

戦略的創造研究推進事業
ナノテクノロジー分野別バーチャルラボ

研究領域「環境保全のためのナノ構造制御触媒
および新材料の創成」

研究課題「分子の特性を最大に引き出すナノサ
イズ構造体がつくる場の研究」

研究終了報告書

研究期間 平成16年10月～平成20年3月

研究代表者：中村 振一郎
(株)三菱化学科学技術研究センター
基盤技術研究所 計算科学室長 三菱化学フェロー

1 研究実施の概要

本研究の目的は“分子の機能を最大限に発揮させるナノサイズ場の設計原理の解明”と定めた。この構想は環境負荷最小の工業製品に至る基礎研究である。攻略への大きな示唆を生体が示している。生体は分子レベルで見ると化学的エネルギーを極限的な高効率で力学的エネルギーに変換するナノ構造体である。一方、現代の工業製品は、部分的には高効率であっても、時間（耐用年数・リサイクル）空間（製造過程・原料と製品の運搬）を加味した系全体に鑑みて判定すれば生体に到底及ばず、排出エントロピーの増加という深刻な問題に直面している。生体は Si デバイスと対比的に曖昧さを許容し、熱ゆらぎの中で機能し、高い効率と環境適合性を保持する。ゆえに 40 億年も地上で生成消滅を繰り返して生存を成し遂げることができたのであろう。この秘密を解き明かし、それを物質設計に取り込む鍵は、空間階層と時間階層にカップルしてたたみ込まれた精妙なメカニズムの解明であろう。ナノ領域の現象は vdW 相互作用など量子論に由来する原理が支配し、実験的には自己組織化という現象論的な事実の知見が蓄積されている。しかし、まだ工業的定量的制御が可能ではない。やってみなければ解らない。その理由のひとつはナノレベルになるとマクロ領域（分子間相互作用の詳細をバルク変数として扱える領域）において高い完成度を誇った化学工学も破綻寸前であるからである。

このような課題は民間企業の研究開発の枠を超えており、一企業の利益を追求して解決されるものではない。然し乍ら、企業の枠を超えた地球規模乃至国家的視点から、民間企業が健全に繁栄を継続させるには、これこそ将来の民間企業が体現させるべき必須の研究であると確信する。民間企業経験を持ちながら、現在アカデミアに籍を置く賛同者らと議論と構想の模索を重ね、本課題「分子の特性を最大に引き出すナノサイズ構造体がつくる場の研究」を提案し、計算科学とナノ領域実験の融合プロジェクトとして遂行した。

具体的な着地点として、生体が人工的デバイスと際立った違いを示すような実験事実、つまり、ゆらぎの中で機能し、曖昧さを許容し、フラクタル構造という特異的な形態を自己組織化結晶成長の結果として出現させる、これらを理解することを目指した。

主要な成果を5点に要約

第一は、「光応答分子が、おかれた場に応じて光反応量子収率にゆらぎを呈した。」（九大入江研、単一分子の蛍光測定）という不思議な観測事実のメカニズム解明に成功したことである（中村 Gr）。単一分子の特性（分子内エネルギー移動）にその秘密が存在するのでは無いことを検討したのち、場との相互作用にその秘密が存在することを明らかにした。光応答機能性分子とそれを包みこむポリマー空間（場）の相互作用はガラス転移点 T_g に依存するという実験事実に対して、はじめて分子論的描像を提出した（JACS2007）。 T_g という場の変数にはこれまで種々の解釈が提案されて来たが、分子レベルではまだ未解明部分の多い物理量である。興味深いことに、以下に述べる第二、第三そして、第四の成果からも、 T_g の分子論が浮き彫りにされている。

第二の成果は、第三、第四と並んで、生体の機能と密接に関連した形態形成の秘密に迫った成果である。辻岡 Gr は有機薄膜への金属蒸着選択性を発見し、そのメカニズム解明に目処をつけた（Nature に 2 度トライするも適わずして、JACS）。その選択性を決めるメカニズムを支配する物理量は T_g であることを明らかにし、さらに恰も生物にみられるかのようなアラベスク模様が出現するという僥倖を得た。その発現機構の解明には光学活性体分晶という視点から一歩前進した。これは生きているかのような美しさだけでなく、生体にとって不可分な光学活性体とその結晶成長メカニズム解明へのヒントを示唆している。

第三の成果は、内田らが光刺激により、超親水・超撥水を示す結晶を見出したことであ

る (Angew2006)。興味深いことに光刺激によって起こされた発毛結晶はフラクタル表面となることが、辻井らにより示された。フラクタル界面という（生物表面には胃腸の内壁など普遍的にみられる）特異的な界面が出現するメカニズムを理解する大きな手がかりを得た。この途上で内田らは素晴らしい副産物に遭遇した。それは光を当てると舞踏する結晶の発見である。この解明は今後の課題である。

第四の成果は、辻井らのフラクタル表面出現の源がほぼ解明されたことである。辻井 Gr では AKD というワックスが放置されるとフラクタル表面となることを世に示し、すでに著名であったが、今回フラクタル構造が出現するには準安定相を経ることが必要条件であること、そして分子の形も単純鎖でなく枝分かれ構造が必要であることを示した。結局、フラクタル構造出現の源は、分子の形とその熱力学的相の双方に宿ることが解った。

第五の成果は、これら実験研究と平行しながら行った理論的手法構築である。関野 Gr は Wavelet を用いた多重解像度解析の定式化を進展させ、中村 Gr では、蛋白など生体系巨大分子の NMR ケミカルシフトを FMO 法と GIAO, CSGT 法を融合して解くコード改良に成功した。

これら 5 つの主要成果に加えて、以下の成果を加筆したい。坂間 Gr らは新たな交差相関 (磁性と誘電性が相関する、つまり磁性で 2 値、電荷で 2 値、合計 4 知の変化相関する現象) というセレンディピティを示した。さらに中村 Gr では、励起状態の解明に向かうべく、現実的サイズの分子において、光励起状態の量子ダイナミクスを代表的色素フェノールブルーの超高速緩和を計算し、色素の劣化に新しい解釈を与えつつある。さらに弱い相互作用を扱う計算科学 (磁場と分子の相互作用、水素結合系) は重点な焦点と考え、ジアリルエテン開設系の ESR スペクトル解析に目処をつけた。

2 研究構想及び実施体制

(1) 研究構想

開始時の目標設定： 開始時に図 1 に示す三項目を目標として設定した。これらの高い目標は現在まで継続している。第一は分子の動的特性設計であり、第二は単分子計測に現れるゆらぎの意味とそれを積極的に活用する道を探索することである。開始直後の徹底調査から分子モーター理解は想像を絶する超難問であることが明らかとなった。現代生物物理の大問題であり、計算科学が vdw 相互作用を的確に扱い得ないとい

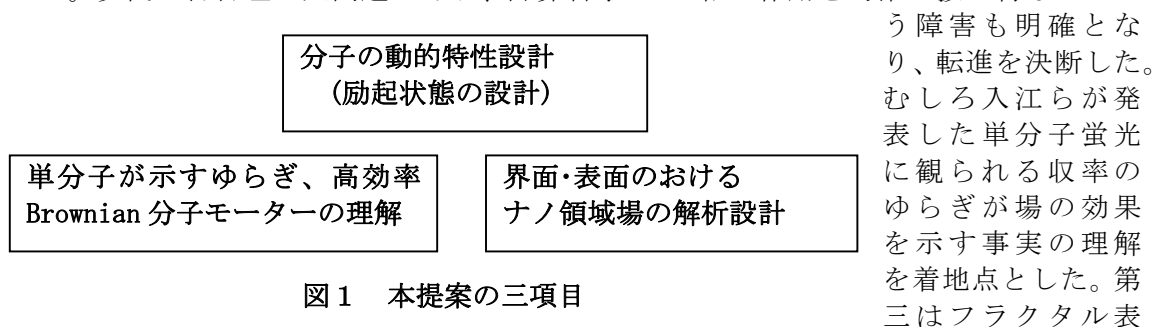


図 1 本提案の三項目

う障害も明確となり、転進を決断した。むしろ入江らが発表した単分子蛍光に観られる収率のゆらぎが場の効果を示す事実の理解を着地点とした。第三はフラクタル表面出現の謎に代表されるナノ構造体の造る場を理解する試みである。自己組織化の最も典型的な例である結晶成長のメカニズムとフラクタル表面出現の源の関連を紐解く試みであった。

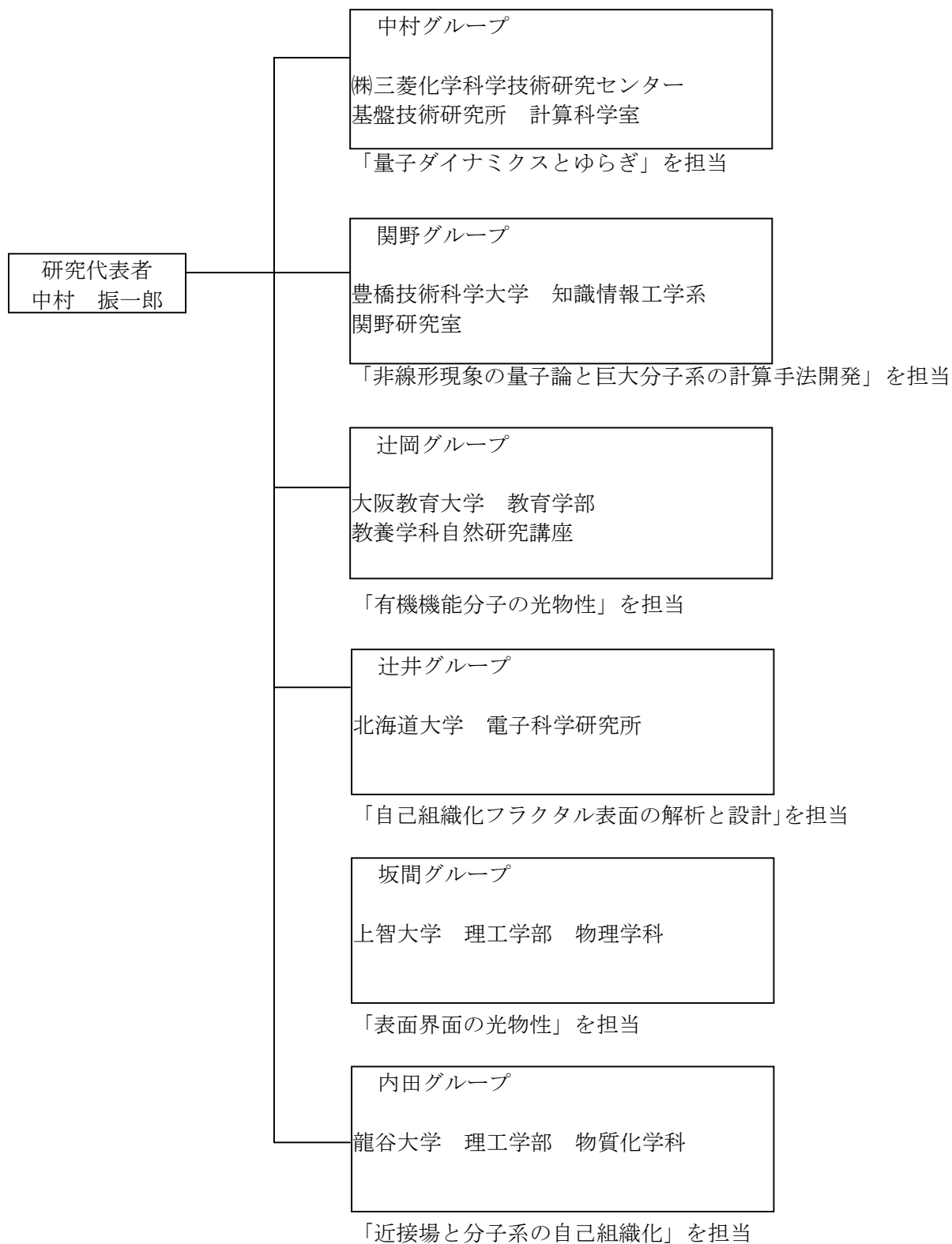
新しく生まれた目標： 二つの重要な変更を行った。第一は生体に置ける分子モーターのメカニズムを理解することは想像を絶する難問であると認識し、これを断念した点である。代わりに地道なアプローチにもどり蛋白の NMR ケミカルシフト推算法構築という手堅い課題に変更して実現することができた。この過程で三菱化学生命科学研究所との連帯を蜜にした結果、糖鎖のダイナミズム、そしてアミロイド β の自己

凝集過程の解析を開始し、終了までに一定のマイルストーンを建てるであろう。第二の変更は、「自己組織化を可能にする原理」という大問題への理論的挑戦も、身の丈と残り時間に鑑みて問題の分割を行い、まずはWavelet解析による多重解像度解析の基礎固めとし、分子計算の基底として活用する第一歩を踏み出した。

グループの役割分担

中村G rは単一分子のゆらぎをTgの分子論を中心的に扱いながら、量子化学計算を主とし全実験G rのシミュレーションと理論的考察を担当した。辻井G rはフラクタル表面出現の源を実験的に探り、内田G rは光刺激による有機結晶の応答を追求した。光応答結晶成長や結晶メカニカルそしてフラクタル表面の出現を実験的に追及し、また多くの化合物サンプルを合成した、辻岡G rはメタル蒸着を選択する表面の実験的追及から生体に似たアラベスク模様を発見しその物理化学的意味を探った。坂間G rは無機薄膜製造の実験を担当し、交差相関と非線形発光メカニズムを解析した。関野G rは本課題に即して新しい方法論の開拓に専念した。特にWavelet解析を重点化した。

(2)実施体制



3 研究実施内容及び成果

3.1 量子ダイナミクスとゆらぎ (三菱化学 中村グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

分子の応答に含まれる「ゆらぎ」のメカニズム解析(主要成果)

これは化学・力学エネルギー変換のメカニズム解明をめざした本プロジェクトの眼目である。「ゆらぎ」はノイズではない、むしろシグナルである、という視点からゆらぎと曖昧さに満ちた生体理解の手がかりを得ることを目指すからである。この目的で生体をそのまま扱うのは難しいが、この課題に直截的に切り込むことを可能とする実験事実が九大入江研から報告されたのでこれを扱う。「光応答分子が、おかれた場に応じて光反応量子収率にゆらぎを呈し、かつメモリー性を有している。」(単一分子の蛍光測定) という不思議な観測事実である。このメカニズム解

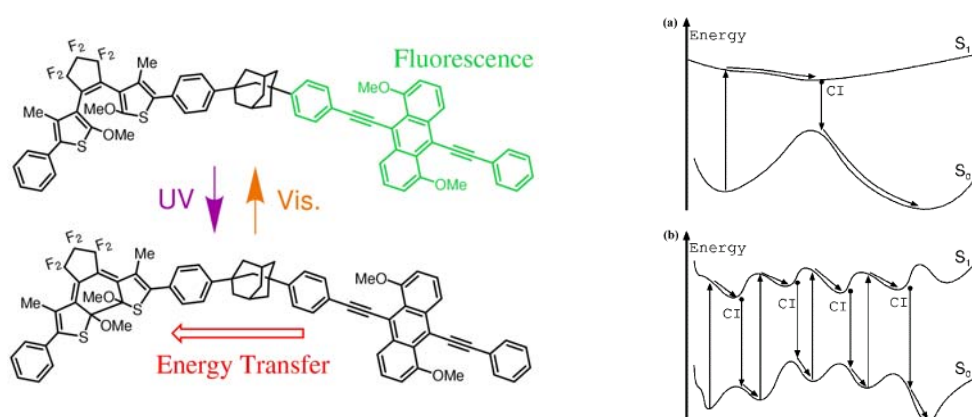


図2 高分子媒体中の DAE 閉環/開環反応とメモリー性を示す作用機序：開環状態で発光する(図左上部)、閉環状態では蛍光色素から DAE にエネルギー移動がおり消光される(図下部)、この単一分子の光応答が媒体に応じてメモリー性(入力フォトン数を記憶)を示す。右上はメモリーを示さない場合(溶液中) 右下は高分子媒体中(高 Tg)でメモリー性を示す場合のポテンシャル面のスキーム

明に成功した。要旨を図2に示す(JACS2007)。この特異な現象のよって来る所以は分子の特性(分子内エネルギー移動や励起子のカップル)では無いことを検討したのち、場との相互作用に因ることを明らかにした。この現象は Tg が室温よりも低いポリマーでは顕著に見られない。つまり室温で溶液とおなじ場ではゆらぎも、メモリー性も現れない。光応答機能性分子を包みこむポリマー空間という場と分子の相互作用をガラス転移点 Tg が特徴づけている。Tg という場の変数にはこれまで種々の解釈が提案されて来たが、分子レベルではまだ未解明物理量である。“高分子の Tg の分子論的実体は何か？”に対して一つの新しい見方を MD によりシミュレーションして“多重局所停留点モデル”(図2)に到達した。入江研と共著の JACS が受理された。興味深いことに、以下に述べる辻岡、辻井、内田 Gr の成果からも、Tg の分子論が浮き彫りにされている。

蛋白 NMR ケミカルシフト予測技術構築 (第二の成果、プレス発表済)

医薬や診断薬ひいてはバイオテクノロジーに強く求められている重要課題は NMR データの帰属である。蛋白と基質の相互作用 X 線構造が入手できない系こそチャレンジであり、そこでは NMR データが本質的なデータとなる。ところが巨大分子の MO 計算はこれまで不可能であった。我々はこれを克服すべく産総研北浦博士の FMO 法のソースコード(GAMESS)と既存 NMR アルゴリズム(GIAO, CGTO)の融合を実現させるべくソフト開発を行った。三菱化学生命科学研究河野博士(NMR)の協力を得て完成させた。図3に結果をしめす。(ChemPhysLet 受理、プレス発表済済)。

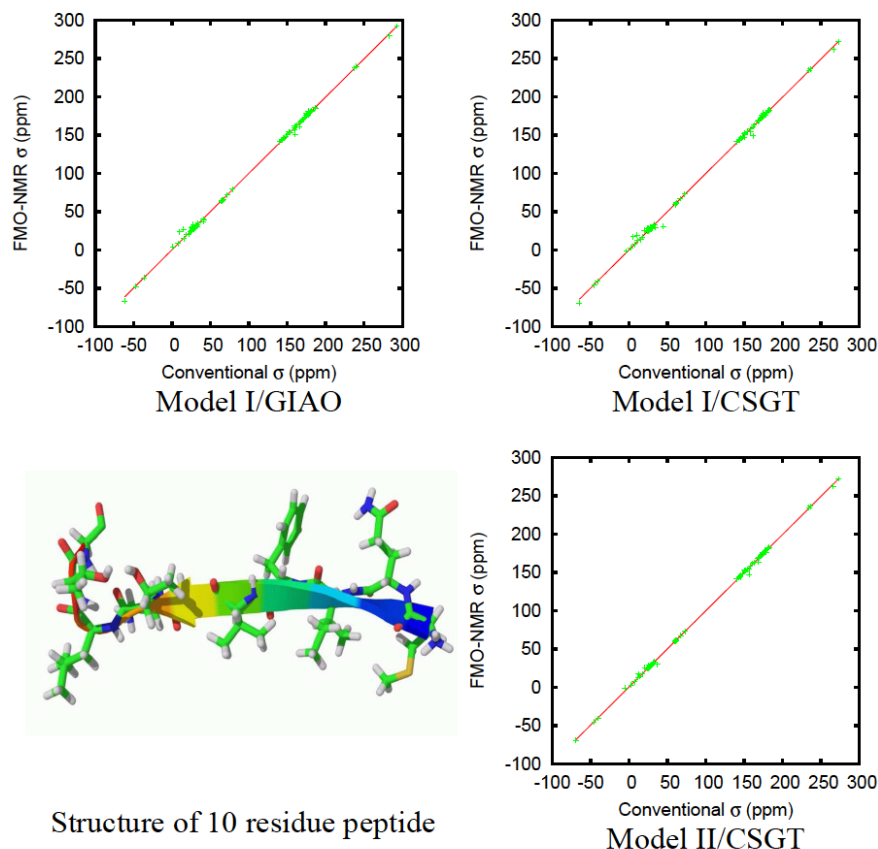


図3 FrangmentM0法と従来型M0法によるNMRケミカルシフト δ 計算の精度比較：巨大蛋白分子では従来法による計算が不可能であるから10残基仮想ペプチドを用いてFMO法の精度を従来型M0法と比較した。 δ の計算法にはGIAO法とCSGT法があり、前者ではModel I（点電荷モデル）のみ、後者ではModel II（2電子積分を考慮）をも適用した。いずれも高精度で巨大分子に適用可能であることを示している。

ESRスペクトルの計算手法の強化開発（第三の成果）

フォトクロミックジアリルエテンとそのモデルの電気化学応答追跡に用いるESRスペクトルの同定を試みていた九大松田助教らは予想外の困難に直面した。基礎的な分光データの帰属を提供することは計算科学の確実な貢献であると考え、電子相関と分子の動的幾何学的変化を正しく加味した結果、無事この同定に成功した。JPC, AおよびChemLetに受理された。

分子の動的特性設計へ量子ダイナミクス手法の強化開発（第四の成果）

フォトクロミックジアリルエテンとそのモデルの励起状態量子ダイナミクスを、CASSSF および CASPT2レベルで追跡した。波束のダイナミクスを半古典量子MDにて追跡し、量子収率の決定機構を解析した。手法アピールとして工業的に意味のあるフェノールブルー色素についてこの成果を報告し、JACS に受理された。

(2)研究成果の今後期待される効果

場の特性を分子の応答シグナルによってモニターするという方法論は、比喩的に言えば、脳波や心拍で体調を診断するやり方である。このようなシグナルには部分的な情報から洩れ落ちてしまいがちな系全体の特性がたたみこまれている。これを分子レベルに活用する道は新しく独自である。要素還元論的細分化の一途をたどりすぎた科学が統合化の知を求めてゆかねばならないという新しい思想パラダイムの具現化であるから、今後も重要性を増すであろう。

3. 2 有機機能分子の光物性 (大阪教育大学 辻岡グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

近年のエレクトロニクスの発達と共に身の周りには様々な電子機器があふれるようになってきた。一方、地球規模で進展する環境破壊・温暖化への対策として、電子部品・機器に対しても省エネルギープロセスや完成品が求められるようになっている。これに呼応する為、エレクトロニクス分野では有機分子材料を用いたデバイス開発が活発になってきている。有機エレクトロニクスと呼ばれるこの分野では、有機 EL 材料を用いたディスプレイはすでに実用化され、さらに大型化に向けた開発が進んでおり、トランジスタやメモリ素子の研究も活発で、究極的には単一分子素子をも目標とされている。

以上の状況に鑑みて、本研究プロジェクトでは当初新しい原理に基づく有機半導体メモリの研究を主テーマに研究を行ったが、その研究過程の中でメモリ以外の新たな現象・分子の機能の発見に至り、その結果以下の成果を得ることが出来た。

1) 低環境負荷を実現する新しい有機半導体メモリ原理の研究

現在実用化され、あるいは研究・開発が進んでいる不揮発性のメモリのフラッシュメモリ、強誘電体メモリ、M-RAM などは、微細化を行うと様々な困難に直面することが知られている。これに対してフォトクロミック分子の可逆的異性化反応を用いるメモリでは、原理的に単一分子レベルにまで微細化が可能であるため、有機あるいは分子メモリとして大変有望である。しかしながら、光で異性化反応を起こすフォトクロミック分子を、如何にして電氣的なメモリとして応用するかは、大きな課題であった。そこで本研究テーマにおいては、フォトクロミック分子の電氣的なキャリア注入による可逆的異性化反応の原理実証に関する研究を行った。

フォトクロミック・ジアリールエテン分子 (DAE) を真空蒸着法によりアモルファス膜形成し、それに対して ITO 陽極基板からホール注入、Mg 陰極側から電子注入することで分子を励起状態とし、異性化反応させることにはすでに成功していた。しかし、低環境負荷→省エネルギー型メモリの実現のため、さらなる高効率化が必要であった。カナダの Branda 等によって、数種の DAE 分子が電気化学的手法により溶液中においてカチオン状態を経て異性化反応することが報告されていた。これは薄膜素子で言えば、電子とホールの両方ではなく、ホール伝導だけで異性化反応できる可能性を示している。そこで、DAE 分子膜に対して、陰極側からの電子注入を阻止する電子ブロック層 (EBL) を設け、キャリア注入による異性化反応実験を行った。その結果、電子ブロック層が厚いほど (電子注入量が少ないほど)、キャリアあたりの分子の異性化効率が高くなることが示され、薄膜状態におけるホール伝導異性化反応が実証された。この実験ではこの結果だけに留まらず、高効率・省エネルギーという観点で、さらに興味深い現象が観察された。

図 3.2.1 はこの素子に対する異性化効率の印加電圧依存性を示したもので、注入キャリア量に対して電流の半減期が早いほど高効率であることを意味する。この結果によれば電圧が低ければ、極めて高効率に異性化反応がおきていることを示している。これは低電圧→分子の移動速度が遅い→カチオン寿命が長い→異性化の確率が高い、ということから来ている。即ち、ホール伝導の異性化では、キャリア消滅が起こらないために 1 個のホールが複数の分子を異性化反応させることが出来るだけでなく、低電圧動作による効率の増大現象も期待できる。この結果は、究極の省エネルギー・超高効率なメモリ動作原理が期待できることを示しているといえよう。

