

応用物理学会関西支部

2021 年度 第 1 回講演会

在宅でも研究開発！

～若手研究者へシミュレーション活用のすゝめ～

主 催：応用物理学会関西支部（URL：<http://jsap-kansai.jp/>）

日 時：2021 年 4 月 23 日（金）13:00～17:15

形 式：オンライン

プログラム

第一部：

講演の部

- 13:00～13:10 開会の辞 : 小林 慶裕 (支部長、大阪大学)
- 13:10～13:40 招待講演 1 : 岡崎 一行 (アドバンスソフト株式会社)
「研究・開発ツールとしてのシミュレーション」
- 13:40～14:10 招待講演 2 : 山中 綾香 (一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 (RIST))
「分子動力学法による炭素複合ポリアミド水処理膜の研究」
- 14:10～14:40 招待講演 3 : 田島 和幸 (株式会社日立製作所)
「コンピュータシミュレーションにおけるシミュレーションと
レンズレスカメラへの応用」
- 14:40～15:10 招待講演 4 : 北河 康隆 (大阪大学)
「量子化学計算入門：量子化学計算の基礎と具体例の紹介」
- 15:10～15:40 休憩

第二部：

ポスター発表の部

15:40～17:10 ポスター発表

P-01 第一原理計算によるアルカリ金属、遷移金属、希土類元素導入 FAPbI_3 ペロブスカイト
結晶の電子構造解析

○鈴木 厚志¹、奥 健夫¹

¹滋賀県大・工

P-02 完全非真空プロセスで製造可能な炭素電極を備えたペロブスカイト太陽電池の高効率化
辻 流輝¹、大石 虹太¹、足立 敦哉¹、田中 健一朗¹、鶴岡 脩真¹、伊藤 省吾¹

