学会 (シンポジウム)、山口、2011. 09

真田樹義他. 成人女性における肥満遺伝子多型と身体活動量およびメタボリックシンドロームリスクとの関係、第 62 回日本体育学会、鹿児島、2011.09

### <修士論文>

青木政美、生活活動、歩行活動および身体不活動とメタボリックシンドロームリスク、体力との関係—横断的および縦断的検討—、スポーツ健康科学研究科 2011 年度

装置名； 超高分解能分析システム

|       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|-------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者 | 機械工学科 教授 飴山 恵 (管理委員長)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 部門名   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 研究テーマ | <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 高強度・高靱性調和構造セラミックス材料の開発</li> <li>2. 窒化物半導体の極微構造評価</li> <li>3. 電子顕微鏡による酸化物に担持した金属触媒材料の表面観察</li> <li>4. 機能性ナノ材料の形態や構造、およびその諸物性評価</li> <li>5. ニック結晶の形成と光学応用</li> <li>6. 高温における多軸低サイクル疲労およびクリープ破断寿命評価法の研究</li> <li>7. はんだのクリープ疲労寿命評価法の検討</li> <li>8. 電子デバイス用樹脂薄膜の物性値評価法の検討</li> </ol>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| 研究の概要 | <p>1. 調和構造を持つセラミックス材料が高強度と高靱性を併せ持つことを見いだした。セラミックス材料は一般に硬くもろいが、2種類のセラミックスによる複合調和組織を作ることによって亀裂の進展速度が抑制され、結果的に高靱性を呈する。金属材料の調和構造の場合、微細結晶粒と粗大結晶粒の塑性変形能の違いにより加工硬化率に差異が生じて高強度と高延性が生じる。一方、セラミックスの場合は微細粒子の中に粗大粒子が分散することにより亀裂が屈曲して進むことで亀裂進展速度が抑制され、その結果、靱性が向上すると推測された。SiC/ZrO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/YSZ、Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/ZrO<sub>2</sub> のセラミックス複合体でこの効果を確認した。これらの成果を特許出願した。</p> <p>2. RF-MBE 法を用いて作製した窒化インジウム (InN)、窒化インジウムガリウム (InGaN) に対して、透過電子顕微鏡観察を行い、転位などの結晶欠陥、ヘテロ構造界面の極微構造評価を行った。</p> <p>3. 不均一系触媒材料として用いられる、アルミナ、ジルコニア、マグネシアなどの各種酸化物上に担持した金属ナノ粒子並びに合金ナノ粒子について、走査型電子顕微鏡を用いてその表面状態の観察を行い、平均粒径や粒子形状などの情報を得た。試料調製の方法と条件によって、粒径が大きく変化することを確認し、その制御方法について研究を行った。</p> <p>4. ゴルーゲル法により、金微粒子含有 TiO<sub>2</sub> 光触媒複合膜を作製した。また、化学気相成長法によるカーボンナノチューブの構造制御、および電気化学処理による酸化物ナノ構造制御により機能性を発現するナノ材料を合成した。これらナノ材料の微細構造を透過型電子顕微鏡 (JEOL JEM-2010, 200kV)、走査型電子顕微鏡 (JEOL JSM6400, 25kV) によって観察することで、結晶構造と機能性の相関性などを明らかにしてきた。</p> <p>5. 3次元フォトリソニック結晶をホログラフィック・リソグラフィー法により形成し、プロセス途中で欠陥導波路を導入することで導波路デバイス作製を目</p> |

|                               |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                               | <p>指す。またバルク結晶としての光学的な応用も視野に大型結晶の形成も目指している。</p> <p>6～8. 高温における多軸低サイクル疲労の研究については、切欠き材の多軸低サイクル疲労および単結晶超合金の多軸疲労について、研究の進展を見ることができた。はんだのクリープ疲労寿命評価については、切欠き材の寿命評価法を提案した。また、樹脂薄膜の高温での低サイクル疲労試験装置や低温での引張特性評価用の試験装置を独自に開発した。</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| <p>利用成果</p> <p>&lt;論文&gt;</p> | <p>(1). K. Edalati, H. Iwaoka, Z. Horita, M. Tanaka, K. Higashida, H. Fujiwara, K. Ameyama, “Fabrication of ultrafine-grained Ti-(5–50wt.%)Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> composites using high-pressure torsion”, J. Kovove Mater, vol.49, 2011, 85-92.</p> <p>(2). Mineo Nozaki, Shengde ZHANG, Masao SAKANE, Kaoru Kobayashi, “Notch Effect on Creep-Fatigue Life for Sn-3.5Ag Solder”, Engineering Fracture Mechanic (Special Issue Multiaxial Fracture), Vol.78, No.8, 2011-5, pp.1794-1807.</p> <p>(3). Masao SAKANE, Shengde ZHANG, TeaJoon KIM, “Notch Effect on Multiaxial Low Cycle Fatigue”, International Journal of Fatigue( Special Issue of 'Multiaxial Fatigue Models'), Vol.33, No.8, 2011-8, pp.959-968.</p> <p>(4). 金 泰俊, 張 聖徳, 坂根 政男:「多軸応力下における改良 9Cr-1Mo 鋼切欠き材の低サイクル疲労寿命評価法」材料, Vol.60, No.9, 2011-9, pp. 803-810.</p> <p>(5). 金山英幸, 張 聖徳, 坂根政男, 山中公博, 寺田健司, 小林 馨:「銅薄膜のクリープ特性に関する研究」材料, Vol.60, No.9, 2011-9, pp. 831-837.</p> <p>(6). 菊池将一, 廣田遥, 小茂鳥潤:「微粒子ピーニングを施した SCM435H 鋼の残留応力と疲労特性に及ぼす基材および投射粒子硬さの影響」, 材料, Vol.60, No.6, (2011), pp.547-553.</p> <p>(7). 福岡隆弘, 菊池将一, 小茂鳥潤, 深沢剣吾, 三阪佳孝, 川寄一博:「雰囲気制御 IH-FPP 処理による改質層形成機構に及ぼす投射粒子の影響」, 日本金属学会誌, Vol.75, No.7, (2011), pp.372-378.</p> <p>(8). 中村裕紀, 酒井達雄, 菊池将一, 平野秀夫, 戸本隆道, 「アルミニウム合金の超高サイクル域回転曲げ疲労特性に及ぼすめっきおよび溶射の影響」, 設計工学, Vol.46, No.8, (2011), pp.468-475.</p> <p>(9). 菊池将一, 福岡隆弘, 小茂鳥潤, 「微粒子ピーニングを施した純鉄のプラズマ窒化挙動」, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.77, No.780, (2011), pp.1367-1377.</p> <p>(10). 野村泰稔, 日下貴之, 森本大貴:「応答アトラクタの交差予測に基づく構造異常診断法の開発と Baseline-less 型への適用可能性調査」, 構造物の安全性および信頼性, 査読有, Vol.7, pp.230-235, 2011.</p> <p>(11). Naoki Matsuzuka, Toshiyuki Toriyama, "Analysis of the piezoresistive properties of isotropic polysilicon based on a self-consistent micromechanics model", Smart Materials and Structures, volume 20, No 8 (2011), pp. 085018 1-8.</p> <p>(12). T.Yamaguchi, H. Umeda, T. Araki, and Y. Nanishi, “Application of Droplet Elimination Process by</p> |

- Radical-Beam Irradiation to InGaN Growth and Fabrication of InN/InGaN Periodic Structure”, Jpn. J. Appl. Phys. 50, 04DH08-1-4 (2011)
- (13). T.Kimura, E. Fukumoto, T. Yamaguchi, K. Wang, M. Kaneko, T. Araki, E. Yoon and Y. Nanishi, “Investigation on InN Mole Fraction Fluctuation in InGaN Films Grown by RF-MBE”, Phys. stat. sol. (c) 8, 1499-1502 (2011)
- (14). Y. Uemura, Y. Inada, K. Bando, T. Sasaki, N. Kamiuchi, K. Eguchi, A. Yagishita, M. Nomura, M. Tada, and Y. Iwasawa, “Core-Shell Phase Separation and Structural Transformation of Pt<sub>3</sub>Sn Alloy Nanoparticles Supported on  $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in the Reduction and Oxidation Processes Characterized by In Situ Time-Resolved XAFS”, J. Phys. Chem. C, 115, 5823-5833 (2011).
- (15). S. L. L. M. Ramos, M. Oguni, Y. Masuda, and Y. Inada, “Crossover from Low-Temperature Itinerant to High-Temperature Localized Electron Behavior in the Electron-Doped Rare-Earth Metal Cobaltate Perovskites”, Phys. Rev. B, 83, 085109 (2011).
- (16). K. K. Bando, Y. Koike, T. Kawai, G. Tateno, S. T. Oyama, Y. Inada, M. Nomura, K. Asakura, “Quick X-Ray Absorption Fine Structure Studies on the Activation Process of Ni<sub>2</sub>P supported on K-USY”, J. Phys. Chem. C, 115, 7466-7471 (2011).
- (17). M. Katayama, K. Sugimoto, E. Kato, K. Ozutsumi, S. Funahashi, and Y. Inada, “Novel Structural Variation of Silver(I)-Pyridine Complexes in Nitromethane As Studied by X-Ray Absorption Spectroscopy”, Inorg. Chim. Acta, 378, 66-71 (2011).
- (18). Y. Uemura, Y. Inada, K. Bando, T. Sasaki, A. Yagishita, M. Nomura, M. Tada, N. Kamiuchi, K. Eguchi, and Y. Iwasawa, “In Situ Time-Resolved XAFS Study on the Structural Transformation and Phase Separation of Pt<sub>3</sub>Sn and PtSn Alloy Nanoparticles on Carbon in the Oxidation Process”, Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 15833-15844 (2011).
- (19). C. Yogi, K. Kojima, T. Hashishin, N. Wada, Y. Inada, E. D. Gaspera, M. Bersani, A. Martucci, L. Liu and T.K. Sham, “Size Effect of Au Nanoparticles on TiO<sub>2</sub> Crystalline Phase of Nanocomposite Thin Films and Their Photocatalytic Properties”, J. Phys. Chem. C, 115, 6554-6560 (2011).
- (20). Z. Meng, C. Kitagawa, T. Hashishin and J. Tamaki, “NO<sub>2</sub> Adsorption Properties on Various WO<sub>3</sub> Crystals and Relation with Their Sensing Properties”, IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng., 『3rd Int. Congress on Ceramics』, 18, ID 212009 [4 pages] (2011).
- (21). T. Hashishin, E. Sato, S. Umeki, K. Kojima and J. Tamaki, “Electrical Properties of Nd-Doped BaTiO<sub>3</sub> PTC Ceramics Prepared by Hydrothermal Synthesis”, IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng., 『3rd Int. Congress on Ceramics』, 18, ID 092031 [5 pages] (2011).
- (22). T. Hashishin, K. Misawa, K. Kojima, C. Yogi and J. Tamaki, “Photocatalytic Properties of Size-Controlled Titania Nanotube Arrays”, International Journal of Electrochemistry, 2011, ID 656939 [7 pages] (2011).
- (23). M. Omae, T. Hashishin, J. Tamaki and K. Kojima, “Fabrication of Multi-walled Carbon Nanotubes Array Electrodes”, Proc. of the 28th sensor symposium, 『The 28th Sensor Symposium on Sensors, Micromachines, and Applied Systems』, pp. 659-662 (2011).
- (24). T. Hashishin, Y. Kamishima, K. Misawa, K. Wada, K. Kojima and J. Tamaki, “Microstructural Change of



Anodized Titania Nanotube Arrays”, Proc. of the 28th Japan-Korea Int.Seminar on Ceram., 『The 28th International Japan-Korea Seminar on Ceramics』, pp. 18-19 (2011).

