

# 文部科学省 先端大型研究施設戦略活用プログラム成果報告会

日時：平成18年10月4日(水) 10:00 - 18:00

場所：コンファレンススクエア・エムプラス

東京都千代田区丸の内2-5-2 三菱ビル 10F

( <http://www.emplus.jp> )

10:00-10:15 開会挨拶

10:20-10:45 成果報告1 (SPring-8 課題 別途配布資料)

## ヒト皮膚角層中の角層細胞間脂質の構造解析

國澤 直美 (株式会社 資生堂)

[概要]：角層細胞間脂質は皮膚バリア機能に密接に関連しており、化粧品は角層を作用対象としているが、その作用機構に関しては角層構造モデル上での議論によっている。今回我々は、独自に開発した手法で低侵襲に角層を採取し、ヒト角層の細胞間脂質の構造解析を行った。その結果、角層細胞間脂質のパッキング構造及びラメラ構造の回折ピークを観察した。また、120℃に昇温すると脂質の回折ピークは消失し、温度により、脂質構造が乱れることを確認した。

10:50-11:15 成果報告2 (SPring-8 成果報告書 P130)

## カーボンナノチューブ/金属電極間の低抵抗オーミック接触界面構造の作製とその電子状態の解析

粟野 祐二 (株式会社 富士通研究所)

[概要]：カーボンナノチューブ(CNT)のエレクトロニクス応用として、将来のLSIの配線への適用が期待されている。その際、CNTの根元にある触媒金属微粒子や下地金属層との界面状態(電気抵抗など)の解明が重要となる。そこで我々は電子状態評価に硬X線光電子分光(BL47XU)を用いた。その結果、下地金属層のTiC層が、作製プロセス後に界面に存在していることが低抵抗性と相関があることが分かった。

11:20-11:45 成果報告3 (SPring-8成果報告書 P109)

## 微小角入射X線散乱および高エネルギー光電子分光によるZnS-SiO<sub>2</sub>薄膜の評価

岩田 周行 (株式会社 リコー)

[概要]：レーザービーム加熱によるナノメートルスケールパターン形成材料としてZnS-SiO<sub>2</sub>薄膜は有用である。このパターン形成メカニズムを調べるため、放射光の大強度と平行性を活かした微小角入射X線散乱測定を実施し、熱によるZnS-SiO<sub>2</sub>薄膜の構造変化を観測することができた。

11:45-13:45 昼食休憩 及び ポスター発表(22件)

13:45-14:10 成果報告4 (SPring-8成果報告書 P147)

## La-Mg-Ni系水素吸蔵合金の結晶構造解析

尾崎 哲也 (株式会社 ジーエス・ユアサコーポレーション)

[概要]：希土類-Mg-Ni系合金は、従来合金に比べて水素吸蔵容量が大きく有望な水素吸蔵材料である。今回、放射光X線回折測定を用いて、結晶構造解析を行うことにより、この合金系の詳細な相構造が明らかとなり、合金組成と結晶構造、水素吸蔵特性の関係について多くの知見が得られたので報告する。

14:15-14:40 成果報告 5 (SPring-8成果報告書 P3)

フリップチップ接合部における熱疲労損傷のX線マイクロトモグラフィーによる評価技術の開発

釣谷 浩之 (富山県工業技術センター)

[概要]: 放射光光源を利用したX線マイクロCT装置 (SP- $\mu$ CT) を用いて、フリップチップはんだ接合構造体における熱サイクル負荷による組織変化 (相成長) の観察、および疲労き裂の発生寿命評価が可能となった。今後、実際の電子基板構造の観察に対して、SP- $\mu$ CTを適用することが期待される。

14:45-15:10 成果報告 6 (SPring-8成果報告書 P179 E S 成果報告書 P19 )

ゴム中のナノ粒子ネットワーク構造のモデル構築による高性能タイヤの開発

岸本 浩通 (S R I 研究開発 株式会社)

[概要]: タイヤの転がり抵抗は車の燃費の約20%を占めていると言われていました。しかし、この転がり抵抗を低減させると雨天時の潤滑路面とのグリップ性能が低下してしまうため、これら性能を両立させる技術の開発が必要となっています。これらの特性は、走行によりゴムが変形した際の分子などの挙動と密接に関係しています。我々は、大型放射光施設SPring-8の高強度X線を利用し、ゴム変形時における分子など構造変化に関する情報を得る実験に取り組んでいます。さらに、得られたデータを用い、世界最大規模の計算能力を有す地球シミュレータで構造解析・シミュレーションを行うことで実際に起こっている事象を解明し、新材料・技術開発を行っていくことを目的としています。