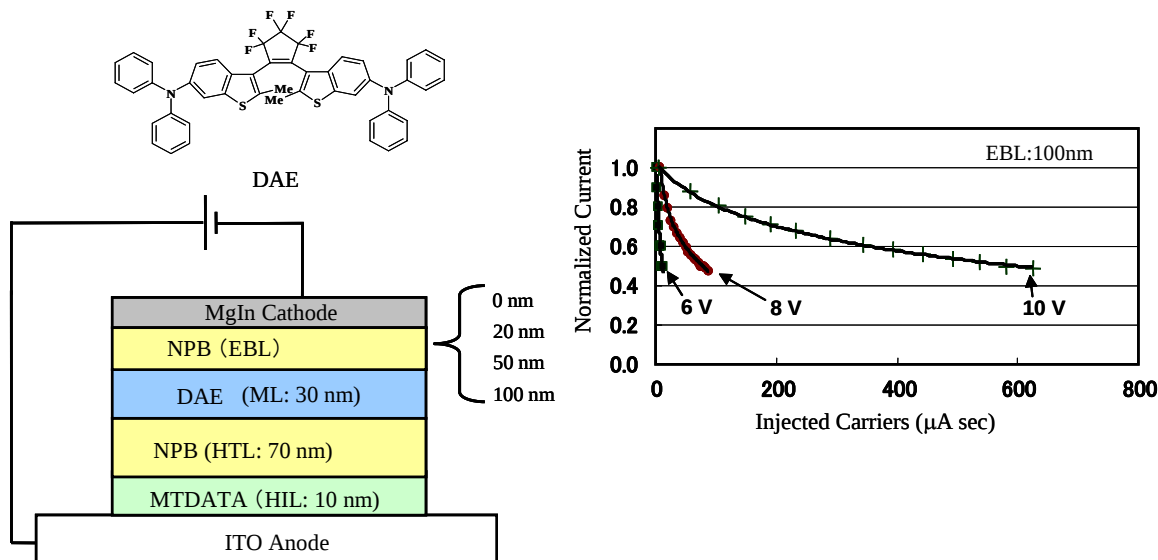


図 3. 2. 1 有機メモリのホール伝導異性化実験に用いた素子の構造（左）と、異性化効率を表す電流半減期の印加電圧依存性（右）

2) フォトクロミズムによる金属蒸着の選択機能

上記の有機半導体素子の研究では、陰極に金属 Mg を真空蒸着で膜形成していたが、この研究プロセスにおいて特定種の DAE の上には Mg 膜が全く形成されないという現象に偶然出くわし、表記 DAE の新機能である金属蒸着選択性の発見に結びついた。金属蒸着選択性とは図 3. 2. 2 に示す様に、消色アモルファス状態の DAE 膜(i)に対して一部を遮蔽して紫外線照射し着色状態部分を作り(ii)、さらにその上から金属 Mg をマスクレスで蒸着すると、着色部にはのみ Mg 膜が形成され、消色部分にはまったく形成されない(iii)という現象である。この新しい機能は、例えば DAE 膜に対してレーザー走査によりミクロンオーダーの異性化パターンを作れば、それに対応する異性化パターンが形成できるので、様々な有機デバイスに対する省エネルギー電極形成プロセスに応用が可能である。実際に我々は、図 3. 2. 3 に示す様に代表的有機デバイスである有機 EL 素子にこの機能を使って電極パターンを形成し、そのパターンに対応した素子からの発光に成功した。

この機能の起源の解明は、本研究における重要なテーマであった。フォトクロミック反応では、光異性化に伴って吸収スペクトル以外に様々な物性が変化する。本機能にはどのような物性変化が効くのかを解明するために手探りの研究が続いた。これについてもまた、まったく別の実験から解明の糸口が得られた。ここでは詳しく述べないが、真空蒸着で Mg 膜が形成される異性化状態のアモルファス膜は、100℃前後の比較的室温より高いガラス転移点 T_g を有しているのに対して、Mg を堆積させない異性化状態は室温付近の T_g を有している。 T_g 付近では分子はガラス状態からゴム状態へと転移し、表面分子は活発に運動している状態となる。Mg 蒸気原子はこの様な活発に運動している分子表面に達したときに、その運動の活性さにより跳ね返されるために表面に堆積しないものと考えることが出来る。実際に図 4 に示す様に DAE 以外の様々な有機膜に対して基板温度を変化させて Mg 蒸着を行ったところ、やはりそれぞれの T_g に対応した基板温度において Mg 堆積が起こらなくなる様子が観察され、上の考察の正しさが確認された。

尚、最近この DAE の異性化による蒸着選択機能に関し、その Mg 原子反射機能に着目した「光誘導型金属原子集積機能」への発展可能性が新たに発見された。

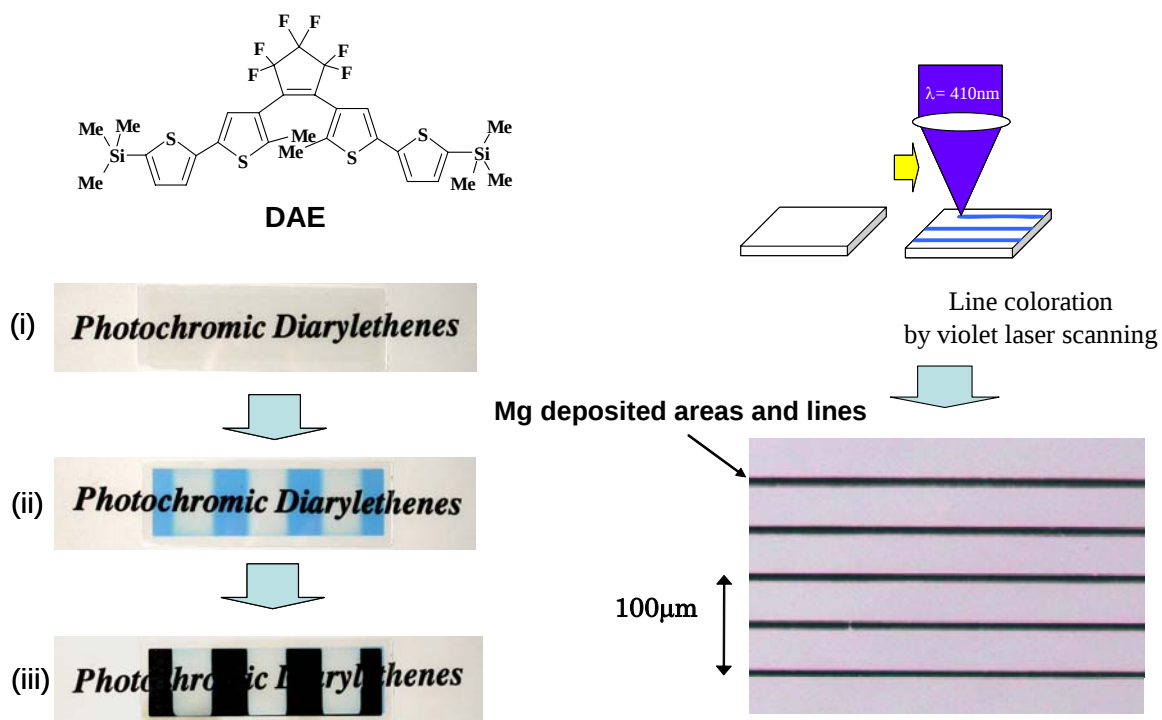


図 3.3.2 DAE による金属蒸着選択機能と、それを用いたレーザー走査による微細金属パターンのマスクレス形成

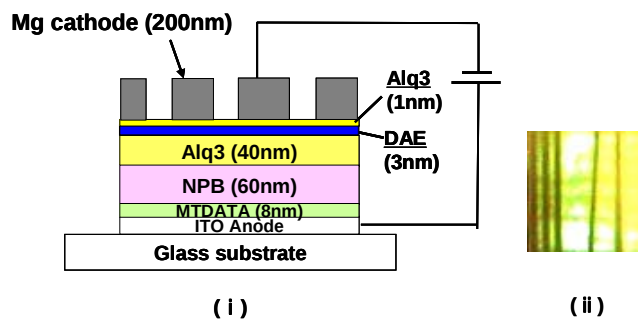


図 3.2.3 DAE の金属蒸着選択機能を用いた有機 EL 素子の電極パターン形成と、対応する発光

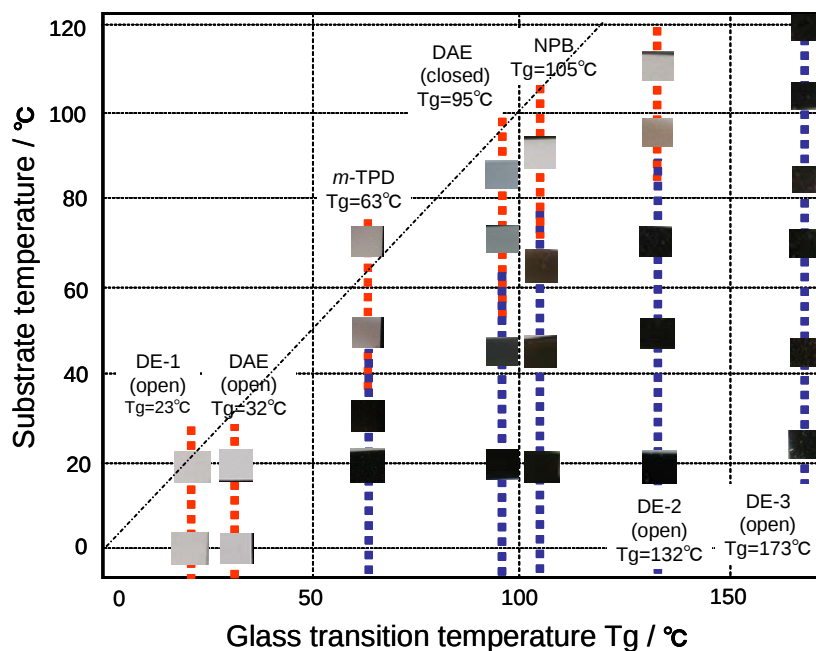


図 3.2.4 様々な Tg を有する有機膜の Mg 堆積性と基板温度の関係

3) DAE の自己組織化による特異な結晶形態

上記の (1) (2) の研究過程で、偶然発見された興味深い現象として、図 3.2.5 で示すようなアモルファス DAE 膜の自己組織化による特異で美しい結晶形態があげられる。なぜこのような結晶が自己組織化するかについては、今後の研究課題であるが、現在までのところ結晶のそれぞれの螺旋形に対応して異なる旋光性を示すことがわかっている。これはラセミ体となっているアモルファス状態から、自己分晶してこのような結晶を作っていることが示唆される。ラセミ体からのキラリティの異なる分子の分離については、溶液状態で種となるキラル結晶を使った自己分晶など数少ない例が報告されているが、この DAE の様な L 体-D 体の入れ替わる分子のアモルファスラセミ膜からの自己分晶の例は知られておらず、今後新たな応用展開の可能性が感じられるものである。

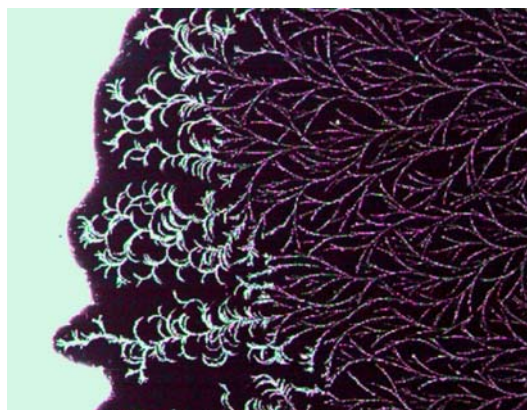


図 3.2.5 ジアリーレン分子の特異な結晶形態。開環体でのみ形成する。

(2) 研究成果の今後期待される効果

蒸着選択性が T_g によって支配される、その分子論はあたらしい物質設計の指針を提供する手がかりとなろう。さらに美しい自己組織化の結果としてフラクタル成長を活用したデバイスを考案することで、環境にやさしい(製造プロセスに無駄の少ない)工業製品開拓が可能となろう。

3.3 自己組織化フラクタル表面の解析と設計 (北海道大学 辻井グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

1. 研究目的

アルキルケテンダイマー (AKD: 構造式は図 3.3.1) という一種のワックスは、融液から結晶化させると自己組織 (自発) 的にフラクタル構造の表面を形成する。フラクタル表面は見掛けの表面積に比べて実表面積が大変大きいため、濡れが強調され、接触角 174° という超撥水表面を作る等の興味深い物性を示す。フラクタル構造を利用して機能性材料を開発するという観点からは、AKD は大変有用な物質で、上記の現象を利用すればよい。しかしながら、表面積が大きく、それ故に表面エネルギーの大きな表面が何故に自発的に形成されるのかは、研究開始時点で全く不明であった。この理由の解明は、学問的に大変興味深いばかりでなく、フラクタル構造のサイズやフラクタル次元を人為的にコントロールして機能性材料を設計するためにも、極めて重要である。本研究の目的は、自己組織的にフラクタル表面が形成される理由を、実験的研究と計算科学的研究の融合によって解明し、機能性材料設計の指針とすることにある。

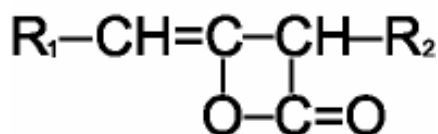


図 3.3.1 AKDの化学構造 (純 AKD の R_1, R_2 は共に $n-C_{16}$ 、混合鎖長 AKD では C_{14} との C_{16} 混合物)

2. 研究の経緯と結果

本研究を始めるにあたり、実験担当の辻井Gr と計算が専門の中村Gr で、自己組織的にフラクタル表面を形成する原因の可能性について議論をした。その結果、表面エネルギーに原因があるとする仮説と、バルクの結晶の振る舞いに原因があるとする仮説が浮かび上がった。まず、簡単にそれらを説明する。

i) 表面エネルギーに原因があるとする仮説

表面積の大きなフラクタル構造が形成されるためには、表面エネルギーの低い環境が必要不可欠である。具体的な検討としては、結晶を成長させる気相や液相の種類を変えて、フラクタル構造形成過程を追跡する計画を立てた。

ii) バルクの結晶の振る舞いに原因があるとする仮説

ワックスが融液から結晶化する際に、最初に準安定な結晶が出来、次いで熱力学的に安定な結晶型に相転移する過程でフラクタル構造が形成されるという仮説である。この仮説は、以前の予備的な検討から推定されたものであった。

2. 1 表面エネルギーに原因があるとする仮説の検証

まず、AKD の結晶化過程を、相互作用の異なると考えられる各種気体の中で観察した。通常、AKD の融液から結晶を析出させる場合は空気中で実験する。もし AKD 表面と気体との間に相互作用が存在し、表面エネルギーを下げる働きがあれば、表面積を拡げてでも不利にはならず、フラクタル構造になり易いと考えられる。そこで、結晶化させる雰囲気を窒素ガス、希ガス、純酸素等にして結晶化させ、表面フラクタル構造形成の過程を、水との接触角測定によって観察した。図 3. 3. 2 に、各種気体雰囲気中における AKD の結晶化過程を、水との接触角測定によって追跡した結果を示す。真空、空気、アルゴン、酸素中で測定したが、顕著な差異は見られなかった。

次いで、AKD の結晶化過程を、各種の液体の中で観察した。気体よりも表面との相互作用は大きいので、効果はより顕著に現れるものと期待されるからである。しかしながら、融解した AKD を液体と接触させると、AKD の溶解が起こる場合が多く、残念ながら信頼できる結果は得られなかった。これらの結果から、表面エネルギーに原因があるとする仮説は放棄された。

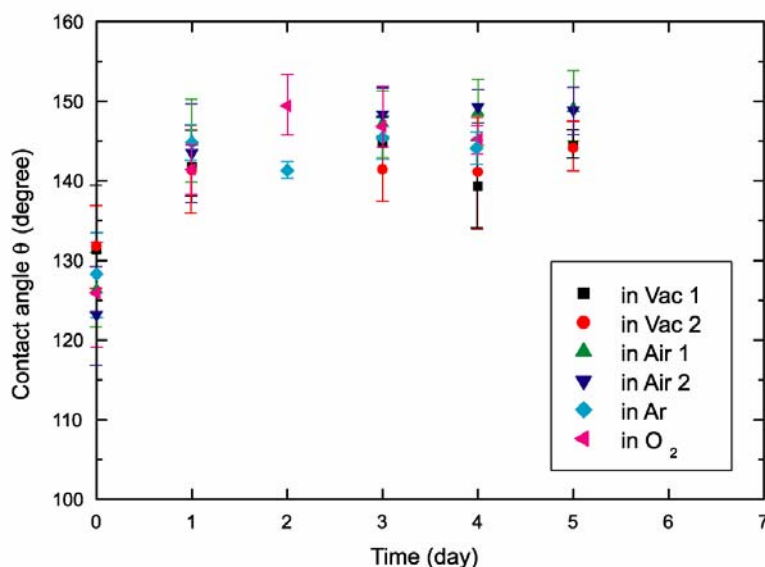


図 3. 3. 2 各種気体雰囲気中で結晶化した AKD 表面上の水の接触角の時間変化。雰囲気による顕著な違いは見られない。

2. 2 トリグリセリドワックスの自発的フラクタル構造形成

AKD の融液から結晶が析出する際に、一部に準安定な結晶相が出来、それが安定な結晶相に転移する過程でフラクタル構造が形成されるという仮説を検証する研究に移行した。その目的のために、融液から析出する結晶が準安定相で、その後安定相に転移することがよく知られているワックスであるトリグリセリド油脂を取り上げ、AKD と同様にフラクタル表面を形成するかどうかを検討した。トリグリセリド油脂は、融液から結晶化すると、先ず α -相と呼ばれる準安定相が出現し、それが時間の経過とともに熱力学的に最も安定な β -相に転移する。その過程で油脂の表面は粗くなって白化し、チョコレート業界では「ブルーミング現象」として嫌われている。この粗い表面の構造がフラクタルであるかどうか、また AKD と同様の超撥水性を示すかどうかを検討した。

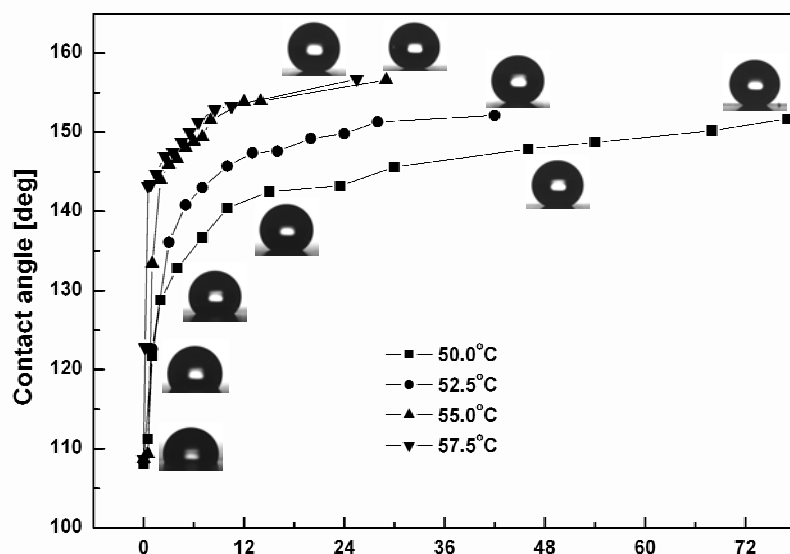


図 3.3.3 トリステアリン・ワックス表面上における水の接触角の時間依存性。融液から結晶化した直後の接触角は 110° 程度であるが、時間経過とともに大きくなり、遂には超撥水性を示す。超撥水性を示すまでの時間は、温度が高い程短い。

図 3.3.3 に、トリステアリン表面上における水の接触角の時間依存性を示す。融液から結晶化した直後の表面では、接触角は 110° 程度であるが、時間経過とともに大きくなり、遂には超撥水性を示すようになる。超撥水性を示すまでの時間は温度に依存し、温度が高い程短い。類似の結果は、トリパルミチンとトリミリスチンにおいても観察された。超撥水性を示すようになったトリステアリン表面の電子顕微鏡像を、図 3.3.4 に示す。表面には激しい凹凸構造があり、解析の結果、フラクタル構造であることが解った。因みに、結晶化直後の表面は平らで、先述の様に接触角も小さい。

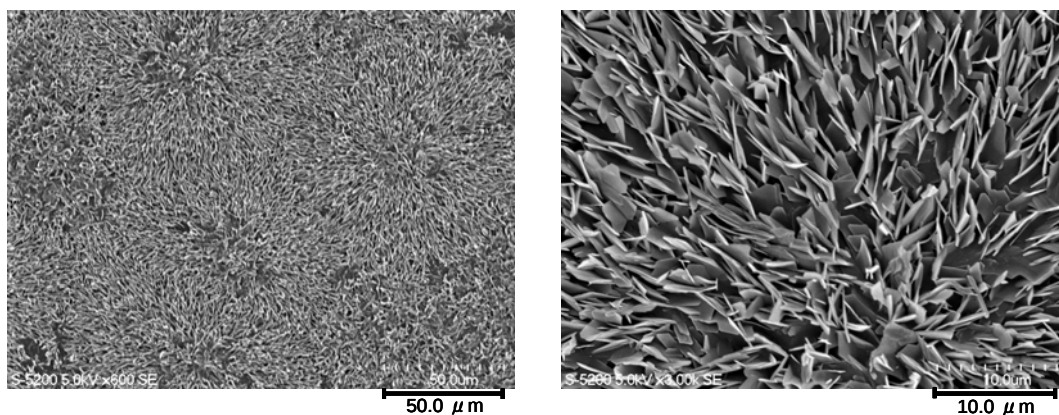


図 3.3.4 超撥水性を示すトリステアリン・ワックス表面の電子顕微鏡像

上記の接触角と表面構造の時間変化が、トリグリセリドの準安定結晶相から安定相への転移が原因であることを示すため、X-線結晶構造回折の測定を行った。時間とともに温度も上昇させ、相転移の速度を促進して観察した。図 3.3.5 に、その結果を示す。トリパルミチンおよびトリステアリンの結果はともに、 α -相結晶 ($2\theta = 21.5^\circ$ に主ピーク) から β -相 ($2\theta = 19.3^\circ$ に主ピーク) への転移を見事に示している。この結果より、トリ

グリセリドのフラクタル表面の形成が、準安定相から安定相への結晶間相転移によるものであることが明らかになった。更に、図 3.3.6 には DSC の結果を示す。結晶化直後の試料（ α -相結晶）は、55 °C 付近に吸熱ピークを持ち、その後発熱過程を経て、70 °C 付近にもう一つの吸熱ピークを有する。ところが、超撥水性を示す様になった試料や長時間（1 年以上）放置された試料は、70 °C 付近の吸熱ピークしか示さない。準安定相の結晶の融点は常に安定相の融点より低いことを考えると、結晶化直後の試料の DSC 曲線は、 α -相結晶が先ず 55 °C 付近で融解し、その後安定な β -相に一旦転移し、更に 70 °C 付近でその β -相が融解したことを示している。超撥水性を示す様になった試料や長時間放置された試料は、初めから安定な β -相なので、70 °C 付近の融点のみが現れる。これらの結果からも、トリグリセリドを融液から結晶化させて場合には、先ず準安定相が出来、それが時間経過とともに安定相へ転移することが確認される。

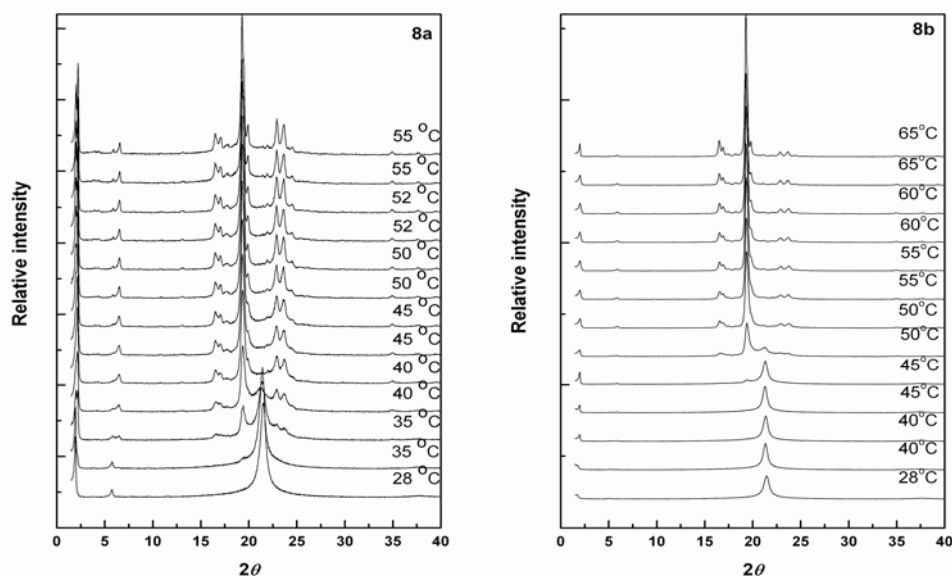


図 3.3.5 トリパルミチン (a) およびトリステアリン (b) の X-線回折パターンの変化。図中に示した各温度に 10 分間保持した後に測定し、その後 2 °C/分の速度で温度を上昇した。同じ温度に 2 本のチャートがあるのは、同じ測定を、2 時間後にもう一度行った結果である