(25). T. Hashishin, S.Hishikawa, E.Sato, T.Sanada, K.Kojima and J.Tamaki, “Hydrothermal Incorporation of Neodymium in Barium Titanate”, Proc. of the 28th Japan-Korea Int. Seminar on Ceram., 『The 28th International Japan-Korea Seminar on Ceramics』, pp. 174-175 (2011)

(26). Yuzo Ono and Masakazu Notsu, “Holographic fabrication and transmittance analysis of three-dimensional photonic crystals”, Proc. SPIE 8074, pp.807422-1/807422-8 (2011).

(27). Mineo Nozaki, Shengde ZHANG, Masao SAKANE, Kaoru Kobayashi, “Notch Effect on Creep-Fatigue Life for Sn-3.5Ag Solder”, Engineering Fracture Mechanics (Special Issue Multiaxial Fracture), Vol.78, No.8, 2011-5, pp.1794-1807.

(28). Masao SAKANE, Shengde ZHANG, TeaJoon KIM, “Notch Effect on Multiaxial Low Cycle Fatigue”, International Journal of Fatigue( Special Issue of 'Multiaxial Fatigue Models'), Vol.33, No.8, 2011-8, pp.959-968.

(29). 金 泰俊, 張 聖徳, 坂根 政男: 「多軸応力下における改良 9Cr-1Mo 鋼切欠き材の低サイクル疲労寿命評価法」, 材料, Vol.60, No.9, 2011-9, pp. 803-810.

(30). 金山英幸, 張 聖徳, 坂根政男, 山中公博, 寺田健司, 小林 馨: 「銅薄膜のクリープ特性に関する研究」, 材料, Vol.60, No.9, 2011-9, pp. 831-837.

(31). 松田 憲昭, 坂根 政男, 大畠 裕司, 寄川 盛男, 増野 浩一, 磯部 展宏, 吉成 明: 「Ni 基単結晶超合金十字型試験片による高温多軸低サイクル疲労試験法開発」, 材料, Vol.60, No.12, 2011-12, pp. 1030-1137.

#### 論文 (査読なし)

##### ●雑誌論文

(1) 小茂鳥潤, 伊藤達也, 天野有規, 亀山雄高, 菊池将一: 「微粒子ピーニングによる表面改質の最新動向」, トライボロジスト, Vol.56, No.8, (2011), pp.489-495."

(2) 谷 泰弘, 村田順二: 「ガラス研磨用酸化セリウム低減化技術の動向」, 月刊機能材料, 2011 年 7 月号

(3) 谷 泰弘: 「セリウム代替の研磨パッドの開発とその可能性」, 月刊マテリアルステージ, 2011 年 9 月号

#### <国際学会>

(1). Kei Ameyama,, “Creation of High Strength and High Ductility Sintered Materials with Harmonic Microstructure, Proceedings of JSME/ASME 2011 INTERNATIONAL CONFERENCE ON MATERIALS & PROCESSING, June 13-17, 2011, Corvallis, Oregon, USA

(2) Kei Ameyama, Hiroshi Fujiwara, “CREATION OF HARMONIC STRUCTURE MATERIALS WITH OUTSTANDING MECHANICAL PROPERTIES”, Internation Conference on Processing & Manufacturing

of Advanced Materials, THERMEC2011, Aug. 1-5, Quebec city, Canada.

(3) T. Sekiguchi, Sabrina N.B.R, Ryota Imao, Hiroshi Fujiwara, Kei Ameyama, Zihua Zhao, Akira Ueno, “Creation of High Strength and High Ductility Titanium Materials by Harmonic Microstructure Control”, The 12th World Conference on Titanium(Ti2011), Beijin, China, June 19-24. (2011)

(4) Z. H. Zhao, T. Sekiguchi, S. N. B. Ramleh, H. Fujiwara, A. Ueno and K. Ameyama, “Fatigue behaviors of commercially pure titanium with harmonic microstructure”, The 12th World Conference on Titanium(Ti2011), Beijin, China, June 19-24. (2011)

(5) Shengde Zhang, Masao Sakane, Takeshi Nagasawa, Kaoru Kobayashi, “Mechanical Properties of Copper Thin Films Used in Electronic Devices”, Proceedings of The 11th International Conference on the mechanical behavior of Materials (ICM11), CD, Villa Erba (Como, Italy), 5-9 June 2011

(6) Shengde Zhang, Syuhei Mori, Masao Sakane, Takeshi Nagasawa, Kaoru Kobayashi, “Tensile properties and viscoelastic model of resin thin film, International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics (ATEM’11)”, No.415979, Kobe, Japan, 19-21 September 2011

(7) A. Ueno, T. Sakai, A. Sakaida, K. Isonishi, T. Shuto and T. Oyatsu, “Current JSMS factual fatigue database and database system including VHCF data”, Proceedings of the 5th International Conference on Very High Cycle Fatigue, CD-ROM, (2011-6), Berlin, GERMANY.

(8) M. Fukuta, T. Sakai, Y. Nakamura, T. Sakai, N. Oguma and A. Ueno, “A study on coaxing effect of SCM435 steel under rotating bending in very high cycle regime”, Proceedings of the 5th International Conference on Very High Cycle Fatigue, CD-ROM, (2011-6), Berlin, GERMANY.

(9) N. Ninomiya, Y. Nakamori, T. Sakai, S. Kikuchi, Y. Nakamura and M. Ueda, “A study on very high cycle fatigue property of low flammability magnesium alloy in rotating bending and axial loading”, Proceedings of the 5th International Conference on Very High Cycle Fatigue, CD-ROM, (2011-6), Berlin, GERMANY.

(10) S. Kikuchi, Y. Yasutake and J. Komotori, “Effect of fine particle peening on oxidation resistance of austenitic stainless steel”, Proceedings of International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics 2011 (ATEM’11)”, CD-ROM, (2011-9), Kobe, JAPAN.

(11) M. Fukuta, T. Sakai, Y. Nakamura, N. Oguma, A. Ueno, S. Kikuchi and T. Sakai, “Coaxing effect of SCM435 steels with different hardness under rotating bending in high cycle regime”, Proceedings of The 2nd China-Japan Joint Symposium on Fatigue of Engineering Materials and Structures, pp.29-32, (2011-10), Chengdu, CHINA.

(12) T. Tanji, M. Wakita, S. Mimura, A. Ueno, S. Kikuchi and T. Sakai, “A study on very high cycle fatigue properties of high cleanliness spring steel (SWOSC-V) in rotating bending”, Proceedings of The 2nd China-Japan Joint Symposium on Fatigue of Engineering Materials and Structures, pp.77-80, (2011-10), Chengdu, CHINA.

(13) Y. Zhang, T. Sakai, S. Kikuchi, A. Ueno, A. Kokubu and L. Lu, “High Cycle fatigue behavior of bulk amorphous alloy (Zr55Al10Ni5Cu30) in rotating bending”, Proceedings of The 2nd China-Japan Joint Symposium on Fatigue of Engineering Materials and Structures, pp.81-84, (2011-10), Chengdu, CHINA.

(14) N. Ninomiya, Y. Nakamori, T. Sakai, S. Kikuchi, Y. Nakamura and M. Ueda, “Very high cycle fatigue

properties of extruded low flammability magnesium alloy in rotating bending”, Proceedings of The 2nd China-Japan Joint Symposium on Fatigue of Engineering Materials and Structures, pp.93-96, (2011-10), Chengdu, CHINA.

(15) J. Murata, Y. Tani, M. Yamada, T. Yanagihara, N. Nomura, R. Hirokawa, Y. Zhang, O. Kirino, “Development of Composite Abrasives and Epoxy resing Polishing Pads to Reduce the Use of CeO<sub>2</sub> Abrasives in Glass Polishing”, 11th International Conference of European Society of Precision Engineering and Nanotechnology, Como, Italy

(16) NOMURA, Y., FURUTA, H., KUSAKA, T., MOTOMURA, N., MORIMOTO, D., “Reference-less Structural Vibration-based Monitoring System using Cross Prediction of Attractor”, Proc. of the 2011 World Congress on Advances in Structural Engineering and Mechanics (ASEM'11+), pp.4339-4348, Seoul, Sept.18-23, 2011.

(17) KUSAKA, T., NOMURA, Y., SAKAMOTO, T., FUJII, T., “Crack Growth Monitoring System for Concrete Structures based on Non-Contact Displacement Measurements”, Proc. of the 8th International Workshop on Structural Health Monitoring -2011, Vol.1, pp.799-806, Stanford, Sept.13-15, 2011.

(18) YAMAGAMI, S., KUSAKA, T., NOMURA, Y., “Evaluation for Mode I Debonding Behavior in CFRP Adhesive Joints under Low-velocity Impact Loading”, Proc. of International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics 2011(ATEM '11), OS09-2-5, Kobe, Sept.19-21, 2011.

