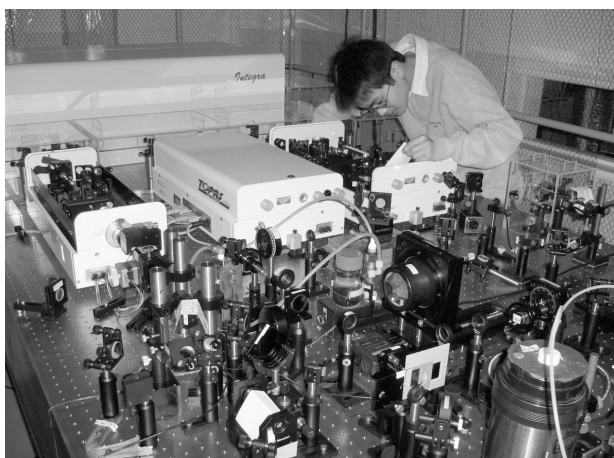
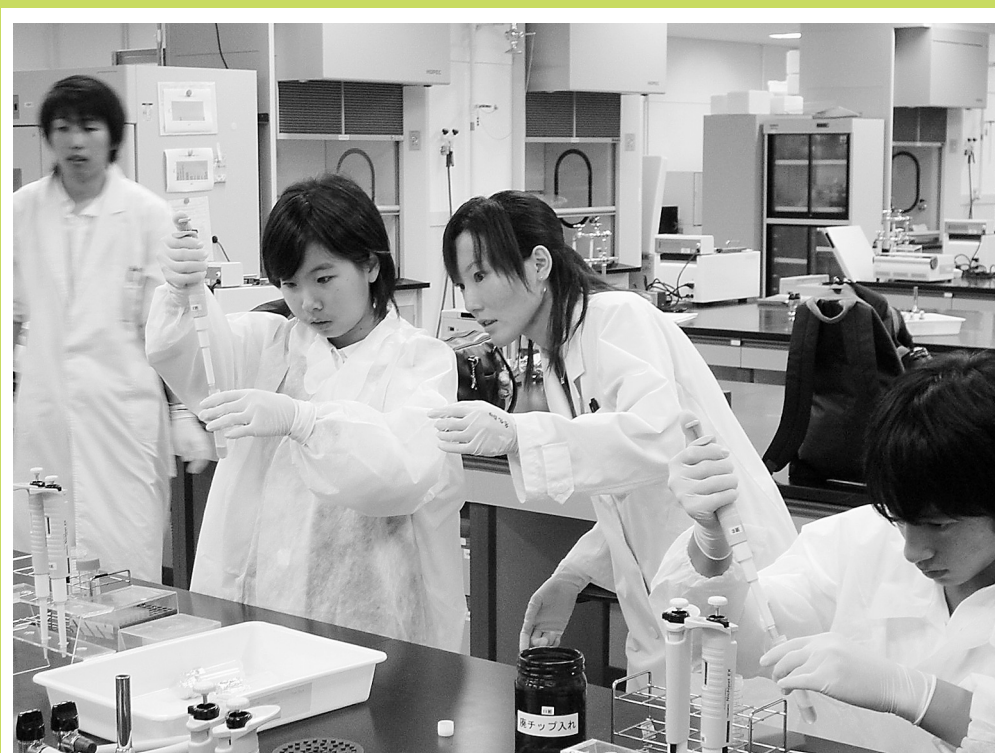


関西学院大学

2006

理工学部

サーキュラー



"Mastery for Service"

目 次

理工学部のさらなる発展をめざして	1
理工学部長 尾崎 幸洋	
2005年度の理工学部及び産連研	2
退任教員紹介	13
豊島 喜則	
新任教員紹介	14
阪上 潔／壺井 基裕	
博士論文紹介	15
修士論文紹介	20
工場・研究所見学記	36
大日本住友製薬会社大阪研究所訪問記 向縄 昌輝	

理工学部さらなる発展をめざして



理工学部長 尾崎 幸洋

理工学部は、物理学科（物理学専攻、数学専攻）、化学科、生命科学科、情報科学科の4学科を擁する本学唯一の理工系学部です。理工学部は、1961年に物理学科と化学科の2学科で創設された理学部を基礎にありますが、21世紀の大きな課題である情報科学と生命科学の分野の拡充をはかるため、2002年4月に情報科学科と生命科学科の2学科を増設し、理工学部として新たな出発をおこないました。それに先立ち、2001年夏に神戸三田キャンパスに最新の設備を持った新校舎を建設し、上ヶ原キャンパスから全面的に移転を行い、理工学部開設に備えました。本年3月には初めての理工学部生を社会に送り出しました。

理工学部の学科・専攻の入学定員は、物理学科物理学専攻75人、数学専攻35人、化学科75人、情報科学科125人、生命科学科50人で、学部全体の入学定員は360人です。理学部は、物理学科、化学科ともに入学定員50人（臨時的定員を含めて65人）という比較的小規模で、家族的な雰囲気を持った学部でした。理工学部は学生数の規模において大きくなりましたが、専任教員も38人から59人に増加し、その上に、ネイティブスピーカーによる英語教育の充実をはかるために7人の英語常勤講師が加わりました。このように、理学部が持っていた恵まれた教育と研究の環境は、理工学部になりましても引き継がれています。

本年3月までに、5080人が理学部を卒業し、理学研究科での修士学位取得者は979人、博士学位取得者は149人を数えています。これらの卒業生は産業界をはじめとして、教育機関、研究機関などで幅広く活躍し、社会で高い評価を得ています。

この理工学研究科を母体として、文部科学省私立大学学術研究高度化推進事業プロジェクトに「ナノ界面創生研究センター」「近赤外環境者タリングシステム研究センター」「光エネルギー変換研究センター」「有機ツール分子研究センター」「ナノバイオテクノロジー研究開発センター」「錯体分子素子研究センター」「ヒューマンメディア研究センター」の7つが採択されています。これらの活動を通して、多くの博士研究員やリサーチ・アシスタントを国内、国外から多数採用し、若手研究者の育成に努めています。さらに同じ兵庫県内にある高輝度光化学研究センター（Spring

8）の活用や理化学研究所・再生科学総合研究センターとの連携を行い、活発な研究活動を行っております。また、企業との受託研究も活発で、大学からの発明申請を積極的に行う教員も増えており、知的財産の創出、さらには製品化に向けての企業との共同開発に取り組んでいます。

理工学部では、進歩の著しい自然科学の分野において、基礎的な知識と柔軟な思考力を身につけ、自分で未知の問題を見だし、自分で解決していく能力を持った創造性豊かな人材の育成を目指しています。それと同時に、本学の建学の精神であるキリスト教主義教育で培われた人間性と倫理観を基盤にして、人類の進歩に貢献していく人材が育っていくことを願っています。

最近では理学部卒業生の半数以上が大学院に進学するようになっており、これからは、今まで以上に大学院の教育と研究の充実を力を入れていく必要があります。理学研究科は1965年4月に開設され、物理学専攻と化学専攻の2専攻で活動してきましたが、今回の理工学部への改組にもない、2004年4月に新しく生命科学専攻を設置し、理工学研究科に名称を変更しました。生命科学専攻は、神戸市にある理化学研究所発生再生科学総合研究センターと連携して大学院の教育と研究をおこなう新しい試みを取り入れています。また本年4月には情報科学専攻の設置と物理学専攻、化学専攻、生命科学専攻の拡充を計画しています。

40数年前に理学部開設の中心的役割を果たされた仁田勇博士は、物理学と化学の間に壁を設けず、自然科学の基礎教育と基礎研究を大切にしながら、しかし応用面をも重視し、常に企業を始めとする社会との繋がりを視野に入れながら理学部創設を推し進められました。そしてその理念が、理学部発展の原動力になり、小規模な学部でありながら、成功を収めることができました。基礎研究と応用研究との境界が明確でなくなり、基礎と応用とを分けて考えることの意味合いが薄れつつある21世紀にあって、理工学部は、理学部がこれまでに成し遂げた実績と伝統を大切にしつつ、基礎と応用とが相互に繋がり、影響しあって発展していく学部でありたいと願っています。理工学部の活動に、ご理解とご支援を賜りますようお願い申し上げます。

2005年度の理工学部及び産連研

1. 理工学部

関西学院大学唯一の自然科学系学部である理工学部が、1960年の創立以来年々教育・研究の成果を着実にあげ、各学会、産業界で高い評価を受けていることは喜ばしいことであります。

2004年4月には生命科学専攻を新設し、研究科の名称も理工学研究科に変更しました。さらに、2006年4月には情報科学専攻の設置と物理学専攻、化学専攻、生命科学専攻の入学定員増をおこない、大学院の充実するための準備を進めています。ここに2005年度の理工学部の歩みをご報告いたします。

• 文部省の私立大学学術高度化推進事業による研究が、昨年度に引き続き行われた。今年度は新たに、ヒューマンメディア研究センターも認可され、計7件となった。これは理工学部の研究が高く評価されたもので、これらの整備事業に伴い多数の博士研究員・リサーチアシスタントを採用し、各研究室において研究活動の活性化に重要な役割をはたし、目覚ましい活躍をしている。

1) オープン・リサーチ・センター整備事業

光エネルギー変換研究センター

(代表) 小山 泰 教授

有機ツール分子研究センター

(代表) 勝村 成雄 教授

近赤外環境モニタリングシステム研究センター

(代表) 尾崎 幸洋 教授

錯体分子素子研究センター

(代表) 御厨 正博 教授

ヒューマンメディア研究センター

(代表) 片寄 晴弘 教授

2) ハイテク・リサーチ・センター整備事業

(代表) 寺内 暉 教授

3) 産学連携事業

(代表) 山崎 洋 教授

• 本学部の教育プログラム「理系のためにデザインした英語教育システム」が、文部科学省から「平成17年度 特色ある大学教育支援プログラム」に採択された。科学技術分野は激しい国際競争下であり、研究活動には、英語による総合的コミュニケーション能力(論文、発表、会話などを通じて、専門分野における自分の考えを伝え、相手の考えを理解することのできる能力)が特に必要とされている。一方、理工系に進学する学生は数学や理科に重点をおいて受験勉強した場合が多く、また入学後も専門教育の負担が大きいため、外国語教育が軽視されがちであった。この矛盾を解消するため、関西学院大学理工学部は、2002年度から全学生を対象に、理系学生のためにデザインされた英語教育システムを導入しました。TOEFL-ITPスコアの飛躍的な向上や学生の英語学習に関する意欲向上など、着実に成果を生みだしている。

• オープン・ラボを7月29日に開催し、約120名の参加者を得た。このプログラムは、高校生・受験生を中心に、中学・高校教員等、多くの人に「自然科学とのふれあい」の機会を提供し、好評を博した。「関学」「理工学部」「神戸三田キャンパス」のPRとして、最適のプログラムとなっている。

また、10月8日には、啓明学院中学校及び関学中学部の生徒を迎え、特別実験授業(オープンラボの中学生版)を行い、参加者に自然科学の楽しさ・素晴らしさを伝えることができた。また、本年度より新たに啓明学院高等学校の生徒を対象に本プログラムの上級編として、年間8回の土曜日を使って「土曜講座」を実施した。

• 本学部、尾崎教授が文部科学大臣表彰科学技術賞を受賞

した。これを記念して、7月16日(土)に講演会「近赤外光—未来を拓く人にやさしい光」を開催した。尾崎教授は近赤外光研究がもたらす可能性について講演した。講演の後、尾崎研究室と近赤外環境モニタリングシステム研究センターの見学会を実施した。

• 客員教員・各種の研究員の受入状況は次の通り。
博士研究員27名、国内客員教員6名、客員教員・客員研究員3名、受託研究員7名、大学院研究員10名、リサーチアシスタント15名

入学者

2005年度大学入学式は4月2日、大学院入学式は4月1日に行われました。

2005年4月の学部入学者は、326名(物理学科104名、化学科59名、生命科学科43名、情報科学科120名)でした。

大学院の入学者は、博士課程前期課程65名(物理学専攻24名、化学専攻28名、生命科学専攻13名)、同後期課程へ11名(物理学専攻2名、化学専攻9名)でした。また、9月には、博士課程前期課程に特別学生(外国人・外国大学卒業)各1名、博士課程後期課程に特別学生(社会人)1名を受け入れました。

卒業生

学部卒業生は、2006年3月卒業生366名(物理学科98名、化学科91名、生命科学科37名、情報科学科140名)。また、大学院博士課程前期課程修了者は、2006年3月修了者49名(物理学専攻25名、化学専攻16名、生命科学専攻8名)でした。これで理工学部が創立以来世に送り出した学士は5,080名、修士は979名になります。

在学者

2006年3月1日現在の在学者数は、学部生1,367名(物理:433名、化学:292名、生命:171名、情報:471名)、大学院生142名(前期課程 物理:49名、化学:47名、生命:22名、後期課程 物理:7名、化学:17名)です。

教員の動き

〈就任〉2005年度には情報科学科を中心に、以下の先生をお迎えしました。

阪上 潔	助教授	〈物理〉
壺井 基裕	専任講師	〈化学〉
中沢 寛光	実験助手	〈物理〉

〈昇任・任用〉2005年度の昇任・任用者は以下の通りです。

玉井 尚登教授	後期課程指導教授	〈物理〉
木下 勉教授	後期課程指導教授	〈化学〉
楠瀬 正昭教授	前期課程指導教授	〈物理〉
金子 忠昭教授	前期課程指導教授	〈物理〉
野田 康夫実験助手	→ 教育技術主事2級	

2. 産連研

2005年度理事会を6月4日に相談役・理事・監事13名のご出席のもとに開催いたしました。2006年度予算ならびに活動方針を審議し、ご承認いただきました。2006年3月現在、228名の個人会員から計1,122口、法人会員として5社から37口の会費をいただき、各種事業に支出しております。

次にその主な内容についてご報告いたします。

(1) 大学院生・卒研究生等の学会での研究発表時の旅費補助 延77名

(2) 学校閲覧用新聞・科学雑誌等の講読

雑誌: 日経サイエンス, パリティ, 現代化学, Newton, 月刊アスキー, 理系への数学

(3) 法人会員(企業名)

神戸天然物化学(株)、(株)島津製作所、(株)シン・ニシ、(株)ニッシン、(株)伯東(株)

2005年度 理工学部業種別求人企業数

(2006. 3. 31 現在)

業 種	求人数	内 定 数								
		物理	学部 修士	化学	学部 修士	生命	学部 修士	情報	学部 修士	
企 業	電気・電子工業	51	11	3 8	2	0 2	1	1 0	2	2 —
	機械・精密工業	56	5	3 2	2	1 1	1	0 1	7	7 —
	化学・製薬・繊維工業	84	4	0 4	22	12 10	11	6 5	1	1 —
	金属・鉄鋼工業	14	0	0 0	2	2 0	0	0 0	0	0 —
	情報・通信産業	93	15	11 4	3	3 0	1	1 0	31	31 —
	商社等販売業	8	1	1 0	0	0 0	0	0 0	4	4 —
	金融・保険業	1	0	0 0	8	8 0	0	0 0	4	4 —
	その他の企業	82	7	5 2	8	7 1	1	1 0	11	11 —
	小 計	389	43		47		15		60	
教 員 等	教 員	6	1	1 0	1	1 0	0	0 0	0	0 —
	公 務 員	9	0	0 0	0	0 0	0	0 0	0	0 —
	小 計	15	1		1		0		0	
合 計	404	44		48		15		60		

学部卒業生の進路状況

(2006. 3. 31 現在)

進 路	2005年度							2002-2004年度			
	物理	化学	生命	情報	計	%	物理	化学	計	%	
企 業	電気・電子工業	3	0	1	2	6	1.6	3	0	3	0.7
	機械・精密工業	3	1	0	7	11	3.0	3	2	5	1.2
	化学・製薬・繊維工業	0	12	6	1	19	5.2	6	31	37	9.0
	金属・製鉄工業	0	2	0	0	2	0.5	0	0	0	0.0
	情報・通信産業	11	3	1	31	46	12.5	31	8	39	9.5
	商社等販売業	1	0	0	4	5	1.4	1	2	3	0.7
	金融・保険業	0	8	0	4	12	3.3	2	4	6	1.5
	その他の企業	5	7	1	11	24	6.5	18	13	31	7.6
小 計	23	33	9	60	125	34.0	64	60	124	30.3	
大 学 院・教員等	関西学院大学	40	33	17	70	160	43.5	74	96	170	41.6
	他 大 学	23	12	9	7	51	13.9	35	21	56	13.7
	進 学 希 望	1	1	1	0	3	0.8	3	5	8	2.0
	小 計	64	46	27	77	214	58.2	112	122	234	57.2
	教 員	1	1	0	0	2	0.5	4	2	6	1.5
	公 務 員	0	0	0	0	0	0.0	5	4	9	2.2
小 計	1	1	0	0	2	0.5	9	6	15	3.7	
その他の進路*	11	11	2	3	27	7.3	14	22	36	8.8	
合 計	99	91	38	140	368	100	199	210	409	100	

* 卒業時進路未定者を含む。

大学院修了者の進路状況

(2006. 3. 31 現在)

進 路	2005年度					2002-2004				
	物理	化学	生命	計	%	物理	化学	計	%	
企 業	電気・電子工業	8	2	0	10	20.4	19	3	22	16.5
	機械・精密工業	2	1	1	4	8.2	10	3	13	9.8
	化学・製薬・繊維工業	4	10	5	19	38.8	1	34	35	26.3
	金属・製鉄工業	0	0	0	0	0.0	0	0	0	0.0
	情報・通信産業	4	0	0	4	8.2	12	3	15	11.3
	商社等販売業	0	0	0	0	0.0	0	2	2	1.5
	金融・保険業	0	0	0	0	0.0	0	1	1	0.8
	その他の企業	2	1	0	3	6.1	3	6	9	6.8
小 計	20	14	6	40	81.6	45	52	97	72.9	
大 学 院・教員等	関西学院大学	3	1	1	5	10.2	6	11	17	12.8
	他 大 学	0	1	0	1	2.0	0	1	1	0.8
	進 学 希 望	0	0	0	0	0.0	0	0	0	0.0
	小 計	3	2	1	6	12.2	6	12	18	13.5
	教 員	0	0	0	0	0.0	2	2	4	3.0
	公 務 員	0	0	0	0	0.0	0	0	0	0.0
小 計	0	0	0	0	0.0	2	2	4	3.0	
その他の進路*	2	0	1	3	6.1	11	3	14	10.5	
合 計	25	16	8	49	100	64	69	133	100	

* 卒業時進路未定者を含む。

受託研究員・博士研究員・専門技術員・リサーチアシスタント・大学院研究員・客員教員・理工学部研究員
 :(氏名、国籍、所属機関、滞在期間、所属研究室、研究テーマ)

研究員種別	氏名	国籍	期間	所属研究室	所属	研究課題
受託研究員	文 暁 謙	中国	2005.4.1 ~ 2006.3.31	金子研	(株)エコトロン	LPE成長技術の実用化の為の共同研究
	山下 桂 司	日本	2005.4.25 ~ 2006.1.25	木下研	姫路エコテック(株) 企業グループグループリーダー	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
	神谷 享子	日本	2005.4.25 ~ 2006.1.25	木下研	姫路エコテック(株) 企業グループ研究員	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
	坂口 友 紀	日本	2005.4.25 ~ 2006.1.25	木下研	姫路エコテック(株) 企業グループ研究員	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
	新原 さなえ	日本	2005.4.25 ~ 2006.1.25	木下研	姫路エコテック(株) 企業グループ研究員	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
	吉 崎 司	日本	2005.4.25 ~ 2006.1.25	木下研	中国電力(株)研究開発部門技術研究センター 生物・化学担当	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
	岩 崎 朋 宏	日本	2005.11.1 ~ 2006.3.31	金子研	岩崎電気(株)企画開発室技術研究所光学システムグループ 主任	SiCイオンアニール技術の検証及び、技術指導
博士研究員	森田 成 昭	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	生体適合性高分子の機能発現機構に関する研究
	橋 本 千 尋	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	赤外分光法による高分子のゾルゲル転移の研究
	佐 藤 春 実	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	赤外分光法とX線回折法によるPoly (hydroxyalkanoate) の熱的挙動の研究
	池羽田 晶文	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	近赤外分光法による水素結合性液体の研究
	Ram Shanker Singh	インド	2005.4.1 ~ 2006.3.31	勝村研	Kyoto Institute of Technology, Venture Laboratory	生物活性天然有機化合物の合成研究
	谷 口 幸 範	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	豊島研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	人工膜上での膜シグナル伝達系の構築と検出法
	Chunyong Li (李 春勇)	中国	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小山研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	Fluorescence Up-conversion Spectroscopy to time-resolve the low-lying singlet states.
	Limin Fu (付 立民)	中国	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小山研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	Photosynthesis by Raman Spectroscopy
	Yanwu Li (李 雁武)	中国	2005.4.1 ~ 2006.2.28	勝村研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	Study on the Higly Stereoselective Asymmetric 6π-Azaelectrocyclization
	Yang Cao (曹 陽)	中国	2005.4.1 ~ 2006.1.15	山田(英)研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	Organic synthesis using flipped sugar (反転糖を用いた有機合成)
	恩 田 弥 生	日本	2005.4.1 ~ 2005.9.30	豊島研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	高等植物における葉緑体遺伝子の転写制御機構
	Ying Zhang (張 穎)	中国	2005.8.5 ~ 2006.3.31	高橋(功)研	Chinese Academy of Sciences, Institute of Chemistry	Vibrational Spectroscopy and X-ray Reflectivity Study on Poly (ethylene 2, 6-naphthalate) Thin Films
	Xiao-Bing Cui (崔 小兵)	中国	2005.4.20 ~ 2006.3.31	矢ヶ崎研	Key Laboratory of Inorganic Synthesis and Preparative Chemistry	Synthesis and reaction of molecular oxides
	内 田 達 也	日本	2005.4.1 ~ 2005.9.30	山口研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	アルツハイマー病関連タンパク質およびNotchシグナル伝達系タンパク質の構造生物学
	吉 岡 大 輔	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	御厨研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	ランタン型二核金属ユニット集積型金属錯体の合成と磁気及び吸着特性
	堅 田 智 久	日本	2005.4.1 ~ 2005.10.31	木下研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	XmamlによるNotchシグナル依存的・非依存的細胞運命決定機構に関する研究
	田 中 祐 二	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	松田研	関西学院大学理工学研究科博士研究員	珪藻の自己組織化機能を用いた人工バイオミネラリゼーション
	Lehui Lu (逯 樂慧)	中国	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	ハンブルグ大学 博士研究員	近赤外励起ラマン分光法のための全ナノ粒子の作製