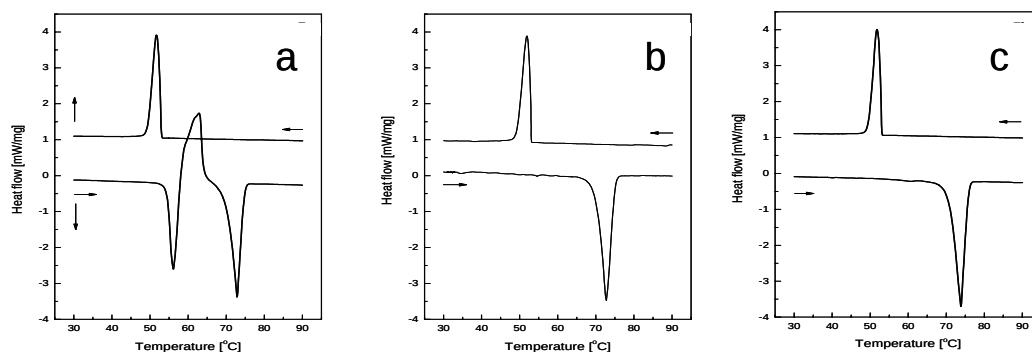


図 3.3.6 トリステアリンの DSC 曲線。a は結晶化直後の試料（ α -相結晶）、b は超撥水性を示す試料、c は長時間（1 年以上）放置された試料

2. 3 AKD のフラクタル構造形成過程の解析

AKD ワックスを使って、上記のトリグリセリドに対して行ったのと同じ実験を遂行した。その結果は、トリグリセリドの場合と基本的に同じであった。一つの例として DSC 曲線の結果を取り上げる。混合鎖長 AKD の結晶化直後の試料には、低温側（41–42 °C）に小さな融解ピークが見られるが、時間経過とともに小さくなり、最後にはなくなって 52 °C 付近の高温側のピークのみとなる。これは、基本的にトリグリセリドの場合と同じ結果であるが、唯一異なる点は、低温側のピークが小さいことである。トリグリセリドの場合は、融液から出来る最初の結晶は全て準安定な α -相結晶であるが、AKD の場合には、その一部だけが準安定相になっている様にみえる。一部の結晶の準安定相から安定相への転移が、表面全体の構造をフラクタルにするメカニズムとはどんなものか、大変興味深いが現時点では不明である。

一昨年度の報告書に記した様に、DSC 曲線の融解ピークの前に見られる小さな発熱ピークの直後に、X 線ピークの強度が急激に大きくなる。もしこの発熱ピークが準安定相から安定相への転移によるものだとすれば、わずかに混ざっている準安定相の結晶が安定相に転移する時に、残りの大部分の安定相の結晶の規則性が向上するということになる。そのメカニズムとはどういうものかという点も大変面白い。

2. 4 各種ワックスの相挙動とフラクタル表面形成

以上の結果より、トリグリセリドと AKD ワックスにおいて、準安定相から安定相結晶への相転移の過程でフラクタル表面が形成されることが分かった。そこで、この機構が一般的に成り立つものかどうかを調べるために、15 種類のワックスについて相挙動と表面構造および撥水性能について検討した。図 3.3.7 に、結果の一例を示す。AKD（混合鎖長）、ジステアリン、トリステアリンの表面はいずれも粗く、水との接触角も 150°を超えて超撥水性を示している。一方、ラウリン酸とドトリアコンタンは平らな表面を形成し、接触角も各々 86°、108°と小さい。検討した全てのワックスについて、表面形状と接触角をまとめたのが表 1 である。先の 3 種類以外のワックスは、いずれも表面は平らで接触角も小さかった。

超撥水性を示した 3 種のワックスのうち、トリグリセリドと AKD はフラクタル表面を形成し、且つ準安定な結晶から安定な結晶型への転移が認められている。そこで、残りのジステアリンについてフラクタル解析と DSC による相挙動を調べた。その結果、やはりフラクタル表面を有し、準安定な結晶型を経ることが明らかになった。表 3.3.1 に、準安定相の有無についても記しておいた。

以上の結果より、少なくとも検討した 15 種類のワックスにおいては例外なく、超撥水性のフラクタル表面を形成するワックスは、準安定相から安定相結晶への相転移を起こしていることが分かった。

2. 5 テンパリング操作によるフラクタル構造形成機構の証明

準安定相から安定相結晶への相転移が、フラクタル構造形成の原因であることを更に確認するため、超撥水性を示すワックスに対してテンパリング操作を行った。テンパリング操作とは、準安定相と安定相の融点の中間の温度で結晶化させる手法のことで、チョコレート“ブルーミング現象”を回避するために開発されたものである。準安定相と安定相が存在する場合には、必ず準安定相の融点の方が低いので、テンパリング操作を行うと融液から直接安定相の結晶が析出することになる。

図 3.3.8 に、テンパリング操作をした後の AKD（純粋なものとは混合鎖長の 2 種）とトリパルミチンの表面の電子顕微鏡写真を示す。これらはフラクタル表面を形成する典型的なワックスであるが、図から分かる様に、テンパリング操作後では激しい凸凹は観察されない。図 3.3.9 にこれらの表面上に置かれた水滴の写真を示す。水の接触角も極く普通の値であり、超撥水性を示さない。テンパリング操作によって、準安定な結晶相を経ることなく直接安定相に落ちたために、フラクタル表面が形成されなかったことが明確に示された。

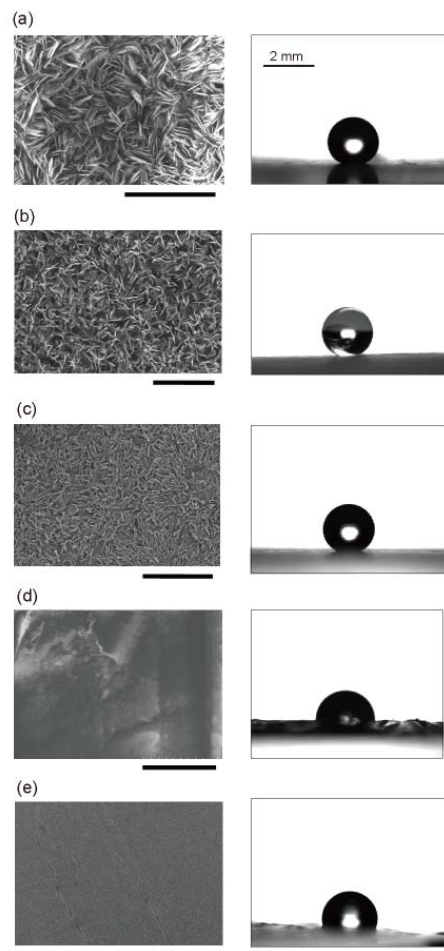


図 3.3.7 AKD(混合鎖長、a)、ジステアリン(b)、トリストアリン(c)、ラウリン酸(d)、ドドリアコンタン(e)の表面構造(左)とその上の水滴

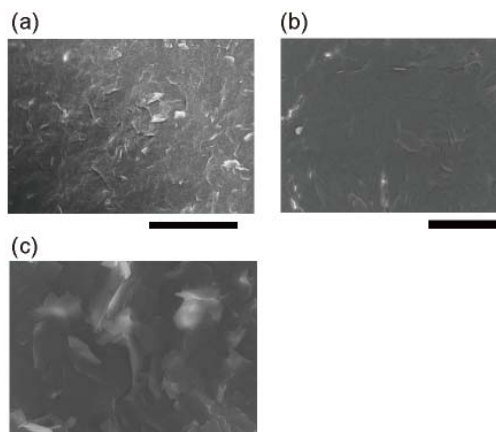


図 3.3.8 AKD(混合鎖長、a)、純AKD(b)、トリパルミチン(c)のテンパリング操作後の表面構造

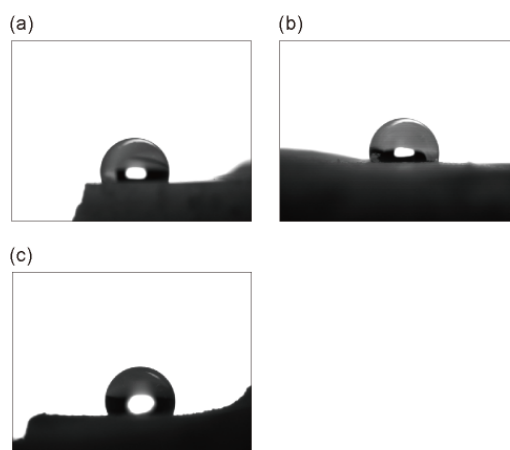


図 3.3.9 図 8 の表面上の水滴。接触角は 110° (a)、 109° (b)、 109° (c)

表 3.3.1 各種ワックスの表面構造、表面上の水の接触角および準安定結晶相の存在の有無.

Wax	Contact angle	Surface structure	Meta-stable crystal
Mixed AKD	151° ± 2°	fractal structure	Yes
Lauric acid	86° ± 5°	flat and smooth	No
Stearic acid	89° ± 5°	flat and smooth	No
Behenic acid	113° ± 6°	flat and smooth	No
Erucic acid	83° ± 2°	flat and smooth	No
Cetyl alcohol	61° ± 4°	flat and smooth	No
Stearyl alcohol	93° ± 2°	flat and smooth	No
Heneicosane	109° ± 3°	flat and smooth	No
Dotriacontane	108° ± 3°	flat and smooth	No
Hexatriacontane	105° ± 1°	flat and smooth	No
Palmityl palmitate	107° ± 1°	flat and smooth	No
Stearyl stearate	106° ± 2°	flat and smooth	No
Monostearin	81° ± 1°	flat and smooth	No
Distearin	153° ± 2°	fractal structure	Yes
Tristearin	154° ± 2°	fractal structure	Yes

(2)研究成果の今後期待される効果

以上の結果より、ワックスが融液から結晶化する際に、先ず準安定な結晶相になり、次いで熱力学的に最も安定な結晶型に相転移する過程でフラクタル構造表面が形成されることが明らかになった。しかしながらこの結果は、フラクタル表面が形成される条件を明らかにしただけであり、形成される構造が何故にフラクタル構造であるのかについては何も語らない。何故に自発的にフラクタル構造が形成されるのかを知るために、計算科学による解析が大変有効であると考えられる。計算科学陣営との議論を重ねたものの、数値的に計算科学的な解析まで研究を進めることは出来なかったが、今後も中村Grとの共同研究を可能な限り継続することにより、何故フラクタル構造なのかをはっきりさせたいと願っている。

この課題は、生体が葉の撥水表面、胃壁、そして腸壁など至る所に用いて、人工物には真似のできない機能を発揮している自己組織化フラクタル構造の生成メカニズムを地道に追及した研究であり、ひいては工業的活用に向かう所存である。まず有機ワックス AKD に限られたセレンヂピティを解析した結果、多くの分子に原理を敷衍し、実証することができた。そして、分子は一様に枝分かれ構造をしているという特徴も（現在のところ例外が無く）分子に要請される要件であることがわかってきた。これらは今後の形態形成原理の解明という大きなステップへの道を準備するものである。

3. 4 近接場と分子系の自己組織化 (龍谷大学 内田グループ)

(1) 研究実施内容及び成果

光により可逆的に色を変えるフोटクロミック化合物の結晶および薄膜表面を対象として、本プロジェクトの趣旨にそった、形状と機能の関連を追及した。

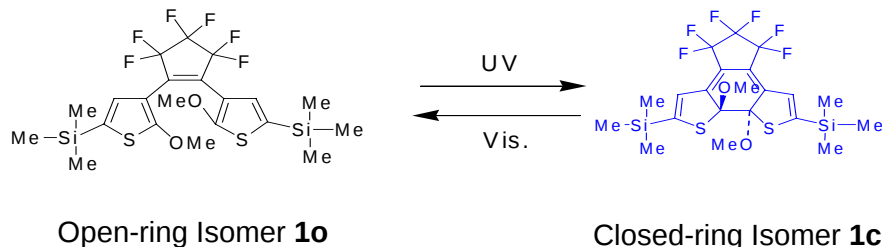
第一の成果は表面形状変化を光で可逆的に制御できるという新しい現象を見出したことである。その実体は光による熔融状態を経て開環体と閉環体の再結晶化に他ならないことを明らかにし、その反応機構が相図で説明できることを立証した。最初に見出した化合物の場合は、紫外光を照射すると表面は針のような閉環体の針状結晶で覆われ、表面は超撥水性を示すようになった。可視光照射で元の通常の撥水性に戻ることから、光で可逆的に表面の撥水性を変えることのできる材料として使われる可能性が示された(権利化済)。置換基を変えた他の誘導体でも、それぞれの開環体・閉環体の結晶形に対応する表面形状変化が観測されている。分子構造と結晶形の相関を明らかにすることで、普遍的な自己組織化の原理とそれが示す表面機能を明らかにしつつある。

第二の成果は光記録材料としてのフोटクロミック材料の応用である。この目的に向かってもっとも難関であったフोटクロミック記録の非破壊再生に注目して研究を行ってきた。非破壊再生とは、記録の再生時に記録を壊さないということである。つまりフोटクロミック化合物の色がついているかいないかを読み出すのに可視光を使えば色が消える反応が起こり、記録は破壊される。これを避けるため、我々は赤外(IR)光を再生時に用いることを提案してきた。しかし、波長の長いIR光の利用は、回折限界のため、IR波長より小さな記録スポットが読み出せず記録密度の低下を招くことになる。これを回避する方法として近接場の利用がある。5ミクロンの記録スポットが近接場IR法により5ミクロンで読み出せたことから、再生に際して像のボケは無く、この方法の有効性を確認した。

第三の成果は、これらの検討の途中で出現した、光をあてると「舞踏する」結晶の発見である。まず権利化を完成させた。その後今日まで、メカニズム解明に集中しており、プロジェクト終了までには計算科学と連帯して提出する予定である。

1) 光誘起表面形状変化 (Angew2006、HotPaperに選ばれた)

有機物表面への光照射により、フラクタル表面が出現した初めての例である。トリメチルシリル基をもつジアリールエテン **1** は、光的作用により以下のようなフोटクロミック反応を示す。



この化合物の結晶表面は、紫外光照射前は図 3.4.1(左)にあるように平滑な面であるが、紫外光を照射して1日経過すると、図 3.4.1(中)にあるように直径1-2ミクロン、長さ十数ミクロンのフィブリルで覆われる。これに可視光を照射すると図 3.4.1(右)にあるような平滑面を再生した。

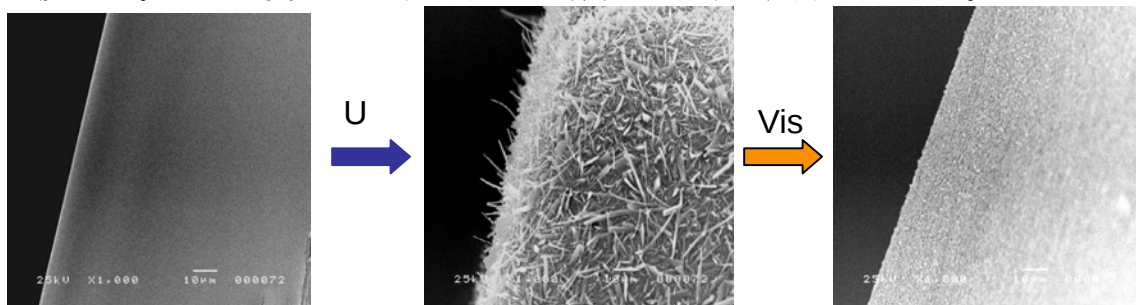


図 3.4.1 ジアリールエテン結晶表面の光誘起形状変化 (左:紫外光照射前、中:紫外光照射後、右:可視光照射後; 倍率1000倍のSEM画像)

さらに、このような可逆的な表面形状変化は、ジアリールエテン **1** をコーティングした膜でも認められ、フィブリル生成時には膜表面は超撥水性(水滴の接触角が 150° を超える)を示し、水滴の接触角は 163° となった。この接触角はハスの葉上の水滴の接触角と同じであった。

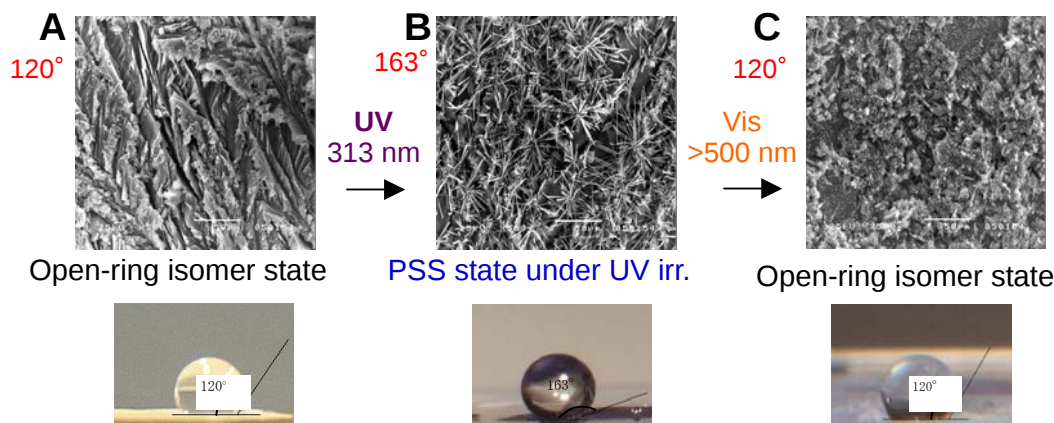


図 3.4.2 ジアリールエテン **1** コーティング膜表面の表面形状変化とその上での水滴の接触角

2) フォトクロミック記録の非破壊再生

アモルファス膜を形成するジアリールエテン記録膜に紫外光を照射して全面青色にした後、532nm の緑色のレーザー光を照射して直径 5 ミクロンの記録スポットを書き込んだ。このジアリールエテンの IR スペクトルが変化する波長を読み出しの波長に選び、散乱型近接場 IR 描画装置により再生した。可視像と近接場 IR 像を図 3.4.3 に示す。約 5 ミクロンの可視像がほぼ同じサイズで IR 像としても観測できたことから、散乱型近接場 IR 法は、像のぼけも少なく記録再生を実証した。

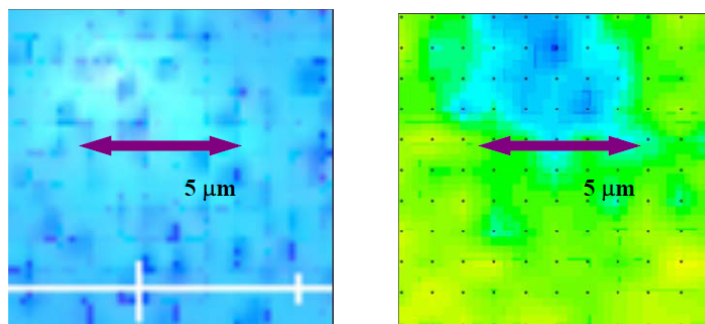


図 3.4.3 記録スポットの可視像(左)と近接場 IR 像(右)

3) 光によって「舞踏する結晶」の発見

内田研究室のメンバーが昼夜を問わず研究を遂行している途上で面白いものが見つかった。それは「光で舞踏する結晶」の発見である。実験研究の醍醐味はしばしばこのような Serendipity たる僥倖に遭遇することである。今日、光応答の結果として力学エネルギーへの変換、すなわち動きが観測された報告例は皆無ではないが、極めて稀な現象である。われわれの結果を図 3.4.4 に示す。UV と可視光によって可逆的に薄片結晶が「舞踏する」ようすが解る。これは図 3.4.4 の上部に示されたジアリールエテン分子の速鎖に水素結合能のある置換基をつけた分子である。幾つかの応用を考案して権利化提案したのち、ChemCom誌に受理され、Hot Article に選ばれた。併行して、現在三菱化学の計算部隊が、分子動力学 MD 計算を行い分子レベルでこの動きを理解する試みとして、内田のバイメタル仮説(表面数層の変化が系の動きを有機する)を検証に向かっている。

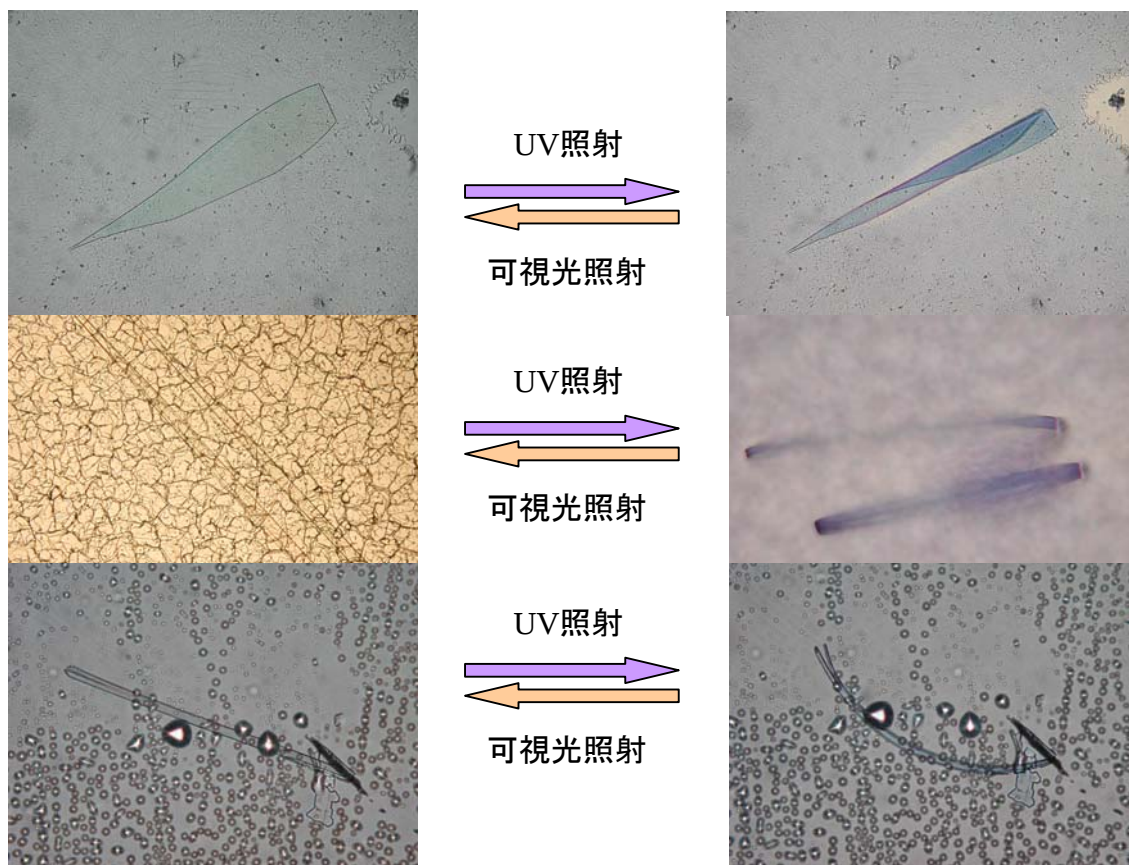
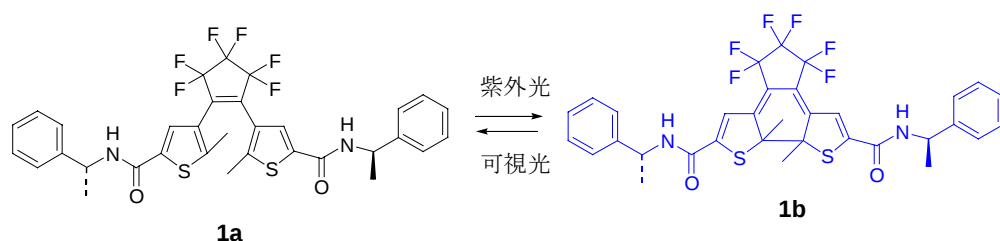


Fig. 3.4.4 紫外光・可視光照射により屈曲する結晶 (左側)紫外光照射前の結晶 (右側)紫外光照射後の結晶 (結晶サイズ上から 長さ 0.7 mm、2 mm、1 mm)

(3) 研究成果の今後期待される効果

これらの結果が示唆する新しいサイエンスは、フラクタル科学の分子論、自己組織化構造生成のメカニズム解明、そして光エネルギーの力学的エネルギーへの変換に関するものである。これらの新しい学問はこれまで物理系の学問として論じられ、理論的側面ないしコンセプト先行の形で人口に膾炙してきたものである。しかし、工業的実用化すなわち具体的「ものづくり」にまで、これらを具現するにはケミストリーの言葉すなわち、分子レベルの言葉で記述され、化学者に理解されるものでなければならない。極論すると、形の科学にまで展開してこそ、化学者がその力を発揮する土台ができたといえる。その意味でこれらの結果は非常に確実で重要な一歩を提示したといえよう。

3.5 表面界面の光物性 (上智大学 坂間グループ)