¹兵庫県立大学

P-03 X・Y 線計測を目的とした蛍光ガラスの作製および特性評価

木村 大海¹、篠崎 健二²、加藤 匠¹、中内 大介¹、河口 範明¹、柳田 健之¹

¹奈良先端大、²産総研

P-04 CaZrO₃ 単結晶シンチレータの Ti 濃度依存性

福島 宏之、中内 大介、加藤 匠、河口 範明、柳田 健之

奈良先端科学技術大学院大学

P-05 CH₃NH₃PbI₃ ペロブスカイト化合物への CuCl 及び GAI 添加効果

榎本 彩佑¹、浅川 由悟¹、寺田 周平¹、北川 楓¹、鈴木 厚志¹、奥 健夫¹、

大北 正信²、福西 佐季子²、立川 友晴²

¹滋賀県立大学工学部、²大阪ガスケミカル株式会社

P-06 グアニジニウムを添加したペロブスカイト太陽電池の作製と評価

小野 伊織¹、浅川 由悟¹、寺田 周平¹、鈴木 厚志¹、奥 健夫¹、大北 正信²、

福西 佐季子²、立川 友晴²

¹滋賀県立大学工学部、²大阪ガスケミカル株式会社

P-07 格子近接系 LSAT 基板への酸化タングステン薄膜の MBE 成長と構造および

電気特性評価

杉本 直也¹、リチャード オンコ¹、廣芝 伸哉¹、稲葉 克彦²、小池 一歩¹

¹大阪工大ナノ材研、²リガク X線研究所

P-08 量子化学計算によるペンタセン前駆体重合反応の検討

部家 彰¹、森 彩花¹、住友 弘二¹

¹兵庫県立大学

P-09 HMDS の大気圧プラズマ処理により生成した粉体に対する焼成処理の影響

高橋 桃世¹、山原 基裕¹、登尾 一幸¹、田口 貢士¹、酒井 道²

¹株式会社魁半導体、²滋賀県立大学

P-10 光学顕微鏡による光学的異方性を持つ単分子有機薄膜の観察と画像処理による解析

津田真太郎、服部吉晃、北村雅季

神戸大学大学院工学研究科

- P-11 生細胞のナノ粒子取り込み過程の観察に向けた蛍光顕微鏡・高速 AFM 複合装置の開発
松井 爽斗¹、仲崇霞²、山下 隼人¹、辻 明宏¹、鈴木 団²、阿部 真之¹
¹大阪大学大学院基礎工学研究科、²大阪大学蛋白質研究所
- P-12 TSSG 法を用いた SiC 結晶成長における移動現象のデータ駆動型解析
竹原悠人¹、岡野泰則¹
¹大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域
- P-13 光電子収量分光法による酸素プラズマ処理した SiO₂ 絶縁膜表面のエネルギー準位分析
渡邊 悠太、服部 吉晃、北村 雅季
神戸大学大学院工学研究科
- P-14 ナノグラフェン中に長方形の周期を持つ電子状態は存在するか？
～第一原理計算による STM 実験結果の考察～
李 君寰、李 韶賢、稲垣 耕司、川合 健太郎、山村 和也、有馬 健太
大阪大学大学院工学研究科物理学系専攻 精密工学コース
- P-15 ミスト CVD 法を用いた Si 基板上酸化ガリウム薄膜成長
菊池 瑛嗣¹、藤田 静雄¹、金子 健太郎¹
¹京都大学
- P-16 マクロスケールメッシュ構造を有する金ナノワイヤネットワークのひずみ下における
導電メカニズム
高根 慧至^{1,2,3}、野田 祐樹¹、豊嶋 尚美¹、関谷 毅^{1,2,3,1}
¹大阪大学産業科学研究所、²大阪大学大学院工学研究科、
³産業技術総合研究所先端フォトニクス・バイオセンシングオープンイノベーションラボラトリ
- P-17 撥水性基板上にスピコート法を用いて作製した有機薄膜トランジスタの評価
井上聡、服部吉晃、北村雅季
神戸大学大学院工学研究科
- P-18 フォスフォレンをチャンネル材料としたトンネル電界効果トランジスタの電気伝導特性
シミュレーション
山口 航輔、相馬 聡文
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