研究員種別	氏名	国籍	期間	所属研究室	所属	研究課題
	富永幸子	日本	2005.4.1～2006.3.31	鈴木研	関西学院大学 理工学部研究員	細胞接着構造の構築
	東端啓貴	日本	2005.4.1～2006.3.31	藤原研	筑波大学生命環境科学研究科 助手	耐熱性タンパク質を利用したセンサー開発
	Li Wang (莉王)	中国	2005.7.5～2006.3.31	玉井研	Beijing institute of technology, Department of Photo-electronic Engineering	Ultrafast Dynamics of Solar Energy Conversion in Metal or Semiconductor loaded TiO ₂ with Microspectroscopy
	石井琢悟	日本	2005.4.1～2006.3.31	小笠原研	関西学院大学理学研究科 博士研究員	金属イオン多重項間遷移の第一原理クラスター計算および手法の整備
	御前智則	日本	2005.4.1～2006.3.31	田辺研	関西学院大学大学院後期課程修了見込み	革新的Ti-Claisen縮合の開発
	Qingying XUE (薛慶營)	中国	2005.5.29～2006.3.31	藪田研	Department of Mathematics, National 973 Project of China 研究員	Study of Harmonic analysis focused on Littlewood-Paley operators
	二見能資	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	東京農工大学大学院博士後期課程3年生	分光法と量子化学計算法を用いた機能性色素のソルバトクロミズムの分子論的研究
	藤島悟志	日本	2005.4.1～2006.3.31	岡田研	豊橋技術科学大学大学院工学研究科修了見込み	データマイニングの研究
	福田青郎	日本	2005.11.25～2006.3.31	藤原研	京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程	耐熱性酵素の新規反応場に関する研究
専門技術員	Ferdy Samuel Rondonuwu	インドネシア	2005.4.1～2005.9.30	小山研	サティヤワチャナ大学理数学部 助教授	バクテリア光合成系の超高速ラマン分光
	Mikhail G. Brik	ロシア	2005.7.1～2006.3.31	小笠原研	京都大学福井謙一記念研究センター 博士研究員	希土類イオンのエネルギー準位と吸収スペクトルの計算
	野池賢二	日本	2005.5.1～2005.5.31	片寄研	関西学院大学理工学部 受託研究員	ヒューマンメディアに関する研究の推進
リサーチ・アシスタント	北原周	日本	2005.4.1～2006.3.31	高橋(功)研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程2年	高分子表面・界面の構造の研究
	和田秀作	日本	2005.4.1～2006.3.31	御厨研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	ペンダント型環状配位子を用いた新規金属錯体の合成と特性
	Wang Xiaofeng (王晓峰)	中国	2005.4.1～2005.9.30	小山研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程3年	Building new type dye-sensitized solar cell
	Yun Hu (胡芸)	中国	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	Structural Studies of Polymers by Infrared, Raman and Near-infrared Spectroscopy with Chemometrics and Two Dimensional Correlation Spectroscopy
	伊藤基章	日本	2005.4.1～2006.3.31	木下研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程2年	初期発生過程におけるアフリカツメガエルSuppressor of Hairlessの機能解析
	山本哲也	日本	2005.4.1～2006.3.31	勝村研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	多様なスフィンゴリン脂質誘導体の統一的合成法の開発
	新澤英之	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	近赤外線スペクトルを用いたケモメトリックス及び二次元相関分光法による高分子材料の構造解析
	小林豊晴	日本	2005.4.1～2006.3.31	勝村研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程2年	効率的な不斉アザ電子環状反応の実現とアルカロイド天然物の実践的合成法への展開
	岡田康則	日本	2005.4.1～2006.3.31	山田(英)研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	ねじれ舟型の糖を利用した立体選択的グリコシル化反応の開発
	三上由帆	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	振動分光法によるアルコール/極性・無極性溶媒混合溶液の混合状態に関する研究
	Pan Lingyun (潘凌云)	中国	2005.4.1～2006.3.31	玉井研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程2年	半導体複合系における光エネルギー変換の時間分解分光
	飯田聖	日本	2005.4.1～2006.3.31	田辺研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程2年	ケイ素を用いた有用有機反応の開発と特異現象の解明
	永瀬良平	日本	2005.4.1～2006.3.31	田辺研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	TiCl ₄ -アミン反応剤を用いる有用有機反応の開発
	伊藤廉	日本	2005.4.1～2006.3.31	山口研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	ペプチドホルモン前駆体タンパク質のX線結晶構造解析

研究員種別	氏名	国籍	期間	所属研究室	所属	研究課題
	木下祥尚	日本	2005.4.1～2006.3.31	加藤研	関西学院大学大学院理工学研究科後期課程1年	無機基盤上のリン脂質膜物性の研究
大学院研究員	古川剛志	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研		顕微IR・顕微ラマン分光法による生分解性ポリマーの構造解析
	山崎勝由	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研		有機溶媒による酸性条件での顆粒球コロニー形成刺激因子の構造変化
	渡正博	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研		品質管理、プロセス分析のための近赤外分光研究
	東昇	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研		近赤外及び紫外光を用いた水溶液中の微量成分濃度測定方法
	多谷健嗣	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研		時間分解赤外分光法による強誘電性液晶再配向過程の共同運動効果に関する研究
	廣本武史	日本	2005.4.1～2006.3.31	山口研		メタヒドロキソ安息香酸代謝関連タンパク質の構造学的研究
	川崎百弥	日本	2005.4.1～2006.3.31	山崎研		コネキシン43による細胞増殖制機構の解明;Cx43と相互作用するタンパクに注目して
	原田尚志	日本	2005.4.1～2005.9.24	松田研		海洋性珪藻Phaeodactylum tricornutumにおける2つの低CO ₂ 誘導性カーボニックアンヒドラーゼ遺伝子のプロモーター解析
	大又巧也	日本	2005.4.1～2006.3.31	吉光研		超高圧下における固体水素の相転移
	橋本典夫	日本	2005.4.1～2006.3.31	田辺研		光学活性環状アミン類のプロセス化学的合成研究
客員教員	西脇清二	日本	2005.4.1～2006.3.31	生命科学	理化学研究所 神戸研究所 チームリーダー	器官形成学特論
	若山照彦	日本	2005.4.1～2006.3.31	生命科学	理化学研究所 神戸研究所 チームリーダー	ゲノムプログラミング特論
	中村輝	日本	2005.4.1～2006.3.31	生命科学	理化学研究所 神戸研究所 チームリーダー	生殖細胞形成・分化論
	中山潤一	日本	2005.4.1～2006.3.31	生命科学	理化学研究所 神戸研究所 チームリーダー	染色体動態論
	柳田祥三	日本	2005.4.1～2005.9.30	小山研	大阪大学先端科学イノベーションセンター 特任教授	色素増感太陽電池に関する研究、高効率発光体に関する研究、マイクロ波化学に関する研究
	足立裕彦	日本	2005.4.1～2006.3.31	早藤研	京都大学大学院工学研究科 名誉教授	物質中電子状態の理論手法の開発とその材料研究への応用
	Hartati Soetjipto	インドネシア	2005.7.30～2005.8.29	勝村研	サテリアワチャナキリスト教大学物質化学科 準教授	有用なツール分子の開発を目指したインドネシア産植物由来する生物活性化合物の探索
	Jiri DYBAL	チェコ	2005.10.1～2005.10.31	尾崎研	チェコ科学アカデミー高分子化学研究所 分子分光学研究室長	赤外ラマン分光法及び量子化学計算法による生分解性ポリマーの構造と熱挙動の研究
客員研究員	Zhang Chengbao (張成宝)	中国	2005.4.1～2006.3.31	瀬川研	吉林大学 副教授	1.実験物理 2.物理化学
理工学部研究員	下山昌彦	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	兵庫県警察本部科学捜査研究所 主任研究員	ラマン分光法、近赤外分光法及びケモメトリックスを用いた高分子の非破壊分析
	松下晃	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	大阪府警察本部刑事部科学捜査研究所化学研究室 主任研究員	ポリマーブレンドの分光学的研究
	中村浩二	日本	2005.4.1～2006.3.31	尾崎研	岐阜医療技術短期大学衛生技術学科 講師	ラマン分光を用いた生体硬組織の解析、加齢に伴う水晶体たんぱく質の構造変化に関する研究
	森分博紀	日本	2005.4.1～2006.3.31	小笠原研	松下電子部品(株)	磁性材料の理論計算
	池野豪一	日本	2005.4.1～2006.3.31	小笠原研	京都大学大学院後期課程1年	結晶中遷移金属イオンによるX線吸収端近傍微細構造の第一原理計算
	Mikhail G. Brik	ロシア	2005.4.1～2006.3.31	小笠原研	京都大学福井謙一記念研究センター 博士研究員	Theoretical calculation of multiplet structures for rare-earth ions

研究員種別	氏名	国籍	期間	所属研究室	所属	研究課題
	Md. Nazmul Huda	バングラディッシュ	2005.4.1 ~ 2006.3.31	岡田研	バングラディッシュ Rajshahi 大学理工学部情報科学学科講師	データマイニングについての研究
	小笠原 智美	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小笠原研	京都女子大学家政学部食物学科卒	結晶中希土類イオンにおける多重項構造の第一原理計算
	寶 暁鳴	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	上海交通大学 教授	分子の光機能科学及び分光法の研究、光計測及び分析機器の研究
	斎藤 武	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	岡村研	京都府立医科大学 名誉教授	非可換微分幾何学を用いた素粒子論量子ホール系のトポロジー
	小門 陽	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	岡村研	神戸国際大学経済学部 助教授	非可換空間におけるホール効果について
	渡辺 慎	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	プロクターアンドギャンブルファーイーストインク 研究員	高分子材料の近赤外分光法による研究
	松原 美香	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	ヤスマ(株)基礎研究室	近赤外分光法による香辛料、乾燥野菜の品質特性の研究
	田邊 重希子	日本	2005.4.15 ~ 2005.9.30	尾崎研	マギル大学理学部化学科卒業見込み	赤外分光法によるポリマーゲルの構造転移の研究
	藤本 あずみ	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	ポリプラスチック(株)研究開発センター 研究員	液晶ポリマーの耐熱特性解析を目的とした温度変化IR測定による構造解析
	Ferdy Samuel Rondonuwu	インドネシア	2005.4.1 ~ 2005.10.31	小山研	サティヤワチャナ大学理学部 助教授	バクテリア光合成系の超高速ラマン分光
	渡辺 泰堂	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小山研	関西学院大学 名誉教授	カロテノイドの発光分光
	眞野 光徳	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小笠原研	関西学院大学理工学部卒業	窒化物中の希土類イオンにおけるスペクトルの第一原理計算
	山川 眞透	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	岡田研	塩野義製薬 退職	化学構造と生理活性の相関
	本城 秀一	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	山口研	関西学院大学理工学部卒業	Comamonas teststeroni KH122-3S におけるメタヒドロキシン安息香酸水酸化酵素遺伝子の転写調節に関する研究
	吉迫 孝史	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	山口研	関西学院大学理工学部卒業	アフリカツメガエル由来 Mastermind1 の X 線結晶構造解析
	鈴木 仁美	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	田辺研	京都大学 名誉教授	環境調和型有機基礎反応の研究
	新妻 弘崇	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	岡田研	産業技術総合研究所 情報技術研究部門 知的インターフェースグループ 研究員	データマイニングの研究
	伊藤 民武	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	尾崎研	産業技術総合研究所 研究員	表面増強ラマン散乱のメカニズム解明とその最適化
	藤本 隆	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	佐藤研	関西学院大学理工学部卒業	ビニルホスフィンオキシドへの不斉共役付加反応によるヘテロ官能基化の試み
	辻野 孝	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	山崎研	京都光華女子大学短期大学部 助教授	細胞の癌化におけるコネクシンの機能異常メカニズム
	足立 容子	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	壺井研	名古屋大学大学院環境学研究科地球環境科学専攻博士前期課程修了	領家変成帯の熱史
	吉田 雅江	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	小笠原研	大阪電気通信大学大学院工学研究科総合電子工学専攻卒業	真空紫外励起用蛍光体の合成と特性評価
	Adita Sutresno	インドネシア	2005.9.1 ~ 2005.9.30	小山研	サチャ・ワチャナ・キリスト教大学 専任講師	光合成バクテリア由来のカロテノイドの高次電子状態から励起状態ダイナミクス
	中川 典子	日本	2005.4.1 ~ 2006.3.31	木下研	神戸女子大学家政学部卒業	新規蛍光タンパク質及び遺伝子の単離と同定
	李 博岩	中国	2005.9.20 ~ 2006.3.31	尾崎研	中南大学化学化工学院応用化学 博士課程	Development of Chemometric Algorithms and Application to Characterize Spectral variations in Chemical Dynamic Process
	藤島 悟志	日本	2005.10.1 ~ 2006.3.31	岡田研	関西学院大学理工学研究科 博士研究員	データマイニングの研究
	中林 史智	日本	2005.10.1 ~ 2006.3.31	高橋(功)研	関西学院大学理工学研究科 修了	磁性コロイドの界面構造の X 線回折

研究員種別	氏名	国籍	期間	所属研究室	所属	研究課題
	張 建明	中国	2005.10.3～2006.3.31	尾崎研	豊田工大ポストドクトラル研究員	生分解性ポリマーの構造と物性に関する研究
	福田青郎	日本	2005.10.20～2005.11.24	藤原研	京都大学大学院工学研究科合成・生物化学専攻博士後期課程	耐熱性酵素を利用した変性環境下での利用法の開発
	河原崎 兼介	日本	2006.1.1～2006.3.31	高橋(和)研	関西学院大学大学院理学研究科 修了	モバイルエージェントの振る舞いに関する研究
	堅田智久	日本	2006.1.23～2006.3.31	木下研	(株)毛髪クリニックリープ21業務部研究開発課 研究員	脱毛予防、発毛促進剤の開発を目指した不死化細胞の樹立と細胞内遺伝子発現による遺伝子の機能解析

理工学部講演会

国内外の研究者との交流は極めて活発で、国際学会や共同研等で日本あるいは近隣府県に来られた方を積極的に招き、下記のとおり頻繁に実施しました。

日付	講師	所属	演題	備考
2005年 5月25日	関口清俊	大阪大学蛋白研究所	細胞外環境のカスタマイゼーションとマトリオーム	
2005年 6月 8日	早川洋一	佐賀大学農学部応用生物科学科 教授	昆虫サイトカインの構造と多様な生理機能	
2005年 6月13日	谷口吉弘	立命館大学理工学部 教授	圧力変性の分子論—高圧振動分光法による	
2005年 6月25日	西田雄三	山形大学理学部 教授	心の病気と鉄イオン	
2005年 7月 8日	Valery V. Tuchin	サラトフ大学物理学科 教授	"Tissue optics and tissue optical clearing" 生体組織光学—基礎と応用	
2005年 7月 6日	杉山康雄	名古屋大学 助教授	ミトコンドリア遺伝子の発現調節研究の現状と今後	
2005年 7月11日	田中克典	島根大学生物資源科学部生命工学科助教授	ユビキチン類似因子SUMOによるタンパク質翻訳後修飾機構の生物学	
2005年 7月16日	尾崎幸洋	関西学院大学理工学部 教授	文部科学大臣表彰受賞記念講演会「近赤外光—未来を拓く人にやさしい光」	
2005年 9月16日	林茂夫	理化学研究所 CDB	上皮形態形成のダイナミクス:ショウジョウバエを用いた解析	
2005年10月14日	荒巻慎哉	特許庁総務部技術調査課大学等支援室 室長	知的財産の動向	研究推進機構共催
2005年10月20日	五十嵐雅之	北大大学院薬学研究所 教授	スフィンゴ脂質生物学の新しい展開とその応用研究	
2005年10月21日	高橋秀一	武田薬品工業(株)知的財産部権利戦略グループ シニアマネージャー	企業における知財戦略1	研究推進機構共催
2005年10月26日	片桐昌直	大阪教育大学自然研究講座	NPRおよびcytochrom b5 欠損患者のステロイド代謝異常	
2005年10月31日	Lilliane Bokobza	Ecole Supérieure Physique Chimie Industrielle Professor	ポリマーナノコンポジットの構造と機能	
2005年11月 9日	泰洋二	月桂冠(株)総合研究所	麹菌のポストゲノム研究	
2005年11月11日	古谷栄男	古谷国際特許事務所 弁理士	ソフトウェアの知的財産	研究推進機構共催
2005年11月12日	Norbert krause	Professor, Dortmund University	The Golden Gate to Catalysis	
2005年11月18日	徳永良	三菱電機(株)知的財産渉外部 部長	知的財産と係争	研究推進機構共催
2005年11月25日	肥塚裕至	三菱電機(株)情報技術総合研究所 所長	企業における研究開発と知的財産	研究推進機構共催
2005年11月25日	庄司満	東京理科大学工学部 助手	血管新生阻害活性を有する天然物の全合成	
2005年12月 1日	Dr. Peter Geigenberger	Max Planck Institute of Molecular Plant Physiology	Regulation of carbon storage in plants (植物における炭素貯蔵調節)	
2005年12月 2日	樋口直樹	サントリー(株)知的財産部長	企業における知財戦略2	研究推進機構共催
2005年12月 7日	Prof. Dave D. Jameson	Professor, School of Medicine, University of Hawaii	Application of Fluorescence Methodologies to Protein Systems (蛍光分光法のタンパク質への応用)	
2005年12月 8日	堀江一元	東京大学 名誉教授	光励起状態の過渡赤外分光とゲルの顕微光散乱	
2005年12月16日	細川洋一	近畿経済産業局総務企画部企画課 総括係長	知財戦略と日本経済、起業化	研究推進機構共催
2006年 1月31日	小林茂夫	京都大学大学院情報学研究科 教授	脳が作る感覚世界—生体にセンサーはない	

日付	講師	所属	演題	備考
2006年 2月21日	DeWitt L. Summers	Department of Mathematics Florida State University Professor	DNA Topology	
2006年 3月17日	山田 徹	慶應義塾大学理工学部 教授	反応機構解析に基づく不斉ボロヒドリド還元反応の再構築	