(19) KUSAKA, T., NOMURA, Y., NAKAMURA, ITO, T., “Debonding Detection System for CFRPreinforced Concrete Structure Based on Evaluations of Elastic Wave Propagation”, Proc. of International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics 2011(ATEM'11),OS11-1-6, Kobe, Sept.19-21, 2011."

(20) KUSAKA, T., NOMURA, Y., SAKAMOTO, T., FUJII, T., “Real-time Crack Monitoring System in Concrete Structures Using Non-contact Displacement Measurements”, Proc. of International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics 2011, OS01-4-4, Kobe, Sept.19-21, 2011."

(21). Y. Nanishi, T. Yamaguchi, T. Araki and E. Yoon, “Recent Progress of DERI Process for Growth of InN and Related Alloys” , 40th "Jaszowiec" International School and Conference on the Physics of Semiconductors 2011, 6 月 29 日 WeI4, Krynica-Zdroj, Poland

(22). T. Yamaguchi, N. Uematsu, R. Iwamoto, T. Araki, E. Yoon and Y. Nanishi, “Proposal of Thick InGaN Film Growth Using Advanced Droplet Elimination Process by Radical-Beam Irradiation”, The 9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9) 2011  
7 月 13 日, D1. 4, the Scottish Exhibition and Conference Centre (SECC) Glasgow UK"

(23). T. Araki, S. Yamashita, T. Yamaguchi, E. Yoon, and Y. Nanishi, “Fabrication of Nano-structure of A-plane InN on Patterned A-plane GaN Template by ECR-MBE”, The 9th International Conference on Nitride Semiconductors (ICNS-9) 2011, 7 月 14 日, D4. 5, the Scottish Exhibition and Conference Centre (SECC) Glasgow UK

(24). T. Araki, T.Sakamoto, A.Miki, N. Uematsu, Y.Takamatsu, T.Yamaguchi, Y.Eoon and Y.Nanishi, “Reduction of Threading Dislocation Density by Regrowth on In-Polar InN”, SPIE Photonics West 2012, 1

月 23 日, 8262-3 Moscone Center, San Francisco, CA USA

- (25). Y. Uemura, Y. Niwa, A. Yagishita, M. Nomura, Y. Inada, M. Kimura, K. K. Bando, and Y. Iwasawa, "Time Resolved In Situ QXAFS and DXAFS Studies on the Formation and Oxidation Mechanisms of Palladium-Zinc Bimetallic Nanoparticles", 60th Annual Conference on Applications of X-ray Analysis: Denver X-ray Conference, Colorado (USA), Aug. 1-5, 2011
- (26). M.Omae, T.Hashishin, K.Kojima, J.Tamaki, "Direct Growth of Vertically Aligned Multi-Walled Carbon Nanotubes on Micro Gap of Interdigitated Au Electrodes by Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition", 『Seventh International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPP11)』 [Shiga] (2011. 6. 11).
- (27). S.Shoji, T.Hashishin, H.amiaki, "Construction of Artificial Chlorosomal Antenna from a Synthetic Bacteriochlorophyll-d Analog and Observation of Their Photocurrents", 『Seventh International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPP11)』 [Shiga] (2011. 6. 11).
- (28). H.Ikenoko, T.Hashishin, J.Tamaki, K.Kojima, "P-N Junction Effect of Multi-walled Carbon Nanotubes Modified with TiO<sub>2</sub> Nanoparticles for NO<sub>2</sub> Detection", 『Seventh International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (SNCPP11)』 [Shiga] (2011. 6. 11).
- (29). M.Omae, T.Hashishin, J.Tamaki, K.Kojima, "Fabrication of Multi-walled Carbon Nanotubes Array Electrodes", 『The 28th Sensor Symposium on Sensors, Micromachines, and Applied Systems』 [Tokyo] (2011. 9. 26).
- (30). ○T.Hashishin, "Size-control of Anodized Titania Nanotube Arrays", 『The 1st Annual World Congress of Nano Science and Technology: Track3-16 Oxide Nanocomposites and Multilayers』 [Dalian World Expo Center] (2011. 10. 25). Keynote Lecture
- (31). ○T. Hashishin, M.Omae, K.Kojima and J.Tamaki, "Characteristics of Gas Sensing Electrodes with Multi-walled Carbon Nanotubes Arra", Proc. of the 3rd Int. Workshop on Nanotech. Application, 『The 3rd Int. Workshop on Nanotech. Application』 [Ho Chi Minh] (2011. 11. 12). Invited Talk
- (32). ○T.Hashishin, Y.Kamishima, K.Misawa, K.Wada, K. Kojima and J. Tamaki, "Microstructural Change of Anodized Titania Nanotube Arrays", Proc. of the 28th Japan-Korea Int. Seminar on Ceram., 『The 28th International Japan-Korea Seminar on Ceramics』 [Okayama Convention] (2011. 11. 24).
- (33). ○T.ashishin, S.Hishikawa, E.Sato, T.Samada, K.Kojima and J.Tamaki, "Hydrothermal Incorporation of Neodymium in Barium Titanate", Proc. of the 28th Japan-Korea Int. Seminar on Ceram. , 『The 28th International Japan-Korea Seminar on Ceramics』 [Okayama Convention] (2011. 11. 25).
- (34). Yuzo Ono and Masakazu Notsu, "Holographic fabrication and transmittance analysis of three-dimensional photonic crystals," Holography: Advances and Modern Trends, a part of SPIE Optics + Optoelectronics 2011, Prague, Czech Republic, April, 2011, Technical Summaries of SPIE Optics + Optoelectronics 2011, Paper 8074-22, Session 6, p.77 (2011).
- (35). Shengde Zhang, Masao Sakane, TakeshiNagasawa, Kaoru Kobayashi, "Mechanical Properties of Copper Thin FilmsUsed in Electronic Devices", Proceedings of The 11th International Conference on the mechanical behavior of Materials (ICM11), CD, Villa Erba (Como, Italy), 5-9 June 2011

- (36). Shengde Zhang, Syuhei Mori, Masao Sakane, Takeshi Nagasawa, Kaoru Kobayashi, "Tensile properties and viscoelastic model of resin thin film", International Conference on Advanced Technology in Experimental Mechanics, Kobe, Japan, 2011-9 No.415979
- (37). Hideyuki Kanayama, Shengde Zhang, Masao Sakane, Tadashi Nagasawa, Kenji Tearada and Kaoru Kobayashi, "Effect of Filler on Creep Characteristics of Polyamide Resin Thin Films", 13th International Conference on Electronics Materials and Packeging (EMAP2011), Kyoto, Japan, 2011-12, No. EMAP2011FP-64"

<国内学会>

- (1) . 萩一真、Lydia Anggraini、飴山恵：「調和組織を有する Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/YSZ 複合材料の組織と機械的特性」、(社)粉体粉末冶金協会平成 23 年度秋季大会(第 108 回講演大会)、平成 23 年 10 月 26 日、大阪大学コンベンションセンター
- (2). 瀬尾卓弘、(立命館大院)今尾亮太、SABRINA N.B.R.、関口達也、Octav Ciuca、飴山恵：「放電プラズマ焼結法による調和組織制御された純チタン材の機械的性質」、(社)粉体粉末冶金協会平成 23 年度秋季大会(第 108 回講演大会)、平成 23 年 10 月 27 日、大阪大学コンベンションセンター
- (3) . 中村寛(IHI)、高梨正祐、真崎達也(立命館大)、張聖徳、坂根政男：「非比例多軸負荷におけるマルエージング鋼の疲労き裂進展挙動」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集，2011-5， CD. 大阪大学（2011 年 5 月 25 日（水）～27 日（金））
- (4) . 廣崎和也(立命館大)、張聖徳、坂根政男、寺田健司(京セラ)、禰占孝之、小林馨：「2 種類のアンダーフィル樹脂薄膜の低サイクル疲労き裂発生および進展特性」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集，2011-5， CD. 大阪大学（2011 年 5 月 25 日（水）～27 日（金））
- (5) . 張聖徳(立命館大)、岡昌樹(立命館大院)、坂根政男(立命館大)、寺田健司(京セラ)、小林馨：「ポリアミド樹脂薄膜の引張特性およびフィラー含有量の影響」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集，2011-5， CD. 大阪大学（2011 年 5 月 25 日（水）～27 日（金））
- (6). 張聖徳、坂根政男：「有限要素法解析を用いた切欠き材の低サイクル疲労寿命評価」、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス，九州工業大学（2011 年 7 月 16～18 日）
- (7). 劉氷汐，張聖徳，坂根政男：「無酸素銅の非比例多軸低サイクル疲労寿命」、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス，九州工業大学（2011 年 7 月 16～18 日）
- (8). 上野明，川島亮太：「内圧式高圧水素法を用いた金属の疲労特性に及ぼす高圧水素ガスの影響評価」，第 60 期日本材料学会学術講演会，(2011-5)，大阪.
- (9). 上野明，西岡瑛：「内圧式高圧水素法を用いた金属の強度特性に及ぼす高圧水素ガスの影響評価」，第 60 期日本材料学会学術講演会，(2011-5)，大阪.
- (10) . 花木聡，岡田憲司，境田彰芳，菅田淳，西川出，上野明，酒井達雄：「金属材料疲労強度データベースによる機械構造用鋼の回転曲げ疲労特性解析の試み」，第 60 期日本材料学会学術講演会，(2011-5)，大阪.
- (11). 上野明，飛鷹強志：「固体高分子形燃料電池用電解質膜の強度特性」，第 60 期日本材料学会学術講演会，(2011-5)，大阪.