P-19 インパルス振動を用いた 2 自由度系圧電 MEMS 振動発電素子の特性評価

APHAYVONG Sengsavang¹, 吉村 武¹, 神田健介², 村上修一³, 藤村 紀文¹

大阪府大工¹, 兵庫県立大², 大阪技術研³

P-20 高速原子間力顕微鏡による光応答転写因子 Photozipper の二量体形成メカニズムに関する研究

辻 明宏¹, 山下 隼人¹, 久富 修², 阿部 真之¹

¹大阪大学大学院基礎工学研究科、²大阪大学大学院理学研究科

P-21 多層グラフェンの広帯域吸収スペクトルにおける乱層積層効果の検証

菊堂裕己¹, 中嶋誠², 仁科勇太³, 井ノ上泰輝¹, 小林慶裕¹

¹大阪大学 大学院工学研究科物理学系専攻、²大阪大学 レーザー科学研究所、

³岡山大学 異分野融合先端研究コア

P-22 高空隙 CNT/グラフェン複合体を用いた歪みセンサの作製と CNT 添加効果の検証

¹比村 優奈、¹石黒 稚可子、¹許 梓釗、¹井ノ上 泰輝、²仁科 勇太、¹小林 慶裕

¹大阪大学 大学院工学研究科 応用物理学コース

²岡山大学 異分野融合先端研究コア

P-23 バルク熱電材料の学術論文に対する合成プロセス自動抽出の試み

Chowdhury Mohammad Mahir Asef¹, 上沼 睦典¹, Shanshan LIU²,

進藤 裕之¹, 松本 裕治², 浦岡 行治¹

¹奈良先端大,²理研 AIP

P-24 表面プラズモン共鳴を用いたカリウムイオン濃度分布の顕微イメージング

田中 宏知^{1,2}, 増井 恭子^{1,3}, Zouheir Sekkat^{2,4,5}, 石飛 秀和^{1,2,3}, 井上 康志^{1,2,3}

産総研フォトバイオ OIL¹, 阪大院工², 阪大院生命機能³, MAScIR⁴, Mohammed V Univ.⁵

P-25 TEM and STEM Observation of Polarity Inversion in Sputtered AlN Films

Li Jiaying¹, Yusuke Hayashi¹, Tetsuya Tohei¹, Akira Sakai¹

¹Osaka Univ. School of Engineering Science

P-26 高速原子間力顕微鏡による光触媒材料上における脂質膜の分解過程の研究

天木 里奈、山下 隼人、阿部 真之

大阪大学大学院基礎工学研究科

- P-27 マイクロ流体デバイスによるシングル T 細胞活性化計測と遺伝子発現解析の相関評価
井手 大輝^{1,2}、齋藤 真人^{1,2}、青枝 大貴³、高松 漂太⁴、Wilfred Villariza Espulgar²、
細川 正人^{5,6}、松永 浩子⁵、鈴木 直子⁵、有川 浩司⁵、竹山 春子^{5,6,7}、民谷 栄一^{2,8}
¹阪大院工、²産総研・阪大先端フォトバイオ、³阪大微研、⁴阪大院医、
⁵早大ナノライフ創新研、⁶早大院先進理工、⁷産総研・早大 CBBDOIL、⁸阪大産研
- P-28 Na フラックス法における電気抵抗測定を用いた結晶成長モニタリング
糸澤 孝一¹、Rickson Tandryo¹、村上 航介¹、今西 正幸¹、
宇佐美 茂佳¹、丸山 美帆子¹、吉村 政志^{1,2}、森勇介¹
¹大阪大学院工学研究科、²大阪大学レーザー科学研究所

招待講演要旨

Invited Talk Abstract

研究・開発ツールとしてのシミュレーション
Simulation as Research and Development Tools

アドバンスソフト株式会社 °岡崎 一行

AdvanceSoft Corporation, °Kazuyuki Okazaki

E-mail: okazaki@advancesoft.jp

文部科学省は、日本の計算科学技術の振興を目的として、2002 年度より「戦略的基盤ソフトウェアの開発」および「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトを実施しました。当社は、プロジェクト開始時よりソフトウェアの開発に参画し、プロジェクト終了後には開発されたソフトウェアを産業界に広く、継続的に普及することを目的に設立されました。現在は、プロジェクトの成果であるソフトウェアを基に、独自に改良・開発を進め、多くの民間企業および官公庁の研究開発組織で使用されるようになっていきます。

当社が取り扱っているシミュレーションソフトウェアを表 1 に示します。単にシミュレーションといっても、すべての事象を扱うことができる万能のシミュレーション方法は存在していません。当社では、原子・分子レベルのシミュレーションから対象物を連続体として扱う流体や構造のシミュレーションまで、広範囲にわたるシミュレーションソフトウェアを取り扱っています。これらのシミュレーションソフトウェアは、扱う対象ごとに最適な手法を選択する必要があります。講演では、当社が取り扱うシミュレーションソフトウェアのいくつかについて、その事例を紹介し、それぞれのシミュレーション方法が得意とする分野について説明します。

シミュレーションは万能ではありません。しかし、複雑で理解することが困難な問題に対して、その解決方法の一つとなりえる非常に大きなポテンシャルを持っています。計算機技術の発展やネットワーク環境の充実により、誰もが手軽に計算機シミュレーションに触れられるようになってきています。今後、ますますシミュレーションが活用される場面は多くなると考えています。

表 1 アドバンスソフト株式会社で取り扱っているシミュレーションソフトウェア

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE	ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo	ニューラルネットワーク 分子動力学システム Advance/NeuralMD
半導体デバイス 3 次元 TCAD システム Advance/TCAD	電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave	
流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red	圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i	気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP
管路系流体解析ソフトウェア Advance/Flow/Net		
構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR	音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise	汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP
建物内の火災安全・ 防災のためのシミュレータ Advacne/EVE SAYFA	深層学習用ツール Advance/iMacle	大気拡散影響予測システム Advance/Emerg

分子動力学法による炭素複合ポリアミド水処理膜の研究

Molecular Dynamics Study of Carbon Nanotubes/Polyamide Reverse Osmosis Membranes

一般財団法人高度情報科学技術研究機構¹, 信州大学 先鋭領域融合研究群 先鋭材料研究所²

○山中 綾香^{1,2}

Research Organization for Information Science and Technology¹, Research Initiative for Supra-Materials, Shinshu University², ○Ayaka Yamanaka^{1,2}