研究助成関係

科学研究費補助金内定状況

文部科学省科学研究費の理工学部申請分では、33件（総額 95,280 万円）が内定しました。

詳細は下記のとおりです。

【教員分】

研究代表者			研究種目		研究課題	備考
所属	職	氏名		審査区分		
理工学部	教授	北橋 忠宏	特定領域研究		人間行動とその対象物体との機能に着目した協調的認識機構と認識結果の自然言語表現	
理工学部	教授	澤田 信一	特定領域研究		超短パルスレーザー光を用いた金属超微粒子の非線形光学応答の理論的研究	
理工学部	教授	山田 英俊	特定領域研究		反転糖を含んだエラジタンニンの全合成研究	
理工学部	教授	田辺 陽	特定領域研究		不斉・交差チタン=クライゼン・アルドール反応を利用する特異機能分子の実用合成	
理工学部	教授	玉井 尚登	特定領域研究		固液界面における光反応ダイナミクスの時間分解ニアフィールド分光	
理工学部	教授	勝村 成雄	特定領域研究		アザ電子環状反応を基盤とする実践的アルカロイド構築法の開発	
理工学部	教授	栗田 厚	特定領域研究		高次構造による電子状態と波面の制御を利用した高機能希土類発光体の開発	
理工学部	教授	茨木 俊秀	特定領域研究		情報基盤アルゴリズムとしてのメタヒューリスティクスの研究	
理工学部	教授	岡田 孝	基盤研究A	一般	単塩基多型と医薬品化学構造からの高次元データマイニングによる薬効評価	
理工学部	教授	片寄 晴弘	基盤研究B	一般	音楽系ゲーム実施時の脳活動計測に基づく「没入感」の分類と要因分析	
理工学部	教授	金子 忠昭	基盤研究B	一般	珪藻殻の形状支配因子タンパク質を用いた半導体ナノパターンニング	
理工学部	教授	北村 泰彦	基盤研究B	一般	三次元仮想空間上でのWeb情報統合に関する研究	
理工学部	助教授	千代延 大造	基盤研究C	一般	長距離相互作用をもつ可積分粒子系の統計力学の確率論的研究	
理工学部	教授	鈴木 信太郎	基盤研究C	一般	心筋細胞の接着構造複合体の構築機構に関する研究	
理工学部	教授	勝村 成雄	基盤研究C	一般	不斉アザ電子環状反応を機軸とする実践的アルカロイド合成	
理工学部	教授	山田 英俊	基盤研究C	一般	環反転した糖を含む、あるいは利用した化合物合成	
理工学部	教授	栗田 厚	基盤研究C	一般	光反応によるランダムレーザーの発振モード制御の研究	
理工学部	教授	御厨 正博	基盤研究C	一般	次元性制御に基づく新規分子磁性錯体の創製	
理工学部	教授	豊島 喜則	基盤研究C	一般	葉緑体転写でのσ因子群の選択的プロモータ認識機構の解明と葉緑体分子工場への応用	
理工学部	助教授	山口 宏	基盤研究C	一般	幹細胞分化制御に関わるNotchシグナル伝達系分子群の溶液構造及び高次構造解析	
理工学部	教授	今岡 進	基盤研究C	一般	アラキドン酸エポキシドによる血管増殖因子発現調節機構の解明	
理工学部	助教授	高橋 和子	基盤研究C	一般	空間データの定性的表現およびその推論に関する研究	
理工学部	助教授	山根 英司	基盤研究C	一般	実解析的・複素解析的関数と非線型偏微分方程式論	
理工学部	助教授	長田 典子	基盤研究C	一般	色聴現象の客観的計測-映像と音楽のノンバーバルマッピングの提案-	
理工学部	教授	西谷 滋人	基盤研究C	一般	析出核生成における自由エネルギー変化の第一原理計算	
理工学部	教授	木下 勉	基盤研究C	一般	初期原腸胚の細胞運命を制御するNotchシグナルの役割に関する研究	
理工学部	助教授	藤原 伸介	基盤研究C	一般	超好熱菌の低温適応機構	

研究代表者			研究種目		研 究 課 題	備考
所属	職	氏名		審査区分		
理工学部	教授	片 寄 晴 弘	基盤研究 C	企画調査	事例を利用した非言語メディアデザイン支援に関する研究	
理工学部	教授	玉 井 尚 登	萌芽研究		フォトリソニック結晶を用いた高帯域フェムト秒顕微分光法の研究	
理工学部	教授	宮 西 正 宜	萌芽研究		ユニポテント自己同型群と代数多様体の構造	
理工学部	教授	田 辺 陽	萌芽研究		テトラヘドラル異性からアトロプ異性への不斉変換と軸性不斉化合物合成への応用	
理工学部	専任講師	巳 波 弘 佳	若手研究 B		サーバ間通信を考慮したグラフ・ネットワーク設計・制御に関するアルゴリズムの研究	
理工学部	専任講師	佐 藤 格	若手研究 B		不斉自己増殖する dendritic 高分子の創製	

【研究員・学生分】

研究代表者			研究種目		研 究 課 題	備考
所属	職	氏名		審査区分		
理工学 研究科	博士研究員	池羽田 晶文	若手研究 B		電場変調近赤外分光法による水素結合性液体の構造に関する研究	
理工学 研究科	博士研究員	橋 本 千 尋	若手研究 B		高分子ゲルの自励振動ダイナミクスに伴うサブミリ網目構造の機構解明とその制御	
理工学 研究科	博士研究員	森 田 成 昭	若手研究 B		全反射赤外分光法による生体適合性高分子へのタンパク質吸着のその場追跡	
理工学 研究科	博士研究員	石 井 琢 悟	若手研究 B		光学材料設計へ向けた固体中金属イオンのスペクトル解析及び汎用多電子計算法の整備	

寄付金受け入れ状況

寄付金の受け入れ状況は、下記のとおりでした。

職	氏 名	企 業	寄 付 目 的
教授	勝村	ダイソー(株)研究所	勝村教授の文部科学省オープン・リサーチ・センター事業の研究助成のため
	勝村	ダイソー(株)2004	勝村成雄教授研究室に対する研究助成
	勝村	日本電子(株)	勝村教授研究室に対する研究助成
教授	田辺	住友化学(株)	田辺教授研究室の研究助成のため
	田辺	(株)カネカ	田辺教授への研究助成金
	田辺	住友化学(株)農業化学品研究所	田辺教授研究室の研究助成のため
助教授	小笠原	松下電子部品(株)	小笠原研究室相対論磁性材料理論計算に対する研究助成
	小笠原	山田科学振興財団	非経験的相対論配置間相互作用計算による結晶中の遷移金属イオン・希土類イオンの電子状態解析
	小笠原	パナソニックエレクトロニクスデバイス(株)	小笠原研究室相対論磁性材料理論計算に対する研究助成
専任講師	井坂	(株)長大	高度交通可視化システムに関する研究の助成のため
	井坂	情報ストレージ研究推進機構SRC	井坂元彦専任講師「誤り訂正符号に関する研究」への研究助成
教授	栗田	(財)光科学技術研究振興財団	栗田厚教授に対する研究助成
	栗田	(財)山田科学振興財団	「ランダム媒質中」の光記録効果を利用した新しい光源の研究
教授	多賀	(株)NTTドコモ	多賀登喜雄教授の学術研究奨励のため
	多賀	ノキア・ジャパン(株)	多賀登喜雄教授研究室に対する研究助成
教授	茨木	(株)数理システム	茨木俊秀教授研究室に対する研究助成
	茨木	JFE技研(株)	茨木俊秀教授研究室に対する研究助成
教授	片寄	(財)中山隼雄科学技術文化財団	片寄晴弘教授「名ピアニストの演奏の追体験インターフェースの知育応用と自己表現の愉しみに関する検証」に対する研究助成のため
教授	寺内	シャープ(株)	学術研究「物質の構造的ゆらぎの研究」を助成他
教授	岡田	武田薬品工業(株)	岡田教授研究室に対する研究助成
教授	尾崎	ポーラ化成工業(株)	尾崎研究室の研究助成のため
教授	高橋(功)	(株)富士通研究所	高橋功教授研究室に対する研究助成

職	氏名	企業	寄付目的
教授	山崎	カネディアン・アカデミー テリー・フォックス・ラン	山崎洋教授研究室に対する研究助成
助教授	松田	勸ソルト・サイエンス研究財団	海洋性珪藻Phaeodactylum tricornutumの好塩性機構の解明
助教授	長田	勸電気通信普及財団	長田典子助教授 研究調査助成のため

受託研究等受け入れ状況

受託研究・共同研究の受け入れ状況は、下記のとおりでした。

【受託研究】

職	氏名	企業	研究課題
教授	石浦	大阪産業振興機構	コンパイラ生成技術、デバッグ生成技術に関する開発
教授	今岡	食品A社	発現ベクタートランスファーベクターの解析
	今岡	食品B社	DNA免疫のためのプラスミド構築とそれを用いた抗体の作製
教授	尾崎	電気C社	光学式超小型濃度センサーの研究
	尾崎	電機D社	品質管理、プロセス分析のための近赤外分光基礎研究
	尾崎	化学E社	PHBHのキャラクタリゼーション研究
教授	片寄	科学技術振興機構	認知的音楽理論に基づくデザイン転写と全体総括
教授	加藤知	化学F社	電子線回折による角層細胞間脂質のパッキング構造解析方法の確立
教授	多賀	電気G社	高速伝送無線対応の電波伝搬モデリング技術の研究
教授	田辺	化学H社	独自反応による有用香料合成プロセスの開発
	田辺	化学I社	「化合物(乙が予定する主な化合物の研究・開発番号:MCC-977等)、それらの中間体および周辺化合物の実用的合成法を指向した研究」への助言、指導
	田辺	科学技術振興機構	「水浴媒中での脱水反応」を利用する環境調和型医薬合成
	田辺	情報J社	ポリエチレン・グリコール系材料の合成に関する研究
教授	西谷	金属K社	hcp金属の変形に関する計算機シミュレーション
助教授	藤原	科学技術振興機構	耐熱性酵素を利用したポリイソプレノイドの合成技術の開発
助教授	松田	科学技術振興機構	珪藻殻自己組織化機能を用いた人工バイオミネラリゼーション技術の応用
助教授	山口	L大学	神経幹細胞分化制御タンパク質群の構造解析・脳神経系ペプチドホルモン前駆体タンパク質の構造解析

【共同研究】

職	氏名	企業	研究課題
教授	今岡	化学A社	Epoxyeicosatrienoic acid (EET)のLC-MS/MSを用いた分析定量法検討
	今岡	機器B社	血管培養・試験装置の開発
教授	尾崎	食品C社	振動分光法を用いた蛋白質高次構造解析
	尾崎	産業技術総合研究所	金及び銀を用いたナノ粒子のSEM・TEM解析
	尾崎	繊維D社	FUV-ATRを応用した水の遠紫外分光分析による微量成分濃度測定技術の開発
教授	勝村	化学E社	スフィンゴリン脂質およびその類縁体の合成研究
	勝村	化学F社	効果的な着生阻害有機分子の開発研究
	勝村	化学G社	スフィンゴリン脂質およびその類縁体の合成研究
教授	片寄	製造H社	和太鼓の特性と人体(特に脳)に与える影響・有効性を調査する
教授	金子	半導体I社	薄液LPE成長技術実用化のための要素技術研究開発
	金子	電気J社	イオン注入アニール技術の検証及び技術指導
教授	木下	測量K社	海洋生物からの新規蛍光物質の単離と同定
		電力L社	
教授	栗田	材料M社	新規酸化物質光体の光物性実験と光学スペクトル解析ソフトの開発
教授	小山	物質・材料研究機構	陽極酸化薄膜を利用した新規太陽電池作成に関する研究
教授	多賀	通信N社	車車間通信における周辺車両の遮蔽を考慮した伝搬モデルの開発

職	氏名	企業	研究課題
教授	豊島	地球環境産業技術研究機構	葉緑体シグマ因子SIG 5による転写活性化機構の研究
教授	中津	電気O社	運動制御用デバイス及びモジュールの開発
助教授	藤原	貿易商社P社	光学活性化化合物合成に有用な好熱性細菌由来酵素の開発
助教授	高橋(和)	産業技術総合研究所	空間表現の意味論に関する研究
専任講師	井坂	電気機器Q社	無線伝送方式における符号化技術を用いた通信品質向上に関する研究

退任教員紹介 (2006年3月退任)

理工学部での4年間

豊島喜則



2002年4月に新設の理工学部生命学科に赴任し4年が過ぎようとしています。生命学科の1期生と同時に入学し、卒業していきます。前任校で停年の日まで務めた管理業務から解放され、和気藹々とした仲間にも恵まれているので、心おきなく新しい人生を歩んでいけそうです。いつも古くて狭い都会の建物での研究生生活を余儀なくさされていましたので、神戸三田キャンパスでの生活は、若かった頃アメリカの片田舎で過ごした数年間の研究生生活に戻った気分です。大変楽しいものでした。子供の頃から大学院までを大阪で過ごした後、東京大学、広島大学、京都大学それぞれでの十数年と理工学部での4年を合わせて、40年近くを生命現象に関わる基礎研究に費やしてきたのですが、研究のスタートを切った大学院では物理化学を専攻していましたので、若いころの刷り込みが消えず、最後までなかなか生物学者にはなりきれませんでした。それならばいつそのこと、与えられた最後の機会を少しは世の中に役立てるような応用研究にあてようかと思いつき、それまでの貧しい研究成果を基に『葉緑体工場の開発』という旗印を立てました。

光合成は食物連鎖の原点にあり、「地球の生命維持装置」と言えます。その反応の場は葉緑体で、光をエネルギー源として、いろいろな有機物質を作り出しています。これを応用面から見れば、葉緑体は非常に高い潜在能力を持った一種の光分子工場ということができ、うまく利用すれば、化石燃料のみに頼る現在のエネルギー供給システムの一部を太陽光を利用するシステムに肩代わりさせうる可能性を秘めています。そこで、私たちは植物の葉緑体に外来遺伝子を導入し、内在性の遺伝子には余り影響を与えずに、いろいろな組織で導入遺伝子の発現を自由にコントロールする技術の開発を目指しました。これは葉緑体工場の実用化の上で待ち望まれている技術です。葉緑体遺伝子の転写を

制御する基本的な機構は長年の研究によってようやく明らかにすることができたので、それに基づいて、どのようにすればそれを自由に操れるかの基本方針をやっと掴むことができました。後はこれを実際の植物で試せばいいのですが、残り時間がなくなってしまい、後継者にお任せすることになりました。

もう一つは、ナノバイオテクノロジー研究開発センターに関わるテーマとして『人工膜上での細胞膜シグナル伝達系の構築』に取り組みました。細胞膜の表面にあるレセプターに作用物質が結合するとそのシグナルが細胞内に伝わりますが、この機能を人工膜上で再現させ、それを新薬開発のためのスクリーニングやいわゆる環境ホルモンの検出に役立てようとしたものでした。シグナル誘引物質の受容体へ結合によって引き起こされるシグナル伝達系タンパク群の相対的な構造・位置変化を蛍光共鳴エネルギー移動(FRED)現象を利用して直接検出するシステムを構築しようとしていました。この研究は始めて2年しか経っていませんが、博士研究員の谷口幸範氏と研究室の学生諸君の努力、また、名誉教授の渡辺泰堂先生の装置面でのご支援により、一定の成果を挙げつつあります。今後は同センター長である山崎洋教授の下で、実用化に向けての基礎研究が期限内に完成することを願っており、また何らかのお手伝いできればと思っています。

私の趣味は囲碁とテニスです。時々理工学部の先生方のお誘いに応じてテニスを楽しませて頂き、それが4年間健康で過ごせたことに繋がったのではないかと思います。お相手頂いた方々には大変感謝しています。このようにこの4年間を振り返ってみると私にとっては楽しい思い出ばかりなのですが、一方、理工学部のために私がお役に立てたこと思い出そうとしてもなかなか浮かんできません。遣らざらばたった4年間だったようです。昨日、一昨日2日に亘って生命学科の最初の卒研生の研究成果発表会がありました。37名の発表を聞きましたが、いずれも論旨の明確な発表で、好感の持てるものばかりでした。中にはこのまま学会で発表しても十分通じる内容の濃いものはいくつかあり、先生方の指導の充実振りや学生たちの意気込みが感じられました。4年間での学生たちの成長に私も少しは寄与できたのかなと思いつき、少し気が楽になりました。

最後にこのような感慨を私に抱かせる機会を与えて下さった関西学院大学に心よりお礼を申し上げ、本学特に理工学部の更なる発展を見守りたく思っています。

新任教員紹介 (2005年4月着任)



物理学科 助教授
阪上 潔

私は新任とは言うものの、この4月で関西学院での勤務は17年目になり、このような原稿を書かせていただくのは何となくおかしな気分です。さて、私の前任は渡辺泰堂名誉教授でありまして、渡辺先生は関学理学部のほぼ創設期から在籍され、理学部・理工学部の発展に大変な寄与をされました。そのような先生の後任であるということは大変な名誉であり、身が引き締まる思いであります。ところで私は、17年前にも同じ原稿(当時、この出版物は『産連研サーキュラー』という名称でした。)を書かせて頂きました。この時には、物理だけでなくそれを支えるような基礎的な技術についても積極的に教えていきたいという内容だったと記憶しています。幸運な事に、私の担当いたしました物理学実験では、担当の先生方3名に私を加えた4名で実験を進めており、丁度私の担当の基礎実験のパートでは「エレクトロニクス」や「真空蒸着」という実験を担当する事となっております。当時既に『エレクトロニクス』という講義は姿を消しており、そのような中でこれら

の物理の実験は(理学部にあっても)工学的な要素をもった内容であったと認識しております。また、エレクトロニクスの実験の発展形として、温度の自動制御の実験を導入したこともありました。

さて、今後も同じ方針で学生に接していこうと考えていますが、この17年で学生の方がすっかり変わってしまいました。当時は、物理の1学年に数人は電子回路を知っている学生がいたものですが、現在では皆無です。物理はその基礎的な側面が強調される一方で、実際に物理学科あるいは物理学研究科の卒業生が技術者の道を選択するケースは少なくありません。しかし、このような幅広い知識を学生時代に持たせるだけで、たとえば卒業研究や修士における研究での実験の方法も広がりますし、場合によっては興味ある分野が広がることで職業などに対するモチベーションの向上も期待できます。

さて、現在私が興味をもっているテーマは、金属や酸化物をはじめとする種々のマテリアルを原子スケールで人工的に配列させ、その構造が生み出す特異な物性を観測し、あるいは人工的な構造を通して物性を眺め直そうというものです。これらの研究は一種の物質探査に近いものがありますし、前もって新奇な物性が予想できないケースが多いので、今後シミュレーション等を積極的に取り入れていきたいと考えています。



化学科 専任講師
壺井 基裕

2005年4月に着任いたしました。私は昨年まで、大学院も含めて合計10年間「学生」として大学にいましたが、今年度からは「教員」として大学と関わることになりました。立場の違いに戸惑いながらも、一年間があつという間に過ぎてしまいました。

私の専門は岩石学で、特に花崗岩を対象に研究を行っています。御影石の名で有名な花崗岩は、大陸地殻を構成する主要な岩石です。この見た目にも美しい花崗岩ですが、太陽系の惑星の中では、地球にしか大量に存在していません。私はこの花崗岩をターゲットに様々な分析化学の研究手法を用いて、その成因を探っています。例えば、岩石に含まれる微量な同位体から岩石の年代を測定したり、化学分析から起源物質の推定などを行っています。大学の近くにも六甲山をはじめとした花崗岩が分布しており、格好の研究フィールドです。化学科ではフィールドワークを伴う研究室は他にありませんので、最初、研究室に配属された

4年生は、その研究スタイルに戸惑うことも多いようです。しかし、しだいに技術を習得し、秋を過ぎる頃には一人前に野外調査をし、ハンマーを振って岩石を採取することができるようになります。

ところで、理学のうち、数学、物理学、化学、生物学は多くの大学で教育されています。しかし、地球科学(地学)を勉強することができる大学は少なく、その重要性がなかなか理解されていないように感じます。また、高等学校においても理科で地学を開講している学校はほとんどありません。私も高等学校では理系を希望する生徒は(地球科学を志望する生徒も同様に)「物理」、「化学」の基礎を学習することが大切だと考えています。しかし、大学においてまで「地学」を学習しなければ、その知識は中学校の段階で終わってしまいます。高等学校で勉強していないからこそ、大学における教養としての基礎的な「地学」の授業は重要であると思います。地球科学は理学の中でも影の薄い学問分野ですが、身近におこる気象、災害、地球環境問題をはじめ、日常生活にも密接に関連しており、その重要性は大きいと思います。

最後に、私は伝統ある関西学院大学理工学部の一員となれたことに感謝し、よりいっそう教育と研究に努力したいと考えております。どうぞ、よろしくお願いいたします。

博士論文紹介

X線反射率法を用いた不安定なポリスチレン超薄膜に現れる構造の研究

高橋功研究室 北原 周

本研究は高分子超薄膜の形態とその安定性を研究した。試料には Si 基板上に汎用プラスチックの 1 種であるポリスチレンをわずか 1 分子層程度基板上に形成したものを、X線回折によって形態評価を行った。今までに無い新しい高分子の製膜法と、その薄膜形成過程をまとめた。

本研究で用いた高分子であるポリスチレン (PS) は直鎖状のコンフィグレーション (1 次構造) を有しており、結晶化することは無く、バルクではランダムコイル状態である。重合度によって、自身の大きさを特徴付ける慣性半径は大きくなる。本研究で用いた試料の慣性半径は 20 から 200Å 程度である。

本研究で考案する製膜法は、慣性半径よりも十分に小さい薄膜を溶媒フリーな環境で Si 基板上に作製できる方法である。作り方は、基板上で PS をガラス転移温度 (~370K) 以上でアニールし、冷却後基板上に張り付いている PS の塊を取り除く。しかし、PS 塊を取り除いてもなお基板には微量な PS が膜状態で残る。この超薄膜を非破壊・非接触の *in situ* 測定で構造を評価するために X線反射率法を用いた。実験は放射光施設、KEK-Photon Factory、を利用して、そこでの実験結果とモデルフィットによって、Å オーダーの微細な構造決定を可能にした。