- (12). 丹治直之, 脇田将見, 三村真吾, 上野明, 菊池将一, 酒井達雄:「超長寿命域における高纯净度弁ばね鋼 SWOSC-V の内部起点型疲労破壊に関する研究」, 2011 年度春季ばね及び復元力応用講演会, (2011-6), 名古屋.
- (13). 福田誠, 酒井孝泰, 中村裕紀, 小熊規泰, 上野明, 菊池将一, 酒井達雄:「SCM435 鋼の超高サイクル回転曲げ疲労試験におけるコーキシング効果に関する研究」, 日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス, (2011-7), 小倉.
- (14). 丹治直之, 脇田将見, 三村真吾, 上野明, 菊池将一, 酒井達雄:「高纯净度弁ばね鋼の超高サイクル回転曲げ疲労特性に関する研究」, 日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス, (2011-7), 小倉.
- (15). 中村裕紀, 望田修也, 菊池将一, 酒井達雄:「アルミニウム合金の超高サイクル域回転曲げ疲労特性に及ぼすアルマイト皮膜厚さの影響」, 日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス, (2011-7), 小倉.
- (16). 上野明:「はんだ BGA ボールを用いた微小接合部クリープ強度評価」, 2011 年度日本機械学会年次大会, (2011-9), 東京.
- (17). 田中雄一郎, 谷 泰弘, 村田順二, 張 宇, 山田美幸, 楊原 武:「セリア循環使用時の研磨能率劣化の原因究明」, 精密工学会関西支部 2011 年度学術講演会, 兵庫県立大学
- (18). 村田順二, 谷 泰弘, 野村信幸, 広川良一, 張 宇:「低硬度エポキシ樹脂パッドの加工条件依存性」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学
- (19). 村田順二, 谷 泰弘, 野村信幸, 広川良一, 張 宇:「低硬度エポキシ樹脂パッドのコンディショニング特性」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学
- (20). 張 宇, 谷 泰弘, 橋爪雄大, 金 偉, 村田順二:「砥粒の表面処理による電着工具の品質向上」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学
- (21). 上村康幸, 土屋健介, 谷 泰弘, 李 承福:「連続気孔を有する固定砥粒工具の提案」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学.
- (22). 桐野宙治, 谷 泰弘:「ブラシめっき法を適用した高速電着ダイヤモンドワイヤ製造方法の開発」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学.
- (23). 桐野宙治, 小幡 卓, 谷 泰弘, 村田順二:「エポキシ樹脂研磨パッドの両面研磨への適用」, 2011 年度砥粒加工学会学術講演会, 中部大学.
- (24). 村田順二, 谷 泰弘, 張 宇:「有機メディア粒子を用いた複合粒子研磨法の開発」, 日本機械学会 2011 年度年次大会, 東京工業大学.
- (25). 村田順二, 谷 泰弘, 野村信幸, 広川良一, 張 宇:「代替砥粒ジルコニアのガラス研磨特性」, 日本機械学会 2011 年度年次大会, 東京工業大学.
- (26). 村田順二, 谷 泰弘, 張 宇:「エポキシ樹脂塗布スエードパッドの開発」, 2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会, 金沢大学
- (27). 桐野宙治, 宮城直紀, 谷 泰弘, 村田順二:「エポキシ樹脂パッドのガラスレンズ研磨への適用」, 2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会, 金沢大学"
- (28). 李 承福, 桐野宙治, 谷 泰弘:「ジルコニア砥粒を用いた化学援用研磨の加工特性」, 2011



年度精密工学会秋季大会学術講演会，金沢大学

(29). 張 宇，谷 泰弘，村田順二，金井宏文：「金属フィルム補強による電鍍ブレードの切断性能の向上」，2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会，金沢大学

(30). 楊 聖淼，谷 泰弘，村田順二，張 宇，桐野宙治：「ドラム式電着ダイヤモンドワイヤ製造法の基礎検討」，2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会，金沢大学

(31). 野村信幸，広川良一，谷 泰弘，村田順二，張 宇：「エポキシ・ウレタン共重合研磨パッドの研磨特性」，2011 年度精密工学会秋季大会学術講演会，金沢大学

(32). 陳晋，中西栄三郎，飴山恵，Chaoli Ma，渡邊育夢，Zhao Zihua，藤原弘，上野明：「構造用材料国際産学連携・日中ワークショップ」の開催 2011 年 10 月 29 日

(33). N. Uematsu, T. Yamaguchi, R. Iwamoto, T. Sakamoto, T. Fujishima, T. Araki and Y. Nanishi, “Thick InGa<sub>N</sub> Growth Using DERI Method”, 30th Electronic Materials Symposium (EMS30), 2011 年 7 月 1 日 Fr1-19 ラフォーレ琵琶湖，滋賀県守山市

(34). 荒木努，坂本務，三木彰，上松尚，高松祐基，山口智広，名西やすし：「In 極性 InN 上への再成長による貫通転位密度低減」，2011 年秋季 第 72 回 応用物理学会学術講演会，2011 年 8 月 30 日，30a-ZE-5 山形大学小白川キャンパス，山形県山形市

(35). 荒木努，山下修平，山口智広，名西やすし：「ECR-MBE 法を用いた A 面 InN ナノ構造の配列制御選択成長」，第 41 回結晶成長国内会議（NCCG-41）、2011 年 11 月 4 日 04aA04 つくば国際会議場、茨城県つくば市

(36). 上松尚，山口智広，荒木努，名西やすし：「DERI 法を応用した InGa<sub>N</sub>/InGa<sub>N</sub> 量子井戸構造の作製」，2012 年春季 第 59 回 応用物理学関係連合講演会 2012 年 3 月、早稲田大学早稲田キャンパス、東京都新宿区

(37). 片山真祥，稲田康宏，太田俊明，山重寿夫，荒井創，内本喜晴，小久見善八：「イメージング XAFS システムの開発とリチウムイオン電池正極への適用」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(38). 山下翔平，片山真祥，丹羽尉博，稲田康宏：「二結晶型時間分解 DXAFS 装置による酸化還元反応解析」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(39). 三宅康之，片山真祥，丹羽尉博，稲田康宏：「PdZn 合金の生成過程における XAFS 解析」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(40). 土井恵介，片山真祥，丹羽尉博，稲田康宏：「時間分解 DXAFS を用いた担持パラジウム触媒の酸化還元メカニズムの解明」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(41). 滝紀子，片山真祥，丹羽尉博，稲田康宏：「パラジウム含有合金触媒の形成機構の解明」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(42). 上村洋平，稲田康宏，丹羽尉博，木村正雄，阪東恭子，柳下明，岩澤康裕，野村昌治：「時間分解 Dispersive XAFS によるアルミナ上の PdZn ナノ粒子の形成および酸化過程の反応機構解析」，第 14 回 XAFS 討論会、岡崎、2011 年 9 月 9-11 日

(43). 片山真祥，山重寿夫，荒井創，稲田康宏，内本喜晴，小久見善八，太田俊明：「リチウムイオン電池正極反応の in situ イメージング XAFS による観測」，第 25 回日本放射光学会年会・放射

光科学合同シンポジウム、鳥栖、2012 年 1 月 6-9 日

(44). 眞田 智衛, 与儀 千尋, 橋新 剛, 小島 一男: 「蛍光材料・光触媒材料の作製と機能性ナノ構造体の構築」, 『第 6 回日本セラミックス協会関西支部学術講演会』(イーグレ姫路), 2011 年 7 月 29 日.

(45). ◯横溝 裕司, 与儀 千尋, 片山 真祥, 和田 憲幸, 稲田 康宏, 小島 一男: 「ゾルーゲル法により作製した Au 微粒子含有 TiO<sub>2</sub> 光触媒膜の XANES 解析」, 『日本化学会西日本大会 2011 年年会』(徳島大学), 2011 年 11 月 12 日.

(46). ◯橋新 剛: 「カーボンナノチューブガスセンサ ―酸化物添加効果―」, 『京都産学公連携フォーラム 2011』(京都工業会館), 2011 年 11 月 18 日. 依頼講演

(47). ◯菱川 翔太, 佐藤 栄亮, 橋新 剛, 小島 一男, 玉置 純: 「Nd 添加チタン酸バリウムの水熱合成における KOH 濃度の影響」, 『日本セラミックス協会 2012 年年会』(京都大学), 2012 年 3 月 19 日.

(48). ◯大前 政輝, 橋新 剛, 小島 一男, 玉置 純: 「カーボンナノチューブアレイ電極とガス選択性」, 『電気化学会第 79 回大会』(アクトシティ浜松), 2012 年 3 月 29 日.

(49). ◯斧田 裕之, 橋新 剛, 小島 一男, 玉置 純: 「マグネシウムフェライトによる硫化水素の低濃度検知」, 『電気化学会第 79 回大会』(アクトシティ浜松), 2012 年 3 月 29 日.

(50). 中村寛(IHI)、高梨正祐、真崎達也(立命館大)、張聖徳、坂根政男: 「非比例多軸負荷におけるマルエージング鋼の疲労き裂進展挙動」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集, 2011-5, CD. 大阪大学 (2011 年 5 月 25 日 (水) ~27 日 (金))

(51). 廣崎和也(立命館大)、張聖徳、坂根政男、寺田健司(京セラ)、禰占孝之、小林馨: 「2 種類のアンダーフィル樹脂薄膜の低サイクル疲労き裂発生および進展特性」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集, 2011-5, CD. 大阪大学 (2011 年 5 月 25 日 (水) ~27 日 (金))

(52). 張聖徳(立命館大)、岡昌樹(立命館大院)、坂根政男(立命館大)、寺田健司(京セラ)、小林馨: 「ポリアミド樹脂薄膜の引張特性およびフィラー含有量の影響」、日本材料学会第 60 期学術講演会講演論文集, 2011-5, CD. 大阪大学 (2011 年 5 月 25 日 (水) ~27 日 (金))

(53). 張聖徳, 坂根政男: 「有限要素法解析を用いた切欠き材の低サイクル疲労寿命評価」、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス (2011 年 7 月 16~18 日)

(54). 劉氷汐, 張聖徳, 坂根政男: 「無酸素銅の非比例多軸低サイクル疲労寿命」、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス 2011 年 7 月 16~18 日)

(55). 張聖徳, 李経懷, 坂根政男: 「改良 9Cr-1Mo 鋼の十字型試験片を用いた高温多軸クリープ変形および破断特性」、日本材料学会第 49 回高温強度シンポジウム, pp66-70.石垣市商工会館, 2011 年 11 月 24 日~26 日

(56). 品川一成、飴山 恵、上野明、磯西 和夫: 「第 4 回粉末成形体および焼結材料の寸法形状と構造制御研究分科会」(P-SCD374) 平成 24 年 1 月 20 日 (金)

<博士論文>

- (1) Lydia Anggraini : “Study on Microstructure and Mechanical Properties of Ceramic Composites Produced by Electromagnetic Sintering”, 2012, February.