E-mail: yamanaka@rist.or.jp

経済協力開発機構の報告によると、2013 年現在、安全な飲料水にアクセスできずに、環境衛生(排水処理など)用水を適切に確保できないために汚れた水から起こる感染症や汚染水で命を落とす人口は数十億人にのぼり、世界における水不足は人類の生命を脅かす課題となっている。これらの課題を解決するために、文部科学省の「COI プログラム」として、信州大学に設置された『世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点』では、低コストで耐久年数が高い、海水から淡水を生み出すロバスト水処理膜を、世界で初めてカーボン系材料から合成し世界に供給するため、研究開発が進められている。高度情報科学技術研究機構(RIST)では上記拠点において信州大学の参画機関として、実験グループと連携して大規模シミュレーションを用いた高性能水処理膜の特性の把握とその機能向上に取り組んでいる。

現在、世界中で 95%以上の海水淡水化水は逆浸透(RO)膜濾過法によって生産され、特に、芳香族ポリアミド(PA)膜は、脱塩と浄水に使用されているほとんどの逆浸透膜を構成している。信州大学の実験グループでは、この PA 膜にカーボンナノチューブ(CNT)を複合することで通常の PA のみの膜に比べて高い透水、脱塩性能を持つ RO 膜の合成に成功したが、その機能の発現メカニズムは明らかになっていなかった。本発表では、この CNT/PA 複合膜の透水、脱塩メカニズムの解明にあたり RISTが行った分子動力学シミュレーションによるアプローチを紹介する。

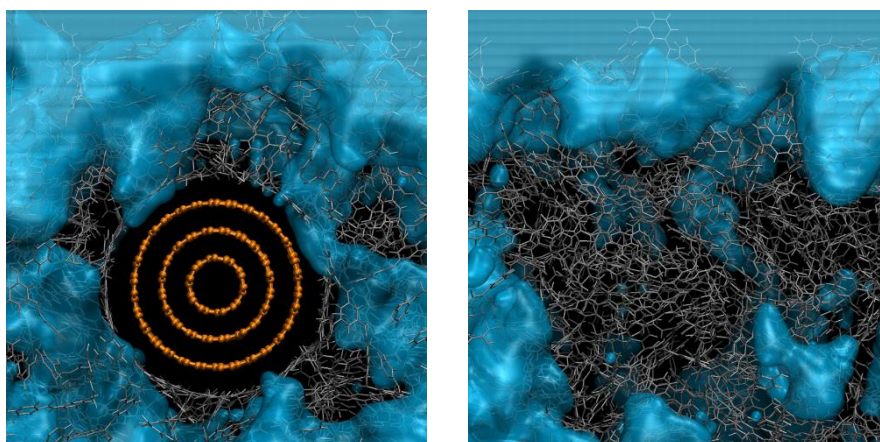


図 CNT/PA 複合膜(左)、従来型 PA 膜(右)の透水経路

コンピュータショナルフォトグラフィにおけるシミュレーションと レンズレスカメラへの応用

Simulation in Computational Photography and Application to Lensless Camera

○田島和幸, 山口啓太, 中村悠介, 島野健

Center for Technology Innovation – Instrumentation, Hitachi, Ltd.

E-mail: kazuyuki.tajima.jw@hitachi.com

1. はじめに

近年, 我々は同心円状のフレネルゾーン開口 (Fresnel zone aperture : FZA) を用いたレンズレスイメージングに取り組んできた^{1,2)}. 本報告では FZA を用いた光学系のセンサ画像生成方法, 並びにセンサ画像から被写体の情報を再構成する手法についてシミュレーション手法・結果を交えて説明する.

2. レンズレスイメージングの原理とシミュレーション手法

Figure 1 にレンズレスカメラの光学系構成と被写体再構成の概要を示す. レンズレスカメラの光学系はイメージセンサと, そこから所定距離離れて設置された FZA によって構成される. レンズの無い光学系であるが為, 被写体を f , FZA を h とするとセンサイメージはその畳み込みによって表すことが出来る. センサイメージから被写体を再構成する場合はまず, 計算機内でセンサイメージへ再度 FZA を掛け合わせることで被写体の位置をピッチと方を反映したまっすぐなモアレ縞が重畳された画像を得る. このモアレ縞を 2 次元フーリエ変換することで被写体の撮影画像を得ることが可能である.