本研究で用いた PS 分子の製膜直後の注目すべき 2 つの特徴は、バルクに比べて大きな自由体積を有していて、容易に形態が変わる不安定な吸着構造である点および、バルク熔融状態を基準とすると 5-6 割程度と基板への被覆率が低い点である。この試料を昇温変化させると、この大きな自由体積のために、ガラス転移点以下の低温からも、分子鎖は容易に形態変化 (分子鎖の再配列) が可能である。また同時に、本製膜法では PS 分子鎖は基板鉛直方向に引き伸ばされた状態にある。昇温によって、これら引き伸ばされた分子鎖は収縮し、基板へ吸着するため低かった被覆率は温度の増加に伴って高くなる。被覆率はガラス転移温度以上、400K までの昇温に対して比例的に増加し、400K からの急冷後には 9 割にも達した。

従来のスピコーティングを用いた製膜法による PS 薄膜は 100Å 程度の薄膜化により、Si 基板上では面内の分子鎖の収縮により dewetting することが知られている。しかし、本試料においては基板への吸着、すなわち薄膜面内の収縮が優先的に起こり、薄膜面内の収縮過程はほとんど確認できなかった。またこの薄膜は、分子量にほとんど寄らず昇温後に膜厚は 20Å 程度で極めて薄く、熱に対し安定な薄膜であった。製膜行程を溶媒フリーなドライ工程に

することで高分子薄膜の安定化が可能であることが分かった。さらに、ガラス転移等の温度に関する特異性は認められなかった。その原因として、基板への吸着が強く、1 分子内の多くの分子鎖が基板に吸着しているため分子運動が制限され、ガラスとしての物性や高分子のバルク物性が凍結することを提唱する。本研究のような不安定な高分子薄膜の微細な形態変化の測定は、他の解析手法では困難であり、非破壊・非接触の X線回折の *in situ* 測定で初めて明らかにされた。

含窒素医薬化合物の環境調和型プロセス化学研究

田辺研究室 橋本典夫

医薬品における有機合成化学は、その方向性から一般に二つに分けることが出来る。すなわち、シード創出を目標とする創薬研究を支えるメディシナルケミストリーおよび医薬品の製造方法を検討するプロセスケミストリーである。この両者は車の両輪と例えられるが、前者が産みの親なら後者は育ての親と言え、ともに不可欠な研究として医療に貢献している。ところで後者においては、非常に有効な医薬であっても、目標の製造コストの費用対効果をクリアできず開発を中止する場合、ヒトに投与される原薬の品質を一定レベル以上に確保できず開発に長期の時間がかかる場合がある。

本論文はプロセスケミストリーに関する新規な方法を提出したものである。プロセスケミストリーは、医薬品製造の基本概念である GMP (Good Manufacturing Practice) や、化審法、安衛法などのレギュレーションにも支配される実践化学でもある。本論文は 3 章からなるが、いずれも既知の反応をプロセス化学の観点から改良を加えることから出発し、その過程で含窒素医薬化合物の環境調和型プロセス化学的に新規な有機合成法を見出したものである。

本学位論文は、第 1 章 4 節、第 2 章 3 節、第 2 章 4 節で構成される。

第 1 章は、酢酸エチル - 水の二層系での OXONE® を利用する環境調和型酸化反応に関する。これまでの汎用酸化法として *m*-CPBA (*m*-クロロ過安息香酸) を酸化剤としてジクロロメタン溶媒を用いるものがある。しかし、プロセス化学の観点から、*m*-CPBA は不安定な酸化剤であり消防法において危険物第五類に属する。また、ジクロロメタンは環境汚染物質で VOC (Volatile Organic Compound) の代表物質である。これらの問題を解決する一つの方法として、著者は安定な酸化剤 OXONE® と酢酸エチル - 水の二層系溶媒へ代替する方法を見出した。対象となる酸化法

としてスルフィドの SO 酸化、SO₂ 酸化、および芳香族オレフィンのエポキシ化反応の有用酸化反応に適用した。特に SO₂ 化反応では *m*-CPBA 以上の取率を与える方法を見出し、環境に優しい酸化条件を提供できた。

第 2 章は、環境調和型の不斉 Aza-Diels Alder 反応に関する。光学活性二環性プロリン誘導体は、そのものの重要性だけでなく、医薬中間体として汎用される光学活性プロリンアナログに導くことが可能で、一般に要請が高い化合物である。これまで光学活性二環性プロリンの合成法として、不斉 Aza-Diels Alder 反応を用いる合理的な方法がある。しかし、プロセス化学的に幾つかの問題点があった。著者が開発した方法は以下の特徴を有す。すなわち、(1) 従来使用されていた環境汚染物質である CF₃CH₂OH や TFA などの含フッ素化合物を完全に回避した。(2) 従来報告されていた類縁化合物の絶対立体配置の訂正も行うことが出来た。(3) 100 kg の製造を実現した。ここで得られた化合物は、不斉還元触媒として有名な CBS (Corey-Bakshi-Shibata) 触媒類縁体の開発研究や神経保護や再生作用を有する免疫抑制剤タクロリムスの FKBP12 リガンドの最適化研究にも使用されており、これらの研究分野への貢献も期待できる。

なお、このタクロリムスは、国際的に画期的な最近の新薬として有名であり、TV の CM でも報道されている。

第 3 章は、環状 β-アミノ酸の環境調和型合成法の開発に関する。光学活性環状 β-アミノ酸の一つであるホモプロリンエステルとホモピペコリン酸エステルは、医薬や生理活性天然物のフラグメントとして多く存在する。創薬においても一つのユニットとして導入されることが多い。しかし、比較的簡単な構造であるにもかかわらず、その実用的な合成法は、高価な試薬や煩雑な操作、さらに保護・脱保護などを含む多段階を必要とした。著者は、これらの化合物の実用的製造法を開発した。すなわち、従来法にない独自の 5, 6 員環の環形成反応や高立体選択的不斉還元、さらに最近開発された交差型 Ti-クライゼン縮合などの効率的方法を組み込んでおり、既存法に比べると環境に優しい廃棄物の少ない安価な製造法を提供している。

このようなプロセス化学的合成は、実用的な操作性、安全性、経済性、環境負荷低減を迫及したものである。これらは今後さらに時代とともに発展し続けると予想される。

なお、筆者の重要な参考となる業績として、以下の内容が挙げられる。

- (1) 抗真菌剤ファンガード®のプロセス開発による医療への貢献：2005 年度有機合成化学協会技術賞
- (2) TMS ジアゾメタンの開発：筆者が名市大薬学部修士課程 (塩入孝之教授の指導) の研究であり、有機合成化学分野で広く利用され、もはや引用されない論文として普及した。

海洋性珪藻 *Phaeodactylum tricornutum* に おける CO₂ 感知の分子機構の解明

松田研究室 原田 尚志

1995 年以降の衛星観測と大規模な海洋調査により、海洋性珪藻類は地球上の生物学的 CO₂ 固定の 25% を担う、環境生理学的に非常に重要な藻類であることが明らかになった。海洋性珪藻類が持つ、無機炭素を積極的に取り込み蓄積する機構 (CCM)、及び生育環境中の CO₂ 濃度に応答して CCM を制御する機構 (CO₂ 感知機構) は、この高い一次生産能力を保つための重要な機能である。本論文では CCM の重要な構成因子でありその発現が環境 CO₂ 濃度によって調節される典型的な分子であるカーボニックアンヒドラーゼ (CA) をモデルとして、海洋性珪藻 *Phaeodactylum tricornutum* における CO₂ 感知の分子機構の解明を試みている。

(1) まず、新規 CA 遺伝子 *ptca2* を同定し、この遺伝子の発現や局在解析、及び *ptca1* との比較を行うことで、2 つの CA の CCM における機能について考察している。PtCA2 は PtCA1 と同様に、N 末端 19 アミノ酸残基からなる ER 移行シグナル配列を持ち、葉緑体のガートルメラに顆粒状に局在することが分かった。*ptca2* は高 CO₂ においてもある程度構成的な発現が見られ、低 CO₂ で 3.5 倍程度蓄積量が増加した。

(2) さらに 2 つの *ptca* 遺伝子のプロモーター配列の単離、*ptca1* プロモーターを中心としたレポーター解析による CO₂ 応答領域の同定、及び cAMP を介した CO₂ と光のシグナル伝達系について考察した。*ptca1* プロモーター領域解析のために、転写開始点より上流約 1.3 kbp から 30 bp まで段階的に削除した断片を、GUS レポーター遺伝子に連結したプロモーター解析用コンストラクトを細胞に導入し、レポーターアッセイを行った。転写開始点より上流 1.3 kbp から 70 bp までを削除した場合は顕著な CO₂ 応答性が見られたが、30 bp まで削除すると CO₂ 応答性が完全に消失した。従って転写開始点より上流 70 bp から 30 bp までの領域が、CO₂ に応答して転写制御を行うために必須であると結論した。この領域をシスエレメントデータベースで検索したところ、哺乳類で cAMP 応答に関与している 2 つの cAMP 応答エレメント (CRE) 及び 1 つの p300 結合エレメント様の配列を含むことが分かった。このうち、前半の CRE (CRE1) または p300 結合エレメントのどちらかに変異がある場合では、高 CO₂ においても GUS 発現が明らかに脱抑制される傾向を示し、さらに CO₂ 応答性が弱くなる傾向を示した。同様の現象は、最小プロモーター領域を TATA 型のヒトサイトメガロウイルス最小プロモーターに繋ぎ変えた場合でも確認された。このことから、CRE1 と p300 結合エレメントの少なくとも 2 つのエレメントが、高 CO₂ 環境で *ptca1* の転写を抑制す

る為に必要なことが分かった。CRE1の機能にcAMPが関与しているか否かについて、cAMPのアナログ及び細胞内のcAMP蓄積を促す薬剤を用いて検討したところ、これらの薬剤が濃度依存的に低CO₂環境におけるGUS発現を抑制することから、細胞内のcAMP濃度の上昇が高CO₂環境下における*ptca1*の転写抑制を引き起こしている可能性が示された。事実、*ptca1*プロモーター中のCRE1を削除した場合、レポーター遺伝子の発現はこれらの薬剤に対してほぼ完全に不感受性となった。海洋表層におけるCO₂濃度の変動(上昇)について、独立栄養生物の応答の仕組みはこれまで全く未知であったが、そこにはcAMPによるCO₂シグナルの伝達系が介在していることが分かった。

Development of Calibration Models in Polymer Process Monitoring by Near-Infrared Spectroscopy and Chemometrics

尾崎研究室 渡 正博

はじめに

サンプルに照射した光のうち、特定の周波数(波長)が分子の共振周波数で吸収されるのが近赤外分光(波長範囲:0.7~2.5 μ m)の基礎的な原理である。近赤外分光法は最近、物理化学、分析化学、高分子化学、生物医学など幅広い分野で活発に用いられるようになってきた。その一つの理由は、近赤外域で観測される倍音、結合音によるバンドが赤外域(2.5~25 μ m)に観測される基本音によるバンド以上に情報を含んでいる場合があるからである。近赤外領域の吸収は、一般的に赤外域の吸収に比較し吸収ピークが広く複雑に重なり合っている。そのために近赤外スペクトルの解析は通常それほど容易なものではない。そこで近赤外スペクトルから情報を抽出するためにしばしばいろいろな多変量解析法(ケモメトリックス法)が用いられる。本論文は、溶融高分子化合物の近赤外スペクトルの解析、そのスペクトルから物理的、化学的性質を予測するケモメトリックス法を使用した検量モデルを作成するための新しいスペクトル前処理法の提案、検量モデルの物理/化学的意味の検討に関するものである。

論文の要旨

本論文は6つの章で構成されている。

第1章は、近赤外分光法-ケモメトリックス法による直鎖状低密度ポリエチレン(Linear Low-Density Polyethylene; LLDPE)の密度予測に関するものである。密度予測の基礎として固体と溶融状態LLDPEの近赤外スペクトルバンドの帰属を試みた。また、モノマーの種類によるLLDPEの近赤外スペクトルの相違について検討した。さらに結晶状態によるバンドとアモルファス状態によ

るバンドの区別を行った。これらの基礎に基づき、Partial Least Squares (PLS)法を用いて検量モデルを作成し、その妥当性をスペクトル解析の結果と比較し検討した。又検量モデルが、実験室における測定とオンラインプロセスにおける測定のいずれにおいても十分な精度をもつことを示した。

第2章では、近赤外分光法-ケモメトリックス法によるポリプロピレン(Polypropylene; PP)中のエチレン濃度の定量分析について検討した。プロピレンとエチレンの共重合体は、構造によりランダムPP(RPP)とブロックPP(BPP)に大別される。RPPとBPPの近赤外スペクトルバンドの帰属について最初に検討し、つぎに固体と溶融スペクトルの違いについて調べた。その上でRPPとBPP共通のエチレン濃度測定用の検量モデル作成を試みたが、結果は共通の検量モデルが十分な精度をもたないことを示した。ケモメトリックスを使用した解析からその原因がRPPとBPPの近赤外スペクトルのエチレン濃度に関するモル吸光係数が異なる点にあると考え、差スペクトルを用いた新しいスペクトル変換法を提案し、RPPとBPPの間で検量モデルの変換が可能であることを示した。

第3章では、試料温度変化がRPPとBPPのエチレン濃度予測結果に与える影響について調べた。ケモメトリックスと差スペクトルを用いた解析結果から、予測結果の誤差の要因が、試料の温度変化に基づく密度変化に起因する相対的な光路長の変化であることがわかった。温度補正方法としては、MSC(Multiplicative Signal Correction)を用いたスペクトルの前処理、また差スペクトルを利用した方法が有効であることを示した。

第4章は、近赤外分光法とケモメトリックス法によるエチレンビニルアセテート(EVA)中のビニルアセテート(VA)含量予測のための検量モデル作成に関するものである。ここではとくに波数シフトによる検量モデルの改良について検討した。EVAの近赤外スペクトルを詳細に調べ、VA濃度に依存して多くのバンドがシフトすることを、そしてその大きさや向きはバンドによって異なることを見出した。この原因を追求するとともに、ピークシフトを利用する新しい検量モデルを提案した。

第5章では、PPのエチレン濃度測定を例にとり近赤外分光システムの検量線の移設について議論した。ここでは波数シフトと光路長を考慮したスペクトル変換法を提案し、この方法を用いれば一種類の試料を利用して精度の高い検量線補正ができることを示した。

第6章では、ポリマー試料を入れる容器の形状、大きさ等のパラツキが検量モデル作成に与える影響について報告した。ここでは検量モデル補正のためにModified MSCと名付けた新しいケモメトリックスアルゴリズムを提案した。

まとめ

高分子化合物の近赤外スペクトル解析、スペクトル検量

のための新しいケモメトリックスアルゴリズム、スペクトル前処理法の提案と、それらの方法を用いた高分子の物理化学的性質の予測に関する検討と実証を行った。本論文で提案した検量モデル作成法やケモメトリックスアルゴリズムが近赤外分光法のみならず、赤外、ラマン分光法、その他幅広い分光法一般に適用可能であり、扱う問題も溶融高分子のみならず、様々な物質の様々な分析化学的問題に用いることが可能である。

Dye-Sensitized Solar Cells Based on Principles and Materials of Photosynthesis

Koyama Lab. XiaoFeng Wang

Society is becoming increasingly aware that reserves of fossil fuels are finite and that their use has serious environmental side effects. This realization has encouraged the evaluation of the use of 'cleaner', renewable sources of energy such as solar, wind or tidal power. Solar cells are potentially very attractive candidates as alternative energy sources; their potential can be readily appreciated when it is realized that the amount of solar energy that strikes the surface of the Earth every minute is greater than the total amount of energy that the world's population consumes in a year. Conventional solar cells transducer light energy into electricity by exploiting the photovoltaic effect that exists at some semiconductor junctions (most current commercial photovoltaic cells are based on silicon). Typical efficiencies are 8-11%, while the capital costs of construction and installation of wafer based crystalline-silicon solar cells are very expensive.

In contrast to these silicon-based solar cells, the dye-sensitized solar cells (DSSCs) based on principles that come from photosynthesis, have been attracting great interests during the last 15 years. The DSSC has a lower technology content than the silicon cells and is therefore much cheaper to produce. Abundant proposals and trials, on the development of dye sensitizer, the nanocrystalline semiconductor film, and the redox component in electrolyte, have been made to improve the performance of this device. The present record of over 11% for the photo energy-to-electricity conversion efficiency (conversion efficiency) for DSSC has been achieved by employing a Ru-complex N719. The electron transfer processes in DSSCs, however, remain unchanged during the long term development, and therefore, they become the key point in the further developments to be improved.

This Ph.D thesis is in a series of attempts to develop new titania-based Grätzel-type dye-sensitized solar cells using photosynthetic pigments, i.e., carotenoids (Cars) and chlorophylls (Chls). The performance of DSSCs and the physical-chemistry background to determine the photo-current and the solar energy-to-electricity conversion efficiency (abbreviated as 'conversion efficiency η ') can be summarized as follows: First, we tried to use Car derivatives as sensitizers that can eject electron upon photo-excitation. (1) DSSCs were fabricated by the use of retinoic acid (RA) and carotenoic acids (CAs) having the number of conjugated double bonds, $n = 5-13$. The incident photon-to-current conversion efficiency (IPCE), the photo-current density (J_{sc}) and conversion efficiency (η) exhibited the highest values at $n = 7$, and then decreased toward both sides. The IPCE, J_{sc} and η values reached $\sim 50\%$, $5 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ and $\sim 1.7\%$. The effects of dilution of CA7 with deoxycholic acid were also examined; the apparent maximum values were obtained by lowering the dye concentration to 70%. The above parameters *per unit concentration* progressively increased toward the lowest concentration approximately 9 times. The result was ascribed to the formation of 'isolated excitation' that is free from *singlet-triplet annihilation*.

(2) (Xiang et al. JPCB 109 (2005)) In order to reveal the physical-chemistry background of the performance of the DSSCs, we examined the RA and CAs bound to TiO₂ nanoparticles in suspension by means of subpicosecond and microsecond time-resolved absorption spectroscopy: The electron-injection efficiencies were determined, by the use of the relevant time constants determined by singular-value decomposition (SVD) and global fitting of the sub-ps time-resolved spectral data metrics, to be in the following order: RA5 \approx CA6 < CA7 > CA8 > CA9 > CA11. CA7 exhibited the electron-injection efficiency as high as 98%, the η value in RA5 and CA6 being 92%. The SVD and global-fitting analyses of the sub- μ s data revealed a new scheme, which includes the formation of the radical cation (D_0^{*+})-triplet (T_1) complex followed by transformation to both the D_0^{*+} and T_1 states. Consistent with the energy gap between the conduction-band edge and the T_1 level, the generation of the T_1 state (or in other words, charge recombination) increased in the order, CA7 < CA6 < RA5, explaining the decline of DSSC performance toward RA5. The efficient generation of the T_1 state even in CA7, causing the singlet-triplet annihilation, has been evidenced.

(3) The idea of singlet-triplet annihilation was further confirmed by comparing the effects of lowering dye concentration or light intensity among four polyene dyes having different transition dipole moments, or in other words, different tendency of aggregate formation. They

include ϕ -6-CA, MeO- ϕ -6-CA, (MeO)₃- ϕ -6-CA and Me₂N- ϕ -6-CA, i.e., CA consisting of benzene ring and 6 conjugated double bonds, to which none or a different electron-donating group is attached. In the dye having the largest transition dipole (Me₂N- ϕ -6-CA), an aggregate was readily formed through dispersive interaction, and the photo-current was increased when the dye concentration or the light intensity was lowered. This was ascribed to the suppression of the single-triplet annihilation reaction. In the dye having the smallest transition dipole, there was no sign of aggregate formation, and the photo-current was decreased when the dye concentration or the light intensity was lowered.

Thus, as polyene sensitizer having a shorter conjugated chain (CA7, for example) can be characterized as follows: It is potentially an excellent sensitizer exhibiting an electron-injection efficiency of almost unity, which stems from a pair of channels one from the $1B_u^+$ (S_2) and the other from the $2A_g^-$ (S_1) state. However, the reverse electron transfer and the resultant charge recombination efficiently generates the T_1 state. Structurally, its extended conjugated chain tends to form an aggregate on the surface of TiO₂ layer due to the dispersive interaction, and as a result, efficient singlet-triplet annihilation takes place when excitonic singlet excitation is covering over the aggregate (a 100% dye concentration) or when a localized singlet excitation is migrating along a pathway (a 70–60% dye concentration). In order to completely prevent singlet-triplet annihilation, isolated singlet excitation needs to be achieved.