(1)研究実施内容及び成果

[1] マルチフェロイック酸化物薄膜の物性と創成

ビスマス-遷移金属ペロフスカイト酸化物 (Bi-TMO) は磁性と強誘電性を併せ持つマルチフェロイック材料として注目されている。その一種である BiFeO_3 薄膜は、室温において今まで知られている強誘電体の中で最も大きい自発分極を持つことがわかり、最近特に脚光を浴びている。しかし、 BiFeO_3 薄膜は磁気的には弱強磁性であるため厳密なマルチフェロイック材料とは言い難い。一方、 BiMnO_3 は強磁性強誘電性を示すマルチフェロイック材料であるが、強磁性を示すのは 100K 以下であり、実用性の点では問題がある。そこで、我々は SrTiO_3 (111) 基板 (以下 STO 基板と略す) 上に Bi-TMO 人工超格子を試作することによって、酸素イオンを介した隣接磁性イオン間に働く超交換相互作用 (Kanamori-Goodenough 則、以下 K-G 則と呼ぶ) を利用した室温で動作する真のマルチフェロイック材料を創成することを目指した。これは、STO (111) 基板上に、2 種類の Bi-TMO 薄膜を交互に 1 層ずつ積層したものである。K-G 則の要請から、Bi-TMO 薄膜の組み合わせとして、 BiFeO_3 と BiCrO_3 を選択した。

さて、超格子作製にあたっては多くの解決すべき課題がある。まず、酸化物薄膜/超格子を PLD 法で作製することを前提として、成長モードを層状成長に限ることが重要である。そのためには、①薄膜/超格子成長の出発点である STO 基板表面を原子レベルで平坦化する技術を開発し、②層状成長モードが実現する Bi-TMO 薄膜成長条件を割り出す必要がある。課題①に関しては、バッファードフッ酸 (BHF) によるウェットエッチングと、アルゴン雰囲気中ポストアニール処理の組み合わせによって、100-1000nm のテラス幅をもつ平坦な STO (111) 基板を得ることができた。

次に課題②に関しては、第一段階として人工格子を構成する BiFeO_3 、 BiCrO_3 の薄膜において層状成長を実現できる成膜条件を試行錯誤により見出した。成長モードは RHEED の鏡面反射点の成長に伴う強度変化により評価した。また、薄膜表面を AFM により観察することによっても薄膜の成長モードを推測した。成長後の薄膜の AFM 像においては、基板表面のステップ&テラス構造が維持されていることがわかった。

そこで、それぞれの酸化物での層状成長条件を用いて、 BiFeO_3 と BiCrO_3 の 1 層毎の超格子 (以下 $\text{BiFeO}_3/\text{BiCrO}_3$ と記す) 作製のための成長条件の最適化を行った。成長後の超格子の AFM 像においては、基板表面のステップ&テラス構造が維持されていた。以上の結果より、3 周期 ($(\text{Fe}/\text{Cr})_3$) までの超格子の作製に成功した。

磁性についても、最初に 100nm 程度の厚みの BiFeO_3 、 BiCrO_3 薄膜を測定した。SQUID を用いて M-H 曲線を測定したところ、いずれの薄膜においても室温で弱強磁性を示し、飽和磁化は高々 1emu/cc であった。これは 1 磁性イオンあたりおよそ $5 \times 10^{-3} \mu_B$ に相当する。即ち、すでに知られているように、 BiFeO_3 、 BiCrO_3 薄膜の磁性は基本的に反強磁性であり、スピncyによる極めて小さな弱強磁性を示すに過ぎないことがわかった。なお、当初の測定では非磁性であるはずの STO 基板も磁化を示した。ICP-MS による基板表面不純物測定の結果、これは基板表面に存在する Fe などの磁性不純物によるものであり、基板研磨/洗浄工程において付着したことが判明した。これらの不純物は、基板表面平坦化処理の BHF によるウェットエッチングによって除去できることがわかった。事実、平坦化処理後の STO 基板は磁化を生じなかった。本研究では、すべての基板に対して BHF によるウェットエッチングを含む平坦化処理を行っているので、磁化測定によって得られる磁化はすべて薄膜ないしは超格子によるものと判断できる。

さらに、 $(\text{Fe}/\text{Cr})_n$ 超格子に対して室温で M-H 曲線を測定した。M-H 曲線はヒステリシスを示し、n の増加に従って飽和磁化も増大した。 $(\text{Fe}/\text{Cr})_3$ の飽和磁化はおよそ 260emu/cc であった。これは、1 磁性イオンあたりおよそ $1.7 \mu_B$ に相当する。 $(\text{Fe}/\text{Cr})_n$ においては、すべての磁性イオンのスピncyが強磁性的に配列していると想定したときの最大磁気モーメ

ントは1磁性イオンあたり $4\mu_B$ であり、Fe 層あるいはCr 層においてすべてのスピンの向きが揃い、Fe 層とCr 層のスピンの向きが反平行であるフェリ磁性的配列の場合の磁気モーメントは、理論的に1磁性イオンあたり $1\mu_B$ である。従って、 $(\text{Fe/Cr})_3$ では、間違いなくFe とCr イオンのスピンの向きが強磁性的に配列した結果得られた磁化であることがわかる。即ち、 $(\text{Fe/Cr})_3$ の系で、室温で初めて強磁性が達成されたことになる。そして、それは当初の計画通り K-G 則によって得られたことは疑いようがない。なお、実際の磁化が理論的な磁化よりも小さいのは、超格子の不完全性によるためであると思われる。

また、非線形誘電率顕微鏡により、室温において誘電分極ドメインが電圧印加により反転することを確認した。

以上まとめると、今回我々は $\text{BiFeO}_3/\text{BiCrO}_3$ 超格子において、初めて室温における強磁性と強誘電性を達成した。これらの成果により、室温において動作する真のマルチフェロイック材料の開発に大きく近づいたと考えられる。

(2)研究成果の今後期待される効果

交差相関は諸外国データの再現性に疑問がもたれる中、どこから判断しても確固たる事実を示しつつあり、早晩、確かなマイルストーンを示すことになるであろう。

3. 6 非線形現象の量子論と巨大分子系の計算手法開発 (豊橋技術大学 関野グループ)

(1)研究実施内容及び成果

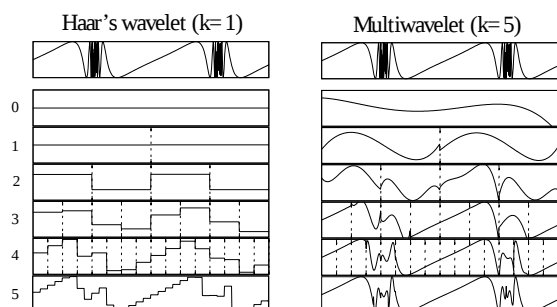
多重解像度解析を用いたナノ空間表現の改善

ナノ空間での現象解析の基本理論は量子力学と古典力学の双方である。単体としての分子やその属性を決定する電子状態は量子論、実測と対応するマクロレベルでの物性量はその集団的扱いを要し古典的統計理論が必要となる。然し、その双方ともその精度の保障が重要であるのはいうまでもない。分子の量子論である量子化学においては Gaussian 基底関数による空間表現が支配的であるが、本プロジェクトでは多重解像度多重ウェーブレット基底による電子状態及びその電場応答物性のプログラムを開発した。多重解像度解析とは空間を階層的に構築し $\{V_i\}$ さらに各解像度の空間の差分 $\{W_i\}$ 空間で表現するものである。

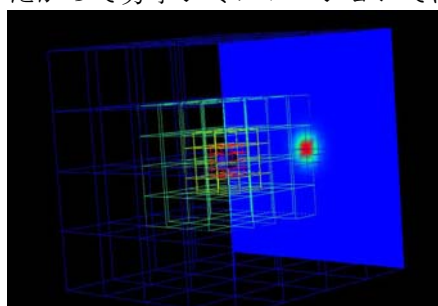
$$\begin{aligned} V_n &= V_0 + (V_1 - V_0) + (V_2 - V_1) + \dots + (V_n - V_{n-1}) \\ &= V_0 + W_1 + W_2 + \dots + W_n \end{aligned}$$

解析される信号はマクロ（点データ）であっても量子的（分布）であっても良く。信号データ全体をマッピングさせる空間の完全性に対する数学的でシステマチックな近似を提供する。現在様々なスケーリング関数に基づくウェーブレットが提案されているが、ルジャンドル多項式で各区間を展開するマルチウェーブレットによりミクロ（量子）及びマクロ信号を効率よく解析可能になっている。下図は複雑な信号にたいして単純な Haar wavelet に比べ Multiwavelet が効率よく原信号を解析、したがって圧縮できること示したものである。

$$f(x) = \sin(\tan(6x))$$



分子は一般に任意の 3 次元形状をもち、その低対称性が物質の多様な形態を誘導する。したがって分子シミュレーションでは 3 次元物理空間の表現が重要となる。



基本方程式であるシュレーディンガーは上述の多重ウェーブレット基底空間で表現される積分方程式となる。3 次元空間での多重ウェーブレット基底関数はかなり大きなものとなり、積分方程式の表現や計算には十分な考慮が必要であり現在のところ既存の Gaussian 基底によるプログラムと対等な効率を望むことは難しいが、基底関数が本質的に局所的であることから、次世代に主流となることが予想される超並列環境では中心的技術となってくることは疑いない。本プロジェクトでは主に電場応答物性の計算理論とプログラム開発がなされた。簡単にまとめると次の表のごとくである。

Table 1 Molecular Polarizability

以下にマルチウェーブレット基底 $K=9$ $\varepsilon = 10^{-6}$ に対する誤差の割合の平均値を示す。

対象分子: C_2H_4 , CO , F_2 , H_2O , HF , NH_3 , SO_2 , CH_4 , CO_2 , H_2 , HCl , N_2 , PH_3

Hartree-Fock		DFT(Svwn5)	
Gaussian function basis		Gaussian function basis	
cc-pvdz	33.539%	cc-pvdz	39.373%
cc-pvtz	19.061%	cc-pvtz	24.224%
cc-pvqz	10.948%	cc-pvqz	15.322%
cc-pv5z	6.723%	cc-pv5z	9.916%
aug-cc-pvdz	3.630%	aug-cc-pvdz	5.128%
aug-cc-pvtz	0.852%	aug-cc-pvtz	1.629%
aug-cc-pvqz	0.496%	aug-cc-pvqz	0.276%
aug-cc-pv5z	0.102%	aug-cc-pv5z	0.334%
d-aug-cc-pvdz	0.295%	d-aug-cc-pvdz	0.330%
d-aug-cc-pv5z	0.013%	d-aug-cc-pv5z	0.014%
MRMW basis		MRMW basis	
k=5 $\varepsilon = 10^{-4}$	0.123%	k=5 $\varepsilon = 10^{-4}$	0.094%
k=7 $\varepsilon = 10^{-5}$	0.001%	k=7 $\varepsilon = 10^{-5}$	0.002%

応答物性は全エネルギーと異なり、より大きな空間でより下がるというものではないので空間の完全性にたいしてより数学的な扱いを可能にする本手法は重要である。各基底関数を定義する位数 k が 7 でほぼ完全に近い空間表現が得られることがわかる。また同様な

計算をするには巨大な Gaussian 基底関数が必要であることも分かる。本手法はさらにダイナミックシミュレーションへと発展させられており、結果は ICQC2006 (Sendai), 日本物理学会 2006 秋季年会 (千葉), 分子構造総合討論会 2006 (静岡)にて報告した。

本研究は半古典論を使う従来の量子MDの精度を上げるといった問題の他に、ナノ領域での電気伝導度算定 (*Transport Measurements of Single Benzene-dithiolate by the STM Break Junction Technique*, Satoru Tanibayashi, Tomofumi Tada, Satoshi Watanabe, Hideo Sekino) に対する新しい手法開発の一環でもある。更に化学反応の場の多くが溶液であるから我々は半無限系の自由度をとりいれたシミュレーションが必要であると考え、溶媒に対して統計力学的処理を行う溶媒密度汎関数理論を開発実装することにより、溶媒環境が従来言われていたのと異なる高分子挙動を促すことを発見した。

(2)研究成果の今後期待される効果

ここにまとめた具体的成果の示している意味を本プロジェクトの真髄に照らして翻訳すると、理論的見地から、ナノサイズのシミュレーションに踏み出すツールの原理的研究を具体例で示した、ということである。とくに Wavelet を用いた多重解像度解析は、階層の異なる物理化学現象 (分子からナノそしてマクロまで) を無理なく接続する記述法を構築するというナノサイズのシミュレーションの大課題に向かう一環である。

4 研究参加者

研究グループ名： 中村チーム (三菱化学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
中村 振一郎	計算科学室	室長	研究総括	H16. 10～	CREST 研究員 CREST 研究員 チーム事務員 チーム事務員
横島 智	JST	PD	分子の光電物性	H17. 4～	
Tatiana Romanova	JST	PD	生体系	H17. 9～H18. 8	
鈴木 晶子	JST	事務補助員	事務	H16. 11～H18. 5	
村上 みどり	JST	事務補助員	事務	H18. 5～	
米山 満	計算科学室	主任研究員	ゆらぎの物理	H16. 10～	
納本 淳	計算科学室	研究員	ゆらぎと信号処理	H16. 10～	
諫田 克哉	計算科学室	主任研究員	並列計算機構築	H16. 10～	
三上 昌義	計算科学室	研究員	第一原理計算	H16. 10～	
沈 君偉	計算科学室	研究員	溶媒効果	H16. 10～	
小林 高雄	計算科学室	研究員	量子ダイナミクス	H16. 10～	H17. 4 Gr 化
村上 明德	計算科学室	研究員	量子化学	H16. 10～	
Gabin Treboux	計算科学室	研究員	量子化学	H16. 11～	
大石 泰生	計算科学室	研究員	触媒反応の解析	H18. 11～	
横溝 友二	計算科学室	研究員	生体とゆらぎ解析	H19. 1～	
谷口 岳志	計算科学室	研究員	生体系の手法構築	H19. 3～	
篠田 恵子	計算科学室	研究員	生体の自己組織化	H19. 4～	
前田 修一	企画調整室	フェロー	光機能材合成と評価	H16. 12～	
飯高 敏晃	理研	前任研究員	ナノの量子論	H16. 10～	
立川 仁典	横浜市大	準教授	励起状態計算	H16. 10～	
龍尾 光太郎	横浜市大	研究補助員	場の効果	H17. 6～H17. 12	
藤生 泰山	横浜市大	大学院生	場の効果	H18. 4～	
内田 欣吾	竜谷大	教授	合成と評価	H16. 10～H17. 3	
上野 崇	(株) デプト	社長	無機基板作成	H17. 2～	
森 和英	関東学院大	講師	量子化学	H16. 10～	
高 玘	計算科学室	研究員	酵素と NMR	H18. 5～	
三川 隆	三菱化学メデ ィエンス(株)	次長	微生物の形と遺伝子	H17. 11～	
蟹江 治	三菱化学生命 科学研究所	主任研究員	糖鎖のダイナミズム	H19. 8～	

研究グループ名： 関野チーム (豊橋技術科学大学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
関野 秀男	知識情報工学	教授	Wavelet 法	H16. 10～	前年度研究補助員 CREST 研究員
墨 智成	知識情報工学	助教	経路積分法	H16. 10～	
濱田 信次	知識情報工学	大学院生 (D2)	Wavelet 基底量子化学	H17. 1～	
野中 尋史	知識情報工学	研究補助員		H17. 1～H17. 3	
谷林 慧	JST	PD	巨大分子系	H17. 4～H19. 3	
前田 康行	知識情報工学	研究補助員		H17. 9～H18. 6	
松村 直樹	知識情報工学	大学院生	巨大分子系の扱いに関する手法開発	H18. 10. 1～H19. 3	
仙石 康雄	知識情報工学	大学院生 (D3)	巨大系の量子化学	H19. 4～	
松本 啓紀	知識情報工学	大学院生 (M2)	巨大系の量子化学	H19. 4～	
内田 雄介	知識情報工学	大学院生 (M2)	溶液理論	H19. 4～	
小林 一彦	知識情報工学	大学院生 (M2)	溶液理論	H19. 4～	
加藤 哲也	知識情報工学	大学院生 (M1)	Wavelet 基底量子化学	H19. 4～	

研究グループ名： 内田チーム (龍谷大学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
内田 欣吾	理工学部	教授	近接場と自己組織化	H17. 4～	
赤澤 雅子	理工学部	大学院生 (M2)	化合物の合成	H19. 4～	

研究グループ名： 辻岡チーム (大阪教育大学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
辻岡 強	教育学部	教授	表面光物性 評価	H16. 10～	
沓 拔 雄 一 郎	教育学部	大学生	表面光物性 評価	H18. 4～H19. 3	
家藤 奈津子	教育学部	大学生 (B4)	表面光物性 評価	H18. 4～	
瀬角 祐介	教育学部	大学生 (B4)	表面光物性 評価	H19. 4～	
塩澤 昂拓	教育学部	大学生 (B4)	表面光物性 評価	H19. 4～	
岩井 勇輔	教育学部	大学生 (B3)	表面光物性 評価	H19. 4～	
松井 愛	教育学部	大学生 (B3)	表面光物性 評価	H19. 4～	
山本 宗幸	教育学部	大学生 (B3)	表面光物性 評価	H19. 4～	

研究グループ名： 辻井チーム (北海道大学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
辻井 薫	電子科学研	教授	フラクタル解析戦略	H16. 10～	
松尾 剛	電子科学研	助教	合成と評価	H16. 10～	
眞山 博幸	電子科学研	助教	合成と評価	H17. 4～	
巖 虎	電子科学研	COE 研究員	合成と評価	H17. 4～H18. 2	
黒木 一誠	電子科学研	大学院生	高分子フラクタル	H18. 4～H19. 3	
南 貴之	電子科学研	大学院生 (M2)	ワックスフラクタル	H18. 4～	
小野 佑輔	電子科学研	大学院生 (M2)	フラクタル立体	H18. 4～	
陳 新江	電子科学研	大学院生 (D2)	フラクタル構造解析	H19. 4～	
紙田 元	電子科学研	大学院生 (M1)	フラクタル構造解析	H19. 8～	

研究グループ名： 坂間チーム (上智大学)

氏名	所属	役職	担当する研究項目	参加時期	備考
坂間 弘	物理学科	教授	無機表面物性	H16. 10～	
市川 能也	物理学科	助教	無機表面物性	H16. 11～	

5 招聘した研究者等

氏 名(所属、役職)	招聘の目的	滞在先	滞在期間
Vincent Meunier(Oak Ridge National Laboratory)	Meunier 博士は従来法を開発量子プログラム NWChem に実装、数々の応用分野の専門家であり、関野 Gr に短期間参加共同で新方法論開発のために、技術提供を受けた。	豊橋技術科学大学 関野研究室	2005.3.5～17
Nathalie Katsonis (University of Groningen Department of Organic and Molecular Inorganic Chemistry Stratingh Institute)	龍谷大学内田研究室で共同研究後、三菱化学での講演会	龍谷大学 内田研究室 (株)三菱化学科学技術研究センター	2007.6.3～11

6 成果発表等

(1)原著論文発表 (国内誌 0 件、国際誌 54 件) 【JST が Acknowledge されているものののみ】
国際

1. T.Tsujioka, M.Shimizu and E. Ishihara
"Electrical Molecular Memory using Diarylethene Derivatives"
Appl. Phys. Lett., 87 (2005) 213506
2. T.Tsujioka
"Electrical molecular memory using diarylethene derivatives"
Molecular Crystals and Liquid Crystals, 431, (2005) 391.
3. H.Yan, K.Kurogi, H.Mayama and K.Tsujii
"Environmentally Stable Super Water-Repellent Poly(alkylpyrrole) Films"
Angew. Chem. Int. Ed., 44: 3453-3456 (2005).
4. K.Uchida, A.Takata, S.Ryo, M.Saito, M.Murakami, Y.Ishibashi, H.Miyasaka and M.Irie,
"Picosecond Laser Photolysis Studies on a Photochromic Oxidation Polymer Film Consisting of Diarylethene Molecules"
Journal of Materials Chemistry, 2005, 15, 2128-2133.
5. K.Uchida, M.Saito, A.Murakami, T.Kobayashi, S.Nakamura and M.Irie,
"Multi-States Photochromic Recording and Nondestructive Readout Using IR Light"
Molecular Crystals and Liquid Crystals, 2005, 430, 31-36.
6. A.Takata, S.Ryo, M.Saito, H.Miyasaka, M.Murakami, M.Irie and K.Uchida,
"Photochromic Reactions of the Oxidation Polymer Film of a Diarylethene Derivative"
Molecular Crystals and Liquid Crystals, 2005, 431, 15/[315]-20/[320].
7. H.Sekino, Y.Maeda and M.Kamiya,
"Influence of the long-range exchange effect on dynamic polarizability"
Molecular Physics, 103, 2183-2189 (2005)
8. T.Sumii, C.Suzuki and H.Sekino,
"Entropy- or enthalpy-driven collapse of strongly charged polymer chains in a one-component charged fluid of counterions or coions"
J. Chem. Phys., 123, 204907 (2005).
9. T.Sumii and H.Sekino,
"A Cooperative phenomenon between polymer chain and supercritical solvents: Remarkable expansions of solvophilic and solvophobic polymers"
J. Chem. Phys., 122, 194910 (2005).
10. K.Shinohara, A.Tanokura, N.Ichikawa and H.Sakama
"Effect of substrate surface roughness on superconducting properties in La-214 copp

er oxide thin films”

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology 3,276–279(2005)

11. M.Gotoh, M.Tachikawa, K.Ryuo, K.Sasagane, K.Suzuki, K.Mori and S.Nakamura
“The First and Second Derivative Matrices in the Random Phase Approximation Scheme by Using the Langrangian Technique”
*Int.J.Quant.Chem.*105 225(2005)
12. K.Uchida, M.Walko, J.J.D. Jong, S.Sukata, S.Kobatake, A.Meetsma, J.H.van Esch and B.L.Feringa
“Diastereoselective cyclisation of a dithienylethene switch through single crystal confinement”
Organic & Biomolecular Chemistry, 2006, 4, 1002–1006.
13. H.Sakama, G.Osada, M.Tsukamoto, A.Tanokura and N.Ichikawa
“Epitaxial growth of anatase TiO₂ thin films on LaAlO₃(100) prepared using pulsed laser deposition”
Thin. Solid Films 515(2006) 535–538
14. Satoshi Yokojima, Kenji matsuda, Masahiro Irie, Akinori Murakami, Takao Kobayahsi and Shinichiro Nakamura
“Caracterization of Cationic Diarylethence by Electron Spin Resonance and Absorption Spectra–Ratio of Open/Closed–Ring Isomers”
J.Phys.Chem.A 2006, 110, 8137–8143
15. Kenji Matsuda, Satoshi Yokojima, Yoshihisa Moriyama, Shinichiro Nakamura, and Masahiro Irie
“Direct Observation of Cation Radicals of a Diarylethene during Oxdative Ring–opening Reaction”
Chemistry Letters 35, No.8 (2006)
16. Ken Tasaki, Katsuya Kanda, Takao Kobayashi, Shinichiro Nakamura, and Makoto Ue
“Theoretical Studies on the Reductive Decompositions of Solvents and Additives for Lithium–Ion Batteries near Lithium Anodes”
Journal of The Electrochemical Society, 153(12)A2192–A2197(2006)
17. Masayoshi Mikami, Kyota Uheda, and Naoto Kijima
“First–principles study of nitridoaluminosilicate CaAlSiN₃”
*Phys.stat.sol.(a)*203,No11,2705–2711(2006)
18. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
“An interaction site model integral equation study of molecular fluids explicitly considering the molecular orientation”
J. Chem. Phys., 125 (2006) 034509.
19. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
“A crossover from metal to plasma in dense fluid hydrogen”
J. Chem. Phys., 125, (2006) 194526.

20. T. Tsujioka, N. Iefuji, A. Jiapaer, M. Irie, S. Nakamura
 "Hole-injection isomerization of photochromic diarylethene for organic molecular memory"
Appl. Phys. Lett. 89 (2006) 222102

21. H. Yan, H. Shiga, E. Ito, T. Nakagaki, S. Takagi, T. Ueda and K. Tsujii :
 "Super Water-Repellent Surfaces with Fractal Structures and Their Potential Application
 to Biological Studies", *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*,
 284-285 : 490-494 (2006)

22. J. Ozawa, G. Matsuo, N. Kamo and K. Tsujii :
 "Separated Organized-Polymerization of an Amphiphilic Monomer and Acrylamide in
 One-Pot Reaction", *Macromolecules*, 39(23) : 7998-8002 (2006)

23. H. Mayama and K. Tsujii :
 "Menger sponge-like fractal body created with a novel template method", *Journal of
 Chemical Physics*, 125 : 124706-1-124706-9 (2006)

24. X. Chen and K. Tsujii :
 "A Novel Hydrogel Showing Super-Rapid Shrinking but Slow Swelling Behavior ",
Macromolecules, 39(25) : 8550-8552 (2006)

25. Takata, M. Saito, S. Yokojima, A. Murakami, S. Nakamura, M. Irie, K. Uchida,
 Micrometer-Scale Photochromic Recording on an Amorphous Diarylethene Film and
 Nondestructive Readout using Near-Field IR Light
Japanese Journal of Applied Physics, 45, 7114-7120 (2006)

26. K. Uchida, N. Izumi, S. Sukata, Y. Kojima, S. Nakamura, M. Irie
 Photoinduced Reversible Formation of Microfibrils on a Photochromic Diarylethene
 Microcrystalline Surface (Selected as a Hot Paper and Newsworthy)
Angewandte Chemie International Edition, 45, 6470-6473 (2006)

27. Shinichiro NAKAMURA, Katsuya KANDA, Patrick TURCOTTE, Hiroaki ITAGAKI,
 Masayoshi MIKAMI, Yoshinori HARA, Yasu y o SAITO, Koshi SASAKI, Takeshi
 MATSUOKA, Makoto TEDUKA, Toshiyuki SUZUKI, Yutaka MORI, Kazuhiro TANABE,
 Jun TAKAHARA and Tohru SETOYAMA
 "On the Mechanism of the Beckmann Rearrangement, A Molecular Orbital StudyStudies
 in Surface Science and Catalysis, (Elsevier 2007) vol.172, 109

28. T. Kobayashi, M. Shiga, A. Murakami, S. Nakamura,
 "Ab initio study of ultrafast photochemical reaction dynamics of phenolblue"
Journal of the American Chemical Society.,129,6405-6424(2007)

29. Hideo Sekino, Yasuyuki Maeda, Muneaki Kamiya and Hirao Kimihiko
 "Polarizability and second hyperpolarizability evaluation of long molecules by the density
 functional theory with long-range correction"
J. Chem. Phys., 126, (2007), 014107.