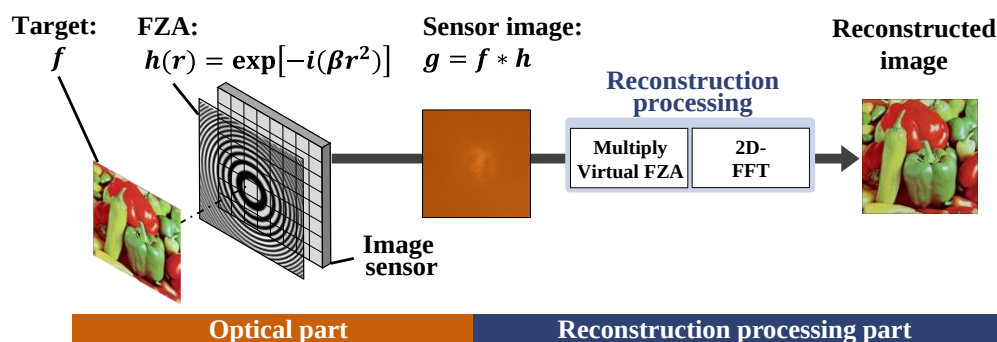


Figure 1 Schematic diagram of the lensless imaging.

3. シミュレーション結果と実機撮影結果の比較

Figure 1 で示した再構成画像ではセンサノイズや光の回折, 量子化誤差等の影響を加味していない為イメージセンサのピクセル数に依存した解像度で理想的な画像が得られる. しかし, 光学系構成部分をシミュレーションから実機に置き換える場合には各デバイスに応じたノイズや光の回折の影響を考慮する必要がある. 各種影響を考慮せずにシミュレーションした結果, 考慮したシミュレーションした結果, 実機の再構成画像それぞれ Figure 2 (a)(b)(d)に示す. 各種影響をシミュレーション上で反映することで実機の再構成画像の画質が近づいていることが分かる. 実施したシミュレーションについては講演にて詳細を述べる.

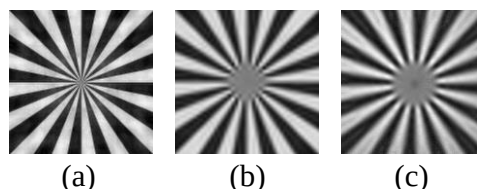


Figure 2 Reconstructed image (a) by simulation with ideal sensor image, (b) by simulation with deteriorated sensor image, and (c) by prototype.

参考文献

- 1) T. Shimano, et al. : Appl. Opt. 11 (2018) 2841.
- 2) K. Tajima, et al. : Opt. Review 26(5) 507-511 (2019).

量子化学計算入門：量子化学計算の基礎と具体例の紹介

Introduction to quantum chemical calculations: Basic concept and application

阪大院基礎工 ○北河 康隆

Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ○Yasutaka Kitagawa

E-mail: kitagawa@cheng.es.osaka-u.ac.jp

近年、化学分野において第一原理計算の結果を含んだ（あるいは第一原理計算の結果のみの）論文数が飛躍的に増加している。図 1 に示したのは、アメリカ化学会が発行している無機化学・錯体化学分野の学術誌である *Inorganic Chemistry* 誌において、第一原理計算に関するキーワードで検索にヒットする論文数の推移である。金属錯体などに関する研究を扱う雑誌においても、特に 2000 年代に入ってから、急激に論文数が増えていることが見て取れる。その要因として考えられる点として、（1）量子化学理論および計算機の発達、（2）Gaussian などの第一原理計算に関する商用ソフトウェアの普及が挙げられる。これらは、従来困難であった実在錯体の第一原理計算をも可能とし、多くの研究者が研究室で量子化学計算を実行することを後押しした。結果として、非常に多くの分子の電子状態、構造、そして特性が第一原理的に求められるようになったと考えられる。あくまでこれは無機化学・錯体化学分野での例であるが、有機化学分野や生化学分野においてもその傾向は同様であろう。第一原理計算は、分子の複雑な電子状態を理解し、また実験結果を説明する重要な手がかりとなるのみならず、今後インフォマティックスなどの手法と組み合わせることにより、新規機能性材料開発へとますます展開されることが予想される。

そのような観点から本講演では、第一原理計算の中でも、化学分野でよく用いられる量子化学計算、つまり分子軌道計算について紹介したい。特に初めて第一原理計算に携わる方々を対象として、その基礎をなるべく数式を用いることなく説明し、さらに実在分子への適用例を紹介する。