<修士論文>

- (1). 夏目雄太 : 「ネットワーク構造を有する  $\text{Si}_3\text{N}_4\text{-ZrO}_2$  複合材料の組織制御と機械的特性の検討」  
(2). 小早川弘志 : 「SUS304L バイモーダル材料の組織と機械特性」  
(3). 西田龍司 : 「メカニカルアロイング法による  $\gamma$  相ベース Ti-Al 合金の作製」  
(4). 山本亮平 : 「メカニカルミリング法による  $\text{SiC-ZrO}_2$  (YSZ) 複合材料の組織制御と機械的特性評価」  
(5). 萩一真 : 「調和組織を有する  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-YSZ}$  複合材料の微細組織と機械的特性」  
(6). 上松尚 : 「DERI 法を用いた厚膜 InGaN 成長および InGaN/InGaN 量子井戸構造の作製」  
(7). 勝木拓郎 : 「DERI 法を用いた高品質 InN 結晶成長とラジカルモニタリングの応用」  
(8). 油谷匡胤 : 「A 面 GaN テンプレート上 A 面 InN の結晶成長と特性評価」  
(9). 滝紀子 : 「パラジウム含有合金触媒の形成機構の解明」  
(10). 土井恵介 : 「担持パラジウム触媒の酸化還元特性の解明」  
(11). 池之子 英洋 : 「酸化チタン内包多層カーボンナノチューブの調製とガス吸着モデルの検証」  
(12). 木下 弘章 : 「パラジウム担持酸化スズの水熱合成とマイクロセンサによるメタン検知特性」  
(13). 岡本渉志 : 「拡張現実ディスプレイを構成する回折光学素子」  
(14). 碓本佑典 : 「車載用電子デバイスの最適構造および熱信頼性評価」  
(15). 田中俊輝 : 「銅-はんだ接合材の低サイクル疲労き裂進展挙動」  
(16). 北村祐丞 : 「ミニチュア試験片を用いた耐熱鋼のクリープ寿命評価」  
(17). 太田一也 : 「単結晶超合金の引張・圧縮-繰返しねじり高温多軸低サイクル疲労寿命評価」

装置名；磁気共鳴断層撮影装置

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | スポーツ健康科学部 教授 浜岡 隆文                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
| 部門名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| 研究テーマ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 運動トレーニングによる生体の変化に関する研究                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| 研究の概要                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | <p>本装置は、磁気共鳴現象を利用して、非侵襲的に生体内部の情報を得る測定装置であり、情報を画像化するMRIと分子の構造や状態などの性質を調べるMRSの両者を備えている。具体的には、画像情報から生体内部の脂肪量(皮下脂肪、内臓脂肪)や骨格筋量の評価が可能であり、MRS測定により骨格筋内高エネルギーリン酸化合物の変化を評価できることから、運動時の筋内エネルギー動態を評価することができる。異なる対象(健常若年者、高齢者、高度にトレーニングされた競技選手など)が、様々な運動および各種運動トレーニングを行った際に、生体の形態および機能に及ぼす影響について検討する。また、運動と表裏一体をなす不活動が生体の形態および運動時骨格筋エネルギー代謝に及ぼす影響を検討することにより、健康を維持・増進するうえで重要な役割を果たす身体活動および運動の生体における役割について研究する。</p> |
| <p>利用成果</p> <p>本装置を利用して研究を行った、その成果は以下の通りである。</p> <p>論文(査読あり)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1) The use of muscle near-infrared spectroscopy in sport,health and medical sciences: recent developments. <u>Takafumi Hamaoka</u>, Kevin K. McCully, Masatsugu Niwayama, Britton Chance. Phil. Trans. R. Soc. A. 369, pp.4591-4604. 2011. Oct.</li> <li>2) Relationship between reduced lower abdominal blood flows and heart rate in recovery following cycling exercise. T.Osada, H.Iwane, T.Katsumura, N.Murase, H.Higuchi, A.Sakamoto, T.Hamaoka, T.Shimomitsu. Acta Physiol(Oxf). 204(3), pp.344-353. 2011.Sep.</li> <li>3) Attenuation of Muscle Deoxygenation Precedes EMG Threshold in Normoxia and Hypoxia. Takuya Osawa, Ryotaro Kime, <u>Takafumi Hamaoka</u>, Toshihito Katsumura, Masayoshi Yamamoto. Med Sci Sports Exerc. pp.1406-1413. 2011. Aug.</li> <li>4) Increased muscular dehydroepiandrosterone levels are associated with improved hyperglycemia in obese rats. Sato K, Iemitsu M, Aizawa K, Mesaki N, Fujita S. Am J Physiol Endocrinol Metab. 301/2, pp.274-280. 2011. Aug.</li> <li>5) Unperceivable noise to active light touch effects on fast postural sway. <u>Tetsuya Kimura</u>, Motoki Kouzaki, Kei Masani, Toshio Moritani. Neuroscience Letters. 506/1, pp.100-103. 2012. Jan.</li> </ol> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |

装置名；深堀用反応性イオンエッチング装置（MUC-21）

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 研究責任者                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 鈴木 健一郎 木股 雅章                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 部門名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 理工学部・マイクロ機械システム工学科／先端マイクロ・ナノシステム技術研究センター                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 研究テーマ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | MEMS 共振器の研究                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| 研究の概要                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | <p>近年、情報機器のブロードバンド化進行に伴い、機器やデバイスの更なる高性能化が要求されている。情報機器を構成するキーデバイスの一つに共振器があり、水晶振動子や SAW（Surface Acoustic Wave）デバイスが多用されている。しかし、これらを用いた発振器の周波数上限は約 100MHz であり、適用限界が指摘されている。この限界を打破する新たなデバイスとして、MEMS（Micro Electro Mechanical Systems）共振器が注目され始めている。MEMS 共振器の特徴として高周波化、小型化、集積化などが挙げられており、周波数可変機能などの研究が進行している。本報告では、適用限界が指摘されている現在の共振器に代わりうる MEMS 共振器の 10-100MHz 帯での基礎検討を行った。</p> |
| <p>利用成果</p> <p>試作した共振器の評価を行い、以下に示すように 2 件の論文と 3 件の国際会議でこの成果を発表した。</p> <p>1) M. Kiso, M. Okada, A. Tamano, H. Fujiura, H. Miyauchi, K. Niki, H. Tanigawa, and K. Suzuki, “MEMS Resonator Utilizing Torsional-to-Transverse Vibration Conversion,” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, pp. 06GM03: 1-7, 2011.</p> <p>2) K. Hashimoto, K. Ito, H. Tanigawa, and K. Suzuki, “Evaluation of a Single-Crystal-Silicon Microelectromechanical Systems Resonator Utilizing a Narrow Gap Process,” Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, No.6, pp. 067201: 1-8, 2011.</p> <p>3) M. Kiso, M. Okada, H. Fujiura, H. Miyauchi, K. Niki, H. Tanigawa, and K. Suzuki, “High Q-factor 80 MHz Resonator Utilizing Torsional-to-Transverse Vibration Conversion,” Digest of 2011 International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Kyoto, The Japan Society of Applied Physics, 25B-3-2, 2011.</p> <p>4) T. Okamoto, H. Tanigawa, and K. Suzuki, “Lame-Mode Octagonal MEMS Resonator Utilizing Sliding Driving Electrodes,” Digest of 2011 International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Kyoto, The Japan Society of Applied Physics, 27P-11-151L, 2011.</p> <p>5) K. Suzuki, “MEMS Resonator: What is the challenge?” Digest of 2011 International Microprocesses and Nanotechnology Conference, Kyoto, The Japan Society of Applied Physics, 25B-3-1, 2011 (invited).</p> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |

# 理 工 学 研 究 所      記 事



## 理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|-------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 川越恭二<br>(立命館大学・情報理工学部・教授)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 集会名               | iDB Workshop 2011 (第3回 データベース, Web, 情報マネジメントに関する若手研究者国際ワークショップ) <a href="http://db-event.jp.org/idb2011/">http://db-event.jp.org/idb2011/</a>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 開催日程              | 2011 年 8 月 1 日 ～ 2011 年 8 月 2 日                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
| 会場                | 朱雀キャンパス(多目的室, 大講義室ほか)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| 報告内容              | <p>iDB Workshop 2011 は, データベース, データ工学や関連する分野の若手研究者を対象とした新しい形態のワークショップである. 2008 年に試行的ワークショップを福島で開催して以降, 2009 年, 2010 年に各々, 神戸, 東京で開催した. 本ワークショップでは国内外のトップクラス研究者がメンターとなり, 若手研究者の研究テーマに関して有意義かつ貴重な議論を交わす. これにより若手研究者がトップクラスの国際会議で先端的研究成果を創出することを目的とする. iDB Workshop 2011 は立命館大学の教員が中心となり京都で国内外からの交通の便もよい朱雀キャンパスで開催した. 海外(韓国, ドイツ, 香港, シンガポール)から 4 名の国際的に著名な研究者および国内から東京大学, 京都大学, 筑波大学等の DB 分野で研究実績及び経験の豊富な 9 名の教授, 准教授をメンターとし, 18 名の若手研究者の研究内容および論文の指導を行った. 若手研究者の研究分野は広範であり, 特に, 情報信頼性, 情報推薦, XMLDB に関する研究が活発に行われていた. iDB Workshop 2011 の初日には, 全発表者が持ち時間 1 人 40 分で講演を行った. 各講演者には予め海外メンター1 名および国内メンター1 名以上を割当てており, 講演者に対して厳しくかつ建設的なアドバイスをを行った. 2 日目の午前には 1 対 1 形式で若手研究者がメンターと直接にアドバイスを受けることができる場を用意した. 1 時間以上も真剣に同一メンターと相談しアドバイスを受ける研究者もおり, 論文の改善に向けて真剣に取り組んでいた. 2 日目の午後は, 海外メンターによる招待講演会を行った. 本講演会は一般自由参加(申し込み不要)で実施した. 最先端のデータベース関連技術の動向を知ることができるよい機会であるため, 立命館大学の学生院生および DB に興味ある立命館大学教員も多かった. 合計 100 名近くの参加者が真剣に聴講していた. 講演会の最後には本ワークショップの最優秀論文賞の表彰式を行った. 2 日目およびその翌日の 2 日間は, 電子情報通信学会データ工学研究専門委員会および情報処理学会データベースシステム研究会の両研究会を多目的室で同時開催した. 本ワークショップの開催にあたり, 情報理工学部事務室および朱雀キャンパス総務部(キャンパス管理), クレオテックの皆様にはたいへんお世話になった. ここに感謝の意を表する.</p> |