30. H. Yan, K. Kurogi and K. Tsujii :
 "High Oil-Repellent Poly(alkylpyrrole) Films Coated with Fluorinated Alkylsilane by a Facile Way", *Colloids Surfaces A*, 292 : 27-31 (2007)
31. X. Chen, H. Mayama, G. Matsuo, T. Torimoto, B. Ohtani and K. Tsujii :
 "Effect of Ionic Surfactants on the Iridescent Color in Lamellar Liquid Crystalline Phase of a Nonionic Surfactant", *J. Colloid Interface Sci.*, 305 : 308-314 (2007)
32. W. Fang, H. Mayama and K. Tsujii :
 "Spontaneous Formation of Fractal Structures on Triglyceride Surfaces with Reference to Their Super Water-Repellent Properties", *J. Phys. Chem. B*, 111 : 564-571 (2007)
33. T. Fukaminato, T. Umemoto, Y. Iwata, S. Yokojima, M. Yoneyama, S. Nakamura, and M. Irie,
 Photochromism of Diarylethene Single Molecules in Polymer Matrices
Journal of the American Chemical Society, 129, 5932-5938, 2007
34. Qi Gao, Satoshi Yokojima, Toshiyuki Kohno, Toyokazu Ishida,
 Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura, Masamichi Fujihira and Shinichiro Nakamura
 "Ab initio NMR chemical shift calculations on proteins
 using fragment molecular orbitals with electrostatic environment"
Chemical Physics Letters, 445, 4-6, 331-339 (2007)
35. Satoshi Yokojima, Koutaro Ryuo, Masanori Tachikawa, Takao Kobayashi, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Toshikazu Ebisuzaki, Tuyoshi Fukaminato and Masahiro Irie
 "Conformational dependence of energy transfer rate between photochromic molecule and fluorescent dye"
Physica E, (2007)
36. Shinichiro Nakamura, Takao Kobayashi, Atsushi Takata, Kingo Uchida, Yukako Asano, Akinori Murakami, Alexander Goldberg, Dominique Guillaumont, Satoshi Yokojima, Seiya Kobatake, Masahiro Irie
 Quantum yields and potential energy surfaces: a theoretical study
Journal of Physical Organic Chemistry, (2007) in press.
37. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
 "Integral equation study of hydrophobic interaction: A comparison between the simple point charge model for water and a Lennard-Jones model for solvent"
J. Chem. Phys., 126, 144508 (2007)
38. K. Kurogi, H. Yan, H. Mayama and K. Tsujii :
 "Super water-repellent poly(alkylpyrrole) films having environmental stability",
J. Colloid Interface Sci., 312 : 156-163 (2007).
39. X. Chen, H. Mayama, G. Matsuo, T. Torimoto, B. Ohtani and K. Tsujii :
 "Effect of Ionic Surfactant on the Iridescent Color in Lamellar Liquid Crystalline Phase of a Nonionic Surfactant",

- J. Colloid Interface Sci.*, 305 : 308–314 (2007).
40. X. Chen and K. Tsujii :
 "Synthetic myelin figures immobilized in polymer gels",
Soft Matter, 3 : 852–856 (2007).
 41. X. Chen, G. Matsuo, B. Ohtani and K. Tsujii :
 "Polymerization Behaviors of Racemic and Chiral Amphiphilic Monomers in Organized
 Bilayer Membranes of Lamellar Liquid Crystalline Phase",
J. Polym. Sci. Part A: Polymer Chemistry (2007), 45(21) : 4891–4900 (2007).
 42. A. Takata, S. Yokojima, H. Nakagawa, Y. Matsuzawa, A. Murakami, S. Nakamura, M. Irie,
 K. Uchida,
 Substituent effect of diarylethenes on IR spectra for application of non-destructive
 readout
 of photochromic recording
Journal of Physical Organic Chemistry, 2007, 20,998–1006.
 43. Hideo Sekino
 "Next Generation Quantum Chemistry for Large Bio-Molecules"
 「次世代生体巨大分子の量子化学」
J. Comput. Chem. Jpn., Vol.6, No.3, 1–6, (20 July 2007).
 44. Yasuo Sengoku, Shinobu Miyahara, Hajime Wakabayashi and Hideo Sekino
 "The Predictive Accuracies of Spectroscopic Parameters in Biological Macromolecules by
 Fragment MO Method"
 「Fragment MO法による分光学的情報の予測精度について」
J. Comp. Aid. Chem., Vol. 8, No. 0, 85–91 (24 August 2007).
 45. Hideo Sekino, Naoki Matsumura, Yasuo Sengoku,
 "Evaluation of NMR Chemical Shift by Fragment Molecular Orbital Method"
Computing Letters (CoLe), Vol. 3, No. 2–4, 423–430 (2007).
 46. Tomonari Sumi, Kazuhiko Kobayashi, and Hideo Sekino
 "Behavior of a polymer chain immersed in a binary mixture of solvents"
J. Chem. Phys. No. 127, No. 16, 164904 (22 October 2007)
 47. W. Fang, H. Mayama and K. Tsujii :
 "Formation mechanism of super water-repellent fractal surfaces of alkylketene dimer",
Colloids Surfaces A, 316 : 258–265 (2008)
 48. T. Minami, H. Mayama, S. Nakamura, S. Yokojima, J. Shen and K. Tsujii :
 "Formation Mechanism of Fractal Structures on Wax Surfaces with Reference to Their
 Super Water-Repellency",
Soft Matter, 4(1) : 140–144 (2008)
 49. K. Kurogi, H. Yan and K. Tsujii :
 "Importance of Pinning Effect of Wetting in Super Water-Repellent Surfaces",
Colloids Surfaces A, 317(1–3) : 592–597 (2008)

50. K. Uchida, S. Sukata, Y. Matsuzawa, M. Akazawa, J. J. D. de Jong, N. Katsonis, Y. Kojima, S. Nakamura, J. Areephong, A. Meetsma, and B. L. Feringa,
Photoresponsive rolling and bending of thin crystals of chiral diarylethenes
Chemical Communications, 2008, 326–328. (Selected as “Hot Article”)
51. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
“Metal–nonmetal transition in dense fluid hydrogen”
J. Chem. Phys., Vol. 128, No.4, 044712 (29 January 2008)
52. Hideo Sekino and Shinji Hamada
“A dynamically adaptive refinement in muliresolution multiwavelet basis for dynamical quantum wavefunctions”
AIP Conference Proceedings 963, COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCE AND ENGINEERING: Theory and Computation: Old Problems and New Challenges. Lectures Presented at the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007 (ICCMSE 2007), Vol.1, 292–295 (3 December 2007)
53. K. Tsujii
“Formation of Fractal Structures by Self-Organization and Their Functional Properties”
BOTTOM-UP NANOFABRICATION: Supramolecules, Self-Assemblies, and Organized Films (2008), in press.
54. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
“A Self-Consistent Density-Functional Approach for Homogeneous and Inhomogeneous Classical Fluids”
J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 77, No. 3, in Print (10 March 2008)

(2)その他の著作物（総説、書籍など）

1. 中村振一郎 “円錐交差に関する最近の理論研究”
光化学, 35, 121–123 (2004)
2. 辻井 薫
「フラクタル構造による超撥水／超撥油表面」, *M&E*, 32(13): 216–218 (2005)
3. 辻井 薫
「フラクタル構造を利用した耐久性超撥水膜の開発」, *コンバーテック*, 2005年(12):47–49 (2005).
4. 巖 虎、辻井 薫
「超撥水材料研究の最近の進展」, *機能材料*, 25(11): 43–55 (2005).
5. 辻井 薫
「フラクタル表面—超撥水／撥油材料への応用—」, 自己組織化ポリマー表面の設計
シーエムシー出版, 193–203 (2005).
6. 辻井 薫
「接触角、表面張力、フラクタル表面」, *高分子辞典* (第3版), 朝倉書店 (2005).

辻井 薫：
「13章2節「表面張力(表面エネルギー)」」
表面物性工学ハンドブック 第2版，
(株)丸善：540-546 (2007).

7. 辻井 薫：
「フラクタル表面の濡れと超撥水・超撥油表面の発現」，
ぬれと(超)撥水、(超)親水技術、そのコントロール，
技術情報協会：20-26 (2007).
8. 辻井 薫：
「第7編 第3章 超撥水性コーティング」，
特殊機能コーティングの新展開，
(株)シーエムシー出版 (2007), in press.
9. H.yan and K.Tsujii:
“Recent Progress in Unique Solid Surfaces for Biological Applications”，
Current Chemical Biology (2007), in press.
10. 新しい光機能コーティング剤
内田欣吾
化学工業,2007, 58,(No.3),22[190]-26[194]
11. 光応答マイクロフィブリル発生現象と表面機能
内田欣吾
機能材料,2007,27 (No.8) 34-38

(3)学会発表(国際学会及び主要な国内学会発表)【JST が Acknowledge されているもののみ】

① 招待講演 (国内会議 15 件、国際会議 4 件)

1. 中村振一郎
「有機光機能材料の設計」
第2回 SORST プロジェクト横断計算科学研究会(東京大学工学部)
2006 年 1 月 17 日
2. 中村振一郎
「計算科学は産業界で如何に活用されているか」
広島大学、量子生命科学セミナー
2006 年 1 月 27 日
3. 中村振一郎
「有機光機能材料の設計、民間企業における計算科学の実践」
理研シンポジウム「RSCC における研究事例紹介と次世代スーパーコンピュータの開発」
(独)理化学研究所、和光市)
2006 年 3 月 24 日
4. 内田欣吾
「フォトクロミック光記録と IR 光による非破壊再生」
関西地区3学協会合同大会(近畿化学協会・化学工学会関西支部・触媒学会関西地区)

関西大学 100 周年記念館

2005 年 11 月 10～11 日

5. 内田欣吾
「フォトクロミック多重記録の非破壊再生」
レーザー学会 第 26 回年次大会
大宮ソニックシティ（埼玉県さいたま市）
2006 年 2 月 9～10 日
6. 三上昌義、上田恭太、木島直人
”CaAlSiN₃ の第一原理計算”
第 314 回蛍光体同学会講演会
(財)総評会館
2006.09.29
7. 中村振一郎
”Teoretical Study in an Chemical Industry Molecular Design”
IBM 天城セミナー
天城ホームステッド
2006.12.09
8. 中村振一郎
”有機光機能材料の設計を試みて 化学産業の研究開発における計算科学実践現場から”
物性研短期研究会「計算物性研科学におけるスーパーコンピュータ利用の現状と展望」
東京大学物性研究所
2006.12.11-12.13
9. 中村振一郎
”計算科学を用いた触媒設計”
触媒学会つくば地区講演会
(独)産業総合研究所 つくば中央第 2
2006.12.15
10. 中村振一郎
”触媒設計・光機能材設計”
触媒学会コンピュータ化学部会
三井化学(株)袖ヶ浦センター
2007.01.12
11. 横島 智
”単一フォトクロミック分子に対する周囲の場の影響”
理研セミナー
理化学研究所物質化学研究棟
2007.02.27
12. 内田欣吾（龍谷大学）
「有機フォトクロミック・ジアリールエテンの合成と機能化」
高分子同友会関西勉強会
2006 年 6 月 20 日(火)

薬業年金会館（大阪市）

13. 内田欣吾（龍谷大学）
フォトクロミック光記録とその非破壊再生、第 87 日本化学会春季年会 1B6-40
(2007 年 3 月 25 日)
関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
14. 辻岡強(大阪教育大学・JST-CREST)、
ジアリールエテンと有機エレクトロニクス、
近畿化学協会機能性色素部会、大阪、
4月23日
15. 内田欣吾、泉 則和、須方振一郎、小島優子、中村振一郎、辻岡 強、入江正弘、
ジアリールエテンマイクロ結晶表面における可逆的光誘起マイクロフィブリル生成－ロータス効果の
光制御－
高分子討論会
2007 年 9 月 19～21 日

国際

1. 辻岡 強、
Photochromic Diarylethenes for Organic Electronics、Molecular Electronics and
Bioelectronics 国際会議、
2005 年 3 月 3 日
2. Shinichiro NAKAMURA, Kingo UCHIDA, Tsuyoshi TSUJIOKA, Koru TSUJII, Hideo SEKINO,
Hiroshi SAKAMA, Satoshi YOKOJIMA, Masayoshi MIKAMI, Jun-Wei SHEN, Yasuo OISHI,
Katsuya KANDA
”Computational Science for Catalyst and Surface Property Design”
Fifth TOKYO CONFERENCE ON ADVANCED CATALYTIC SCIENCE AND TECHNOLOGY
(TOCAT5 2006) タワーホール船堀
2006.07.23-07.28
3. K. Uchida (Ryukoku University),
Photochromic Recording and Nondestructive Readout Using IR Light,
The 7th International Symposium on Functional-Electron Systems
(Osaka, Japan, May 16, 2006)
4. Shinichiro NAKAMURA,
”Quantum Yield and Field Effect in Photochromism”
International Symposium On Photochromism (ISOP-07)
(ISOP07 2007,Vancouver, Canada) 2007.10.7-11.

② 口頭発表 (国内会議 151 件、国際会議 31 件)

国内

1. 深港 豪、梅本 徹、米山 満、中村 振一郎、入江 正浩、
単一分子フォトクロミズムの反応解析－量子収率のゆらぎ、

日本化学会、神奈川、
2005 年 3 月 27 日

2. 三上 昌義、中村 振一郎、
希土類酸化物・酸硫化物の電子構造、格子振動及び誘電特性
日本化学会、
神奈川、2005 年 3 月 28 日
3. 小林 高雄、村上 明德、中村 振一郎、志賀 基之
Ab-initio 非断熱分子動力学計算を用いた 1,3-シクロヘキサジエンの光開環反応機構に関する理論的研究、
日本化学会、神奈川、
2005 年 3 月 28 日
4. 串田 一雅、エイニジャツパル、辻岡 強、
フォトクロミックポリマーへの電氣的キャリア注入、
応用物理学会、
埼玉大、
2005 年 3 月 30 日
5. 高木 理江、増井 恭子、中村 振一郎、辻岡 強、
ジアリールエテンの光異性化状態に依存した特異なマグネシウム蒸着選択性 I、
応用物理学会、
埼玉大、
2005 年 3 月 30 日
6. 増井 恭子、中村 振一郎、辻岡 強、
ジアリールエテンの光異性化状態に依存した特異なマグネシウム蒸着選択性 II、
応用物理学会、
埼玉大、
2005 年 3 月 30 日
7. 西尾幸子、高木理江、増井恭子、中村振一郎、志賀靖、前田修一、辻岡強
「グレーティング基板上のフォトクロミック膜の回折効率変化」
第53回応用物理学関係連合講演会
武蔵野工業大学
2006 年 3 月 22～26 日
8. 増井恭子、高木理江、中村振一郎、辻岡強
「バッファ層を介したジアリールエテンのマグネシウム蒸着選択性」
第53回応用物理学関係連合講演会
武蔵野工業大学
2006 年 3 月 22～26 日
9. 高木理江、増井恭子、中村振一郎、辻岡強
「フォトクロミック分子のMg蒸着選択性を用いた有機デバイスの電極パターン形成」
第53回応用物理学関係連合講演会
武蔵野工業大学
2006 年 3 月 22～26 日

10. 増井恭子、高木理江、志賀靖、前田修一、中村振一郎、辻岡強
「フォトクロミック分子の光異性化を用いた有機電子デバイス用微細電極パターン形成」レーザ学会学術講演会
大宮ソニックシティ（埼玉県さいたま市）
2006 年 2 月 9～10 日
11. 高木理江、増井恭子、中村振一郎、辻岡強
「レーザー走査によるフォトクロミック分子の光反応を用いた微細 Mg 電極パターン作成」Optics Japan2005
学術総合センター（東京）
2005 年 11 月 23～25 日
12. 黒木 一誠、巖 虎、眞山 博幸、辻井 薫
「高耐久性の超撥水性ポリアルキルピロール膜の電気化学的合成」
第 54 回高分子学会年次大会
パシフィコ横浜
2005 年 05 月 25～27 日
13. 黒木 一誠、巖 虎、眞山 博幸、辻井 薫
「超撥水性ポリアルキルピロール膜の優れた耐久性」
日本化学会北海道支部 2005 年夏季研究発表会
公立はこだて未来大学(函館市)
2005 年 07 月 23～24 日
14. 眞山 博幸、辻井 薫
「フラクタル立体の創製」
第58回コロイドおよび界面化学討論会
宇都宮大学工学部(陽東キャンパス)
2005 年 09 月 8～10 日
15. 黒木 一誠、巖 虎、眞山 博幸、辻井 薫
「超撥水ポリアルキルピロール膜の電気化学的合成」
第58回コロイドおよび界面化学討論会
宇都宮大学陽東キャンパス
2005 年 09 月 8～10 日
16. 眞山 博幸、辻井 薫
「フラクタル立体の創製」
日本物理学会 2005 年秋季大会
同志社大学(京田辺キャンパス)
2005 年 09 月 19～22 日
17. 巖 虎、黒木 一誠、眞山 博幸、辻井 薫
「フラクタル構造を持つポリアルキルピロール膜の超撥水性と高耐久性」
第54回高分子討論会
山形大学小白川キャンパス
2005 年 09 月 20～22 日

18. 黒木 一誠、巖 虎、辻井 薫
「フッ素化合物をコーティングした高撥油性ポリアルキルピロール膜」
高分子学会第 40 回北海道支部冬季研究発表会
北海道大学百年記念会館
2006 年 01 月 31 日
19. 内田欣吾・斉藤全亮・村上明德・小林高雄・中村振一郎・入江正浩、
「ジアリールエテンを用いたフォトクロミック多重記録の IR による非破壊読み出し」
2005 年光化学討論会
アクロス福岡
2005 年 9 月 12～14 日
20. 関野秀男
「多重解像度多重ウェーブレット基底による電子状態動的物性」
(Electronic Dynamic Properties by Multi-resolution Multi-wavelet Basis)
第 14 回非平衡系の統計物理シンポジウム(つくば冬の学校 2005)
つくば
2006 年 1 月 25～27 日
21. 墨智成, 関野秀男
「分子性液体の積分方程式理論: 配向相関を露に考慮したアプローチ」
日本物理学会第 61 回年次大会
松山
2006 年 3 月 27～30 日
22. 横島智、岡田朗
「DNA 中のグアニン並びのエナジェティックス」
ナノ学会第3回大会
仙台市民会館
2005 年 5 月 8～10 日
23. 小林高雄、志賀基之、村上明德、中村振一郎
「Ab initio 非断熱分子動力学計算を用いた1,3-シクロヘキサンの光開環反応機構に関する理論的研究」
第9回理論化学討論会
京都大学百周年時計台記念館 国際交流ホール
2005年5月17～19日
24. 中村振一郎
「分子科学に出現する形の科学の多様性」
第59回形の科学シンポジウム
北海道大学
2005年6月19～21日
25. 深港豪、梅本徹、米山満、中村振一郎、入江正浩
「高分子媒体中でのジアリールエテンのフォトクロミズム」
2005年光化学討論会
アクロス福岡
2005年9月12～14日

26. 横島智、龍尾光太郎、立川仁典、沈君偉、小林高雄、村上明德、米山満、諫田克哉
中村振一郎、深港豪、入江正浩、
「色素の結合したジアリールエテンの励起状態」
2005年光化学討論会
アクロス福岡
2005年9月12～14日
27. 横島智、野中尋史、濱田信次、中村振一郎、関野秀男
「Method to calculate electronic structures of large molecules using fragments」
日本物理学会2005年秋季大会(同志社大学京田辺キャンパス)21aXJ-10
28. 三上昌義、上田恭太、木島直人
「Al/Si混合擬ポテンシャルによる第一原理電子構造計算」
日本物理学会2005年秋季大会
同志社大学京田辺キャンパス
2005年9月19～22日
29. 小林高雄、志賀基之、村上明德、中村振一郎
「超高速電子励起状態緩和を示す有機色素の光励起ダイナミクスに関する理論的研究:フェ
ノールブルーを例として」
分子構造総合討論会 東京2005
タワーホール船堀
2005年9月27～30日
30. 横島智、野中尋史、濱田信次、中村振一郎、関野秀男
「フラグメントを用いた巨大分子の電子状態計算法ー境界の取扱い方について」
分子構造総合討論会 東京2005
タワーホール船堀
2005年9月27～30日
31. 村上明德、小林高雄、沈君偉、中村振一郎
「エステル分解反応の量子化学計算」
分子構造総合討論会 東京2005
タワーホール船堀
2005年9月27～30日
32. 緒方浩二、沈君偉、Tatiana Romanova、横島智、中村振一郎
「分子動力学法による Ras/Raf 相互作用の解析」
第19回分子シミュレーション討論会
科学研究機構 岡崎コンファレンスセンター
2005 年 11 月 29 日～12 月 1 日
33. 内田欣吾、須方振一郎、泉則和、小島優子、辻岡強、中村振一郎
「水素結合ネットワークにより形成したジアリールエテン結晶薄膜とその光応答」
日本化学会第86春季年会2006年
日本大学理工学部船橋キャンパス
2006 年 3 月 27～30 日

34. 内田欣吾、泉則和、須方振一郎、小島優子、辻岡強、入江正浩、中村振一郎
「溶液キャスト法により作成したジアリールエテン薄膜表面の光形態変化」
日本化学会第86春季年会2006年
日本大学理工学部船橋キャンパス
2006年3月27～30日
35. 松田建児、横島智、森山喜久、中村振一郎、入江正浩
「ジアリールエテンカチオンラジカルの開環／閉環反応(2): 中間体に関する検討」
日本化学会第86春季年会2006年
日本大学理工学部船橋キャンパス
2006年3月27～30日
36. 内田欣吾、高田篤志、望月大剛、村上明德、横島智、中村振一郎、松田広久、伊藤将司、宮坂博、入江正浩
「近接場 IR 光を用いたジアリールエテンフォトクロミック記録の非破壊読み出し」
日本化学会第86春季年会2006年
日本大学理工学部船橋キャンパス
2006年3月27～30日
37. 小林高雄、志賀基之、村上明德、横島智、中村振一郎
「フェノールブルーの超高速光化学反応ダイナミクスに関する理論的研究」
日本化学会第86春季年会2006年
日本大学理工学部船橋キャンパス
2006年3月27～30日
38. 三上昌義
「Si₂N₂O 多相に関する第一原理計算」
日本物理学会2006年春季大会
愛媛大学・松山大学
2006年3月26～30日
39. 横島智、村上明德、小林高雄、中村振一郎、松田建児、入江正浩
「ESR によるカチオン状態のフォトクロミック分子の解析」
第44回電子スピンスサイエンス学会年会
仙台市戦災復興記念館
2005年10月24～26日
40. 横島智、龍尾光太郎、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、小林高雄、村上明德、米山満、諫田克哉、中村振一郎、深港豪、入江正浩
「Excited states of dye-attached diarylethene」
日本物理学会2006年春季大会
愛媛大学・松山大学
2006年3月26～30日
41. 中村振一郎
「分子の特性を最大限に引き出すナノサイズ構造体がつくる場の研究」紹介
WCSC 研究会
高千穂大学
2006年3月18日

42. 立川仁典
「多成分系分子理論の最近の進展」
WCSC 研究会
高千穂大学
2006 年 3 月 18 日

43. 三川隆、中村振一郎
「接合菌類の多様性と分類」
第60回形の科学シンポジウム(東洋大学)
2005年11月5～7日

44. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、中村振一郎、深港 豪、入江正浩
” 蛍光色素結合した単一フォトクロミック分子に対する場の影響”
第 67 回 応用物理学会学術講演会
立命館大学 びわこ・くさつキャンパス
2006.08.29-09.01

45. 中村振一郎
”EUIJ 関西ワークショップ「欧州研究開発政策の社会的インパクト」”
CREST 研究活動紹介および日仏研究環境比較試論
関西学院大学
2006.09.09

46. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、中村振一郎、深港 豪、入江正浩
” 蛍光色素結合した単一フォトクロミック分子に対する場の影響”
2006 年光化学討論会
東北大学 川内北キャンパス
2006.09.10-09.12