15:15-15:30 S P r i n g - 8 戦略活用プログラムについて

渡辺 義夫 (財団法人 高輝度光科学研究センター)

15:30-15:40 休憩

15:40-15:55 地球シミュレータ戦略活用プログラムについて

新宮 哲 (独立行政法人 海洋研究開発機構)

16:00-16:25 成果報告 7 (E S 成果報告書 P1)

コンピュータ技術を活用した創薬手法の研究における疾患原因蛋白の構造解析手法の研究

高田 俊和 (日本電気 株式会社)

[概要]: 新薬の開発では、疾患原因蛋白質の阻害剤を探索することが最初のステップである。ロボットを使った実験技術が確立され、多数の分子候補に対し、蛋白質との結合度合いを短時間で測定できるようになった。しかし、近年、探索すべき分子の候補が百万を超えるようになり、実験研究者から分子シミュレーションにより実験で確認可能な数百から数千程度まで候補を絞り込んで欲しいという強い要望が出てきている。この分野は、インシリコスクリーニングとして、特に注目されており、今後数年で実用段階に到達すると思われる。本報告では、大阪大学が進めている“創薬バリューチェーン”プロジェクトで、実際地球シミュレータで得られた分子計算の結果が、どのように活用されているか、具体的な適応事例を踏まえて紹介する。

16:30-16:55 成果報告 8 (E S 成果報告書 P11)

有機材料の発光特性シミュレーション

善甫 康成 (住友化学 株式会社)

[概要]: 高分子LEDをはじめ、最近の表示関連材料では、材料の発光吸収スペクトルが主要な特性である。我々は、高分子LED材料での光の吸収・発光特性について、時間依存密度汎関数法を利用し電子状態計算により解析を行い、材料設計に役立ててきた。その結果、得られたスペクトルは実測とよく一致しており、実用的なレベルにあることが分かってきた。我々の研究では、基底を用いず実空間・実時間で電子状態を計算する方法を用いている。比較的少ないメッシュでの計算にも関わらず、実測と比較的良好な一致を示す結果が得られることと、精度が全時間のステップ数によるという特徴がある。我々は、この手法を用い材料の設計・開発を進め実用化を進めている。成果報告では、主にこの手法の概要と代表的な高分子LED材料について、2005年度に得られた光学スペクトルの解析結果について報告する。

17:00-17:25 成果報告 9 ( E S 成果報告書 P29)

**まると建物シミュレーションによる環境配慮型建築・街区計画手法の開発**

浦野 明 (大成建設 株式会社)

[概要] : 環境に与える負荷が最小限となる建築・街区形態の迅速な設計を支援するため、建物内外の気流・風の流れ、空調機器の運転特性、建物間の日射・輻射をすべて連成して解析するまると建物シミュレーションシステムを開発中である。ここでは建築物の自然換気を取り上げ、屋外の風環境および室内の温熱環境についてCFD (数値流体力学) による気流シミュレーションを実施した。その結果、地球シミュレータによる大規模解析により詳細な物体形状が気流に与える影響を再現することが、建物の自然換気の検討に有効であることがわかった。

17:30-17:55 成果報告 10 ( E S 成果報告書 P37)

**新奇ナノ材料の構造と特性に関する大規模シミュレーション研究**

古田 照実 (株式会社 本田技術研究所)

手島 正吾 (財団法人 高度情報科学技術機構)

[概要] : 本プロジェクトでは、従来のナノ材料を超える特性を発現する新奇組成及び構造をカーボン / 無機 / 有機の領域に捉われずに探索する。探索する機能は、例えば、導電性、各種変換特性、物理化学吸着特性等であり、それらの機能に対応するナノ材料としては、ナノカーボンの構造変更や異種ナノカーボンの複合体、金属及び無機酸化物の複合体や無機有機複合化合物、ナノカーボンと無機 / 有機複合体などが考えられる。これらのナノ材料研究は世界的に見ても新規性が高く、大規模計算機による計算科学的なアプローチから将来に向けた新材料の提案を目指す。

17:55-18:00 閉会挨拶

定員 : 100名 (聴講無料、定員になり次第締め切ります)