理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|-------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 情報理工学部・教授・小川 均                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 集会名               | The 6th Annual International Workshop on Haptic and Audio Interaction Design 2011                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| 開催日程              | 2011 年 8 月 24 日～8 月 26 日                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 会場                | 立命館大学 BKC (ローム記念館 大会議室(4 階), 資料・展示室(3階))                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| 報告内容              | <p>本ワークショップでは、口頭による発表、および、チュートリアルをローム記念館 4 階の大会議室、ポスター、および、デモ発表をローム記念館 3 階の資料・展示室で行った。</p> <p>24 日に行われたチュートリアルは、3D Division, I-Net Corporation の協力で、約 3 時間、リアルタイム処理とハプティックツールの講義とデモが行われた。参加者は、約 25 名であった。</p> <p>25, 26 日の口頭発表では、招待講演を含め 15 件の発表があった。また、ポスター発表は 12 件であった。正規の参加者は国内外を含め、46 名であった。海外からの参加者が 12 名であり、例年より極端に少なかったが、これは福島原発事故の影響である。(参加辞退理由に述べられていた) 一方、立命館大学の学生、および、大学院生に関しては、聴講者に限り無料参加を認めた。25 日 24 名、26 日 17 名の聴講者があった。</p> <p>本ワークショップでは、種々の利用形態に適合した、触角、および、音響を利用した実践的で経験的に利用されるユーザインタフェースにおける創造的なアイデアや適応事例に関する発表やデモが行われ、活発な議論があった。本ワークショップの口頭発表の内容については、「”Haptic and Audio Interaction Design”, LNCS 6851, Springer (2011)」で公表されている。</p> |

理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|-------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 理工学部・教授・牧川 方昭                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 集会名               | International Symposium on Ubiquitous Healthcare (uHealthcare 2011)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
| 開催日程              | 2011年 9月20日～2011年 9月22日                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 会場                | びわこくさつキャンパス・ラルカディア棟／インテグレーションコア棟                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| 報告内容              | <p>日常的な健康管理技術の確立を求めて、2004 年から日本と韓国で交互に開催している International Symposium on Ubiquitous Healthcare (uHealthcare) の第 8 回シンポジウムを 9 月 20～22 日、立命館大学スポーツ健康産業研究センターならびに日本生体医工学会関西支部主催、滋賀県産業支援プラザ共催でびわこくさつキャンパス・ラルカディア棟／インテグレーションコア棟で開催した。</p> <p>なお、本シンポジウムは第 26 回計測自動制御学会生体生理工学シンポジウムとジョイント開催とし、各々のシンポジウムの参加者は両シンポジウムの聴講を可能とした他、9 月 21 日午後に開催した特別講演「アジアのユビキタスヘルスケア」は 2011 年度第 5 回立命館大学スポーツ・健康イノベーション研究会として、一般に無料公開した。</p> <p>発表は特別講演を含め、日本側の講演 10 件、韓国並びに中国からの講演 16 件を数えた。また、20 日から 21 日かけて台風 15 号が会場付近を通過するとの予想があったにもかかわらず、シンポジウム全体の参加者は 291 名を数えた。</p> <p>一方、生体生理工学シンポジウムには日本の生体医工学分野の著名な研究者が毎年集合するが、講演での質疑応答、ロビーでの立ち話、情報交換会での会話を通じて、韓国、中国のこの分野の研究者とのより密接な連携を築くことができ、所定の成果を上げることができた。</p> <p>今回の uHealthcare2012 は 2012 年 10 月、韓国の Gyeongju(慶州)市で開催されることとなった。</p> <p>下記に開催概要を示す。</p> <p>名称:International Symposium on Ubiquitous Healthcare (uHealthcare 2011)<br/> 主催:立命館大学スポーツ・健康産業研究センター<br/> 共催:日本生体医工学会関西支部、滋賀県産業支援プラザ<br/> 組織(敬称略):</p> <p>実行委員長: 牧川方昭(立命大)、Kwang Suk Park(ソウル大)、田村俊世(千葉大)<br/> 事務局: 岡田志麻(立命大)</p> |

参加内訳:

|         |            |       |
|---------|------------|-------|
| 講演者・司会者 | 韓国, 中国     | 17 名  |
|         | 日本         | 11 名  |
| 参加者     | 本学教員院生・学生等 | 24 名  |
|         | 他大学・公的機関   | 222 名 |
|         | 企業         | 17 名  |
| 計       |            | 291 名 |

プログラム概要:

| September 20(Tue)                                                | September 21(Wed)                              | September 22(Thr)                             |
|------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|-----------------------------------------------|
|                                                                  | 9:05-12:00 2U1                                 | 9:45-11:15 3U1                                |
| <b>Registration</b>                                              | <b>Bioinstrumentation II</b><br>(Oral Session) | <b>Clinical Application</b><br>(Oral Session) |
|                                                                  | Lunch time                                     | <b>Closing remarks</b>                        |
| 13:00 - 13:10<br><b>Welcome address</b>                          | 13:00-14:00 2U2<br><b>Poster Session</b>       |                                               |
| 13:10-14:50 1U1<br><b>Bioinstrumentation I</b><br>(Oral Session) | Coffee break                                   |                                               |
| Coffee break                                                     | 15:00-18:30                                    |                                               |
| 15:40-17:20 1U2<br><b>Signal Processing</b><br>(Oral Session)    | <b>Special lecture</b>                         |                                               |
|                                                                  | Intermission                                   |                                               |
|                                                                  | 18:50-20:00<br><b>Gala party</b>               |                                               |

プログラム詳細:

**Tuesday, September 20**

|                                                                                                                                            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1U1 13:10 - 14:50<br>Bioinstrumentation I<br>Chair: Toshiyo Tamura (Chiba University)<br>Chair: Keun Ho Ryu (Chungbuk National University) |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

1U1-1

**Forehead EOG Signal Measurement for Cap-based Human-Computer Interface**

Jeong Heo (Seoul National University)

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |
|--|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Hyun Jae Baek (Seoul National University)</p> <p>Min Hye Chang (Seoul National University)</p> <p>Kwang Suk Park (Seoul National University)</p> <p>1U1-2</p> <p><b>Automatic Detection of Anthropometric Parameters using 2D Images</b></p> <p>Fozia Rajabdad (Kyung Hee University Global Campus South Korea)</p> <p>Fakhira Anwar (Kyung Hee University Global Campus South Korea)</p> <p>Seung Hun Park (Kyung Hee University Global Campus South Korea)</p> <p>1U1-3</p> <p><b>Measurement method of pulmonary blood flow using electrical impedance tomography</b></p> <p>Satoru Nebuya (School of Allied Health Sciences, Kitasato University)</p> <p>Kei Ebihara (School of Allied Health Sciences, Kitasato University)</p> <p>Makoto Noshiro (School of Allied Health Sciences, Kitasato University)</p> <p>1U1-4</p> <p><b>Development of A New Fitness Index Based on Non-invasive Assessment of Cardiac Reserve Using Electrical Admittance Cardiography</b></p> <p>Shinobu Tanaka (Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University)</p> <p>Tempei Ohkanemasa (Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University)</p> <p>Masamichi Nogawa (Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University)</p> <p>Mitsuhiro Ogawa (Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University)</p> <p>Ken-ichi Yamakoshi (Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University)</p> |
|  | <div> <p>1U2 15:40-17:20</p> <p>Signal Processing</p> <p>Chair: Kazuki Nakajima (University of Toyama)</p> </div> <p>1U2-1</p> <p><b>Development of a New Personal Identification Method During Door-Opening Operations Using a Wii Balance Board</b></p> <p>Kazuki Nakajima (Division of Bioinformation, Faculty of Engineering, University of Toyama)</p> <p>Kiyoshi Sakai (Division of Bioinformation, Faculty of Engineering, University of Toyama)</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Kazuo Sasaki (Division of Bioinformation, Faculty of Engineering, University of Toyama)</p> <p>1U2-2</p> <p><b>Development of the Time and Frequency Domain Analysis Framework for the Heart Rate Variability Analysis</b></p> <p>Dae-Geun Jang (Korea Advanced Institute of Science and Technology)</p> <p>Umar Farooq (Kyunghee University)</p> <p>Jae-Keun Jang (Kyunghee University)</p> <p>Seung-Hun Park (Kyunghee University)</p> <p>Minsoo Hahn (Korea Advanced Institute of Science and Technology)</p> <p>1U2-3</p> <p><b>A Study on the Software Validation Guideline for Smart u-Healthcare Applications</b></p> <p>Jae-Keun Jang (Kyunghee University)</p> <p>Dae-Geun Jang (Korea Advanced Institute of Science and Technology)</p> <p>Seung-Hun Park (Kyunghee University)</p> <p>1U2-4</p> <p><b>Automated System for Exercise Prescription using Evolutionary Computation and Data Mining Technologies</b></p> <p>Fakhira Anwar (Kyung Hee University Global Capmus South Korea)</p> <p>Fozia Rajabdad (Kyung Hee University Global Capmus South Korea)</p> <p>Seung Hun Park (Kyung Hee University GlobalCapmus South Korea)</p> <p><b>Wednesday, September 21</b></p> <div> <p>2U1 9:05-12:00</p> <p>Bioinstrumentation II</p> <p>Chair: Yong Gyu Lim (Sangji University)</p> <p>Chair: Masayuki Nambu (Osaka Electro-Communication University)</p> </div> <p>2U1-1</p> <p><b>Evaluation of Thermal Noise Level in Indirect-contact ECG</b></p> <p>Yong Gyu Lim (Sangji University)</p> <p>2U1-2</p> <p><b>Behavior Momitoring System on WWW Using Flash</b></p> <p>Hiroki Takeuchi (OsakaElectro-Communication University)</p> <p>Masayuki Nambu (Osaka Electro-Communication University)</p> <p>2U1-3</p> <p><b>12-lead ECG Derivation using Four Capacitive EASI-lead Electrodes</b></p> <p>Hyun Jae Baek (Seoul National University)</p> |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|