47. 中村振一郎
”場の効果について”
「環境ナノ触媒」領域ワークショップ
札幌センチュリーロイヤルホテル
2006.06.02-06.03

48. 中村振一郎
”「量子シミュレーションが拓くナノの世界」パネリスト”
次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2006
MY PLAZA ホール
2006.09.19-09.20

49. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、
深港 豪、入江正浩
” 蛍光色素の結合した単一フォトクロミック分子に対する場の影響”
分子構造総合討論会 2006 静岡

50. 小林高雄、志賀基之、村上明德、横島 智、中村振一郎
 ”1,3-シクロヘキサジエンの超高速光開環反応機構に関する理論的研究”
 分子構造総合討論会 2006 静岡
 静岡県コンベンションアーツセンター
 2006.09.20-09.23

51. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、小林高雄、
 村上明德、米山 満、諫田克哉、中村振一郎、深港 豪、入江正浩
 ” Effect of environment on singlephotochromic molecule linkedtofluorescent dye”
 日本物理学会 2006 年秋季大会
 千葉大学 西千葉キャンパス
 2006.09.23-09.26

52. 三上昌義、内田欣吾、小島優子、中村振一郎
 ”フォトクロミック分子結晶の分子間相互作用に関する第一原理計算”
 日本物理学会 2006 年秋季大会
 千葉大学 西千葉キャンパス
 2006.09.23-09.26

53. 三川 隆、中村振一郎
 ”電子顕微鏡でたどる菌寄生性接合菌の寄生様式と分子系統”
 第 62 回形の科学シンポジウム
 大阪大学 豊中キャンパス 2006.11.03-11.05

54. 横島 智
 ”単分子の光応答と場の効果”
 CREST 領域横断シンポジウム
 学士会館
 2006.11.06-11.07

55. 高 玘
 ” FMO による蛋白の NMR”
 CREST 領域横断シンポジウム
 学士会館
 2006.11.06-11.07

56. 沈 君偉
 ”フラクタル表面出現の源は何処に(実験)”
 CREST 領域横断シンポジウム
 学士会館
 2006.11.06-11.07

57. 小林高雄
 ”半古典 MD による励起状態の解析”
 CREST 領域横断シンポジウム
 学士会館
 2006.11.06-11.07

58. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港 豪、入江正浩
” 蛍光色素結合した単一フォトクロミック分子に対する場の影響”
第 20 回分子シミュレーション討論会
仙台国際センター
2006.11.27-11.29

59. 中村振一郎
”分子の光応答特性を最大限に活かす場を求めて・計算科学によるアプローチ”
環境保全のためのナノ構造制御触媒及び新材料の創製公開シンポジウム
コクヨホール
2007.01.19

60. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、
深港 豪、入江正浩
” 単一フォトクロミック分子に対する場の影響”
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学郡元キャンパス 2007.03.18-3.21

61. 横島 智、松田建児、入江正浩、村上明德、小林高雄、中村振一郎
”ESR によるカチオン状態のフォトクロミック分子の解析”
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学郡元キャンパス 2007.03.18-3.21

62. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、
深港 豪、入江正浩
” 単一フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する場の影響”
日本化学会第 87 春季年会(2007)
関西大学千里山キャンパス 2007.03.25-3.28

63. 小林高雄、志賀基之、村上明德、横島 智、中村振一郎
”1,3-シクロヘキサジエンの超高速光開環反応機構に関する理論的研究”
日本化学会第 87 春季年会(2007)
関西大学千里山キャンパス 2007.03.25-3.28

64. 三上昌義、内田欣吾、小島優子、中村振一郎
”フォトクロミック分子結晶の分子間相互作用に関する第一原理計算”
日本化学会第 87 春季年会(2007)
関西大学千里山キャンパス 2007.03.25-3.28

65. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、
深港 豪、入江正浩
” 単一フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する場の影響”
第 54 回応用物理学関係連合講演会
青山学院大学 2007.03.27-3.30

66. 横島 智、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、高 玘、Paul Tchoupe、
小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、
深港 豪、入江正浩
” 単一フォトクロミック分子の応答”
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学郡元キャンパス 2007.3.18-3.21
67. 墨智成、関野秀男
「量子-古典混合系の有限温度 DFT による高密度流体水素の理論解析」
分子構造総合討論会 2006 静岡
グランシップ[静岡県コンベンションアーツセンター](静岡市駿河区池田 79-4)
2006.09.20-23
68. 関野秀男
「マルチウェーブレット基底による物性算定」
分子構造総合討論会2006静岡
グランシップ[静岡県コンベンションアーツセンター](静岡市駿河区池田79-4)
2006.09.20-23
69. 濱田信次、関野秀男
「マルチウェーブレットを用いたシュレディンガー方程式の解法」
日本物理学会 2006 年秋季大会
千葉大学西千葉キャンパス(千葉市稲毛区弥生町 1-33)
2006.09.23-26
70. 墨智成、関野秀男
「レナード・ジョーンズモデル溶媒は疎水性相互作用の特徴にどこまで迫れるのか？ ～密度
汎関数理論による解析～」
日本物理学会 2006 年秋季大会
千葉大学西千葉キャンパス(千葉市稲毛区弥生町 1-33)
2006.09.23-26
71. 墨智成、関野秀男
「高密度流体水素の金属-非金属転移: 電子-核混合系の DFT による解析」
日本物理学会 2007 年春季大会
鹿児島大学(鹿児島市郡元 1-21-35)
2007.03.18-21
72. 辻岡強、中村振一郎
「フォトクロミック・ジアリールエテンが示す Mg 蒸着選択機能の起源」
第 54 回応用物理学関係連合講演会、2007 年 3 月 27 日
73. 辻岡強、中村振一郎
「有機フォトクロミック分子の異性化状態に依存した特異な自己組織化 ～光応答性分子が描
く唐草模様～」、
形の科学シンポジウム、
2006 年 11 月

74. 辻岡強、横島智、中村振一郎
「アモルファスジアリールエテン分子膜による Mg 蒸着選択機能」
光化学討論会、2006 年 9 月
75. 眞山 博幸、山口 大輔、小泉 智、橋本 竹治、辻井 薫：
「小角・超小角中性子散乱実験からみたフラクタル立体の次元性」，
日本物理学会 2007 年春季大会，
鹿児島大学 (2007-03)
76. 陳 新江、松尾 剛、大谷 文章、辻井 薫：
「Polymerization Behavior of an Amphiphilic Monomer in Organized Bilayer Membranes of a
Lamellar Liquid Crystalline Phase」，
第41回高分子学会北海道支部研究発表会，北海道大学学術交流会館 (2007-02)
77. 眞山 博幸、中井 唱、澤岨 英正、辻井 薫、吉川 研一：
「DNA ゲルと DNA 単分子鎖の1次相転移」，
日本物理学会 2006 年秋季大会，
千葉大学西千葉キャンパス (2006-09)
78. 巖 虎、黒木 一誠、眞山 博幸、辻井 薫：
「フッ素化アルキルシランコートのパリアルキルピロール膜の超撥水性と高撥油性」，
第 55 回高分子討論会，富山大学 (2006-09)
79. 黒木 一誠、巖 虎、辻井 薫：
「高撥油性ポリアリキルピロール膜の優れた耐久性」，
第 59 回コロイドおよび界面化学討論会，
北海道大学(札幌) (2006-09)
80. 方 文軍、眞山 博幸、辻井 薫：
「Spontaneous formation of fractal structures on a wax surface and its super
water-repellency」，
第 59 回コロイドおよび界面化学討論会，北海道大学(札幌) (2006-09)
81. 陳 新江、辻井 薫：
「Synthetic Myelin Structures Immobilized by Polymer Gel」，
第 59 回コロイドおよび界面化学討論会，北海道大学(札幌) (2006-09)
82. 眞山 博幸、陳 新江、長尾 道弘、瀬戸 秀紀、辻井 薫：
「発色性 DGI 二分子膜の中性子スピンエコー法による曲げ弾性率測定」，
第 59 回コロイドおよび界面化学討論会，
北海道大学 高等教育機能開発総合センター (2006-09)
83. 眞山 博幸、辻井 薫：
「Fractality controlled porous silica with a designed template method」，
第 59 回コロイドおよび界面化学討論会，
北海道大学 高等教育機能開発総合センター (2006-09)

84. 松尾 剛、辻井 薫：
「二分子膜形成におけるキラル分子効果」，
第59回コロイドおよび界面化学討論会，北海道大学（2006-09）
85. 石原 敬基、小澤 純、松尾 剛、辻井 薫：
二分子膜固定化ゲルを用いた新規なゲル電気泳動法の開発」，
第59回コロイドおよび界面化学討論会，北海道大学（2006-09）
86. 黒木 一誠、巖 虎、辻井 薫：
「フッ素化合物をコーティングした高撥油性ポリアルキルピロール膜」，
日本化学会・北海道支部・2006 年夏季研究発表会，室蘭工業大学（2006-07）
87. 陳 新江、辻井 薫：
「A novel hydrogel showing super-rapid shrinking but slow swelling behavior」，
日本化学会・北海道支部・2006 年夏季研究発表会，室蘭工業大学（2006-07）
88. 方 文軍、眞山 博幸、辻井 薫：
「Thermally induced formation of super water-repellent surface with fractal structures」，日本
化学会・北海道支部・2006 年夏季研究発表会，室蘭工業大学（2006-07）
89. 眞山 博幸、辻井 薫：
「ナノ多孔質体：フラクタル立体の幾何学的性質の制御」，日本化学会北海道支部 2006 年夏
季研究発表会，室蘭工業大学（2006-07）
90. 陳 新江、辻井 薫：
「Synthetic Myelin Figures Immobilized in Polymer Gels」，
第18回高分子ゲル研究討論会，東京大学山上会館（2007-01）
91. 眞山 博幸、辻井 薫：
「ナノ多孔質体：フラクタル立体の幾何学的性質の制御」，
日本化学会北海道支部 2006 年夏季研究発表会，室蘭工業大学（2006-07）
92. 内田欣吾(龍谷大学)・泉 則和(龍谷大学)・須方振一郎(龍谷大学)・小島優子
(三菱化学科技研セ)・中村振一郎(三菱化学科技研セ)・辻岡 強(大阪教育大)・
入江正浩(九州大学院工)、ジアリールエテン薄膜表面の光形態変化
～新しい光機能コーティング剤～、
2006 年光化学討論会 1B18 (2006 年 9 月 10-12 日)(口頭発表 10 日)
於 東北大学 河内キャンパス
93. 内田欣吾(龍谷大学)、泉 則和(龍谷大学)、小島優子(三菱化学科技研セ)、
中村振一郎 (三菱化学科技研セ)、入江正浩(九州大学院工)、
ジアリールエテン薄膜表面の可逆的光形態変化に及ぼす置換基効果
第 87 日本化学会春季年会 2G7-02 (2007 年 3 月 26 日，会期 25-28 日)
於 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
94. 内田欣吾(龍谷大学)、石黒久登(龍谷大学)、物部浩達(産総研関西センター)、
清水 洋(産総研関西センター)、
アゾベンゼン部位とトリフェニレン環をエーテル結合で結んだ新規
トリフェニレン誘導体の光異性化反応

第 87 日本化学会春季年会 2G7-04 (2007 年 3 月 26 日, 会期 25-28 日)
於 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)

95. 内田欣吾(龍谷大学)、赤澤雅子(龍谷大学)
2つのウレア基をもつジチエニルエテン誘導体のゲル形成とそのフォトクロミズム
第 87 日本化学会春季年会 2G7-06 (2007 年 3 月 26 日, 会期 25-28 日)
於 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
横島智、辻岡強、中村振一郎
“ジアリールエテンの示す Mg 蒸着選択機能の理論的解析”
第 68 回応用物理学会学術講演会
北海道工業大学
2007.9.4-8
96. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、Gao Qi、篠田恵子、小林高雄、村上明德、米山満、
諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“単一フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する周囲の場の影響”
第 68 回応用物理学会学術講演会
北海道工業大学
2007.9.4-8
97. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、高玘、篠田恵子、小林高雄、村上明德、米山満、諫
田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“単一フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する周囲の場の影響”
第 1 回分子科学討論会
東北大学川内北キャンパス
2007.9.17-20
98. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、高玘、篠田恵子、小林高雄、村上明德、米山満、諫
田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“単一フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する場の影響”
日本物理学会第 62 回年次大会
北海道大学札幌キャンパス
2007.9.21-24
99. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、高玘、小林高雄、村上明德、米山満、諫田克哉、戎
崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“フォトクロミック分子ジアリールエテンに対する場の影響”
光化学討論会
信州大学松本キャンパス
2007.9.26-28
100. 篠田恵子、Tatiana A.Romanova、高玘、横島智、村上明德、沈君偉、蟹江治、中村振一郎
“糖鎖のダイナミクスに関するMDシミュレーション”
第 21 回分子シミュレーション討論会
金沢歌劇座
2007.11.26-28
101. 沈君偉、高玘、横島智、篠田恵子、中村振一郎、南貴之、真山博幸、辻井薫
“ワックスによるフラクタル構造形成メカニズムの解析”

第 21 回分子シュミレーション討論会
金沢歌劇座
2007.11.26-28

102. 中村振一郎
“分子の応答に埋め込まれた”場”の特性～その解明から新機能の創造へ 計算と実験の融合による挑戦～
ナノテクノロジー分野別バーチャルラボ成果報告会「ナノテク・未来への挑戦」
新都市ホール
2007.11.29
103. 横島智、Tatiana Romanova、村上明德、大黒周作、蟹江治、中村振一郎
“衝突誘起解離におけるグリコシド結合の解裂機構：量子化学計算による解析”
第 45 回日本生物物理学会年会
パシフィコ横浜 会議センター
2007.12.21-23
104. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、高垣、篠田恵子、小林高雄、村上明德、米山満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“ポリマーがつくる場の中の単一フォトクロミック分子ジアリールエテンの応答”
日本物理学会第 63 回年次大会
近畿大学本部キャンパス
2008.3.22-26
105. 横島智、藤生泰山、立川仁典、沈君偉、高垣、篠田恵子、小林高雄、村上明德、米山満、諫田克哉、戎崎俊一、中村振一郎、深港豪、入江正浩
“ポリマーがつくる場の中の単一フォトクロミック分子ジアリールエテンの応答”
日本化学会第 88 回春季年会
立教大学
2008.3.26-30
106. 小林高雄、志賀基之、村上明德、横島智、中村振一郎
“1,3-シクロヘキサジエンの超高速光開環反応機構に関する理論的研究”
日本化学会第 88 回春季年会
立教大学
2008.3.26-30
107. 中村振一郎、横島智、篠田恵子、村上明德、小島誠也、内田欣吾、入江正浩
“ジアリールエテンの熱安定性に関する考察”
日本化学会第 88 回春季年会
立教大学
2008.3.26-30
108. 関野秀男、佐野直樹
“複素型双直行スプラインウェーブレット基底による時間依存シュレーディンガー方程式解法”
第 10 回理論化学討論会
名古屋大学 野依記念学術交流会館
2007.5.14-16

109. 墨智成、関野秀男
“電子-核混合系の DFT に基づく流体水素の金属-非金属転移の理論解析”
第 10 回理論化学討論会
名古屋大学
2007.5.14-16 野依記念学術交流会館
110. 濱田信次、関野秀男
“ウェーブレットを用いた TDHF/TDDFT 実時間シミュレーション”
第 10 回理論化学討論会
名古屋大学 野依記念学術交流会館
2007.5.14-16
111. 関野秀男
“密度汎関数理論における長距離相互作用再訪”
第1回分子科学討論会
東北大学川内北キャンパス
2007.9.17-20
112. 墨智成、小林一彦、関野秀男
“二成分混合溶媒の液-液相分離臨界点近傍での高分子鎖に関する理論的研究”
第1回分子科学討論会
東北大学川内北キャンパス
2007.9.17-20
113. 墨智成、関野秀男
“不均一系の密度汎関数理論の開発と応用”
日本物理学会第 62 回年次大会
北海道大学札幌キャンパス
2007.9.21-25
114. 伊井隆浩、加藤哲也、濱田信次、関野秀男
“マルチウェーブレットによる物理信号解析”
第 1 回ウェーブレット変換及びその応用に関するワークショップ
豊橋技術科学大学情報基盤メディアセンター
2007.10.24-25
115. 濱田信次、関野秀男
“マルチウェーブレットを用いた時間依存シュレディンガー方程式の解法”
第 1 回ウェーブレット変換及びその応用に関するワークショップ
豊橋技術科学大学情報基盤メディアセンター
2007.10.24-25
116. 加藤哲也、前田康行、柳井毅、ロバート・ハリソン、関野秀男
“マルチウェーブレット基底による非線形応答物性算定”
第 1 回ウェーブレット変換及びその応用に関するワークショップ
豊橋技術科学大学情報基盤メディアセンター
2007.10.24-25

117. 墨智成、関野秀男
“高密度流体水素の金属-プラズマクロスオーバーおよび金属-非金属転移”
若手研究会『理論分子科学のフロンティアを探る』
自然科学研究機構分子科学研究所
2008.1.15-17
118. 瀬角祐介、横島智、中村振一郎、辻岡強
“アルファモス・ジアリールエテン膜への Mg 堆積特性”
第 68 回応用物理学会学術講演会
北海道工業大学
2008.9.8
119. 塩澤昂拓、高木理江、横島智、中村振一郎、辻岡強
“フォトリソミック・ポリマーの光異性化反応による Mg 蒸着制御”
第 68 回応用物理学会学術講演会
北海道工業大学
2008.9.8
120. 家藤奈津子、内田欣吾、中村振一郎、辻岡強
“ジアリールエテン分子の特異な薄膜結晶形態”
第 68 回応用物理学会学術講演会
北海道工業大学
2008.9.8
121. 辻岡強
“フォトリソミック・ジアリールエテンによる金属原子堆積・反射機能”
第 56 回高分子討論会
名古屋工業大学
2007.9.20
122. 辻岡強、横島智、中村振一郎
“アモルファス・ジアリールエテン膜による金属原子の反射特性”
2007 年光化学討論会
信州大学 松本キャンパス
2007.9.27
123. 家藤奈津子、内田欣吾、中村振一郎、辻岡強
“フォトリソミック分子の特異な薄膜結晶形態～唐草模様の起源～”
第 64 回形の科学シンポジウム
神奈川大学 横浜キャンパス
2007.10.2
124. 瀬角裕介、横島智、中村振一郎、内田欣吾、辻岡強
“ジアリールエテン表面における Mg 蒸着選択性の発現モデル”
第 55 回応用物理学関係連合講演会
日本大学理工学部 船橋キャンパス
2008.3.28
125. 紙田元、松尾剛、辻井薫

- “偏光解析による二分子膜固定化ゲルの異方性の定量化”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
126. 眞山博幸、山口大輔、小泉智、橋本竹治、辻井薫
“中性子散乱実験によるフラクタル立体の次元性”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
127. 小野佑輔、眞山博幸、辻井薫
“フラクタル構造を有するポーラスシリカの表面積・細孔分布測定”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
128. 南貴之、眞山博幸、辻井薫
“ワックスによる超撥水フラクタル表面の形成機構”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
129. 陳新江、松尾剛、大谷文章、辻井薫
“Polymerization Behaviors of Racemic and Chiral Amphiphilic Monomers in Organized Bilayer Membrane of a Lamellar liquid Crystalline Phase”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
130. Gosh K. Swapan, Alargova G. Rossitza, 出口茂、辻井薫
“高温/高圧水中におけるコロイドの安定性”
日本化学会・北海道支部・2007 年夏季研究発表会
旭川工業高等専門学校
2007.7
131. 辻井薫
“メゾスコピック高分子組織体の機能性材料への応用”
第 56 回高分子討論会
名古屋工業大学
2007.9
132. 紙田元、松尾剛、辻井薫
“偏光解析による二分子膜固定化ゲルの異方性の定量化”
第 60 回コロイドおよび界面化学討論会
信州大学理学部
2007.9
133. 南貴之、眞山博幸、辻井薫

“ワックス表面における超撥水フラクタル構造の形成メカニズム”

第 60 回コロイドおよび界面化学討論会

信州大学理学部

2007.9

134. 眞山博幸、山口大輔、小泉智、橋本竹治、辻井薫

“超小角中性子散乱・小角中性子散乱によるフラクタル立体の次元性”

第 60 回コロイドおよび界面化学討論会

信州大学理学部

2007.9

135. 小野佑輔、眞山博幸、辻井薫

“フラクタル構造を有するポーラスシリカの次元性・表面積・細孔分布”

第 60 回コロイドおよび界面化学討論会

信州大学理学部

2007.9

136. 辻井薫

“自己組織的フラクタル構造形成と超撥水表面”

豊田理研トライボロジー研究会

東北大学多元物質科学研究所

2007.12

137. 南貴之、眞山博幸、辻井薫

“ワックス表面における超撥水フラクタル構造の形成メカニズム”

第 42 回高分子学会北海道支部研究発表会

北海道大学

2008.1

138. 紙田元、松尾剛、辻井薫

“偏光解析による二分子膜固定化ゲルの異方性の定量解析”

第 3 回 LSW 研究会シンポジウム「ソフト&ウェットマターにおける水の役割」

北海道大学

2008.1

139. 紙田元、辻井薫

“偏光解析による二分子膜固定化ゲルの異方性の定量解析”

第 19 回高分子ゲル研究討論会

東大・山上会館

2008.1

140. 内田欣吾

“フォトクロミック化合物とその機能化”

第 89 回生物有機化学・草津セミナー

立命館大学・くさつキャンパス

2007.4.20

141. 内田欣吾

“ジアリールエテンマイクロ結晶表面における可逆的光誘起マイクロフィブリル生成-ロータス効果

の光制御”

第 56 回高分子討論会

名古屋工業大学

2007.9.27

142. 内田欣吾、須方振一郎、松澤裕至、赤澤雅子、小島優子、中村振一郎

“ジアリアルエテンの気相中での結晶成長とその光応答”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

143. 家藤奈津子、内田欣吾、中村振一郎、辻岡強

“ジアリアルエテン分子の光異性化状態に依存した特異な薄膜結晶モルフォロジー”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

144. 内田欣吾、赤澤雅子、JaapJ. D.de Jong, Jetsuda Areephong, Giuseppe Caroli, Marc Stuart, Ben L. Feringa

“ウレア基をもつジチエニルエテン誘導体からなる光応答性オルガノゲル形成”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

145. 内田欣吾、泉則和、小島優子、辻岡強、中村振一郎

“光応答性薄膜の可逆的表面形状変化”

第 64 回形の科学シンポジウム

2007.11.2-4

146. 内田欣吾

“光により誘起される超撥水・超親水表面”

特定領域研究「フォトクロミズムの攻究とメカニカル機能の創出」

2008.1.24-25

147. 内田欣吾、中川裕友、望月大剛、小林高雄、中村振一郎

“アズレン環をもつジアリアルエテンの合成とフォトクロミック反応”

第 88 回日本化学会春季年会

立教大学 池袋キャンパス

2007.3.27

148. 内田欣吾、山口慎太郎、山田博文、赤澤雅子、片山哲郎、石橋千英、宮坂博

“アミド基をもつアゾベンゼン誘導体のゲル形成とその光異性化”

第 88 回日本化学会春季年会

立教大学 池袋キャンパス

2007.3.27

149. 内田欣吾、赤澤雅子、松澤裕至、辻岡強、中村振一郎

“キラルな置換基をもつジアリアルエテン蒸着薄膜結晶のパターニング”

第 88 回日本化学会春季年会

立教大学 池袋キャンパス

2007.3.28

150. 内田欣吾、松澤裕至、赤澤雅子、辻岡強、小島優子、中村振一郎

“キラルな置換基をもつジアリールエテン結晶薄膜の光応答”

第 88 回日本化学会春季年会

立教大学 池袋キャンパス

2007.3.28

151. 内田欣吾、泉則和、辻岡強、中村振一郎、入江正浩

“ジアリールエテン薄膜表面の可逆的光形態変化に及ぼす構造と温度の効果”

第 88 回日本化学会春季年会

立教大学 池袋キャンパス

2007.3.28

国際

1. 中村 振一郎、浅野 由花子、小林 高雄、Alexander Goldberg, Dominique Guillaumont, 村上 明德、藪下 聡、入江 正浩、
‘Theoretical Study of Organic Functional Molecules; on the Role of Conical Insection ’
、理論化学国際会議 WATOC05、
ケープタウン(南アフリカ) 2005 年 1 月 17 日
2. Hu Yan, Hatsuki Shiga, Etsuko Ito, Kaoru Tsujii,
Cell culture on a super water-repellent AKD surface,
Asian Conference on Nanoacience & Nanotechnology,
Beijing, China, Nov.24-27(2004)
3. 眞山 博幸、
Spontaneous formation of fractal surface、
第 6 回電子科学研究所国際シンポジウム「超」、
学術交流会館、北海道大学(札幌)、
2004 年 12 月 13 日-14 日
4. 巖 虎、辻井 薫、
1. Studies on Behaviors of Biological Cells on Super Water-repellent Surface;
2. Studies on Synthesis of Rapid Thermo-responsive Hydrogels、
第 6 回電子科学研究所国際シンポジウム「超」、
学術交流会館、北海道大学(札幌)、
2004 年 12 月 13 日-14 日
5. M.Mikami, K.Uheda and N.Kijima
”First-principles study of nitridoaluminosilicate CaAlSiN_3 ”
ICTMC-15 Kyoto Japan
(2006.6.6-10)
6. H.Mayama and K.Tsujii
”Creation of a Fractal Body”