To realize this condition of isolated excitation, a large surface area of TiO₂ layer, to accommodate both the sensitizer and the spacer molecules, needs to be formed by the use of TiO₂ nanowires or nanotubes.

Next, we started to use a chlorophyll derivative, as the sensitizer, and the bacterial and plant Cars as redox spacers: (4) DSSCs were fabricated by the use of methyl 3-devinyl-3-carboxy-pyropheophorbide *a* (abbreviated as PPB *a*, renamed afterward as 'Phe' *a*') as the sensitizer. A 10% each of Car, including neurosporene, spheroidene, lycopene, anhydrorhodovibrin, and spirilloxanthin with number of conjugated double bonds, $n = 9$ –13, was added as a conjugated spacer in order to neutralize the dye radical cation and to block the reverse electron transfer. The J_{sc} and η values systematically increase with increasing n (or in other words decreasing one electron-oxidation potential the Cars) from 10.1 mA·cm⁻² and 3.1% (with no Car) up to 11.5 mA·cm⁻² and 4.0% (with spirilloxanthin, $n = 13$), i.e., an enhancement of ~30%. Energetically, there was little chance of singlet-energy transfer from bacterial Cars to PPB *a*; the enhancement of DSSC performance was explained in

terms of electron-transfer mechanism.

(5) In order to confirm the electron-transfer mechanism, subpicosecond time-resolved absorption spectroscopy of PPB *a* and the set of Cars bound to TiO₂ nanoparticles in suspension was performed. Electron injection from PPB *a* to TiO₂ took place in ~30 fs following the decay of an excimer that was generated immediately after excitation to the Q_y state. Then, electron transfer from Cars to PPB *a* radical cation took place in 200–240 fs. The time constant of electron transfer increased systematically according to the gap of one electron-oxidation potential between PPB *a* and each Car.

(6) A 20% each of plant Cars, including neoxanthin, violaxanthin, lutein and β -carotene with $n = 8, 9, 10$ and 11 were added as redox spacers to a DSSCs using PPB *a*, and effects on the photo-current and conversion efficiency were examined. Not shorter-chain Cars that can potentially transfer singlet energy, but longer-chain Cars that can efficiently transfer electron to the sensitizer, exhibited a larger enhancement of the performance, supporting not the energy-transfer mechanism but the electron-transfer mechanism. The J_{sc} and η values systematically increase with increasing n (decreasing one electron-oxidation potential) from 10.6 mA·cm⁻² and 3.4% (with no Car) to 13.7 mA·cm⁻² and 4.2% (with β -carotene).

Thus, it has been established that the combination of PPB *a* having the one electron-oxidation potential (E_{ox}) of 1.18 eV and β -carotene having that of 0.61 eV gives rise to the best performance of DSSC so far examined. (Since the Grätzel group succeeded in generating the J_{sc} and η values of 14.4 mA·cm⁻² and 5.1% in a DSSC fabricated by them by the use of our PPB *a* (if our values 10.6 mA·cm⁻² and 3.4%), there is a good chance of getting those values, 18.7 mA·cm⁻² and 6.6%, the β -carotene spacer is introduced.

修士論文紹介

Particle size dependence of critical thickness on ferroelectricity in BaTiO₃ by ab initio calculations

Hayafuji Lab. Keisuke Ishizumi

Ferroelectric materials have been extensively studied for using in gate capacitors of non-volatile memories. Ferroelectric material exhibits spontaneous polarization, which can be reversed by applied electric field. Typical ferroelectric materials used for memories have perovskite crystal structures such as BaTiO₃. For applications, ultra thin films of these materials are required, but ferroelectricity is disappeared at a certain nanoscale size of materials. Their critical size has not been understood well by experiments yet.

From this perspective, size effects of the critical thickness of nanoscale BaTiO₃ are investigated using ab initio molecular orbital method and population analysis. A series of models composed of a Ba₈Ti₇O₆ cluster and point charges surrounding the cluster are employed for calculations of the electronic structures of the BaTiO₃, with the size of the model defined by the size of the point charge array. Results of the calculations show that the critical thickness of nanoscale BaTiO₃ decreases with decreasing basal area of the rectangular particles.

特徴変換によるヒューマンモーション生成システムの構築と仮想空間への応用

早藤研究室 上野雅貴

コンピュータグラフィックス (CG) 技術の発展により、様々な3次元CGコンテンツが製作されるようになった。とりわけコンテンツの印象を大きく左右する人物キャラクターのモーションが注目されている。しかし、ヒューマンモーションの生成には時間とコストがかかる。また生成されたモーションの多くは編集や再利用することが出来ない。そこでヒューマンモーションの編集や再利用が行える簡易生成システムが必要とされている。

本研究は、モーションデータの解析と編集によって、多種類のモーションを簡易的に生成するヒューマンモーション生成システムを構築し、コンテンツにおけるヒューマンモーション生成の効率化を図ることを目的とする。また、生成されたモーションの仮想空間への応用として、情報統合システム「バーチャル神戸三田キャンパス」の開発を行う。

本システムは、モーションキャプチャを用いてヒューマンモーションを解析し、主成分分析によってモーションの特徴を抽出し、その特徴の変換を行うことによって新たなモーションを生成する。本研究によって、歩行モーションにおける性別特徴や幼児歩行特徴などが主成分分析によって求められ、特徴変換によって新しいモーションの生成が可能であることを示した。また情報統合システムに応用し有用性を確認した。

これによりヒューマンモーション生成の効率化が達成された。歩行以外の動作の生成も可能になれば、より広い汎用性を持つことが期待される。

金属タンタルの浸炭処理による炭化タンタルの相分離と浸炭層制御

金子研究室 内田昌宏

今日、超高温材料を利用することによって飛躍的な発展が期待されている分野が数多くある。その中で温度、圧力、雰囲気などの極限的な環境に耐えるなど、従来の材料では実現困難な要求性能を満足する新たな材料が必要となる。そこで我々は、機能的耐熱セラミックス材料としての用途も期待されている高融点材料 TaC に注目した。TaC にはその蒸着薄膜が従来から工業的に用いられているが、薄膜のクラックや剥離が問題視されていた。それに対して、Ta 母材への浸炭 TaC は母材に対する接着性が良く応用が期待されるが、安定相として複数の δ -TaC_{1-x}/ ζ -Ta₄C_{3-x}/ β -Ta₂C_{1-x} が存在し、それらの形成に関わる浸炭機構 (C 原子の拡散機構) については言及されていない。我々は C の異種相間拡散機構の解明、およびバルク Ta と表面 TaC 層との両特性が融合された傾斜機能材料開発を目的に研究を行った。浸炭処理には真空環境下にて金属 Ta 基材へ炭素蒸気圧を直接照射する手法を用い、さらに炭素蒸気圧を含まない高真空環境下でアニール処理を施した (二段階高温浸炭法)。アニールにより C 原子の相間拡散にともなう全 TaC 浸炭層厚の増大化が観察されたが、この原因として相図上の δ 相および β 相がもつ許容 C 濃度揺らぎの存在を考えた。これらの結果から、拡散機構における動的相安定性に関する知見を得、また炭素吸蔵効果を有する傾斜機能を見出した。

二者間における安全な計算に関する研究

高橋和子研究室 麻植 一 聡

安全多人数計算は、複数の参加者がそれぞれの入力を明かさないようにしてその入力に対する所望の関数値を正しく計算する手法であり、電子投票やネット上でのポーカーなど幅広い応用が存在する。しかし、安全多人数計算の一般的な手法を各応用に対して直接適用すると計算量および通信回数が多くなり効率が悪くなるという欠点をもつことが知られている。そこで、個々の応用に必要な関数に特化した効率の良い計算手順を与える研究が行われている。

本研究においては、二者のもつ情報を入力とする安全な計算として、以下のような秘密交渉の問題に着目する。

「売り手もつ商品の複数の項目に対して、買い手はそれぞれある要求を持っている。このとき買い手の要求が満たされている項目の個数がある閾値以上であるかどうか、互いに自分の情報を明かさないようにして調べたい。そのような秘密交渉を実現するためにはどうすればよいか？」

この問題を解決する手法として、二者アリスとボブの入力を整数ベクトルとしたとき、要素間の大小関係に対して、アリスの要素が対応するボブの要素より大きくなる組の数が、ある閾値以上である場合に限り、その個数が一方に伝わるといふ計算手順を提案する。提案する計算手順は、二者間において効率良く安全に計算を実行することが可能であり、第三者を計算に加える必要がない点と秘密交渉における閾値を任意に設定できる柔軟性を有する点が利点である。

A mechanism for hole generation by octahedral B₆ clusters in silicon

Hayafuji Lab. Kengo Ohmori

The electronic structures and X-ray photoelectron spectra of silicon model with octahedral B₆ clusters are investigated using first-principles calculations. It is found that the B₆ clusters act as double acceptors in silicon and that the simulated chemical shift of the B 1s orbital signals of the B₆ clusters in X-ray photoelectron spectra exactly coincides with the chemical shift of B 1s experimentally observed in as-implanted silicon at an extremely high dose of boron. These results reveal that the B₆ clusters are the origin of hole carriers. We propose a mechanism of hole generation and a physical model of B₆ cluster formation at implantation-induced divacancy site.

「リゾチーム変異体を用いてS-S結合再生反応の初期過程を解析する」

瀬川研究室 岡本邦彦

本論文は、ポリペプチド鎖上の Cystein 残基間の近接によっておきる S-S 結合再生反応の過程を追跡することによって、タンパク質の折りたたみ過程を研究するものである。そのような研究はすでに数多く行われてきたが、本論文のオリジナリティは、アミノ酸置換によって Cys 残基を Ala に置換した変異体タンパク質を用い、形成される S-S 結合を注目する特定の部位だけに限定して研究できる点にある。これまでは再生中間体の S-S 結合異性体の数が非常に多くなり（とくに再生初期にはそれが顕著）、中間体を分離して解析する事が不可能であった。本研究においては Cys6、Cys64、Cys80、Cys127 の 4 残基だけ残した変異体リゾチーム (2SS(1+3) 変異体と呼ぶ) を用いているため、再生途中の中間体を HPLC カラム上で明瞭に単離する事が出来た。単離したタンパク質に架かる S-S 結合の数と位置を質量分析計によって巧みに同定し、天然型、非天然型の S-S 結合の位置を決定した。実験に用いた 2SS(1+3) 変異体は水溶液のままでは無秩序鎖の状態であるが、溶媒にグリセロール 30% を共存させることによって、立体構造を回復することが知られていたが、それが本当に天然立体構造形成に寄与しているものかどうかは不明であった。本論文は、S-S 結合再生の初期過程 (1SS 中間体形成などの) において、グリセロールがほとんど効果を示さないこと、天然型の 2SS(1+3) リゾチームが形成される段階においてはじめて、その構造を安定化することによって天然型 S-S 結合体の再生効率を顕著に向上させる効果があることを立証した。

ポップス系ドラムの打点時刻及び音量とグルーブ感の関連について —ドラム演奏の基礎モデル—

早藤研究室 奥平啓太

グルーブ感とはリズムに感じる生き生きとした表情のことであり、楽曲全体の印象を変えるような重要な要素の 1 つである。ポップス系音楽におけるドラムの基本的な役割はテンポをキープすることであるが、スネア、ベースドラム、ハイハットのタイミング、音量の微妙な制御によってグルーブ感を表出している。筆者はタイトとルーズのグルーブ感を与えたプロのドラム演奏から、スネア、ベースドラム、ハイハットの打点時刻と音量を測定し、これらのグルーブ感との関係を調べてきた。この結果、1) ゴーストノートを加えることで、打点時刻は早まるということ、2) テンポが速くなると打点時刻の遅れが大きな値になる

こと、3) ルーズの演奏はタイトの演奏に対し打点時刻が遅れる傾向にあること、4) タイトのグルーブ感を持つ演奏における連続するハイハットの打点時刻はやや相関があること、5) ルーズのグルーブ感を持つ演奏における連続するハイハットの打点時刻は強い相関があること、などを確認した。本研究では、さらに、その分析結果をふまえてドラム演奏生成システム GrooveEdit を実装した。グルーブ感を表現、付加することを目的としたシステムとしては、他に、steinberg 社の GrooveAgent 2 等のヒューマナイズ機能があるが、そこでは、連続する打点間の相関（因果関係）は考慮されていない。この事項によって生じる両者のグルーブ感の差がドラム経験者に関知されることが確認された。

MBE法を用いた表面原子拡散場制御 による選択成長：

—吸着型マスク機能を用いたGaAs三次元構造制御—

金子研究室 鬼塚 康成

光・電子デバイスへ応用される化合物半導体の三次元微細構造の作製法として選択成長法が有望視されている。一般に用いられる MOCVD 法とは異なり、化学種を成長原料に用いない MBE 法では表面吸着原子の選択的脱離・化学反応が望めず、また拡散長が比較的小さいため、選択成長は従来困難と考えられてきた。我々の研究室では、真空一環プロセスとして、電子線直接描画法による GaAs 表面酸化膜改質、描画領域外の自然酸化膜の選択的熱脱離、その場 MBE 選択成長、からなるマスクレス・リソグラフィを考案し、GaAs を対象に MBE 法による選択成長を次の方法で実証してきた。本研究は、電子線照射により改質された GaAs 表面上の酸化膜領域が MBE 成長時の表面拡散原子に対して選択的“吸着型”マスクとして機能する機構解明を目的にしたものである。酸化膜に対して様々な電子線照射条件を変化させることにより改質し、成長に対して改質領域がどのように機能するかを検討した。その結果、マスク機能とは電子線の照射エネルギー量のみ単純な関数ではなく、単一線描画による改質領域内においても、吸着型および反発型の両マスク機能が存在することを明らかにした。我々は、改質された酸化膜中にわずかに存在する Ga 沈殿物と電子線との相互作用がマスク機能に影響を及ぼすと考えた。

A formation mechanism of X level due to an indium-carbon pair in silicon

Hayafuji Lab. Hiroyuki Kawanishi

We investigated the formation mechanism for a shallower acceptor energy level called an X level that is due to an indium-carbon pair. Electronic structure calculations were performed using the Discrete Variational (DV) - $X\alpha$ molecular orbital method. The VASP program was used to calculate lattice relaxation. The following results were obtained. The X level consists mainly of the $5p$ orbitals of the indium and the $3sp$ orbitals of the three silicon atoms directly bound to the indium atom (Si_{in}). Therefore, the interaction between the $5p$ orbitals of the indium atom and the $3sp$ orbitals of the Si_{in} mainly determines the ionization energy of the X level. Moreover, the ionic bonding interaction of the carbon atomic orbitals with the indium atomic orbitals results in the covalent bonding interaction of the orbitals between the indium atom and the Si_{in} due to the reduction in the energy difference between the $5p$ atomic orbital energy of the indium and the $3s$ and $3p$ atomic orbital energies of Si_{in} in the cluster. As a result, a shallower X level is formed.

「タンパク質の非天然状態とアミロイド線維形成 —重水素置換とNMR分光法による研究」

瀬川研究室 木村 雅也

タンパク質の折りたたみ反応過程に現れるタンパク質の部分秩序構造を平衡状態として残基レベルの分解能で詳細に調べるために、S-S 結合をすべて欠損させたりゾチム OSS 変異体を NMR 分光法で研究したものである。部分秩序構造形成に対するグリセロールの効果に関して、本論文は 2SS 変異体と OSS 変異体の結果を比較して研究を行った。30% グリセロールは OSS 変異体にはほとんど効果を示さないが、2SS 体になると部分秩序構造の安定化に大きく寄与することが明らかになった。この実験結果は S-S 結合再生過程におけるグリセロールの効果と首尾一貫していた。著者はさらに、トリフルオロエタノール (TFE) という溶媒添加物の効果を研究した。この場合は OSS 体にも 2SS 体にも同様の部分秩序構造が回復する。特に、リゾチム分子の 2つのドメイン間接触領域に形成される部分秩序構造が折りたたみ反応の初期に出現することの重要性を指摘した。一方、非天然構造にあるリゾチム OSS 変異体は高塩濃度、高タンパク質濃度でアミロイド線維を形成することが知られている。本研究は、アミロイド線維となる分子間会合体の β シート形成に関与するアミノ酸残基の同

定に成功し、リゾチームのC末端のヘリックス領域が会合体形成に伴ってβシート構造に変化する事を指摘した。

高温真空環境下における炭化珪素結晶表面ダイナミクスと形状制御

金子研究室 後藤 真之助

半導体炭化珪素 (SiC) は Si デバイスの性能を凌駕する次世代材料として期待され、結晶成長研究が進展している。近年はデバイスへの実用化も進んでいるが、SiC のもつ化学的機械的安定性により、プロセスには Si プロセス以上の高温が必要となり技術的課題は多く残っている。特に SiC ウエハの表面クリーニングなど結晶表面の前処理技術は、Si プロセスで蓄積された技術の流用が困難である。そこで本研究では汎用性の高い、全く独自の高温真空環境下での新規表面形状制御技術を開発した。SiC 表面処理における最大の課題は、表面からの Si の優先的脱離に起因する表面荒れである。我々は C 蒸気のない高温真空環境下で Si 蒸気外部から供給することにより、表面荒れを抑制することに成功した。このとき SiC の表面では、“ $\text{SiC(s)} + \text{Si(v)} \rightarrow \text{Si}_2\text{C(v)}$ ” の反応が積極的に起きたと考えられる。そのため SiC 表面から Si と C が均一に脱離すること (エッチング) によって、均一な微細ステップ構造が形成される。さらに C 原子を外部から供給することにより、表面では SiC 成長が優勢になり脱離によって形成されたステップよりも大きなステップが形成されることを確認した。エッチングの場合は微細なステップが形成され、成長の場合は大きなステップが形成されることを利用し、目的に応じた表面形状を得ることができると考えられる。

ホームユースを目指したロボットの研究

早藤研究室 篠崎 邦耶

ロボットはリアルなコミュニケーションが図れることによって現実の社会や家庭の中で人々とコミュニケーションを行い、いわば社会の一員となることが可能である。本論文ではそのような試みの第一歩として、将来の家庭に入るべきロボット (ホームユースロボットと呼ぶことにする) の実現に向けた研究を3つに分けその結果を述べる。第一にロボットの設計では人とコミュニケーションするロボットには、全身を使った複雑な動作の実現が必要である。そのような柔軟な全身運動の可能なロボットを開発するため CAD を利用し、無駄のない設計を行う。第二にダンスエンタテインメントの研究ではコミュニケーションは大きく分けて言語によるものと、非言語のものが存在する。非言語コミュニケーションはヒューマンコンピュータイン

タラクションデバイスとして、身体を持つロボットに必要な機能である。本研究ではエンタテインメントでありながら、日常動作を誇張した動作を表現に用いるダンスに注目する。第三にホームロボットの研究では携帯電話によるコミュニケーション機能 (携帯端末からの音声、画像、インターネットを用いた通信) を有するロボットの可能性を述べ、その実現へ向けたロボットを開発する。但し、このようなロボットは機械のみの研究にとどまらず人間に対する研究にも目を向けなければならないため、今後さらに心理学や生物学など様々な考え方を取り入れなくてはならないと考えられる。



定性空間推論における新しい枠組みの提案

高橋和子研究室 住友 孝郎

本研究は定性空間推論における空間の表現方法である PLCA 表現についてのものである。

PLCA 表現は、二次元平面上の図形に対して、座標を使った数値データではなく、点、線、閉路、範囲に分解してそれらの関係で表す離散的なもので、特に、従来の定性空間推論手法で問題のあった領域間の接し方をうまく扱える。このため接し方のみを取り扱う問題では座標や形状の情報にかかわることなく解くことができる。

本研究では二つの PLCA 表現の等価性を定義し、等価でないもの同士を互に変換するアルゴリズムを提案して実装する。また、PLCA 表現と二次元平面上の図形との対応を示し、ある条件を満たす PLCA 表現から二次元平面上の図形を描くアルゴリズムを提案する。これによって、PLCA 表現が二次元平面上の図形データに対する記号表現として妥当であることを示す。さらに、PLCA 表現は1階述語論理による表現と対応することから、専用のプログラムを用意することなく、既存のデータベースと容易につながることができる。応用例として論理型プログラミング言語 Prolog のデータベースとして PLCA 表現を与え、Prolog の推論機構を利用した推論システムを構築する。