|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Jeong Heo (Seoul National University)</p> <p>Yong Gye Lim (Sangji University)</p> <p>Kwang Suk Park (Seoul National University)</p> <p>2U1-4</p> <p><b>The Effects of Light Source on Wearable Photoplethysmograph Sensors during Walking</b></p> <p>Yuka Maeda (Graduate School of Engineering, Chiba University, Chiba, Japan)</p> <p>Masaki Sekine (Graduate School of Engineering, Chiba University, Chiba, Japan)</p> <p>Toshiyo Tamura (Graduate School of Engineering, Chiba University, Chiba, Japan)</p> <p>2U1-5</p> <p><b>Sleep Posture Estimation from Capacitively Measured 12-Channel ECG</b></p> <p>Hong Ji Lee (Seoul National University, Republic of Korea)</p> <p>Seung Min Lee (Seoul National University, Republic of Korea)</p> <p>Su Hwan Hwang (Seoul National University, Republic of Korea)</p> <p>Hee Nam Yoon (Seoul National University, Republic of Korea)</p> <p>Kwang Suk Park (Seoul National University, Republic of Korea)</p> <p>2U1-6</p> <p><b>Deep and Light Sleep Estimation with BCG Signal HRV Using Support Vector Machine</b></p> <p>Heenam Yoon (Seoul National University)</p> <p>Gihung Chung (Seoul National University)</p> <p>Suhwan Hwang (Seoul National University)</p> <p>Sojin Lee (Seoul National University Hospital)</p> <p>Do-un Jeong (Seoul National University Hospital)</p> <p>Kwang Suk Park (Seoul National University)</p> <p>2U1-7</p> <p><b>Assessment of Mental Stress by Incoherent Oscillations of Respiratory Sinus Arrhythmia</b></p> <p>Kyuichi Niizeki (Department of Bio-system Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University)</p> <p>Whkana Imano (Department of Bio-system Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Yhmagata University)</p> <p>Naoki Harada (Department of Bio-system Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University)</p> |
|--|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Tadashi Saitoh (Department of Bio-system Engineering, Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University)</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|  | <div> <p>2U2 13:00 - 14:00</p> <p>Poster Session</p> <p>Chair: Shinobu Tanaka (Kanazawa University)</p> </div>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
|  | <p>2U2-1</p> <p><b>A Bio-Textmining System for Protein-Protein Interaction Extraction</b></p> <p>Meijing Li (Database and Bioinformatics Laboratory in Chungbuk National University)</p> <p>Tsendsuren Munkhdalai (Database and Bioinformatics Laboratory in Chungbuk National University)</p> <p>Taewook Kim (Database and Bioinformatics Laboratory in Chungbuk National University)</p> <p>Peipie Li (Database and Bioinformatics Laboratory in Chungbuk National University)</p> <p>Keun Ho Ryu (Database and Bioinformatics Laboratory in Chungbuk National University)</p>                                                                                                                                                                                 |
|  | <p>2U2-2</p> <p><b>Risk Factors of Major Adverse Cardiac Events after Percutaneous Coronary Intervention in Non ST Elevation Myocardial Infarction</b></p> <p>Ho Sun Shon (Database &amp; Bioinformatics laboratory, Chungbuk National University)</p> <p>Kwang Sun Ryu (Database &amp; Bioinformatics laboratory, Chungbuk National University)</p> <p>Soo Ho Park (Database &amp; Bioinformatics laboratory, Chungbuk National University)</p> <p>Keun Ho Ryu (Database &amp; Bioinformatics laboratory, Chungbuk National University)</p> <p>Eun Jong Cha (Department of Mechanical Engineering, Chungbuk National University School of Medicine)</p> <p>Jang Whan Bae (Department of Internal Medicine, Chungbuk National University School of Medicine)</p> |
|  | <p>2U2-3</p> <p><b>Comparison of the Center of Gravity Unrest by Having Visual Suggest or Not</b></p> <p>Nobuko Shichiri (Bukkyo University)</p> <p>Shima Okada (Ritsumeikan University)</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Masaaki Makikawa (Ritsumeikan University)</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p>Special Lecture 15 : 00 – 18 : 30</p> <p>"Ubiquitous Healthcare Technologies of ASIA"</p> <p>Chair: Toshiyo Tamura (Chiba University)</p> </div> <p><b>"Nonintrusive Sleep Monitoring for and Ubiquitous Healthcare"</b></p> <p>Prof. Kwang Suk Park (Seoul University)</p> <p><b>"Clinical Trial Using Ubiquitous Healthcare System in Korea: Smart Care Project for Metabolic Syndrome &amp; Obesity"</b></p> <p>Prof. BeLong Cho (Seoul University)</p> <p><b>"Cardiovascular Health Informatics: Wearable Sensing and Medical Imaging Techniques for the Non-Invasive Identification and Monitoring of Vulnerable Patients"</b></p> <p>Prof. Yuan-Ting Zhang (Chinese University of Hong Kong)</p> <p><b>"Research on Ubiquitous Healthcare: Our Experience"</b></p> <p>Prof. Toshiyo Tamura (Chiba University)</p> <p><b>Thursday, September 22</b></p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px;"> <p>3U1 9:45-11:15</p> <p>Clinical Application</p> <p>Chair: Kwangsuk Park (Seoul National University)</p> <p>Chair: Shima Okada (Ritsumeikan University)</p> </div> <p>3U1-1</p> <p><b>Non-restrictive Monitoring of Swallowing Frequency Using a Throat Microphone</b></p> <p>Hajime Tsujimura (Graduate School of BioMedical Engineering, Osaka Electro-Communication University)</p> <p>Hideaki Doi (Graduate School of BioMedical Engineering, Osaka Electro-Communication University)</p> <p>Masafumi Matsumura (Graduate School of BioMedical Engineering, Osaka Electro-Communication University)</p> <p>3U1-2</p> <p><b>Developing Technology of Remote Consultation Based on Mobile and Evaluation of the Usefulness for Chronic Wound (Pressure Ulcer)</b></p> <p>Chan Young Heo (Seoul National University Bundang Hospital)</p> <p>Ji Eun Kim (Seoul National University Bundang Hospital)</p> <p>3U1-3</p> <p><b>Oxygen Saturation Monitoring Without Direct Skin Contact : Preliminary Study</b></p> |
|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>Jongmin Lee (Seoul National University)</p> <p>Hyunjae Baek (Seoul National University)</p> <p>Kwangsuk Park (Seoul National University)</p> <p>3U1-4</p> <p><b>Aspects of the Gross Movement Monitoring by Video Analysis for Clinical Applications</b></p> <p>Shima Okada (Ritsumeikan University)</p> <p>Masaaki Makikawa (Ritsumeikan University)</p> |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 理工学部・教授・杉本末雄                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
| 集会名               | 第 43 回ストカスティックシステムシンポジウム (SSS'11)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| 開催日程              | 2011 年 10 月 28 日 (金), 29 日 (土)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| 会場                | 10 月 28 日 (金): 琵琶湖汽船ビアンカ船内,<br>10 月 29 日 (土): 立命館大学 BKC エポック立命 21                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| 報告内容              | <p>学術団体の本部は、ほぼ東京一極に集中して設置されているという現状からはいまや稀である、京都に、学会本部が設置されている「システム制御情報学会」が主催、立命館大学が共催となった第 43 回ストカスティックシステムシンポジウム (確率システム理論とその応用シンポジウム (SSS'11)) The 43rd ISCIE International Symposium on Stochastic Systems Theory and Its Applications の国際会議が開催されたので、その概要を報告する。</p> <p>最近、わが国でもアカデミックな会議の国際化が進んでいるが、その意味では、本シンポジウムは毎年開催され、既に 25 年以上の先駆的な実績がある国際会議である。今回は、立命館大学で開催されるということで、滋賀県という地の利を生かして、琵琶湖上の客船「ビアンカ」と立命館大学びわこ・くさつキャンパス(BKC) で講演会が開催された。当シンポジウムは、組織委員長は立命館大学片山徹客員教授 (京都大学名誉教授)、 実行委員長は立命館大学、理工学部杉本末雄教授、事務局は、理工学部久保幸弘准教授という立命館大学にゆかりのある教員で構成され、開催された。参加者総数は 101 名 (一般 64 名, 学生 37 名), 発表論文数は招待講演 2 件, 一般 69 件であった。特に、立命館大学の教員・ポストドク・大学院生による発表が多かった。</p> <p>Proceedings は提出論文を査読した後、2012 年 5 月に刊行される予定である。また、その後、本シンポジウムで採択された Proceedings paper をベースにして、主催団体の論文誌に再投稿、Peer Review の後、2012 年 11 月号から 2013 年 2 月号にかけて、論文誌に継続した特集号が組まれ、論文が出版される予定である。</p> <p>今回のシンポジウムでは、初日は「ビアンカ」の 2 室で、2 日目は会場を立命館大学 BKC, エポックに移し、3 室のパラレルセッションで実施された。講演件数、また海外からの参加者は例年より多く、韓国、中国、米国、イタリアからの参加者による発表があった。</p> <p>立命館大学の資金援助の下で、招待講演は Banks 教授 (N. C. State University) による、Propagation of Uncertainty in Dynamical Systems の題目で、また Kappel 教授 (University of Graz) による Methods of</p> |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
|--|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p><b>Parameter Subset Selections</b> という題目での講演が行われた。それぞれ伊藤型確率微分方程式およびモデリングに関係した講演であり，参加者に深い感銘を与えた。</p> <p>バンケットは，28 日夜に，約 80 名の参加者を得て，ビアンカ船上で開催された。琵琶湖でのクルージングと夜景の美しさ，心華やいた雰囲気と，立命館大学生のアカペラグループの演奏もあり，英語が飛び交う，楽しい懇談・懇親の場となった。</p> <p>以上、当シンポジウムは盛会裏に閉幕し，日本はもとより，世界各国からの参加者に，立命館大学の存在を印象づけたように思われる。</p> |
|--|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|