The 11th International Conference on Organized Molecular Films
Sapporo, Japan
(2005-06)

7. H.Mayama and K.Tsuji
"Fractal Body Created with a Designed Template"
8th Japan-Australia Colloid and Interface Science Gakkai
Crowne Plaza Hotel, Terrigal, NSW, Australia, Australia
(2005-11)
8. H.Sekino, Y.Maeda and S.Hamada
"Dynamic Response Property Evaluation by Multi-resolution Multi-wavelet Basis Set"
ICCMSE 2005
Loutraki
2005.10.21-26
9. T.Sumii, H.Sekino
"Density-functional theory for thermodynamic properties of condensed systems consisting of quantum and classical particles"
PACIFICHEM2005
Honolulu
2005.12.15-20
10. H.Sekino
"Evaluation of non-equilibrium properties"
PACIFICHEM2005 (Honolulu)
2005.12.15-20
11. Shiichiro Nakamura, Satoshi Yokojima, Mitsuru Yoneyama, Jun-Wei Shen, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Yasutaka Fujiu, Gao Qi, Kingo Uchida, Tsuyoshi Tsujioka, Masahiro Irie
"Theoretical Study of Diarylethene on the Electronic Structure and Molecular Dynamics"
Japanese-French Joint Seminar on Organic Photochromism
湘南国際村センター 2006.10.15-10.18
12. Satoshi Yokojima, Yasutaka Fujiu, Masanori Tachikawa, Jun-Wei Shen, Qi Gao, Paul Tchoupe, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Mitsuru Yoneyama, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Toshikazu Ebisuzaki, Tsuyoshi Fukaminato, Masahiro Irie
"Effect of Environment on single-photochromic molecule"
13. AMERICAN PHYSICAL SOCIETY March Meeting 2007
COLORADO CONVENTION CENTER, DENVER
2007.03.05-03.09
14. Satoshi Yokojima, Kenji Matsuda, Masahiro Irie, Akinori Murakami, Takao Kobayashi and Shinichiro Nakamura
"Characterization of Cationic Diarylethene by ESR"
Fourth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics(M&BE4)
東京大学本郷キャンパス
2007.03.14-3.16

15. Hideo Sekino, H. Matsumoto
 "Evaluation of Polarizability by Density Based Methods" ICCMSE 2006
 18.10.27-11.01
 otel Panorama (Chania, Crete, Greece)

16. H. Mayama and K. Tsujii : "Menger sponge-like fractal body created with a novel template method", YITP Workshop "Structures and Dynamics in Soft Matter" -Beyond Self-Organization and Hierarchical Structures- , Yukawa Institute for Theoretical Physics (YITP), Kyoto University (2006-07)

17. H. Mayama, P. Wang, W. Fang, T. Onuma, N. Birukawa, J. Li, A. Urano and K. Tsujii : "C6 Glioma Cells on Fractal Surfaces", The 3rd Japan-UK Symposium on Promotion of Regional Partnerships on Nanotechnology Development , CRIS, Hokkaido University (2007-03)

18. K. Uchida (Ryukoku University), N. Izumi (Ryukoku University), S. Sukata (Ryukoku University), Y. Kojima (Mitsubishi Chemical Group), S. Nakamura (Mitsubishi Chemical Group), M. Irie (Kyushu University),
 Photoinduced Reversible Surface Morphology Changes of a Thin Film of a Photochromic Diarylethene (SO₃)
 XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry (in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006)

19. Takao Kobayashi, Motoyuki Shiga, Akinori Murakami and Shinichiro Nakamura
 "Ab initio Study of Ultrafast Photochemical Ring-Opening Reaction of 1,3-Cyclohexadiene"
 Proceedings of the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007(ICCMSE2007)
 Corfu, Greece
 25-27 September 2007

20. Satoshi Yokojima
 "Environmental Field Effect in Photochromism"
 Crest Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
 Tsukuba International Congress Center (Epochal Tsukuba)
 January 29th~31st,2008

21. Gao Qi
 "A New Method for NMR Chemical Shift of Proteins, A FMO Study"
 Crest Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
 Tsukuba International Congress Center (Epochal Tsukuba)
 January 29th~31st,2008

22. Hideo Sekino
 "A dynamically adaptive refinement in muliresolution multiwavelet basis for dynamical quantum wavefunctions"
 Proceedings of the International Conference on Computational Methods in Science and Engineering 2007(ICCMSE2007)
 Corfu, Greece

25–27 September 2007

23. Hideo Sekino
“Toward the electric conductance evaluation of bio-macro molecule-FMO non-equilibrium Green’s function method”
Crest Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
Tsukuba International Congress Center (Epochal Tsukuba)
January 29th~31st,2008
24. Tsuyoshi Tsujioka, Satoshi Yokosima, Shinichiro Nakamura
“Selective Metal Deposition/Reflection Property of an Amorphous Diarylethene Film”
International Symposium on Organic Photochromism(Vancouver,Canada)
2007.10.9
25. Tsuyoshi Tsujioka
“Molecular Atom Player on Organic Film Surface”
Crest Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
Tsukuba International Congress Center (Epochal Tsukuba)
January 29th~31st,2008
26. K. Tsujii
“FRACTAL MATERIALS AND THEIR FUNCTIONAL PROPERTIES”
9th Conference on Colloid Chemistry
Hungary, Siofok, Hungary, Hungary
2007.10
27. K.Tsujii
“Fractal Structures and Their Functional Properties”
YITP Workshop2007–New Frontiers in Collidal Physics–
京大会館
2007.10
28. K. Tsujii
“What is the origin of fractal structure appearance?”
CREST Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
Tsukuba International Congress Center
2008.1
29. Hiroshi Sakama and Noriya Ichikawa
“The Discovery of a new Cross Correlation System”
CREST Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at Nano-Scale Interfaces
Tsukuba International Congress Center
2008.1
30. Kingo Uchida, Norikazu Izumi, Yuko Kojima, Tsuyoshi Tsujioka, Shinichiro Nakamura, and

Masahiro Irie
“Photoinduced Morphology Changes of Diarylethene Thin Film Surface”
International Symposium on Photochromism(ISOP-07)
Vancouver, Canada,
October 7-10 2007

31. Kingo Uchida
“What is the secret of Hair Growth on Organic Crystal Surfaces?”
Also, the Dancers of Organic Crystals
CREST Symposium on Theories and Simulations for Charge Migration and Chemical Reactions at
Nano-Scale Interfaces
Tsukuba International Congress Center
2008.1

① ポスター発表 (国内会議 53 件、国際会議 46 件)

- (ア) 高木理江、増井恭子、中村振一郎、辻岡強
「ジアリールエテン膜のMg蒸着選択性を用いた有機電子デバイス微細電極形成」
光化学討論会 (福岡)
2005 年 9 月
- (イ) 増井恭子、高木理江、中村振一郎、辻岡強
「フォトクロミック・ジアリールエテンの新機能 -Mg 蒸着選択性-」
光化学討論会 (福岡)
2005 年 9 月
- (ウ) 辻岡強、高木理江、増井恭子、中村振一郎、志賀靖、前田修一
「フォトクロミック・ジアリールエテン分子のマグネシウム蒸着選択機能」
文部科学省科研費特定領域研究「次世代共役ポリマーの超階層制御と革新機能」
第二回 公開シンポジウム(大阪)
2006 年 1 月
- (エ) 内田欣吾・高田篤史・梁 仙一・斉藤全亮・村上昌孝・石橋千英・宮坂 博・入江正浩
「ジアリールエテン酸化重合膜のピコ秒レーザー光分解」
2005 年光化学討論会
2005 年 9 月 12-14 日
- (オ) 内田欣吾・高田篤史・望月大剛・小林高雄・村上明德・中村振一郎・入江正浩、
「ジアリールエテンを用いたフォトクロミック光記録の近接場 IR 光を用いた非破壊読み出し」
2005 年光化学討論会
2005 年 9 月 12-14 日
- (カ) 内田欣吾・須方振一郎・小島誠也・Martin Walko・Jaap J. D. de Jong, Ben L. Feringa
「(*R*)-1-Phenylethylamino 基を有するジアリールエテンのフォトクロミック反応」
2005 年光化学討論会
2005 年 9 月 12-14 日 (ポスター発表 14 日)
- (キ) 内田欣吾、山田博文、

「(R)-1-Phenylethylamino 基を有するアゾベンゼンのフォトクロミック反応」

2005 年光化学討論会

2005 年 9 月 12-14 日

- (ク) 横島 智、龍尾光太郎、藤生泰山、立川仁典、沈 君偉、小林高雄、村上明德、米山 満、諫田克哉、中村振一郎、深港 豪、入江正浩、
”色素付きジアリールエテンの励起状態”

ナノ学会第 4 回大会

京都大学 百周年時計台記念館 2006.05.19-05.21

- (ケ) 横島 智

”分子の光応答にメモリー性を与える場の効果とは？”

”ナノテクノロジーバーチャルラボ成果報告会”

東京国際フォーラム

2006.07.15

- (コ) 村上明德、小林高雄、中村振一郎、三好永作

”遷移モーメントの MS-CASPT2 による補正-アズレンを例にして”

分子構造総合討論会 2006 静岡

静岡県コンベンションアーツセンター

2006.09.20-09.23

- (サ) 藤生泰山、横島 智、沈 君偉、高 玘、立川仁典、深港 豪、
入江正浩、中村振一郎

” 場の中に置かれたフォトクロミック分子のダイナミクス”

分子構造総合討論会 2006 静岡

静岡県コンベンションアーツセンター

2006.09.20-09.23

- (シ) Qi Gao, Satoshi Yokojima, Takao Kobayashi, Kohno Toshiyuki,
Shinichiro Nakamura, ”Ab initio calculation of NMR chemical shifts
of large molecules by FMO method”

第 45 回 NMR 討論会

京都大学 百周年時計台記念館 2006.11.22-11.24

- (ス) 藤生泰山、横島 智、沈 君偉、高 玘、中村振一郎、深港 豪、
入江正浩、立川仁典

” 場の中に置かれたフォトクロミック分子のダイナミクス”

第 20 回分子シミュレーション討論会

仙台国際センター

2006.11.27-11.29

- (セ) 横島 智

”蛍光色素の結合した単一ジアリールエテンに対する場の影響”

環境保全のためのナノ構造制御触媒及び新材料の創製公開シンポジウム
コクヨホール

2007.01.19

- (ソ) 松本啓紀、関野秀男

「密度汎関数法による分極率算定における長距離相互作用に関する研究」
分子構造総合討論会 2006 静岡
グランシップ[静岡県コンベンションアーツセンター](静岡市駿河区池田 79-4)
2006.09.20-23

(タ) 松村直樹、関野秀男
「巨大生体分子系の NMR 化学シフト理論算定」分子構造総合討論会 2006 静岡
グランシップ[静岡県コンベンションアーツセンター](静岡市駿河区池田 79-4)
2006.09.20-23

(チ) 内田雄介、関野秀男、墨智成
「ナノピラーを用いたマイクロチップ電気泳動の計算機シミュレーション」
分子構造総合討論会 2006 静岡
グランシップ[静岡県コンベンションアーツセンター](静岡市駿河区池田 79-4)
2006.09.20-23

(ツ) 家藤奈津子、エイニジャツパル、辻岡強
「フォトクロミック・ジアリールエテンへのキャリア注入による超微弱発光の観測」
Optics and Photonics Japan 2006、2006 年 11 月

(テ) 家藤奈津子、エイニジャツパル、中村振一郎、入江正浩、辻岡強
「フォトクロミック・ジアリールエテンを用いた有機半導体メモリ I」
光化学討論会、2006 年 9 月

(ト) 杵坂雄一郎、志賀靖、前田修一、中村振一郎、入江正浩、辻岡強
「フォトクロミック・ジアリールエテンを用いた有機半導体メモリ II」
光化学討論会、
2006 年 9 月

(ナ) 辻岡強、内田欣吾、米山満、中村振一郎
「ジアリールエテン薄膜の Mg 蒸着選択機能の相状態依存性」
光化学討論会、
2006 年 9 月

(ニ) 眞山 博幸、陳 新江、長尾 道弘、瀬戸 秀紀、辻井 薫：
「中性子スピンエコー法による発色 DGI 二分子膜のダイナミクスと曲げ弾性率測定」、
日本中性子学会第 6 回年回、茨城県県民文化センター(水戸) (2006-12)
眞山 博幸、陳 新江、長尾 道弘、瀬戸 秀紀、辻井 薫：
「中性子スピンエコー法による発色性 DGI 二分子膜の曲げ弾性率測定」、
日本物理学会 2006 年秋季大会、千葉大学西千葉キャンパス (2006-09)

(ヌ) 内田欣吾(龍谷大学)・石黒久登(龍谷大学)・中川裕友(龍谷大学)・物部浩達
(産総研関西センター)・清水 洋(産総研関西センター)
メソゲンとしてアゾベンゼン部位を有する新規トリフェニレン誘導体の光異性化反応、
2006 年光化学討論会 1P058 (2006 年 9 月 10-12 日)(ポスター発表 10 日)
於 東北大学 河内キャンパス

(ネ) 内田欣吾(龍谷大学)・山田博文(龍谷大学)・石橋千英(大阪大学院基礎工)・谷 賢輔
(大阪大学院基礎工)・宮坂 博(大阪大学院基礎工)

光学活性なアミド基をもつアゾベンゼン誘導体のゲル生成とその光応答、
2006 年光化学討論会 2P023 (2006 年 9 月 10-12 日)(ポスター発表 11 日)
於 東北大学 河内キャンパス

- (ノ) 内田欣吾(龍谷大学)・松澤祐至(龍谷大学)・須方振一郎(龍谷大学)・小島優子(三菱化学科技研セ)・中村方振一郎(三菱化学科技研セ)、
水素結合ネットワークをもつフォトクロミックジアリールエテン結晶のフォトクロミズム、
第 87 日本化学会春季年会 2PC-058 (2007 年 3 月 26 日, 会期 25-28 日)
於 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
- (ハ) 内田欣吾(龍谷大学)、中川裕友(龍谷大学)、高田篤史(山田化学)、石橋千英(大阪大学院基礎工)、宮坂 博(大阪大学院基礎工)、中村振一郎(三菱化学科技研セ)、入江正浩(九州大学院工)、
ジアリールエテン誘導体の IR スペクトルに及ぼす置換基効果
第 87 日本化学会春季年会 2PC-061 (2007 年 3 月 26 日, 会期 25-28 日)
於 関西大学千里山キャンパス(大阪府吹田市)
- (ヒ) Tatiana Romanova、村上明德、横島智、沈君偉、大黒周作、蟹江治、中村振一郎
“Mechanism of the Glycosidic Bond Cleavage of α -Fuc-(1-2)- β -Gal-(1-1)-Octyl IN
Collision Induced Dissociation.Quantum Chemical Study”
第 27 回日本糖質学会年会
九州大学医学部百年講堂
2007.8.1-3
- (フ) 横島智
“場の特性を映した分子の応答に関する理論的研究”
ナノテクノロジー分野別バーチャルラボ成果報告会「ナノテク・未来への挑戦」
新都市ホール
2007.11.29
- (ヘ) 横島智、Tatiana Romanova、村上明德、大黒周作、蟹江治、中村振一郎
“衝突誘起解離におけるグリコシド結合の解裂機構:量子化学計算による解析”
第 45 回日本生物物理学会年会
パシフィコ横浜 会議センター
2007.12.21-23
- (ホ) 仙石康雄、若林一、関野秀男
“FragmentMO 法によるスペクトル予測”
第 10 回理論化学討論会
名古屋大学 野依記念学術交流会館
2007.5.14-16
- (マ) 内田雄介、墨智成、関野秀男
“ナノピラーを用いたマイクロチップ電気泳動の計算機シミュレーション”
第 10 回理論化学討論会
名古屋大学 野依記念学術交流会館
2007.5.14-16
- (ミ) 加藤哲也、前田康行、柳井毅、R.J.Harrison、関野秀男

“マルチウェーブレット基底による超分極率の算定“

第 10 回理論化学討論会

名古屋大学 野依記念学術交流会館

2007.5.14-16

(ム) 小林一彦、墨智成、関野秀男

“二成分混合溶媒の液-液相分離臨界点近傍における高分子挙動の理論的研究”

第 10 回理論化学討論会

名古屋大学野 依記念学術交流会館

2007.5.14-16

(メ) 松本啓紀、関野秀男

“長距離相互作用補正を考慮した密度汎関数法による(超)分極率算定に関する研究”

第 10 回理論化学討論会

名古屋大学 依記念学術交流会館

2007.5.14-16

(モ) 墨智成、今崎伸幸、関野秀男

“超臨界流体の気-液臨界点近傍での高分子鎖の振る舞い

ソフトマター物理第 2 回公開シンポジウム

名古屋大学

2008.1.7-1.8

(ヤ) 墨智成、今崎伸幸、関野秀男

“超臨界溶媒の気-液臨界点近傍での高分子鎖の普遍的および特異的挙動”

日本物理学会第 63 回年次大会

近畿大学 本部キャンパス

2008.3..23-26

(ユ) 瀬角祐介、横島智、中村振一郎、辻岡強

“ジアリアルエテンの示す Mg 蒸着選択性ガラス転移点との関連性”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

(ヨ) 塩澤昂拓、高木理江、横島智、中村振一郎、辻岡強

“フォトクロミック・ポリマーの光異性化反応による Mg 蒸着制御”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

(ラ) 家藤奈津子、内田欣吾、中村振一郎、辻岡強

“ジアリアルエテン分子の光異性化状態に依存した特異な薄膜結晶モルフォロジー”

2007 年光化学討論会

信州大学 松本キャンパス

2007.9.27

(リ) 辻岡強、瀬角祐介、横島智、中村振一郎

“アルファモス・ジアリールエテン膜による Mg 蒸着制御と集積機能”

第 1 回フォトクロミズムシンポジウム

東京大学 山上会館

2007.11.16

(ル) 瀬角祐介、横島智、中村振一郎、辻岡強

“ジアリールエテンの示す Mg 蒸着選択性と異性化反応による膜表面の物性変化”

第 1 回フォトクロミズムシンポジウム

東京大学 山上会館

2007.11.16

(レ) 塩澤昂拓、横島智、中村振一郎、辻岡強

“ジアリールエテンドープによるポリマーへの Mg 蒸着制御”

第 1 回フォトクロミズムシンポジウム

東京大学 山上会館

2007.11.16

(ロ) 家藤奈津子、内田欣吾、中村振一郎、辻岡強

“ジアリールエテン分子の光異性化状態に依存した特異な薄膜結晶形態

第 1 回フォトクロミズムシンポジウム

東京大学 山上会館

2007.11.16

(ワ) 眞山博幸、山口大輔、小泉智、橋本竹治、辻井薫

“ナノ多孔質体:フラクタル立体の創製とその次元性”

第 5 回ナノ学会

つくば国際会議場

2007.5

(ヲ) 南貴之、眞山博幸、辻井薫

“超撥水フラクタル表面の形成メカニズム”

第 5 回ナノ学会

つくば国際会議場

2007.5

(ン) 小野祐輔、眞山博幸、辻井薫

“ナノ多孔質体:フラクタル立体の比表面積と細孔分布”

第 5 回ナノ学会

つくば国際会議場

2007.5

(ア) 千葉香織、眞山博幸、門出健次、吉田昌史、辻井薫

“高撥油性ポリフッ化アルキルピロール膜の電気化学的合成

第 60 回コロイドおよび界面化学討論会

信州大学理学部

2007.9

(イ) 南貴之、眞山博幸、辻井薫

“超撥水フラクタル表面の形成機構”

第 53 回高分子夏季大学
洞爺湖万世閣
2007.7

- (ウ) 内田欣吾、泉則和、小島優子、中村振一郎、入江正浩
“ジアリールエテン薄膜表面の可逆的光形態変化”
2007 年光化学討論会
信州大学 松本キャンパス
2007.9.26-28

- (エ) 内田欣吾、石黒久登、物部浩達、清水洋、
“アゾベンゼンメソゲンとトリフェニレンコア部をエーテル結合で結んだ液晶分子の光誘起相変化”
2007 年光化学討論会
信州大学 松本キャンパス
2007.9.26-28

- (オ) 内田欣吾、中川裕友、横島智、高田篤史、村上明德、石橋千英、宮坂博、中村振一郎
“ジアリールエテン誘導体の IR スペクトルに及ぼす置換基効果”
2007 年光化学討論会
信州大学 松本キャンパス
2007.9.26-28

- (カ) 内田欣吾、須方振一郎、赤澤雅子、松澤裕至、辻岡強、小島優子、中村振一郎
“キラルな置換基を有するジアリールエテンの結晶性蒸着膜のフォトクロミズム”
2007 年光化学討論会
信州大学 松本キャンパス
2007.9.26-28

- (キ) 赤澤雅子、内田欣吾、松澤裕至、辻岡強、中村振一郎
“蒸着したジアリールエテン薄膜結晶の形態に及ぼす分子構造の影響”
第 64 回形の科学シンポジウム
2007.11.2-4

国際

1. Kyoko Masui, Rie Takagi, Shinichiro Nakamura, Tsuyoshi Tsujioka
“Mg Vapor Deposition Switch using a Photochromic Diarylethene”
Pacifichem 2005 (環太平洋国際化学会議)
Honolulu, Hawaii
2005 年 12 月
2. Rie Takagi, Kyoko Masui, Shinichiro Nakamura, Tsuyoshi Tsujioka
“Fine Electrode Preparation of Organic Electronics Devices using a Photochromic Diarylethene Layer”
Pacifichem 2005 (環太平洋国際化学会議)
Honolulu, Hawaii
2005 年 12 月
3. Tsuyoshi Tsujioka

"Photochromic Memory with Electronic Functions"
International Symposium on Optical Memory & Optical Data Storage
Honolulu, Hawaii
2005.7.10-14

4. T.Sumii, H.Sekino,
"Cooperative phenomenon between polymer chain and supercritical solvent: Remarkable expansions of solvophobic and solvophilic polymers"
Pacifichem2005
Honolulu
2005 年 12 月
5. T.Sumii, C.Suzuki, and H.Sekino
"Entropy- or enthalpy-driven collapse of strongly charged polymer chains in one-component charged fluids"
第 3 回「水生体分子」公開ワークショップ
岡崎
2006 年 1 月 06~07 日
6. H.Yan, H.Shiga, E.Ito and K.Tsujii
"Cell Cultures on Self-Organized Fractal Surfaces"
The 11st International Conference on Organized Molecular Films
Sapporo, Japan
2005 年 06 月
7. K. Kurogi, H. Yan, H. Mayama and K. Tsujii
"Super Water-Repellency and Environmentally Stability of Self-Organized Poly(alkylpyrrole) Films"
The 11st International Conference on Organized Molecular Films
Sapporo, Japan
2005 年 06 月
8. K.Kurogi, H.Yan, H.Mayama and K.Tsujii
"Environmentally-Durable Super Water-Repellent Surfaces Made of Poly(alkylpyrrole) Films"
19th Conference of the European Colloid and Interface Society
Geilo, Norway, ノルウェー
2005 年 09 月
9. H.Sakama, G.Osada, A.Tanokura and N.Ichikawa
"Epitaxial growth of anatase TiO₂ thin films on LaAlO₃(100) prepared using pulsed-laser deposition"
ICTF 13/ACSIN8
2005.6
10. H.Sakama, A.Ono, M.Tsukamoto and N.Ichikawa
"Photocatalytic Activities of TiO₂ Films Prepared by RF Magnetron Sputtering"
ICMAT2005
Singapore
2005.7.3-8

11. M.Tsukamoto, A.Tanokura, N.Ichikawa and H.Sakama
 "Epitaxial growth of anatase TiO₂ thin films prepared using pulsed-laser deposition"
 ISSS4 Saitama Japan
 2005.11.14-17

12. K.Wakiyama, N.Ichikawa, A.Tanokura and H.Sakama
 "Effect of Fluorine-substitution in La-214 Copper Oxide Thin Films"
 ISSS4 Saitama Japan
 2005 .11.14-17

13. K.Shinohara, N.Ichikawa, A.Tanokura and H.Sakama
 "Effect of substrate surface roughness on the superconducting properties in La-214 copper oxide thin films"
 ISSS4 Saitama Japan
 2005.11.14-17

14. T.Kudo, A.Tanokura, N.Ichikawa and H.Sakama
 "Effect of epitaxial strain in La_{2-x-y}Eu_ySr_xCuO₄ thin films"
 ISSS4 Saitama Japan
 2005.11.14-17

15. K.Uchida, M. Saito, A. Murakami, T. Kobayashi, S. Nakamura and M. Irie
 "Nondestructive Readout of the Multi-States Photochromic Recording by Using IR Light"
 International Symposium of Optical Memory and Data Storage (ISOM-ODS 2005)
 Hawaii, USA
 2005 年7月 10～15 日

16. Satoshi Yokojima, Koutaro Ryuo, Yasutaka Fujiu, Masanori Tachikawa, Kuni Shin, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Mitsuru Yoneyama, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Tuyoshi Fukaminato, and Masahiro Irie
 " Excited states of dye-attached diarylethene"
 IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY
 京都府民総合プラザ 京都テルサ
 2006.04.02-04.05