申込方法 : 9月21日 (木) までに以下を記入して、e-mail又はFAXで、お送りください。

件名 : 戦略活用プログラム報告会を明記してください。

参加者氏名、フリガナ、企業名、所属機関、所属部署、職位、住所、  
連絡先 (電話、FAX, e-mail)

[申込み先] e-mail: senryaku-p@spring8.or.jp

FAX : 0791 - 58 - 0988

問合せ先 : (財)高輝度光科学研究センター 研究調整部 原・荒木

PHONE : 0791-58-0924

(独)海洋研究開発機構 計算システム計画・運用部 新宮・吉岡

PHONE : 045-778-5456

# 文部科学省 先端大型研究施設戦略活用プログラム成果報告会 (ポスター発表)

日時：平成18年10月4日(水) 11:45 - 13:45

場所：コンファレンススクエア・エムプラス ミドル  
東京都千代田区丸の内2-5-2 三菱ビル 10F  
( <http://www.emplus.jp> )

1. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P136)  
有機サイリスタ  $-(BEDT-TTF)2CsZn(SCN)_4$ における巨大非線形伝導機構と電荷の空間分布測定  
寺崎 一郎(早稲田大学)
2. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P 124 )  
放射光 X 線回折を用いた金属内包フラーレンピーボッドの構造  
加藤 祐子(名古屋大学)
3. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P158)  
大細孔径ゼオライトの合理的合成・製造手法の確立を目指したゼオライト結晶化過程における前駆体のリング構造の解析  
大久保 達也(東京大学)
4. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P35)  
電荷積分型マイクロパターンガスディテクタの開発研究  
藤田 薫(東京大学)
5. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P49)  
X線CTによるコンクリート微細空隙の立体構造の観察  
人見 尚(株式会社 大林組技術研究所)
6. 成果報告ポスター  
メタルダスティング腐食材における元素偏析状態の分析  
土井 教史(住友金属工業 株式会社)
7. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P202)  
放射光を利用したクロムの状態分析-環境分析への応用  
小坂 悟(株式会社 豊田中央研究所)
8. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P46)  
ヒ素高集積植物の根における元素吸収・移行過程の解明  
北島 信行(株式会社 フジタ)

9. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P291)  
X線位相コントラスト顕微CTシステムによる細胞試料観察法の開発  
伊藤 敦(東海大学)
10. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P140)  
高分解能X線CT装置(BL47XU)による医薬品製剤用造粒顆粒の三次元構造観察  
森田 孝広(田辺製薬 株式会社)
11. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P22)  
マイクロビームX線回折法を用いたヒト毛髪の水溶液中での構造の解析  
井上 敬文(株式会社 カネボウ化粧品)
12. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P243)  
XAFS法によるLi-Mg-N-H系水素貯蔵材料に添加した化合物の化学状態分析  
常世田 和彦(太平洋セメント 株式会社)
13. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P37)  
SOFCセルの酸化還元時の残留応力変化測定  
矢加部 久孝(東京ガス 株式会社)
14. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P117)  
エネルギー分散XAFSを用いた燃料電池触媒の酸化・還元機構解析  
今井 英人(日本電気 株式会社)
15. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P10)  
カルコゲナイド化合物 Bi<sub>50</sub>Te<sub>50</sub>組成近傍の結晶構造  
久保田 佳基(大阪府立大学)
16. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P266)  
SPring-8を利用したレーザ結晶化Si膜の結晶欠陥の解析  
加藤 智也(株式会社 液晶先端技術開発センター)
17. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P272)  
LSIパッケージ封止後のSiチップの非破壊応力評価  
野村 健二(株式会社 富士通研究所)
18. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P44)  
微小角入射X線小角散乱法 GI-SAXS(Grazing Incidence Small-Angle X-ray Scattering)による薄膜HfSiON膜の構造解析  
佐藤 暢高(東芝ナノアナリシス 株式会社)

19. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P165)  
高輝度放射光による有機 - 無機変換非晶質SiC系セラミック繊維の微細構造に関する研究  
岡村 清人 (株式会社 超高温材料研究所)
20. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P50)  
先進ガスタービン用ナノコーティングの集合組織と応用解析法の研究  
川村 昌志 (川崎重工業 株式会社)
21. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P68)  
放射光窒素ドーピングによる誘電体材料の極表面直接窒化  
金島 岳 (大阪大学)
22. 成果報告ポスター(SPring-8成果報告書 P116)  
発光多孔性金属錯体の励起状態における構造決定  
田中 大輔 (京都大学)