以上により、PLCA 表現は定性的に空間を扱う新しい枠組みと考えられ、これに基づく手法やアルゴリズムの開発が期待できる。

高品質音声分析変換合成法STRAIGHTを用いた歌声モーフィングに関する研究

早藤研究室 豊田 健一

モーフィングとは、ある形状と別の形状との中間状態に相当する形状を生成する技術である。2つの試料の中間状態を容易に制作できることや、現実には存在し得ないような効果を生み出せるといった利点があり、映像メディアデザイン領域においては、モーフィングは既に実用レベルに達している。本研究では、映像メディアと比べて技術開発が進んでいない歌唱を対象としたモーフィングシステムの初期的実装と認知評価を課題とした。具体的には、Vocoder ベースの高品質音声分析変換合成法 STRAIGHT を用い、歌声の声質と歌い回しそれぞれに対してモーフィング率を設定し、それぞれを独立に操作する機能を実装した。また、モーフィングを行う際には二つのサンプル間の対応点の付与が必要となるが、スケールスペースフィルタリングを用い対応点候補をユーザに提示するツールを作成した。以上の機能を利用し、2つの歌声サンプルから、声質、歌い回しのそれぞれのモーフィング率を変えて合成歌唱を生成し、それらが2つの歌唱サンプルのうちどちらに似ていると判断されるかという事項に関して聴取実験を実施した。今回、用いた試料からは、歌声の判断には声質が重視されること、内挿のレベルに応じた判別結果は単調増加の直線として近似できること、外挿した際にはどちらの試料に近いかが判別が困難になること、などが確認された。

Confined Geometryにおける磁性流体－固体界面の研究

高橋功研究室 中林 史智

磁性流体とは直径 10nm 程度の超常磁性体微粒子表面を界面活性剤分子で修飾することにより安定な分散状態を実現させているコロイドの総称であり、真空シール剤から光学素子にいたるまで、その磁氣的相互作用を活用した広範な応用がなされている。近年磁性流体の全く新たな応用法として磁性体微粒子の統計集団としての特異性を用いた新奇なヒートポンプの提案が注目を集めているが、この事実は磁氣的相互作用を有するコロイド粒子の集団の特殊条件下での振る舞いがいまだ統計力学の研究対象となりえることを示しているものと考えられる。本研究では磁性流体が凝二次元的な空間に閉じ込められた際にどのような空間分布をとるかを第3世代シンクロトロン放射光 (Spring-8) の高輝度・高エネルギーの X 線ビームを用いてその場観察を行った。一組の平坦な石英ガラス基板、もしくはシリコン結晶基板を用いて、コロイド層の厚みが非常に薄い場合 (100nm オーダー)、非常に厚い場合 (mm のオー

ダー) の他にコロイド層の厚さを連続的に変化させながらの測定を行った。また同等なジオメトリーで、基板表面に垂直方向に静磁場を印加しながらの測定、異種のコロイドを用いた測定、コロイド粒子を含まない溶液を用いた実験等も行い、磁性コロイド粒子集団が示す固有の構造を明らかにしようと試みた。それらの結果磁性体微粒子が厚さ数 100nm の極薄環境下におかれた際のみコロイド粒子が上下の壁を避けて中心部に集中するという一種の自己組織化構造を初めて見出すことができた。本研究で見出された自己組織化構造の形成に関するメカニズムの解明はなされてはいないが、今後数値計算を主とした新たな物理学研究の展開が行われることを期待したい。

プロセッサの命令セット拡張に対するソフトウェア開発環境の自動構築

高橋和子研究室 永松 祐二

特定の応用に対して、そのアーキテクチャを最適化することにより高性能、低消費電力化を実現したプロセッサを ASIP (Application Specific Instruction set Processor) という。ASIP は近年、組み込み機器等への搭載が急速に拡大しつつある。

ASIP を用いる上での大きな課題がソフトウェア開発環境の効率的な構築である。ソフトウェア開発環境はアセンブラ、リンカ、命令セットシミュレータ、コンパイラ、デバッガ等から構成されるが、これら開発ツールはプロセッサのアーキテクチャに強く依存し、その開発には多大な労力を要する。ソフトウェア開発環境の構築は、一般に既存の開発環境をリターゲットングすることによって行われる。この際、アーキテクチャに関する情報はマシン記述を通して取得されるが、マシン記述を作成することは一般的に容易ではない。また開発環境のリターゲットングビリティ、すなわちマシン記述作成の容易さはその対応アーキテクチャ・クラスの広さとトレードオフの関係にある。

本研究では幅広いアーキテクチャに対応しつつ、自動でソフトウェア開発環境をリターゲットングすることを可能とするシステムの構築を目標とし、その設計と実装を行った。対象とするアーキテクチャは既存のプロセッサをベースに命令セットを拡張することによって設計される ASIP とし、開発環境は GCC, Binutils, GDB, CGEN, NEWLIB を用いて構築する。これらのソフトウェアは GPL、もしくはそれに似たライセンスの下で配布されており、既存のプロセッサのマシン記述を流用することが可能であるため、多くのアーキテクチャに対応可能である。また、拡張命令に対しては次の制限を課すことにより、ソフトウェア開発環境の自動構築を可能としている。

1. 汎用レジスタや特殊レジスタの数、種類は変更しない
2. パイプラインのステージ数の変更や演算器の追加は

行わない

3. 命令フォーマットの追加や変更は行わない

命令セットの拡張が上記の制限内であれば、新たに設計されるプロセッサのマシン記述はベースプロセッサのマシン記述に拡張命令の定義を追加するのみで作成可能である。GCC の拡張命令定義は `define_peephole`, `Binutils`, `GDB` の拡張命令定義及びそれにかかる変更は `CGEN` の `dni` を使用した。我々はこの処理系を実装し、M32R プロセッサをベースに、12 の拡張命令を追加することによって設計される新たなプロセッサに対するソフトウェアクロス開発環境の自動構築に成功した。また構築した開発環境が C コンパイラ用テストスイートで全てのテストにパスすることを確認した。また各追加命令についても小さな C のコードをコンパイル、実行し、各命令が確かに使用されていること、正しく動作することの確認を行った。

キーワード

ASIP, ソフトウェアクロス開発環境, リターゲッティング, マシン記述, GCC, Binutils, GDB, CGEN, NEWLIB

Kinetic Ising Model of Successive Phase Transition In $K_2Ba(NO_2)_4$

吉光研究室 西尾 泰一

$K_2Ba(NO_2)_4$ 結晶は、 NO_2 基が持つ電気的雙極子が三角格子を形成しているところに特徴がある。各雙極子は等価な2つの向きをとり、十分高温では配向に関して無秩序状態にある。温度の低下とともに三角格子の2つの副格子が秩序化し、他の副格子は無秩序状態の部分秩序相が出現する。さらに低温で残る副格子の秩序化がおこる。この論文では、この逐次相転移の動的機構を明らかにするために、各雙極子の状態を Ising 変数 $\sigma = \pm 1$ で表わし、素過程として2つの状態を緩和時間 τ で遷移する Kinetic Ising Model を用いている。雙極子間の相互作用として、拮抗する2つの相互作用、即ち、長距離雙極子-雙極子相互作用と近隣の NO_2 基間の斥力相互作用を考慮する。系全体の時間発展は Master 方程式で記述し、相転移、特に、部分秩序相発現の動的機構を、Monte Carlo Simulation で解明している。相転移に関係する部分秩序相の3重縮退モード M_1, M_2, M_3 の時間発展に注目し、これらの時間相関関数の解析を行っている。相転移の存在、転移点近傍の臨界緩和現象の存在などを動的側面から明らかにしている。この系の特徴として、縮退するモード間の緩やかな遷移の存在を明らかにし、臨界緩和に伴う緩和時間の異常発散や転移点近傍での緩和時間の分布現象を見出ししている。系の動的側面の解明としては尚不十分ではあるが、相転移の動的振る舞いの本質の一端を明らかにしており労作と考えられる。

ソフトウェア互換ハードウェアの高位合成における関数呼び出しの扱い

高橋和子研究室 西口 健一

近年、半導体技術の発展により LSI の集積密度が増大するにつれ、大規模化する回路の設計の効率化が重要な課題となってきた。高位合成 (High-Level Synthesis) は、プログラミング言語などによる回路動作の記述からレジスタ転送レベルのハードウェアを合成する技術であり、LSI の効率的な設計の一手法として注目されている。我々が開発を進めている高位合成システム CCAP (C Compatible Architecture Prototyper) は、ソフトウェアの一部を自動的にハードウェアに置換して高速化、低消費電力化することを目的としている。

本研究は、CCAP におけるソフトウェア/ハードウェア間、ハードウェア/ハードウェア間の関数呼び出しの実現法を提案する。関数呼び出しの引数と返り値のデータの受け渡し、および関数の起動/終了の制御は、主記憶に保存されるグローバル変数を利用して実現する。また、関数呼び出しに関連する演算の実行の効率化のために、関数実行の待ち合わせを行う特殊な演算の導入と、この演算を効率的にスケジューリングするための手法を提案する。本研究により、ANSI-C で開発されたシステムの中の任意の関数を、ソフトウェアとして実行される他の関数から呼び出せるハードウェアに合成することが可能となった。その際、関数の引数にポインタを用いた参照呼び出しも可能である。また、合成実験の結果より、本研究のスケジューリング手法は従来の手法よりも少ない合計実行サイクルでスケジューリングできることを確認した。

キーワード

CCAP, 高位合成, 動作合成, ソフトウェア/ハードウェア協調設計

MBE法を用いた表面原子拡散場による選択成長 ~GaAsテンプレート上のAlAs成長機構~

金子研究室 橋本 政樹

AlAs のエピタキシャル成長では基板表面での Al 原子の拡散長が極めて小さいことから、三次元構造のための選択成長を行うことは GaAs や InAs と比較して極めて困難であると考えられてきた。しかし、AlAs/GaAs の界面構造を有する三次元ナノ構造は量子デバイス化には重要であり、また作製手法として選択成長の可否を問う上でも AlAs の成長機構に関する知見が欠かせない。そこで本研究では、AlAs(001) 成長中の表面 Al の拡散制御を可能とする条件探索を目的に、表面再構成及び As Flux に依存した成長機構の解明を行った。実験では RHEED を用いた“そ

の場”観察により、化学量論比を保つ AlAs 成長が可能な最小 As Flux 量を表面再構成との関連において初めて定量的に評価した。その結果、AlAs 成長表面において、少量の過剰な As 吸着分子の存在が Al の表面拡散を大きく抑制することを明らかにした。また、以上の結果を Al の表面拡散機構が直接反映される三次元選択成長において検証するため、低温 $c(4 \times 4)$ 再構成表面、超低 As フラックスを用いた成長条件で AlAs 三次元微細構造を GaAs(001) テンプレート基板上に成長した。その結果、均一なファセット構造と基板表面の平坦性を兼ね揃えた構造の成長を可能にした。超低 As フラックス環境により、Al 原子の拡散長が伸びた事が最大の要因であると考えられる。

Studies on Analysis of Models for Complex Networks and a Drawing System

高橋和子研究室 原田大輔

In this master's thesis, we studied on a mathematical model of real networks and developed a network analysis and drawing system.

First, we investigated the threshold model. We estimated the clique size and the number of edges in a graph generated by the threshold model. In addition, we proposed and analyzed a mechanism to generate a weight distribution of the model. As a result, we proved that the weight distribution converges to the geometric distribution. Furthermore, we showed that a scale-free network is generated by the threshold model whose weight distribution is the geometric distribution.

Next, we developed a network analysis and drawing system. The system contains a module which analyzes many properties of a large-scale network, a module which draws an easily viewable network, and a module which executes simulations on a network such as a virus spreading.

GaAs-MBE成長機構における動的過程： —GaAs(111)B面における表面拡散種の 競合過程と自己組織化構造発展機構—

金子研究室 松田一宏

MBE法を用いたGaAs成長機構に関する知見は、選択成長などを用いたナノ・マイクロ領域でのデバイス構造制御には必要不可欠である。しかし、GaAs成長機構は現在までIII-V族化合物のMBE成長分野で最も詳細な検討がされてきたにも関わらず不明な点も多く、また、その知見からマクロ構造物の形成過程を解明するまでに至っていない。

この原因として、我々は結晶中の表面構造が与える成長機構への影響に関する知見が十分でない事にあると考えた。しかし、成長表面は動的な非平衡場であるため、それを定量的に評価する事は困難であった。そこで、我々は一般的な表面評価法である反射高速電子線回折を用いながらも、GaAs(111)B面を用いることで、その物性的特徴、すなわち異なる安定構造間の大きなエネルギー差に着目することにより、成長表面の安定構造が顕在化され易いと考え評価を行った。実験は成長中の構造決定を行うに当たり、まず成長が起きていない表面構造に対する“その場”評価法を確立し、そこに成長前から成長中への遷移過程、および成長中から成長後への回復過程の構造変化過程を詳細に調べ、それらの結果を組み合わせることにより、間接的にはあるが極めて再現性の良い成長中の表面構造の決定に成功した。その結果、 $\sqrt{19} \times \sqrt{19}$ からの成長表面が、その基本構成要素である六員環を被覆率15%に保持することを明らかにした。

GaAs-MBE成長機構における動的過程 ～GaAs(100)面における異なる準安定状態に 依存した表面拡散種の競合過程～

金子研究室 宮崎憲一

GaAs(100)は、二元系材料であるため、蒸気圧の異なる二つの構成原子同士の複雑な競合機構が存在し、長年にわたり研究が行われてきた。しかし、実験や理論的な努力にもかかわらず、GaAs(100)上における成長過程という非平衡場における原子の物理的な反応機構はいまだ明らかでなく、従って原子レベルの集団運動(ミクロなカイネティクス)と、その結果生じる表面形態(マクロなカイネティクス)との因果関係を議論することも困難であった。本研究では、GaAs(100)上でのMBE成長に対して、従来とは異なるAs中心の成長機構解釈(従来はGaが主体)を得ることを目的とする。手法としてはMBE成長時のRHEED強度振動観察を行い、二粒子モデルからなるkinetic-Monte Carlo法を用いて実験結果に対応した原子レベルでの成長機構解釈を試みた。その結果、Asの基板結晶への取込過程が成長前の準安定状態に依存していることを見出した。Asの成長機構への関与とは、Gaと結合しGaAsを形成する過程、および表面再構成を形成する過程という競合過程の存在である。この競合過程は、表面のGa濃度に依存してどちらを優先するかが決定されるという特徴をもつ。以上より、表面のGa濃度により変化する準安定表面構造が、Asの結晶への取込過程に与える影響を明らかにし、マクロ構造につながる表面形態への影響を議論した。

X線回折によるPHA系生分解性高分子 薄膜の表面構造の研究

寺内研究室 森 克仁

ポリヒドロキシアルカン酸 (PHA) は微生物によってつくられる生分解性高分子である。代表的な PHA として知られているポリヒドロキシブタン酸 (PHB) は、高結晶性を有し、硬く脆いため工業的には成形性や機械的強度に弱点があった。近年、ヒドロキシヘキサ酸 (HHx) とのランダム共重合体 P(3HB-co-3HHx) が実用面で大変注目されているが、その耐熱性には依然として課題が残されている。本研究では、X線回折・表面散乱を用いてバルク及び薄膜表面の構造と融点近傍までの熱的挙動を調べた。あらゆる物質に存在する“表面”はバルクと異なる振る舞いを示すことが期待され、融解・結晶化などの物理現象を解明する際に、表面構造・表面モフォロジーを明らかにすることは本質的に重要である。膜厚数十 nm 程度の薄膜試料に対してX線回折測定を行った結果、表面に対して深さ方向に結晶学上の b 軸が顕著に配向した構造であることが明らかになった。このことからバルク結晶による研究で示唆されている水素結合の存在を確認することができた。また、薄膜表面にはパッキングの異なる二種類のラメラが存在し、温度上昇に伴い準安定なラメラは比較的低温で安定なラメラに変化し溶融することが分かった。本研究で得られた結果は、結晶性高分子に観られるラメラ構造の表面固有の構造及び熱的挙動を反映していると推測される。

「遊び」の視点によるエンタテインメントの考察 —メディア論から生理心理学的アプローチまで—

早藤研究室 和間 健典

情報化社会が進む現代において、物質的豊かさと精神的豊かさとの兼ね合いが求められている。数年前、日本では「IT 革命」なる言葉が流行し、それに伴い我々の生活は劇的な変貌を遂げてきた。情報の伝達は非常に便利になり、新たなエンタテインメントも生まれ、人々の生活をより実りのあるものにしてきたことは紛れもない事実である。しかし、こういった社会的に見て華やかな面だけが取り沙汰され、それに付随した体裁の悪い面には目を向けていないのではないだろうか。技術革新による新しいエンタテインメントによって我々は深い没入感（夢中状態）を得られるが、それによる人間への影響は不透明なままであり、そのことが大衆に不安を煽るような社会規範を逆手に取った報道を助長している。このような事態が引き起こされている背景と、そして昨今の様々な情報を我々はどうのように扱っていくことが望ましいのか、メディア社会の住人である

我々は「メディア・リテラシー」を基としたメディアに対する意識・理解を培う必要がある。そして、子供だけでなく大人までも魅了してやまない「現代の知的複合体」であるゲーム（エンタテインメント）、世界的にも認められたこの「文化」と我々はどうのようにして円滑に付き合っていくべきなのか、「遊び（エンタテインメント）」というものを歴史的考察から見直すことにし、情報化の進む現代のエンタテインメントに対する考察を行った。

磁性コロイドの自己組織化のシミュレーション

澤田研究室 栗谷 圭一

磁性流体（磁性コロイド溶液）はこれまで多くの研究者が興味を持ち、主としてバルクの構造や物性が研究されてきた。一方、当理工学部の高橋研究室では、X線回折を用いて磁性流体の表面に現れる構造を解析している。その結果、磁性コロイド粒子がクラスターを形成しており、そのフラクタル次元が2よりもむしろ1に近いことを見出している。

この実験に対応する理論的研究がこの論文の研究課題である。2次元の系において、コロイド粒子間の相互作用として、磁気モーメント間の引力と粒子間斥力を考慮し、粒子の並進運動と回転運動を考慮に入れた Brown 動力学シミュレーションを行った。144 個の粒子系において周期境界条件を課し、個々のコロイド粒子の軌跡を求めるため、Verlet 法を用いて Langevin 方程式の数値積分を行った。その結果、熱的揺らぎのエネルギーに比べて磁氣的相互作用が小さい（磁気モーメントが小さい）場合は、磁気モーメントの方向はランダムに配置し、クラスターが形成されず、粒子分布のフラクタル次元はほとんど2であった。

一方、磁氣的エネルギーが大きい（磁気モーメントが大きい）場合は、コロイド粒子が鎖状クラスターを形成し、フラクタル次元が1に近いという実験と一致する結果を得た。この系は、様々な条件のもとでシミュレーションを行えば、もっと様々な相が出現することが期待でき、この研究で明らかになったのは、その一側面であろうと考えられる。

Ga分子線パルス照射法を用いたGaAs 表面酸化膜の改質機構とその評価

金子研究室 藤井 敬久

GaAs 基板表面に存在する厚さ約 3nm の自然酸化膜 (Ga-As-O) は、エピタキシャル成長開始前に熱脱離により除去されるが、そのとき基板自身との反応による表面荒れが問題となる。そこで、我々は GaAs-MBE 環境下において、酸化膜に対して Ga 分子線のみの直接照射による二

次元的な酸化膜脱離手法を考案し、また RHEED を用いた Ga の中断 (パルス) 照射を行うことで単原子層単位の酸化膜脱離反応過程について観察を行ってきた。しかし、いままでこれらの脱離反応は熱脱離反応が抑制される上限の基板温度 (450°C) のみでしか観察していないため、酸化膜の熱的安定性を背景とした Ga との反応機構は明らかでなかった。本研究では、基板温度の異なる GaAs 自然酸化膜 (390 ~ 530°C)、および、酸素または水を利用することで異なる酸化形態 (厚み・組成) を持つ酸化膜を作製し、系統的な酸化膜構造の安定性および GaAs 結晶に対する酸化機構について考察を行った。実験には、MBE 装置を用いて GaAs 一分子層 (ML) 分に相当する量の Ga 分子線をパルス照射し、Ga 照射量に依存した RHEED 強度変化を“その場”観察した。その結果、酸化膜は熱的な脱離機構と Ga との反応を介した脱離機構との間に競合過程が存在することを明らかにし、さらに、酸化膜内部に存在する Ga 沈殿物が酸化膜の脱離反応を律速する新しい酸化膜脱離反応モデルを提案した。

α -アルキルマンデル酸の効率的な不斉合成法の開発及び不斉交差型 Ti-Claisen 縮合を用いる光学活性アルタナル酸の形式全合成

田辺研究室 嬉野 智子

(S)-アトロラクチン酸に代表される光学活性 α -アルキルマンデル酸類縁体は不斉補助剤や不斉触媒として重要な化合物であるが、骨格に構築が困難な不斉な四置換炭素を有しているため、既存の不斉合成法は限られており、実用的合成法の開発が望まれている。そこで今回、プロセス化学の見地から従来法を大幅に改良し、*cis*-2-ナフチル-1,3-ジオキソラン-4-オンを経由する (S)-アトロラクチン酸を含む光学活性 α -アルキルマンデル酸類縁体の効率的で実用的な不斉合成法を行い、90-94% ee という高立体選択性で目的物を得ることができた。この改良法を用いることで、反応時間が大幅に短縮され、中間体の結晶性が格段に増し精製操作が簡便になるなど、かなり実用的なものとなり幅広い利用が期待される。