17. Tuyoshi FUKAMINATO, Tohru UEMOTO, Mitsuru YONEYAMA, Satoshi YOKOJIMA, Shinichiro NAKAMURA and Masahiro IRIE
 "Photochromic Reaction of Single Diarylethene Molecules in Polymer Matrices"
 IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY
 京都府民総合プラザ 京都テルサ
 2006.04.02-04.05

18. Takao Kobayashi, Motoyuki Shiga, Akinori Murakami, Satoshi Yokojima, and Shinichiro Nakamura
 "An ab initio study of ultrafast photochemical reaction dynamics of phenol blue"
 IUPAC SYMPOSIUM ON PHOTOCHEMISTRY
 京都府民総合プラザ 京都テルサ
 2006.04.02-04.05

19. Satoshi Yokojima, Koutaro Ryuo, Yasutaka Fujiu, Masanori Tachikawa, Kuni Shin, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Mitsuru Yoneyama, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Tuyoshi Fukaminato, and Masahiro Irie
 "Excited states of dye-attached diarylethene"
 The XIIth International Congress of Quantum Chemistry
 京都府民総合プラザ 京都テルサ 2006.05.21-05.26

20. Takao Kobayashi, Motoyuki Shiga, Akinori Murakami, Satoshi Yokojima, and Shinichiro Nakamura
 "An ab initio study of ultrafast photochemical reaction dynamics of phenol blue"
 The XIIth International Congress of Quantum Chemistry
 京都府民総合プラザ 京都テルサ
 2006.05.21-05.26

21. Satoshi Yokojima, Koutaro Ryuo, Yasutaka Fujiu, Masanori Tachikawa, Kuni Shin, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Mitsuru Yoneyama, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Tuyoshi Fukaminato, and Masahiro Irie
 "Excited states of dye-attached diarylethene"
 Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation
 慶応大学野上キャンパス
 2006.06.06-06.08

22. Qi Gao, Satoshi Yokojima, Takao Kobayashi, Shinichiro Nakamura
 "Ab initio calculation of NMR chemical shifts of large molecules by FMO method"
 Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan (EABS & BSJ 2006)
 沖縄コンベンションセンター
 2006.11.12-12.16

23. Satoshi Yokojima, Yasutaka Fujiu, Koutaro Ryuo, Masanori Tachikawa, Jun-Wei Shen, Qi Gao, Paul Tchoupe, Takao Kobayashi, Akinori Murakami, Mitsuru Yoneyama, Katsuya Kanda, Shinichiro Nakamura, Toshikazu Ebisuzaki, Tuyoshi Fukaminato, Masahiro Irie
 "Effect of Environment on single-photochromic molecule"
 Second International Symposium on Nanometer-Scale Quantum Physics (nanoPHYS'07)
 東京工業大学大岡山キャンパス
 2007.01.24-01.26

24. Shinji Hamada, Hideo Sekino
 "Solution of time dependent Schrodinger equations using multiwavelet"
 The ICQC 2006 Satellite Symposium in Sendai [Electron Dynamics and Spectroscopy]
 ホテル松島大観荘 (宮城郡松島町松島字犬田 10-76)
 2006.5.16-19

25. Hideo Sekino
 "Evaluation of Non-equilibrium Property"
 The XIIth ICQC in Kyoto
 京都テルサ (京都市南区新町通九条下ル 京都府民総合交流プラザ内)
 2006.05.21-26

26. Yasuyuki Maeda, Takeshi Yanai, Robert J. Harrison, Hideo Sekino
 “Polarizability evaluation using multiresolution multiwavelet bases”
 The XIIth ICQC in Kyoto
 京都テルサ(京都市南区新町通九条下ル 京都府民総合交流プラザ内)
 2006.05.21-26

27. Satoru Tanibayashi, Tomofumi Tada, Satoshi Watanabe, Hideo Sekino
 “Effects of energetic stability in transport measurements of single benzene-dithiolate by the STM break junction technique”
 The XIIth ICQC in Kyoto
 京都テルサ(京都市南区新町通九条下ル 京都府民総合交流プラザ内)
 2006.05.21-26

28. Tsuyoshi Tsujioka, Rie Takagi, Kyoko Masui, Yasushi Shiga, Shuichi Maeda, Shinichiro Nakamura
 “Metal Vapor Selective Deposition by Using Photo-Isomerization of Photochromic Diarylethenes”
 IUPAC Photochemistry (Kyoto)、2006 年 4 月

29. H. Mayama and K. Tsujii :
 “Creation of Menger Sponge-Like Fractal Bodies with Different Fractal Dimensions”,
 AsiaNANO 2006 , Busan, Korea , Korea (2006-11)

30. K. Kurogi, H. Yan and K. Tsujii :
 “Super Water-Repellent Surfaces of Polyalkylpyrrol with Good Durability”,
 Asian Conference on Nanoscience & Nanotechnology (AsiaNANO 2006) , Busan , Korea
 (2006-11)

31. X. Chen and K. Tsujii :
 “A novel hydrogel showing super-rapid shrinking but slow swelling behavior”,
 Asian Conference on Nanoscience & Nanotechnology (AsiaNANO 2006) , Busan , Korea
 (2006-11)

32. G. Matsuo and K. Tsujii :
 “Effect of Chirality in Bilayer Membranes”,
 Asia Nano 2006 , Busan , Korea (2006-11)

33. K. Uchida (Ryukoku University), A. Takata (Ryukoku University), D. Mochizuki (Ryukoku University), A. Murakami (Mitsubishi Chemical Group), S. Yokojima (Mitsubishi Chemical Group), S. Nakamura (Mitsubishi Chemical Group), H. Matsuda (Osaka University), S. Ito (Osaka University), H. Miyasaka (Osaka University), M. Irie (Kyushu University),
 Photochromic Recording and Nondestructive Readout by Using IR Light in Near Field
 XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry (in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006)

34. K. Uchida (Ryukoku University), S. Sukata (Ryukoku University), M. Walko (University of Groningen), J. J. D. Jong (University of Groningen), S. Kobatake (Osaka City University), A. Meetsma (University of Groningen), J. H. van Esch, B. L. Feringa (University of Groningen),

Diastereoselective Cyclisation of a Dithienylethene Switch Through Single Crystal Confinement
XXIst IUPAC Symposium on Photochemistry (in Kyoto, Japan, April 2-7, 2006)

35. K. Uchida (Ryukoku University), M. Walko (University of Groningen), J. J. D. Jong (University of Groningen), S. Sukata (Ryukoku University), S. Kobatake (Osaka City University), A. Meetsma (University of Groningen), J. H. van Esch (University of Groningen), B. L. Feringa (University of Groningen),
Diastereoselective Cyclization of a Dithienylethene Fixed by Inter- molecular Hydrogen Bonding Network in Crystals
The 7th International Symposium on Functional • -Electron Systems (May, 15-20, 2006)
(in Osaka, Japan, May 19, 2006)
36. K. Uchida (Ryukoku University), H. Yamada (Ryukoku University), H. Nakagawa (Ryukoku University), Y. Ishibashi (Osaka University), K. Tani (Osaka University), H. Miyasaka (Osaka University),
Synthesis and Gelation Ability of Azobenzene Derivatives with Chiral Amide Groups
Third International Workshop on Supramolecular Nanoscience of Chemically Programmed Pigments (June 6-8, 2006)
(at Ritsumeikan University, Kusatsu, Shiga, Japan)
37. Hideo Sekino, Shinji Hamada
“Time Dependent Simulation with Multi-resolution Multi-wavelet basis sets”
FCSNT2007(Frontiers in Computational Science of Nanoscale Transport2007)
東京理科大学森戸記念館
2007.6.7-8
38. Tomonari Sumi and Hideo Sekino
“Polymer behavior in supercritical fluid mixture near the liquid-liquid phase separation”
Golden Research Conferences[Liquids, Chemistry & Physics Of]
Holderness School in Plymouth NH United States(ブリマス、ニューハンプシャー州、アメリカ)
2007.7.28-8.3
39. Tomonari Sumi, Kazuhiko Kobayashi, Hideo Sekino
“Behavior of a polymer chain immersed in a binary mixture of solvents”
第30回溶液化学シンポジウム・JMLG/EMLG ミーティング 2007 合同大会
2007.11.21-25
40. H. Mayama, D. Yamaguchi, S. Koizumi, T. Hashimoto and K. Tsujii
“Small-angle and ultra small-angle neutron scattering studies on fractal body”
The12th International Conference on Organized Molecular Films(LB12)
Uniwersytet Jagiellonski in Krakow, Poland, Poland
2007.10
41. H. Mayama and K. Tsujii
“Fractal dimension of fractal porous silica in real and reciprocal spaces”
The 9th RIES-Hokudai International Symposium on 創[sou], Creative Research Initiative”Sousei”
Hokkaido University
2008.1

42. G. Kamita, G. Matsuo and K. Tsujii
 “Polarizing microscopic study on the structural anisotropy of polymer gels containing bilayer membranes”
 The 9th RIES-Hokudai International Symposium on 創[sou], Creative Research Initiative”Sousei”
 Hokkaido University
 2008.1
43. T. Minami, H. Mayama, and K. Tsujii
 “Formation mechanism of super water-repellent fractal structures on wax surface”
 The 9th RIES-Hokudai International Symposium on 創[sou], Creative Research Initiative”Sousei”
 Hokkaido University
 2008.1
44. Kingo Uchida, Masako Akazawa, Jaap J. D. de Jong, Jetsuda Areephong, Marc Stuart, Giuseppe Caroli, Ben L. Feringa
 “Photoresponsive Organogels Consist of Dithienylethenes Having Urea Groups”
 The 11th international Conference on Circular Dichroism(CD2007)
 University of Groningen, The Netherlands
 September 2nd-6th , 2007
45. Kingo Uchida, Hisato Ishiguro, Hirosato Monobe and Yo Shimizu
 “Photo-induced phase changes of triphenylene derivatives connected azobenzene mesogens and triphenylene core by ether linkage”
 International Symposium on Photochromism(ISOP-07)
 Vancouver, Canada,
 October 7-10 2007
46. Kingo Uchida, Shin-ichiro Sukata, Masako Akazawa, Yuji Matsuzawa, Tsuyoshi Tsujioka, Yuko Kojima, Shinichiro Nakamura
 “Photochromism of vapor deposited crystalline film of diarylethenes having chiral substituents”
 International Symposium on Photochromism(ISOP-07)
 Vancouver, Canada,
 October 7-10 2007

(4)特許出願

①国内出願 (13 件)

1. 【発明の名称】有機電子デバイス及びその製造方法
 【発明者】辻岡 強、中村 振一郎、
 【出願人】国立大学法人大阪教育大学 三菱化学㈱
 【出願日】2005 年 3 月 2 日
 【出願番号】特願 2005-057709
2. 【発明の名称】有機電子デバイス及びその製造方法
 【発明者】辻岡 強、中村 振一郎、
 【出願人】国立大学法人大阪教育大学 三菱化学㈱(JST バイドール法)
 【出願日】2005 年 3 月 28 日

【出願番号】特願 2005-090713

3. 【発明の名称】有機電子デバイス及びその製造方法
【発明者】辻岡 強、中村 振一郎、
【出願人】国立大学法人大阪教育大学 三菱化学㈱
【出願日】2005 年 12 月 15 日
【出願番号】特願 2005-362002
4. 【発明の名称】微細凹凸構造の形成方法及びその利用
【発明者】巖虎、辻井 薫、
【出願人】国立大学法人北海道大学
【出願日】2005 年 3 月 2 日
【出願番号】特願 2004-378147
5. 【発明の名称】微細多孔構造の形成方法およびその利用
【発明者】眞山 博幸、辻井薫、
【出願人】国立大学法人北海道大学
【出願日】2005 年 3 月 15 日
【出願番号】特願 2005-73718
6. 【発明の名称】「撥水性および撥油性表面を有する物品およびその製造方法」
【発明者】巖 虎、黒木 一誠、辻井 薫
【出願人】国立大学法人北海道大学.
【出願日】2006 年 1 月 23 日、
【出願番号】特願 2006-014149、
7. 【発明の名称】「撥水性制御剤および新規ジアリールエテン化合物」
【発明者】内田欣吾、中村振一郎
【出願人】三菱化学株式会社
【出願日】2006. 1. 24
【出願番号】2006-14885
8. 【発明の名称】「結晶性フォトクロミック薄膜およびその利用」
【発明者】内田欣吾、中村振一郎
【出願人】三菱化学株式会社
【出願日】2006. 1. 31、
【出願番号】2006-23300、
9. 【発明の名称】「金属パターン及び有機電子デバイスとその製造方法」
【発明者】辻岡強、中村振一郎
【出願人】大阪教育大、三菱化学株式会社
【出願日】2006. 3. 1
【出願番号】2006-55090、
10. 【発明の名称】光情報記録システムおよび光情報記録媒体
【発明者】内田 欣吾、中村振一郎、宮坂 博、長澤 裕、伊都 将司、松田 広久
【出願人】三菱化学株式会社
【出願日】平成 18 年 6 月 23 日
【出願番号】特願 2006-174307

11. 【発明の名称】有機半導体メモリとその情報記録、再生、消去方法
 【発明者】辻岡 強、入江 正浩、中村振一郎
 【出願人】国立大学法人 大阪教育大学、三菱化学株式会社
 【出願日】平成 18 年 9 月 7 日
 【出願番号】特願 2006-243230
12. 【発明の名称】常温磁性強誘電性超格子およびその製造方法
 【発明者】坂間 弘、市川 能也、中村振一郎
 【出願人】学校法人 上智学院、三菱化学株式会社
 【出願日】平成 19 年 5 月 16 日
 【出願番号】特願 2007-130252
13. 【発明の名称】常温磁性強誘電性超格子およびその製造方法
 【発明者】坂間弘、中村振一郎
 【出願人】学校法人上智学院、三菱化学株式会社
 【出願日】2007.5.16
 【出願番号】特願 2007-130252

②海外出願 (1 件)

- 【発明の名称】「金属パターン及び有機電子デバイスとその製造方法」
 【発明者】辻岡 強、中村 振一郎
 【出願人】大阪教育大、三菱化学株式会社
 【出願日】2006.3.1
 【出願番号】PCT/JP2006/303887

(5)受賞等

①受賞

1. 辻井 薫、高分子学会、高分子学会三菱化学賞、2007 年 7 月 12 日

②新聞報道

1. 辻井 薫、超撥水プラスチック膜 北大が開発、平成 17 年 5 月 19 日、日経産業新聞
2. 辻井 薫、超撥水プラスチック膜開発、平成 17 年、5 月 24 日、化学工業日報
3. 辻岡 強、ジアリールエテンの特性活用 アモルファス膜にマグネ蒸着、平成 19 年 7 月 24 日、日刊工業新聞
4. 内田欣吾、物質の表面 超撥水に、平成 19 年 7 月 20 日、日刊工業新聞
 (この4の内容に対して海外で報道されたものを把握した限りでは独、露 2 件、別提出の表参照)

7 研究期間中の主な活動(ワークショップ・シンポジウム等)

年月日	名称	場所	参加人数	概要
2004.11.10	CREST 研究チーム発足会	㈱三菱化学 科学技術研究センター	20 人	研究代表者から趣旨説明と各グループの研究紹介
2004.12.15	中村チーム/吉澤グループ ジョイント研究計画会議	JST 八重洲 事務所	22 人	御園生先生への発足説明会

2005.3.19 ～ 20	中村チーム討論会	上智大学	18 人	実験結果の集中討論会
2005. 7. 15	CREST 研究会	(株)三菱化学科学技術研究センター	30人	研究成果報告および今後の研究計画の発表
2006. 2.28～ 3.1	CREST 研究会	(株)三菱化学科学技術研究センター	30人	研究成果報告および今後の研究計画の発表
2006.11.6-7	CREST 領域横断シンポジウム	学士会館	89 名	CREST 内で異なる課題を計算科学で攻略している、光機能材料(中村チーム)燃料電池(池田司チーム)生態系(高田チーム)が、その実態を交換し、相互に新たな視点と攻略方法が触発される機会を持つことを目的とした研究討論会
2007.8.31	CREST 研究会	(株)三菱化学科学技術研究センター	10 名	研究成果報告および今後の研究計画の発表 最終報告へ向けての準備

8 研究成果の展開

(1)他の研究事業への展開

- 1) 科研費入江特定領域に公募班として採択され継続開始した(2008 年 4 月現在)
- 2) 2007 年 4 月より研究代表者中村が三菱化学フェローに任命され、冠研究室を開始することを会社から許可された。この新しい視点の工業的展開を射程に入れた基礎研究に発展させるべく、企画中である。

(2)実用化に向けた展開

辻岡 Gr、内田 Gr、坂間 Gr そして辻井 Gr の実験研究結果が権利化され、前3者の発明9件(うち国際出願 1 件を含む)については三菱化学が積極的に出願人となり、実用化を検討している。辻井 Gr の 2 件についても、現在三菱化学内で幾つかの事業部が関心を示している。

9 他チーム、他領域との活動とその効果

(1)領域内の活動とその効果

中村 Gr と関野 Gr が計算科学を担当し残る全ての Gr は実験研究をおこなった。よって、おそらく最も Gr 間のコラボレーションの頻繁なチームであったと自負する。

3-4月に以内に定期的に中村 Gr が実験 Gr を訪問して、計算の焦点を詰めた。

辻井 Gr のフラクタル表面を計算科学的に解析する途上で、内田 Gr と辻岡 Gr のテーマにもその切り口からの実験を提案し、共著論文に発展した。

坂間 Gr は中村 Gr からの電子状態理論からの議論を反映させながら、かつ権利化に際しては三菱化学の実験研究者 (CREST メンバー以外も含む) を招待して議論を重ねた結果、交差相関の権利化に到達した。

関野 Gr は常に抽象度の高い一般理論に展開すべく、実験家の議論に参加した。

(4) 領域横断的活動とその効果

1) 池庄司チーム(産総研)高田チーム(神戸大)との領域横断研究会を開催

2006 年 11 月 6-7 日 学士会館 約90名

光機能材料(中村チーム)燃料電池(池庄司チーム)生態系(高田チーム)が、その実態を交換し、相互に新たな視点と攻略方法が触発された。とくに、高田チームの示唆を受け、これを機会に中村チームで三菱化学生命科学研究所の生体テーマ解析(アルツハイマー原因物質アミロイド、糖鎖のダイナミック構造と機能)を開始した。

2) 池庄司チーム、浅井チーム(ともに産総研)と領域横断研究会開催願ひ受理され

2008 年1月 30-31 日つくばエポカルにて合同研究会国際シンポジウムをおこなった。

10 研究成果の今後の貢献について

(1) 科学技術の進歩が期待される成果

近年の数理物理に根ざした最先端サイエンスの大きな潮流の一つは自然界にしばしば現れる「フラクタル構造」(べき乗則に従うスケール構造)、そして生体が非デジタル的な原理で機能を発揮するとき必ず介在する「ゆらぎ」(とくに $1/f$ ゆらぎ)である。これは、人類の知性が半ば、無意識のレベルでその必要性を認知し、その展開を渴望していることの現れに他ならない、と筆者は考える。

言い換えると、今後の工業製品が環境負荷を少なくし、排出エントロピーを最小化することが必須たるは人類共通の願いであるにも拘わらず、そこに至るには要素還元論および部分の精密な知識の総和から得られる物では不十分である、というパラダイムシフトと時代の要請のなせる業であろう。代わって必要となる知の潮流が求められている。

具体的に物質科学に即したアプローチでこれに答えるために、(i)物質とエネルギーの移動において無駄を最小にするような表面界面の設計、そして (ii)素材・デバイスの製造プロセスにおいて、高エネルギーや高度制御を必要としない自己組織化プロセスであること、この二つの方向に向かってプロジェクトを構想企画し、ゆらぎと自己組織化を正面からとりあげた。特に数理科学の示唆するコンセプトを分子構造に即して攻略したのが我々の特徴である。

自己組織化フラクタル表面がなぜ出現するのか、その原理を二つの側面から明らかにした。第一に熱力学的視点からは、系が準安定相を経由して最安定相に至ることが重要であること (tempering という特殊な工夫で準安定相を経ないとフラクタル構造は出現しないことも実証した)、第二に分子論的視点からは分子構造の特徴として分岐構造を持つことが重要である (現在まで、それ以外では出現していない)ことを示した。これらの視点から考えると、アラベスク模様と有機結晶上の発毛現象も不安定状態から分岐点 (Bifurcation point) を経由して出たフラクタル構造であることが理解される。そこに介在したゆらぎとフラクタル構造との関連は今後の課題である。

選択的蒸着とポリマー内の分子の光応答が T_g に支配されていることが手掛かりである。

我々が示した研究の意義を要約すると、環境負荷低減の工業製品を目指す分子論的サイエンスの先駆的な一歩であると言えよう。

(2) 社会・経済の発展が期待される成果

基礎研究を志向した中でも、以下は権利化を行い、具体的に実用化が検討されている。権利化され、実用化が期待され、社会経済の発展に寄与することを目指した成果から幾つかを列挙しコメントを加えた。(出願の項参照)

- 1) 【発明の名称】金属パターン及び有機電子デバイスとその製造方法
【発明者】辻岡 強、中村 振一郎、
マスキングのリソグラフィ技術として期待される。
- 2) 【発明の名称】有機半導体メモリとその情報記録、再生、消去方法
【発明者】辻岡 強、入江 正浩、中村振一郎
電氣的に作用させるフォトクロ系として画期的である。
- 3) 【発明の名称】微細凹凸構造の形成方法及びその利用
【発明者】敵虎、辻井 薫、
【発明の名称】微細多孔構造の形成方法およびその利用
【発明者】眞山 博幸、辻井薫、
【発明の名称】撥水性および撥油性表面を有する物品およびその製造方法
【発明者】敵 虎、黒木 一誠、辻井 薫
【発明の名称】撥水性制御剤および新規ジアリールエテン化合物
【発明者】内田欣吾、中村振一郎
これらの例はフラクタル構造の実用化の試みである。
- 4) 【発明の名称】常温磁性強誘電性超格子およびその製造方法
【発明者】坂間 弘、市川 能也、中村振一郎
交差相関の実用化を期待させる例である。

11 結び

近年の数理科学最先端の大きな潮流の一つは自然界にしばしば現れる「フラクタル構造」(べき乗則に従うスケール構造)、そして生体が非デジタル的な原理で機能を発揮するとき必ず介在する「ゆらぎ」(とくに $1/f$ ゆらぎ)である。これは人類の知性が半ば、無意識のレベルで要素還元論ではない新たな構造を持った知性の展開を渴望していることの現れに他ならない。今後の工業製品が環境負荷を少なくし、排出エントロピーを最小化するためには、生体に学び、従来の科学技術の成果を活かしつつも、従来型の特徴、部分に関する精密な知識の総和、とは違う新たなアプローチが求められている。

場の特性を分子の応答シグナルのゆらぎによってモニターするという方法論は、比喩的に言えば、脳波や心拍で体調を診断するやり方である。このようなシグナルには部分的な情報から洩れ落ちてしまいがちな系全体の特性がたたみこまれている。これを分子レベルに活用する道は新しく独自である。要素還元論的細分化の一途をたどりすぎた科学が統合化の知を求めてゆかねばならないという新しい思想パラダイムの具現化であるから、今後大きな注目を集めるであろう。

本提案は民間企業の現役研究者から提案された目的基礎研究である。加えて参加者メンバーはすべて、一度は民間企業での勤務経験を有する同士によって結成された。民間企業において環境とエネルギー問題を一市民として真摯に向き合った経験から、経済環境を無視してこれらを語ることは無意味であると実感する。従って課題対応型(何 ppm までなら許されるか、燃費は何%以下であるべきか、等など)の研究には経済的側面を論じなければ非現実的である。それゆえに、個別対応型でなく、我々は原理的課題を設定した。

我々が示した研究成果の意義を要約すると、環境負荷低減の工業製品を目指す原理的な研究として、生物に学び、数理科学の先端が照らしている新しいコンセプト(フラクタル、ゆらぎ、自己組織化、カオス)を分子論的に展開したサイエンスの先駆的な一歩であるといえよう。



2006/7/14 三菱化学における中村 Gr・辻井 Gr・内田 Gr の合流討論会のスナップ、この日の議論によって AKD も準安定相を経ないで安定化させれば (tempering) フラクタルと成らないという仮説が発案され、急速にフラクタル発現のメカニズム解明に向かって前進した。

12. 自己評価

計算科学と実験科学が融合し、共通の目的に向かって研究活動を実践した。フラクタル表面が現れるメカニズムの熱力学および分子構造的側面を明らかにし、この視点から結晶表面の発毛現象とアラベスク模様が自己組織化(結晶成長)するメカニズムの端緒を理解することができた。この臨界現象に介在するゆらぎを理解するため、計算科学によって攻略し、分子の光応答量子収率がポリマーという場に依存するメカニズムを解明した。すなわち場の変数 T_g (準安定相そしてフラクタルと深く関連している) に分子論から新たな視点を提供した。

所期に目指した高い目標にはまだまだ未踏部分があること、しかし実験研究の僥倖に導かれた

進展も一定量あること、これらを総合的に鑑みて「 75点 」と自己評価とする。