## 理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|-------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 立命館大学 理工学部 機械工学科 教授 飴山恵                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| 集会名               | 構造用材料国際産学連携・日中ワークショップ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| 開催日程              | 2011年10月29日(土)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| 会場                | 立命館大学 BKC テクノコンプレクス 2階 会議室                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 報告内容              | <p>産業界(日産自動車シニアスタッフ)、ならびに日中間経営学研究者を招聘し、また、北京航空航天大学から2名、国内(大阪大学)から2名、学内から8名の中国人研究者・学生を含めた、合計50名の参加者を集めて、「構造用材料国際産学連携・日中ワークショップ」を以下の通り実施した。</p> <p>&lt;共催&gt;<br/> R-GIRO「自然共生型機械材料システム創成プロジェクト」<br/> 文部科学省科学研究費補助金・新学術領域「バルクナノメタル」<br/> 立命館大学理工学振興会<br/> JST 産学共創基礎基盤研究「ヘテロ構造制御」プロジェクト</p> <p>&lt;開催主旨&gt;<br/> わが国の科学技術分野の今後の発展には、基礎分野の研究の展開・深化を図るだけでなく、グローバルな視点を持ち、異分野への好奇心にあふれた若手人材の育成が必要不可欠である。このような観点から、材料科学、産学連携、異分野交流、若手育成、をキーワードに「構造用材料・日中ワークショップ」を開催した。</p> <p>■日時：2011年10月29日(土)<br/> ■場所：BKC テクノコンプレクス 2階 会議室<br/> ■参加者：参加者50名<br/> [内訳；学外者10名、学内者(学部生:11名、院生:18名、教員・PD:11名)]<br/> ■プログラム：<br/> 12:00-12:10 挨拶：立命館大学総合理工学院院长 坂根政男<br/> 12:10-12:40 「中国市場の変化と製造企業の戦略」 立命館大学経営学部 陳晋<br/> 12:40-13:10 「日本の自動車産業のグローバル化と将来動向」 日産自動車株式会社 中西栄三郎<br/> 13:10-13:30 「ヘテロ構造制御材料の開発とその特性」 立命館大学 理工学部 飴山恵<br/> 13:30-13:50 「The structure of metallic glasses and its behavioral</p> |

|  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  | <p>characteristic」</p> <p>北京航空航天大学材料科学院 Prof. Chaoli Ma</p> <p>14:00-14:20 「Numerical prediction of deformed microstructure subjected to plastic forming and its macroscopic strength」 (独)物質・材料研究機構 (NIMS) 元素戦略材料センター 渡邊育夢</p> <p>14:20-14:40 「Atomistic simulation on strength of bulk nanostructured metals」</p> <p>大阪大学工学研究科、Dr. Guo-Jie J. Gao</p> <p>14:40-15:00 「Cavity sintering behavior during the hot isostatic pressing rejuvenation of turbine blades」 北京航空航天大学材料科学院 Dr. Zhao Zihua</p> <p>15:10-15:30 「Creep mechanism transition in nanocrystalline metals」</p> <p>大阪大学工学研究科、Dr. Yunjiang Wang</p> <p>15:30-15:50 「Fabrication of Tool Steel / Carbon Steel Complex Harmonic Structured Material」、同志社大学工学部 藤原弘</p> <p>15:50-16:10 「Fracture path analysis for metallic materials by means of FRASTA technique」 立命館大学理工学部 上野明</p><br><p>16:20-16:50 若手研究者・院生ポスター・ショートプレゼンテーション</p> <p>16:50-17:40 ポスターセッション</p> <p>17:40-17:55 総合討論・まとめ</p> <p>18:00-20:00 交流会 (BKC 内「シー・キューブ」)</p> |
|--|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

## 理工学研究所シンポジウム・ワークショップ報告書

|                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |
|-------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 代表者<br>(所属・職名・氏名) | 浅野 真司 (立命館大学薬学部・教授)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |
| 集会名               | BKC 脂質メディエーター研究会第3回ワークショップ                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| 開催日程              | 2011年12月17日(土曜日) 12:30~17:55                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| 会場                | クリエーションコア1階 CC101 教室                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
| 報告内容              | <p>前年度に引き続いて第3回のワークショップを開催した。今回のワークショップには、学外参加者9名(講師4名を含む)、学内教員11名、大学院生・学部生33名の計53名の参加があった。学内参加者の所属も、薬学部、生命科学部、スポーツ健康科学部、糖鎖工学研究センターと多くの部署に跨っていた。</p> <p>4名の外部講師(大阪薬科大学講師 藤森功先生、富山大学大学院教授 今中常雄先生、東海大学糖鎖研究所教授 鈴木明身先生、同准教授 樺山一哉先生)とスポーツ健康科学部から橋本健志准教授をお招きし、「脂質メディエーター」をキーワードとしてご講演、話題提供をして頂いた。また、学内からグループメンバーの研究室の若手教員、大学院生が7題のポスター発表を行った。</p> <p>藤森先生はプロスタグランジンによる肥満制御についての研究成果を発表された。今中先生は、ペルオキシソームへの脂肪酸輸送におけるABCトランスポートの働きについて講演された。鈴木明身先生は糖脂質の構造解析から発現制御・機能の解析までを系統的に講演された。樺山先生は脂質ラフトの構造と機能についての先端的な研究成果を発表された。さらに橋本先生は脂肪細胞における脂質分解と運動との関わりについての研究成果を紹介された。各講演の後には、学生を含むフロアとの間で活発な質疑や、意見の交換が行われた。また、口頭発表のあと、学内のグループメンバーの研究室の大学院生がポスター発表、討論を行い、活発な質疑、やりとりが行われた。</p> <p>今回のワークショップは、研究者の間での意見交換、情報交換を行うことに加えて、外部の当該分野における一線の研究者のとの間でのネットワークを形成することが大きな目的であった。その点においても大きな成果が得られた。また、学部生、大学院生がさまざまなレベル(基礎・臨床・創薬)での先端の研究成果に触れる機会を提供すること、自ら研究成果を発表することを通じてモチベーションの向上を目指すことも大きな目的であった。この点でも、学生の反応もよく、外部講師の先生方からポスター発表について高い評価を得た。それらの点で、実りの多いワークショップであった。ワークショップ開催も3回目。「継続は力」で、手前味噌ではあるが部局を越えて教員・学生が集い、議論も深まり、定着、充実感を増した感がある。</p> |

## 2011 年度 立命館大学理工学研究所 学術講演会 (立命館イノベーションフェア 2011)

主催:立命館大学 研究部 リサーチオフィス(BKC)

後援:立命館大学理工学振興会

立命館大学理工学研究所

立命館大学スポーツ健康科学部

文部科学省ポストドクター・インターンシップ推進事業

(イノベーション創出若手研究人材養成)

立命館大学キャリアオフィス

日 時: 2011 年 12 月 9 日(金) 15:00～17:00

会 場: エポック 21 立命 1 階ホール

講 師: 東京大学大学院総合文化研究科・生命環境科学系・  
新領域創成科学研究科 教授  
石井 直方 氏

演 題: 「健康づくりのための筋力トレーニングの重要性」

要 旨: 健康長寿のためには、適度に運動することで全身の活性を維持することが重要であり、その基盤となるものが運動器、とりわけ筋肉といえる。筋肉の機能を維持・増進するために、最も効果的な手段は筋力トレーニングであるが、今回の講演では全身的なストレスが小さく、かつ筋力増強効果の大きな新規トレーニング法の開発と応用について紹介された。

## 理工学研究所の運営

|         |    |       |                   |
|---------|----|-------|-------------------|
| 2011 年度 | 所長 | 牧川 方昭 | 理工学部 ロボティクス学科     |
|         | 主事 | 塩澤 成弘 | スポーツ健康学部 スポーツ健康学科 |
|         | 委員 | 今田 真  | 理工学部 物理科学科        |
| 前期      |    | 高山 茂  | 理工学部 電気電子工学科      |
|         |    | 谷 泰弘  | 理工学部 機械工学科        |
| 後期      |    | 上野 哲  | 理工学部 機械工学科        |
|         |    | 岡本 享久 | 理工学部 環境システム学科     |
|         |    | 大西 淳  | 情報理工学部 情報システム学科   |
|         |    | 西川 郁子 | 情報理工学部 知能情報学科     |
|         |    | 久保 幹  | 生命科学部 生物工学科       |
|         |    | 一川 暢宏 | 薬学部 薬学科           |

---

2012 年 3 月 16 日 印刷

2012 年 3 月 31 日 発行

立命館大学理工学研究所紀要 第 70 号

〒525-8577 滋賀県草津市野路東一丁目 1 番 1 号  
編 集 兼 立 命 館 大 学 理 工 学 研 究 所  
発 行 所 代 表 者 牧 川 方 昭

〒600-8047 京都府京都市下京区松原通麴屋町東入  
石不動之町 677-2  
印 刷 所 (株)田中プリント

---







## CONTENTS of No. 70, 2011

### <Treatise>

1. Relationship between confinement and material losses and generalized quarter-wave stack condition  
in nonhollow-core Bragg fibers ..... Yuta Suzuki and Jun-ichi Sakai ..... 1
2. Quantitative Proteomic Analysis of 3 Developmental Stages in *Caenorhabditis elegans*  
..... Kanami Monobe, Yukako Tohsato, Toshiya Hayano, and Masahiro Ito ..... 13
3. Prediction of EC Numbers for Enzymatic Reactions using Mutual Information and Support Vector Machine  
..... Yoshihiko Matsuta, Masahiro Ito, and Yukako Tohsato ..... 21
4. 3C-SiC (001)-3×2 Reconstructed Surface Structure Analysis by High-resolution Medium Energy  
Ion Scattering Combined with the First Principles Calculations  
... Taishi Matsuda, Hideki Okumura, Masataka Tagami, Kei Mitsuhashi, Anton Viskovskiy, and Yoshiaki Kido ..... 29
5. Development of epoxy resin polishing pads for glass polishing  
..... Junji Murata, Yasuhiro Tani, Ryoichi Hirokawa, Nobuyuki Nomura, and Yu Zhang ..... 41
6. Development of Alternative Abrasives of Cerium Oxide for Glass Polishing  
..... SeungBok Lee, Okiharu Kirino, Yasuhiro Tani, and Junji Murata ..... 51
7. Database of Japanese Agricultural Soil analyzed by SOFIX  
..... Sachie Horii, Toshihide Matsuno, Kenzo Kubota, Yuki Hukuhara, Yoshiki Matsumiya,  
Jun Hirakawa, Bunyu Matsuda, Chikayoshi Kitamura, and Motoki Kubo ..... 63
8. Stochastic Equation on Pseudo-Sphere  
..... Hiroshi Kuratsuji and Masao Matsumoto ..... 73
9. Maximum Output Operation by Equivalently Field Weakening and Optimal Parameters of BLDC Motor  
..... Komatsu Yasuhiro, Syed Abdul Kadir Zawawi, and Yoshihiko Araki ..... 81
10. Coulometric analysis of ethanol oxidation reactions catalyzed by acetic acid bacteria  
..... Kosuke Ueda and Kazuyoshi Takagi ..... 91
11. Abstracts of Research Projects using Institute Experimental Apparatuses ..... 97
12. Other Activities ..... 131