当研究室ではすでに、従来困難であった一般性の高い交差型 Ti-Claisen 縮合を開発しており、最近、この重要な展開として、1,4-ジオキサン-2,5-ジオンのテンプレート効果を用いる不斉交差型 Ti-Claisen 縮合を見出している。しかしながら、求電子剤により嵩高い α,α -二置換酸クロリドを用いると、反応がまったく進行しない問題点があった。そのため、条件を検討し、7例において中程度~良好な収率で >95% de の目的物を得ることができた。この不斉 Ti-Claisen 縮合の有用性を示すため、複雑な構造を有す天然植物毒性物質アルタナル酸の特徴的な 3 連続不斉中心骨格部分の合成に応用し、従来法より短段階の形式全合成を達成した。

TiCl₄-ルイス塩基錯体を用いる脱 TBS 化反応及び不斉 Ti-aldol 反応の開発

田辺研究室 岡崎 宏紀

(1) TBS 基は、有機合成上最も代表的なアルコールのシリル保護基の一つである。今回、汎用的で経済的な TiCl₄-ルイス塩基錯体 (AcOEt or CH₃NO₂) を用いる温和な条件下での脱 TBS 化法を開発した。この方法は (i) Ti-ルイス塩基錯体の形成により副反応を完全に抑制できる。(ii) TiCl₄ 単独の場合に比べ反応速度が格段に向上する。(iii) カルボニル隣接基関与で反応速度が向上する、などの特徴を有している。また、この脱保護法の有用性を示す応用として、最も代表的で進化した抗生物質である 1 β -メチルカルバペネムの脱 TBS 化反応を行い高収率で目的物を得ることに成功した。この方法は 1 β -メチルカルバペネムの実用的合成法、今後の 1 β -メチルカルバペネムの研究への寄与が期待できる。

(2) 当研究室では光学活性 1,4-ジオキサン-2,5-ジオン基質を用いる不斉 Ti-Claisen 縮合を研究中で、その重要な展開として不斉交差型 Ti-aldol 付加反応の開発を行った。その結果、高い面および立体選択性で反応が進行することを見出した。得られる付加体は塩基性条件下、光学活性 α,β -ジヒドロキシ酸エステルへと誘導ができ、同時に不斉助剤の回収も可能である。これらの化合物やその誘導体は、医薬品、機能性分子や生理活性天然物の鍵中間体としての応用が期待される。

単一銀ナノ凝集体の局在表面プラズモン共鳴と表面増強ラマン散乱、電荷移動発光との相関

尾崎研究室 吉川 泰生

表面増強ラマン散乱 (SERS) とは、金、銀、銅などの金属表面に分子が吸着することにより、その吸着分子のラマン散乱断面積が 10⁵ ~ 10⁸ 倍に増大する現象である。SERS 発現機構として電磁場 (EM) モデルがある。EM モデルとは金属ナノ粒子凝集接点に生じる局在表面プラズモン共鳴 (LSPR) が i) ラマン励起光、ii) ラマン散乱光と結合し SERS を引き起こすというモデルである。その i と ii の 2 段階の増強度を表す式を以下に示す。

$$M^{EM} = \left[\frac{E^L(\omega_j)}{E^I(\omega_j)} \right]^2 \cdot \left[\frac{E^L(\omega_j - \omega_v)}{E^I(\omega_j - \omega_v)} \right]^2$$

ここで、 M^{EM} は増強度、 E^L と E^I は局所電場と入射電場、 ω_l と ω_v は入射電場、散乱電場の振動数をそれぞれ表している。EM モデルは有力な SERS 発現機構であるが、このモデルに基づき LSPR と SERS 相関を実験的に検証することは、LSPR が凝集体の形状、大きさに依存するため、従来の集団系を対象とした実験法では難しい。また、電荷

移動 (CT) 発光と考えられる SERS 背景光と LSPR との相関の検証もできない。そこで本研究では同一の単一銀ナノ凝集体からの LSPR、SERS、CT 発光を時間分解測定できる装置を用いてそれぞれの相関関係を明らかにした。また、実験結果と時間領域差分 (FDTD) 法による LSPR バンドを比較し、EM モデルの観点から SERS 発現機構を検証した。

第一原理計算に基づく青色蛍光体 BaMgAl₁₀O₁₇:Eu²⁺の構造と電子状態に関する検討

小笠原研究室 豊島 広朗

近年の目まぐるしいマルチメディアの発展により需要が高まってきている 3 波長形ランプや、プラズマディスプレイ (PDP) などでは、BaMgAl₁₀O₁₇:Eu²⁺ が青色蛍光体として広く用いられている。この蛍光体の Eu サイトについて結晶構造解析より、BR site, aBR site, mO site の 3 つのサイトが知られている。Eu の占有サイトについて検討するため、これまで実験や計算によるアプローチがなされているが、明快な解釈は得られていない。本研究では、各サイトにおける 4f-5d 理論吸収スペクトル及び XANES スペクトルを相対論多重項計算より求め、実験スペクトルと強度比較を行う事で、これまで明快な解釈が得られなかった Eu の占有サイトについて検討した。また、Eu サイトの Eu 濃度依存性を検討するために様々な Eu 濃度の BAM について放射光を用いて極低温で実験励起スペクトルを測定した。実験励起スペクトルと 4f-5d 理論吸収スペクトルの強度比較から、aBR site の占有率が高い事が示された。一方 XANES スペクトルに関する同様の強度比較からは、BR site の占有率が高いと予測された。この矛盾を説明するために、試料全体では BR site が支配的であり、表面領域では aBR site が支配的であると考えた。また、様々な Eu 濃度の BAM における実験励起スペクトルのピークの強度変化より、表面について低濃度の BAM では aBR site が支配的に占有されており、濃度が増加するにつれてさらに aBR site の占有数が増加し、mO site についても占有し始めることが示された。

コリラジンの全合成

山田研究室 長尾 浩平

加水分解性タンニンのうち、加水分解によりエラゲ酸を生成するエラジタンニン類には、アキシアル・リッチな立体配座のグルコースを含んだ化合物群が存在し、その立体配座から ¹C₄/B エラジタンニンと呼ばれている。天然物として多数単離、構造決定されているにもかかわらず、通

常では不安定なアキシアル・リッチな立体配座のグルコースを含むという構造的な特異性から、これまで合成されることがない。本研究では、これらの中で最も単純な構造を有するコリラジンの合成経路確立を目的とし、全合成を達成した。

まず、ピラノースを開環し、グルコースの特異な立体配座の原因となる 3,6-位の酸素を架橋する HHDP 部分を構築した後、ピラノースを再閉環することで、目的の骨格合成が可能になることを明らかにした。次いで、過去に通常の ⁴C₁ 配座のグルコースを有するエラジタンニンの全合成に成功している Feldman らのカップリング手法と、今回開発した合成経路を組み合わせることで、コリラジンの初めての全合成を達成した。しかし、この全合成には、HHDP 基の構築段階で多数の異性体が生成し NMR による解析が不可能であり、全収率も低いという欠点があった。そこで、HHDP 基構築の際に用いる基質を新たにデザインし、Feldman らとは異なるカップリング試薬を用いてコリラジン合成の高効率化に成功した。今回の結果を含めて、これまでのエラジタンニン全合成では、HHDP 基構築に必ず酸化的フェノールカップリング法が用いられてきたが、本研究では、酸化的カップリングではなくウルマンカップリングを用いた全合成も形式的に達成した。

ワンポット不斉アザ電子環状反応の実現とアルカロイド合成へ向けたインダン基除去法の検討

勝村研究室 中島 美由紀

著者の研究室では、これまでに不斉 6π-アザ電子環状反応を実現している。すなわち、不飽和置換基をもったビニルスズ化合物と、アルデヒドおよびエステル基をもったビニルヨウ素化合物の Pd(0) 触媒によるカップリング、続く酸化によりジエナール化合物を得、これを独自に開発した光学活性なアミノインダノール誘導体と反応させ、高立体選択的な不斉アザ電子環状反応により、光学活性な 4 環性のアミノアセタール得るといものである。

本研究では、上記の不斉アザ電子環状反応を実用的な天然物合成法へと展開するため、上記一連の反応をワンポットで実現することに成功している。すなわち、Pd(0) 触媒の精査や詳細な反応条件の検討の結果、相当するビニルスズ化合物、ビニルヨウ素化合物、光学活性アミノインダノール誘導体を Pd(0) 触媒存在下に一つの反応容器で混ぜ、加熱・攪拌することにより、二カ所で立体化学を制御しながら四カ所での結合を一挙に形成させ、高収率、高立体選択的に目的とする 4 環性アミノアセタールの合成に成功した。また、インドールを含む 8 種類のビニルスズ化合物について実施し、本ワンポット反応の一般性を確認している。さらに本反応を用いて、インドールアルカロイドであるエピウレインの重要合成中間体も合成した。また著者は、こ

れまで確立されていなかったインダン基の除去にも成功した。このように、今回開発されたワンポット不斉アザ電子環状反応は、アルカロイド新規合成戦略として高く評価される。

半導体量子ドットCdTeの光物性 時間分解レーザー分光と単一量子ドット分光による研究

玉井研究室 中山 純一

半導体量子ドットは、量子閉じ込め効果によりバルク結晶とは異なった物性を示すため、新規光機能材料として近年注目を集めている。しかし、CdTe 量子ドットの励起子緩和過程と単一量子ドットに関する研究はほとんど行われていない。そこで本研究ではコロイド化学的に水溶液法により CdTe 量子ドットを合成し、励起子緩和過程を解明すること、また単一量子ドット発光を観測し、その発光強度がマトリクスや励起光強度にどのような影響を受けるのか調べることを目的とした。CdTe 量子ドットのサイズは、水溶液中で還流時間を変えることにより制御した。時間分解レーザー分光法の結果から、CdTe 量子ドットの励起子はバンドエッジに対応した発光とダークエキシトン状態からの発光、そして表面状態からの無輻射緩和により基底状態へ緩和する事が明らかになった。過渡吸収ダイナミクスからはホット電子の緩和と発光の誘導放出によるサイズ成分が粒径と共に長くなること、および高強度のレーザーによるオージェ再結合過程が存在することを明らかにした。さらに水溶液法で合成した CdTe 量子ドットにおいて単一量子ドット特有の性質である発光の明滅現象を観測し、on-Time がマトリクスにより変化することを初めて明らかにした。また励起光強度を高くするとオージェ再結合により量子ドットのイオン化が起り、on-Time が短くなることを明らかにした。

スフィンゴ脂質及びその機能性類縁体の 統一的合成法の開発

勝村研究室 長谷川 浩子

スフィンゴ脂質は、アポトーシスや細胞増殖など様々な細胞機能を担っていることが明らかとなり、情報伝達物質としての生体内挙動や伝達機構の解明が望まれている。一方、最近、生体内における生理活性物質の働きや作用を解明するため、基質の生理活性物質に対し蛍光標識基や光親和性標識基を導入した誘導体が用いられている。

本研究では、天然のスフィンゴ脂質であるスフィンゴシン、セラミド、スフィンゴシン 1-リン酸、スフィンゴミエリンだけでなく、蛍光標識基や光アフィニティー標識基

を導入した様々なスフィンゴ脂質類縁体を、共通した合成法により供給することができる新たな収束的かつ統一的合成法の開発に成功している。すなわち、末端オレフィンを持つ α,β 不飽和カルボニルに対する高立体選択的還元法を見出したことにより、L-Serine から短段階でのアミノアルコール部位の構築に成功し、次いで、Grubbs 第二世代触媒を利用するオレフィングロスメタセシスを用い、種々の異なる機能性官能基を持ったオレフィンの導入を高収率で実現したものである。このように、開発した合成法は極めて汎用性の高い効果的合成法として高く評価される。またこの方法を用い、新たにデザインした機能性類縁体として、蛍光標識化スフィンゴシンおよびスフィンゴシン 1-リン酸の硫黄類縁体それぞれの合成を達成している。これらは、スフィンゴ脂質の生体内挙動解明に有用なツール分子として大いに期待されている。

アザ電子環状反応を用いた One-potピリジン合成法の開発

勝村研究室 波多野 翔

アリールピリジンは生理活性物質としてだけでなく、液晶などの材料化学などにおいてもその有用性が注目されている。アリールピリジンの合成法としては、ホウ素などが結合したメタロピリジンとハロゲン化アリールのクロスカップリングを用いる方法が大半を占めており、3- および 4- アリールピリジンの合成例が数多く報告されている。しかし、2- メタロピリジンが不安定であるため、2- アリールピリジンの合成例は限られている。

著者の所属研究室では、これまでに、著しい置換基効果に基づく速やかなアザ電子環状反応を実現し天然物合成へ展開している。本研究では、この様な速やかなアザ電子環状反応をさらに発展させ、2- アリールピリジンの効率よいワンポットでの新規合成法の開発に成功している。すなわち、アミン源を種々検討した結果メタンスルホンアミドを用い、種々のアリールビニルスタナン、アルデヒドとエステル基を持つビニルヨウ素化合物の三成分を、Pd(0) 触媒存在下で加熱・攪拌することにより一挙に連結させ、その後連続して塩基を作用させることにより 2- アリールピリジンを合成するというものである。この合成法は、一つの反応容器内で Stille カップリング、イミン形成、アザ電子環状反応、脱離反応の 4 反応を進行させた結果である。7 種類のアリール化合物について 50-70% の収率で目的物を得ており、ユニークな一般的 2- アリールピリジン合成法と言え今後の利用が期待される。

広帯域・高感度時間分解顕微分光システムの開発とその応用

玉井研究室 治井 孝 哲

近年、微小領域における構造と反応ダイナミクスに関する研究が注目を浴びている。本研究では、共焦点レーザー顕微鏡とフェムト秒レーザーを組み合わせ時間分解顕微分光システムを開発すると共に、有機微結晶における励起子緩和過程の解明を試みた。顕微過渡吸収分光システムでは、増幅しないレーザーをフォトニック結晶ファイバー(PCF)にカップリングしてフェムト秒白色光を発生させプローブ光として用いた。励起光は基本波(800nm)ないし第2高調波(400nm)である。検出系にロックインアンプを導入することにより $\Delta OD = 10^{-7}$ ($S/N = \pm 3 \times 10^{-8}$) オーダーの非常に微弱な吸収変化の測定が可能となった。またこの顕微分光システムを利用することで、試料の不均一性を反映した時間分解過渡吸収イメージングの測定に成功した。この新規な分光システムの構築、性能評価、さらにその応用例としてペリレン液膜および α -ペリレン結晶の励起状態ダイナミクスの測定を行った。 α -ペリレン結晶は単位格子内に平行に隣接する分子により自己束縛励起子を形成することが知られているが、その生成過程は明らかにされていない。局所領域の2光子励起による時間分解発光分光と過渡吸収分光を比較することにより励起子生成ダイナミクスの測定・解析を行い、その生成過程にはパルスと同程度の極めて早い過程と約2psで生成する過程の2種類あることを明らかにした。

甘味感受機構解明に向けたバイユノシド類縁ツール分子の合成研究

山田研究室 藤田 麻 里

「甘さはどのようにして感じるのか」——著者はこの問いに対して有機合成化学的手法からのアプローチするため、超甘味配糖体バイユノシドを修飾したツール分子の合成を試みた。

まず、ツール分子の持つ二糖ユニットを β 選択的に導入するために、収率面での課題が残されていた糖の環立体配座制御を利用するグルコシル化反応の改良を行った。種々検討を重ねたところ収率92% ($\alpha/\beta=5/95$)を実現する反応条件を見出した。本反応は糖受容体の水酸基周辺に大きな立体障害が存在する場合ほど適応性に欠ける傾向がある。結局はこの点が支障を来してモデル化合物には適用できなかったが、配糖体合成には隣接基関与による代替法で対処した。

続いてツール分子の二環性骨格部位の供給法を確立するためent体化合物による検討を行った。逆合成計画をもと

にC-3位水酸基をベンジルオキシメチル保護した化合物からの合成を試みたが、アフィニティラベル導入の起点を構築する酸化反応やその別法は功を奏さなかった。そこでC-3位のベンゾイル保護体を利用する経路を設定し、これによってさきの酸化反応はまずまずの収率で進行した。これらの情報は、ツール分子創製の一助となると考えられる。

新規ポリニオブ酸の合成と構造及びタンタル酸の合成、単離の試み

矢ヶ崎研究室 前川 昌 輝

序: 過去に $[(NO)V_{12}O_{32}]^{5-}$ がニトロメタン溶媒中で、イソポリ酸である VO_3^- とNOガスとの反応から合成、単離されている。特に、NO $^-$ を固体状態で単離した唯一のものである点が注目されている。またポリ酸は金属元素が異なっても同形構造を取る事が知られている。そこでNb及びTaを用いて、先の様な化合物、または新規ポリ酸の合成、単離を目的として本研究を行った。

実験:Nb、Ta共に、これらが作るイソポリ酸の内では比較的良く研究されている $[M_6O_{19}]^{8-}$ ($M = Nb, Ta$)を出発物質とした。そして有機アンモニウム塩として単離し、有機溶媒に溶解しNOガスを通じた。

結果:Nbの系からは $[Nb_{10}O_{28}]^{6-}$ が二量化した構造を持つ新規化合物、 $[(Nb_{10}O_{26})_2O_2]^{8-}$ の有機アンモニウム塩の合成、単離に成功した。この様な構造を持つ化合物の単離は初めてのものである。またこの結果は、三量体やそれ以上の縮合体の合成は可能か?加水分解等による逆のプロセスは可能か?等の更なる興味、疑問を投げかけるものである。そしてTaの系からは、出発物質の基本骨格を維持した反応(例えばプロトン化反応 $[M_6O_{19}]^{8-} + X \cdot H \rightarrow [H_xM_6O_{19}]^{(8-x)-}$?)が進行している事を示唆する結果を得た。従って五族元素のイソポリ酸とNOガスとの反応からは、周期的な繋がりは見られず、それぞれ異なった結果を示す事が分かった。

有機微結晶のメゾスコピック構造とエネルギー移動の時間分解SNOMによる研究

玉井研究室 松崎 史 晃

有機固体中の励起エネルギー移動に関しては、バルクの分光学的アプローチにより研究がなされてきたが、結晶に不均一性があったとしても平均化された光学情報しか得られなかった。本研究では、表面の凹凸情報と同時に結晶内部の光学情報・ダイナミクスを測定することが可能な時間分解SNOMを用い、アントラセンおよびペリレンをドープした混晶の励起エネルギー伝達に関する空間的挙動

に関する研究を行った。1) アントラセン薄膜結晶内部の不均一性：昇華法と圧力下加熱融解法で作製したアントラセン薄膜において、昇華膜では結晶表面に数百 nm の溝が観測されるものの内部不均一性は観測されなかったが、加熱融解法では結晶内部に著しい不均一性をもつことがわかった。2) アントラセン結晶中での励起拡散過程：N.A. の大きな対物レンズで試料表面を局所励起し、SNOM プローブを用いて試料表面を走査させることにより蛍光の空間的拡がりを測定した。励起子拡散方程式によって解析を行ったところ拡散定数が $7.8\text{cm}^2/\text{s}$ と求まった。3) アントラセン-ペリレン混晶中のエネルギー移動：混晶昇華膜および混晶キャスト膜のどちらもペリレンが局所的に溝部分に多く存在し、そこで効率よくエネルギー伝達が行われている事がわかった。4) アントラセン結晶の照射による表面変化：SNOM チップからの励起光により薄膜結晶表面の形状変化が誘起され、表面が数十 nm 盛り上がる現象を見つけた。

振動分光法によるPoly(hydroxyalkanoate)の構造と熱的挙動に関する研究

尾崎研究室 村上留美

最近、ポリヒドロキシブタン酸 (PHB) のような生分解性ポリマーが注目されている。PHB 結晶構造はすでに明らかにされているが、分子構造、熱的挙動、分子内、分子間相互作用などは必ずしも十分な研究がなされていない。本研究の目的は、PHB およびその共重合体、ブレンドについて赤外、ラマン分光法、X 線回折法、示差走査熱量 (DSC) 測定などを用いて結晶構造、ラメラ構造、熱的挙動などを調べることである。赤外分光法を用いて PHB の温度変化に伴う CH、C=O、C-O-C などの官能基による分子内、分子間相互作用の変化やバンドの波数と強度の挙動を観察した。それにより、温度に伴うらせん構造の変化と、らせん分子間に形成されると考えられる $\text{CH}\cdots\text{O}=\text{C}$ 水素結合の熱的挙動について調べた。また、PHB 系ブレンドを作製し、ブレンドすることによる PHB の熱的挙動の変化や分子内、分子間相互作用の変化についても調べた。両成分とも生分解性ポリマーである PHB/ポリ乳酸 (PLLA) ブレンドは、低分子量でのブレンドを除いては非相容系であり、PHB/ポリエチレングリコール (PEG) ブレンドはある条件下では一部相容すると報告されている。本研究では、席外聞広報、X 線回折法、DSC 測定、偏光顕微鏡観察、走査電子顕微鏡 (SEM) 測定による PHB/PEG ブレンドの部分的相容性の解明と、PHB/PEG ブレンドにおける PHB 結晶構造の熱的挙動について報告した。

ポリチオフェン誘導体のレーザー分光とメゾスコピック構造に関する研究

玉井研究室 山本正晃

ポリチオフェン誘導体はその導電性と発光性から応用面でも興味の持たれている共役高分子である。本研究では、ポリ (3-アルキルチオフェン) (誘導体 1) と水溶性ポリチオフェン (誘導体 2) を用い、ソルバトクロミズムに伴う光化学ダイナミクスを調べるとともに、薄膜作製時の表面構造を解析した。誘導体 1 では貧溶媒のメタノールおよびヘキサンを溶液に添加すると長波長側に会合体由来の吸収が観測された。メチル基を置換基として持つポリチオフェン誘導体との比較および濃度依存性の実験から、誘導体 1 は π - π スタッキングによる高分子間会合体を形成している事が示唆された。また蛍光・過渡吸収ダイナミクスの測定から、会合体は 1ps 以下で基底状態へ緩和する極めて速い過程を持つことが明らかになった。会合体を含む溶液からスピコートにより薄膜作成すると、メタノール混合溶液からはドット構造、ヘキサン混合溶液からは主にロッド構造が形成された。クロロホルム溶液やメチル基を持つポリチオフェン誘導体からはドット構造しか観測されなかった事から、ヘキサンと高分子側鎖との疎水相互作用と会合体形成がロッド形成に重要な役割を果たしている事が示唆された。誘導体 2 でも pH 変化によって電子状態変化し、薄膜時に形成される表面構造が異なることが分かった。以上の結果から、ポリチオフェン誘導体は、溶媒による電子状態変化と薄膜の表面構造が相関を持つ事が明らかとなった。

LiYF₄中の希土類イオン及びアクチノイドイオンにおける $f^n-f^{n-1}d$ 遷移吸収スペクトルの第一原理計算

小笠原研究室 渡邊真太

近年近紫外、紫外領域などのより高エネルギー領域における発光材料が望まれており、結晶中に発光中心として固溶した希土類イオンやアクチノイドイオンの多重項間遷移を利用したものが有望な候補として期待されている。一方で、発光材料にとって重要な多重項準位の一般的参照データはいずれのイオンについても 40000cm^{-1} までしかなく、それ以上の高エネルギー領域における参照データが存在しないのが現状であった。そこで、本研究では、より高エネルギー領域における発光材料開発の指針を得ることを目的として、非経験的相対論配置間相互作用法を用いて、LiYF₄中の希土類イオン及びアクチノイドイオンにおける $f^n-f^{n-1}d$ 遷移吸収スペクトルや多重項準位構造の解析を行い、多重項準位の一般的な参照データとなるダイアグラ

ムの拡張とスペクトルの解析を試みた。これまで、40000 cm⁻¹ までしか存在しなかった多重項エネルギーダイアグラムを希土類については約 350000 cm⁻¹ まで、アクチノイドについては約 250000 cm⁻¹ まで拡張し、一般的参照データとなるダイアグラムを構築した。また、LiYF₄ 中の希土類、アクチノイドにおける $f^n f^{n-1} d$ 遷移吸収スペクトルにおける多電子系波動関数の解析からその多体効果の重要性が示唆された。さらに、第一原理分子動力学計算から、LiYF₄ 中に Ce³⁺ が固溶した場合、局所的な対称性が低下し、off-center 構造をとっていることが示唆された。

高等植物葉緑体遺伝子群の転写制御機構の解明 —SIG 遺伝子群の光誘導転写機構—

松田研究室 望月 堂 照

シロイヌナズナの PEP の 6 種の σ 因子の遺伝子 (*SIG1* ~ 6) は核にコードされている。本研究では、*SIG* 遺伝子群の光誘導転写挙動の解析、*SIG5* の転写を特異的に誘導する青色光受容体の同定、*SIG5* の光誘導転写の動的挙動の解析及び *SIG5* のプロモーター解析を行った。*SIG* 遺伝子群の転写活性に対する照射光波長依存性を調べるため、暗順応した野生株に青・赤色光を照射し、*SIG1* ~ 6 の mRNA を定量 PCR で解析した。その結果、それぞれの σ 因子が異なる光誘導挙動を示した。特に *SIG5* は、他の σ 因子とは異なり青色光のみに著しい誘導を受けることが分かった。高等植物の青色光受容体としてクリプトクロム (CRY1, CRY2) とフォトトロピン (PHOT1, PHOT2) が知られている。そこで、各受容体の変異体について *SIG5* の mRNA の照射光波長・強度依存性を調べ、それらに関わる青色光受容体を同定した。その結果、*SIG5* の青色光誘導に関わる光受容体はクリプトクロムであり、CRY1 と CRY2 の両方が光受容体として機能することが分かった。また、各 *SIG* 遺伝子の光誘導転写の経時的変化を比較解析した結果、*SIG5* の青色光転写誘導は他の σ 因子に比べて誘導時間が短く、約 30 分の誘導期の後急激に起こり、著しく蓄積量が増加することが分かった。さらに、*SIG5* の青色光誘導転写は 5 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\text{s}$ の閾値を持つことが分かった。

変異導入による光合成光化学系IIにおける PsbLの機能解析

豊島研究室 川本 慎 哉

PsbL は光合成光化学系 II 複合体 (PSII) に存在する機能未同定タンパク質の 1 つで、37 アミノ酸残基からなり C 末端側に一本の膜貫通型 α ヘリックスを持つ。in vitro 再

構成実験から、PSII での電子移動に関与していることが示唆されていた。本研究では、PsbL の機能を明らかにする目的で、葉緑体形質転換を利用し、PsbL の C 末端及び N 末端部位に変異を導入した形質転換タバコを作出して、変異導入が PSII 電子移動活性に与える影響を PsbL 欠損変異体の場合と比較検討した。PsbL 欠損変異体は光独立栄養的には生育せず、スクロース存在下では生育するが、後者の表現形は野生株とは異なる。若い葉では野生株と見掛けは変わらないが、成長に伴い葉の白色化が見られた。さらに、若い葉でも PAM 法によって測定した PSII 電子移動活性は野生株の約 20% に低下していた。PsbL の C 末端の 4 アミノ酸 YFFN に変異を導入した 2 種の変異体 LLLN 及び YFFD では表現形及び PSII の電子移動活性は野生型と変らなかった。一方、N 末端側の一部を欠失させた変異体では PSII の電子移動活性が低下した。低下の原因が Fm の減少ではなく F₀ の増加であることから、N 末端への変異導入がエネルギー移動過程ではなく電子移動過程を阻害することが分かった。これらの結果から、PsbL は PSII の還元側の電子移動に関与していると推定される。

耐熱性CGTaseと非耐熱性CGTaseの比較 解析及びドメイン間相互作用を利用した 遺伝子の発現調節

藤原研究室 北川 寛 之

超好熱菌 *Thermococcus* sp. B1001 株及び常温菌 *Bacillus macerans* の CGTase の熱安定性を分光学的手法により比較解析した。B1001 株の CGTase は高温環境だけでなく、変性溶媒環境下においてもネイティブ構造を維持していることがわかった。デンプンを基質に B1001 株の CGTase を反応させると主に α -CD が合成されるが、反応が進むに従って β -CD, γ -CD の比率が上昇する。しかし、30% のエタノール、アセトン、イソプロパノール、ブタノール存在下で反応を行った結果、いずれも α -CD の比率が高いまま反応が続いた。これは加水分解反応及び糖転移反応が抑制されたためと考えられる。次に部分ドメインを共発現させ、CGTase 発現に及ぼす影響について検討した。大腸菌を宿主に 4 つのドメイン A, B, C, D を CGTase と共発現させたところ、ドメイン A, B, D の共発現により CGTase 活性は 20~30% に減少した。またドメイン C を共発現させた場合では活性は約 34% 上昇した。一方精製した CGTase にそれぞれのドメインを添加したとき、活性の変化は認められなかった。以上の結果から、部分ドメインの共発現は CGTase 遺伝子の翻訳中のフォールディング過程で干渉し、発現量を制御したと考えられる。

分裂酵母における新規ヘテロクロマチンタンパク質Grc3の機能解析

中山研究室 金 大悟

分裂酵母 Grc3 は GFP をランダムに融合させた網羅的局在解析により、ヘテロクロマチン様の局在を示す因子として同定されたタンパク質であり、出芽酵母における相同因子は、pre-rRNA のプロセッシングに関わる事が示唆されているが、実際の機能についての詳細は明らかにされていない。そこで、Grc3 の細胞内局在とその機能がどのように相関するのかを解明する事を目的として機能解析を行った。まず、Grc3 はヘテロクロマチンタンパク質 Swi6 と共局在を示したことから、ヘテロクロマチン領域に局在する因子であることが確認された。次に、Grc3 と相互作用するタンパク質の精製を行った結果、Crb3 と Las1 を同定することに成功した。出芽酵母における相同因子は、それぞれ pre-rRNA のプロセッシングや出芽形成に関わることが示唆されている。Crb3 と Las1 の局在を観察したところ、ヘテロクロマチン様局在を示した。grc3+ 温度感受性変異株を用いて表現型解析を行った結果、変異株では 27S pre-rRNA が蓄積し、25SrRNA、5.8S rRNA が減少している事が分かった。このことから、分裂酵母 Grc3 は pre-rRNA のプロセッシングに関わることが示唆された。さらに興味深いことに、変異株では pre-rRNA の蓄積だけでなく tRNA の蓄積も観察された。以上より、Grc3 は pre-rRNA の成熟過程や tRNA の転写に関わることが考えられるが、この機能がなぜヘテロクロマチン局在と結びつのか、更なる解析が必要であると考えている。

海洋性珪藻 *Phaeodactylum tricornutum* 細胞内カーボニックアンヒドラーゼ(PtCA1) 遺伝子上流領域のCO₂応答性機能解析

松田研究室 阪上国寛

海洋性珪藻 *Phaeodactylum tricornutum* における CO₂ 応答性モデル分子であるカーボニックアンヒドラーゼ (PtCA1) は、その遺伝子 (*ptcal*) 上流領域に CO₂ 応答性を有している。本研究では *ptcal* の転写量調節領域を同定することを目的とし、外来最小プロモーターを用いた *ptcal* プロモーター領域 (*Pptcal*) の詳細解析を行った。外来最小プロモーターとして、哺乳類で構成的に発現する TATA 型の cytomegalovirus 最小プロモーター (mPCMV) を使用し、mPCMV が *P.tricornutum* において構成的に高く発現することがわかった。次に、CO₂ 応答領域上流の何らかの発現量調節領域を調べるために *Pptcal* の 5' 末端から数百 bp ずつデリベーションした配列に mPCMV、GUS レポーター遺伝子 (*uidA*) を連結したコンストラクトを珪

藻に導入し、得られた形質転換体の GUS 活性を測定した。その結果、最小プロモーター領域の構造にかかわらず、*Pptcal* の CO₂ 応答領域の機能が *uidA* 発現調節に発揮され、発現量の変動も見られた。この CO₂ 応答性の発現は、タンパクレベルだけでなく、転写レベルでも確認できた。また、ゲノミックサザン解析を行い、導入した遺伝子のコピー数と発現量との相関を調べたところ、明確な相関は得られなかった。そこで、これまでの測定データをまとめると、*Pptcal*-1292 から -824 の領域で発現量が 50% 以上減少することがわかった。したがって、*Pptcal*-1292 から -824 の領域に発現量調節に関わる領域が存在することが示唆された。

海洋性珪藻 *Phaeodactylum tricornutum* における CO₂ 不感受性変異体の単離及び原因遺伝子の同定の試み

松田研究室 中島健介

珪藻は、効率よい炭素固定のために無機炭素濃縮機構を有しており、その重要因子であるカーボニックアンヒドラーゼ (*PtCA1*) は、CO₂ 濃度によって発現量が調節され、*ptcal* プロモーター領域の CO₂ 応答性も確認されている。従って、珪藻には、CO₂ 感知機構が存在すると考え、本研究では、珪藻が外挿 DNA を核ゲノムにランダムに取り込む性質を応用し、*ptcal* プロモーターの直下に Zeocin 耐性遺伝子を継ぎ込んだベクターを細胞に形質転換することにより、変異体の単離を試みた。

上記のベクターを野生型細胞へ導入し、Air 環境下と 5% CO₂ 環境下での選抜を経て、51 クローンを変異体候補として単離した。51 クローンの CO₂ 感受性確認のため、5% CO₂ 及び Air 環境下生育クローンより全 RNA を抽出し、*ptcal* の転写レベルを野生型細胞と比較したところ、14 クローンにおいて Air 環境下の *ptcal* の転写レベルが減少していることがわかった。

最近、cAMP 代謝系が CO₂ 感知機構として働いていることが示唆され、可溶性アデニル酸シクラーゼが HCO₃⁻ センサーである可能性が報告されているが、*P. tricornutum* のアデニル酸シクラーゼ (AC) は未同定である。そこで、EST 配列より得られた AC 候補遺伝子の全長をクローニングするため、3' RACE 法を用いて、EST 配列より C 末端の塩基配列を決定した。

初期発生過程における 低酸素応答系因子の機能解明

今岡研究室 村口太一

生物が低酸素状態に曝されると数々の遺伝子を誘導し応答します。これらの低酸素応答性遺伝子の誘導を行うのが低酸素感受性因子 HIF-1(Hypoxia Inducible Factor)です。通常の酸素状態で HIF-1 は特異的水酸化酵素 PHD による水酸化を引き金にユビキチン化され積極的に分解されます。一方、低酸素下では PHD の活性が抑制されるために HIF-1 は分解されずに安定化、標的遺伝子を誘導しています。ヒトの PHD はゲノム情報から 3 種類の遺伝子 (PHD1,2,3) が報告されていますが、機能は十分に明らかにされていません。さらに、HIF-1 欠損マウスは胎生致死を示すことから、低酸素応答機構が発生において重要な役割を持つことが示唆されていますが、詳細は明らかにされていません。本研究は、モデル生物であるアフリカツメガエル胚を用いて、初期発生過程での低酸素応答系因子の生理機能の解明を目的として行いました。この研究の成果として、2 種類のツメガエル新規 PHD のクローニングに成功し、これらが発生過程で発現と局在が異なることを明らかにしました。また 2 種類の PHD を過剰発現し HIF-1 を減少させると頭部および眼胞形成に異常を示しました。これらの結果から、低酸素応答機構は中枢神経形成に関与している事が示唆されました。得られた知見は、再生医療への応用や発生機構の解明に繋がると考えています。

神経形成過程におけるProtein disulfide isomerase (PDI)の機能解析

今岡研究室 山崎絢子

環境ホルモンの一つである Bisphenol A(BpA) は、プラスチックなどに含まれる化学物質です。BpA を妊娠ラットに投与すると、多動つまり落ち着きのない仔が生まれてくる事が明らかとなりました。この原因を解明するため、ラット脳から BpA 結合タンパク質として、Protein disulfide isomerase (PDI) が同定されました。PDI はタンパク質に対して S-S 結合の形成を触媒する分子シャペロンとしての機能や脳神経系の形成において重要な甲状腺ホルモン T3 と結合することが明らかとなっており、中枢神経形成過程において重要であることが考えられます。そこで、中枢神経形成過程における PDI の機能解析を目的とし、ヒト神経細胞における PDI の相互作用因子の検索および、アフリカツメガエルを用いた発生過程における PDI の機能の検討を行いました。ヒト神経細胞における PDI の相互作用因子の候補として translation elongation factor 1By を TOF-MS により同定しました。また、発生過程におい

てアフリカツメガエル胚を BpA 曝露することにより神経形成期において PDI タンパク質の発現量が減少している事を明らかにしました。BpA はアフリカツメガエル胚において頭部領域の形成異常を引き起こすことから、神経形成期における BpA の影響に PDI の直接的な関与が示唆されました。

超好熱菌のタンパク質再生系遺伝子の 機能解析

藤原研究室 吉田正也

Thermococcus kodakaraensis は 60℃から 100℃で生育可能な超好熱菌である。この生育温度範囲は同目に属する近縁種と比較すると非常に広い。またゲノム解析より近縁種には存在せず、本菌に特異的な分子シャペロン遺伝子の存在が明らかになっている。本研究では広い温度範囲での生育に重要だと考えられる *T. kodakaraensis* 由来の分子シャペロンに着目し、それらの解析を行った。2 次元電気泳動法及びウエスタン解析より、生育温度の下降に伴いシャペロニン CpkA の発現が、上昇に伴いシャペロニン CpkB の発現量が増加することが示された。RT-PCR 法での転写量解析から、*cpkB* は培養温度の上昇に伴った mRNA 量の増加が確認できた。一方で *cpkA* では mRNA 量に差がないことから、*cpkA* は転写後レベルで、*cpkB* は転写レベルで発現調節されていると考えられた。また *T. kodakaraensis* に存在する 2 つのプレフォルディンの違いを明らかにするため、組換え体の取得を試みた。*Tk1005* 及び *Tk0643* を個々に発現し、*Tk1121* 及び *Tk1122* については共発現を行い、それぞれをクロマトグラフィーにより精製した。精製タンパク質を用い、クエン酸合成酵素の熱凝集抑制の効果を検討すると、いずれの複合体においても活性を確認することができた。

工場・研究所見学記

大日本住友製薬会社大阪研究所訪問記

生命科学科 向 縄 昌 輝

平成 17 年 11 月 2 日、矢倉先生の引率により、私たち生命科学科の三回生 15 名と大学院生 10 名を含む計 25 名は JR 安治川口駅から徒歩 10 分にある大日本住友製薬株式会社の大阪研究所を訪問、見学をさせていただきました。大日本住友製薬は、2005 年 10 月 1 日に大日本製薬と住友製薬が一緒になって新しくスタートした会社であり、国内有数の営業力を保持する企業の一つです。また、主な事業内容である医療用医薬品事業は、人々の健康に大きく貢献し、とても重要なものです。

まず研究所では全員が八号館講堂に案内され、研究統括部の中山さんより会社の概要について聞かせていただきました。大日本住友製薬は、「新たな価値を作り広く社会に貢献する」「能力を発揮する機会を提供する」「地球環境に貢献する」という理念の下に設立され全国各地に支店を持ちます。そして、最新技術・情報を駆使し新薬の研究開発に臨んでいます。また、創薬研究の流れについても教えていただきました。新薬開発のプロセスというのは、スクリーニング、非臨床試験、臨床試験の三つのステップがあり、あわせると 10 年以上もかかると言われました。驚いたことに、40 数万個の化合物の中から、数十個しか新しい薬にならず、またその 30% は薬効によりドロップしてしまうそうです。一つの薬を作るのに、一つの人生をかけなければならないということに、創薬という事業の重みを感じました。さらに現在は、創薬のターゲットとして化合物の受け皿である受容体に重点を置いて研究開発に取り組んでいることも教えていただきました。

次に研究業務第二部の加賀屋部長より就職状況および就職に望ましい資質についてのお話をお聴きしました。まず研究者というのは、テーマを自分で考え、提案できる知識と能力が必要であり、高い専門性と研究スキルはもとより、プレゼンテーションする能力が重要であることを教えられました。また、創薬というのは前述したようにとても時間がかかり、成果もでにくいので、忍耐力や研究への情熱、モチベーションを持続させる能力、研究メンバーとの協調のために社交性も必要であり、研究が好きだけではダメであるとおっしゃられました。さらに、研究するに当たっての情報収集は英語の文献や論文からするので英語力は必須であると強調されました。就職後の話については、自分がやりたいテーマを発見した場合、それをうまく提案できれば、実行できるということにとても魅力を感じました。

お話が終わると実際に研究所の中を案内していただきました。自分が想像していたものよりスケールが大きく、学校の研究室しか知らない自分にはただただびっくりするしかありませんでした。しかし、自分が普段いつも使用している実験器具などを発見すると、この職業がとても身近に感じられ楽しかったです。研究所の中には女性も多く、みんな楽しそうに仕事をしているのが特に印象的でした。

今回の、研究所訪問は、今後大学院に進学し就職する私にとって大変参考になりました。これからは自分の未来のビジョンをしっかりとって勉学に励んでいきたいと思えます。

最後になりましたが、ご多忙の中、研究所の案内、丁寧に説明していただいた大日本住友製薬株式会社の大阪研究所の皆様、そしてこの研究所訪問を指導していただいた矢倉先生に心より感謝いたします。



発行人：関西学院大学理工学部長
 関西学院大学理工学部産学連絡研究会代表 尾崎 幸洋
編集：関西学院大学理工学部広報委員会
URL：<http://sci-tech.ksc.kwansei.ac.jp/>