講演の前半では、量子化学計算でよく用いられる手法や基底関数にどのようなものがあるのか、そしてそれらを、どのように選択すれば良いかを説明する。また実際に、どの程度の分子サイズの計算がラボレベルで可能かを、私たちの計算結果をもちいて例示する。

後半では、具体的に光機能性分子を例に用いながら、量子化学計算をどのように活用しながら、分子のデザインを進めてゆくの、その流れを紹介したい。

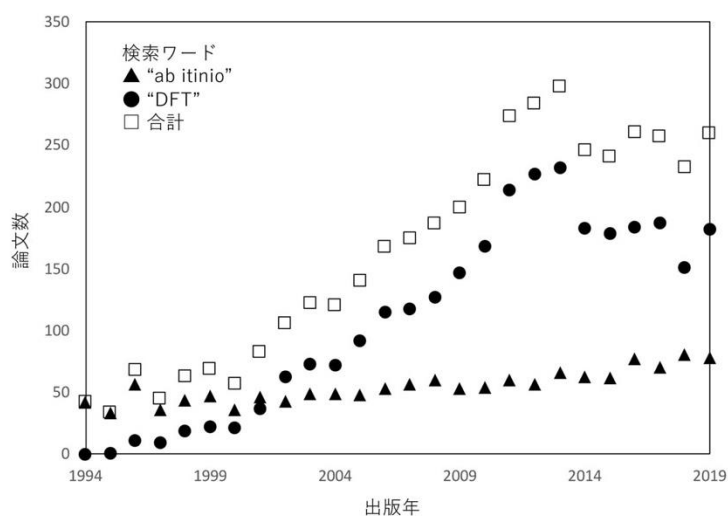


図 1 *Inorg. Chem.* 誌で “ab initio” あるいは “DFT” というキーワードでヒットした論文数の推移（Web of Science で検索した結果）

ポスター発表要旨

Poster Presentation Abstract

P-01

第一原理計算によるアルカリ金属、遷移金属、希土類元素導入 FAPbI_3 ペロブスカイト結晶の電子構造解析
鈴木 厚志 ¹ 、奥 健夫 ¹
¹ 滋賀県大・工
ペロブスカイト太陽電池は光起電力特性、移動度に優れ、ペロブスカイト層の結晶組成制御により変換効率を向上することができる。しかし、劣化しやすく、長期安定性に問題がある。遷移金属、希土類元素を導入したペロブスカイト太陽電池の光起電力機構や長期安定性が最近明らかにされつつある。本研究ではアルカリ金属、遷移金属、希土類元素を微量添加したペロブスカイト結晶のバンド構造、電子密度分布、 ^{127}I -NMR のケミカルシフト、熱力学的安定性を第一原理計算から予測し、性能向上を目的とする。

P-02

完全非真空プロセスで製造可能な炭素電極を備えたペロブスカイト太陽電池の高効率化
辻 流輝 ¹ 、大石 虹太 ¹ 、足立 敦哉 ¹ 、田中 健一朗 ¹ 、鶴岡 脩真 ¹ 、伊藤 省吾 ¹
¹ 兵庫県立大学
ペロブスカイト太陽電池は、印刷・塗布技術によって非常に低コストで製造できるため注目を集めている。しかし、使用される有機材料と金属電極は高価で不安定である。そこで、これらの材料を安価な炭素電極に代替した多層多孔質層状電極ペロブスカイト太陽電池(MPLE-PSC)に着目した。本研究では、MPLE-PSC の炭素電極内に NiO ナノ粒子を添加することで、正孔輸送能力を強化し、太陽電池性能を向上させることに成功した。

P-03

$\text{X} \cdot \gamma$ 線計測を目的とした蛍光ガラスの作製および特性評価
木村 大海 ¹ 、篠崎 健二 ² 、加藤 匠 ¹ 、中内 大介 ¹ 、河口 範明 ¹ 、柳田 健之 ¹
¹ 奈良先端大、 ² 産総研
シンチレータとは蛍光体の一種であり放射線のエネルギーを吸収し、瞬時に光子へと変換する機能を持つ素子である。市販のシンチレータには主に単結晶が用いられているが、ガラスは単結晶と比較すると生産コストが低く、成型性が高いなど産業的な利点があるため、 $\text{X} \cdot \gamma$ 線用ガラスシンチレータの開発が期待されている。そこで本研究では熔融急冷法により Ce 添加酸フッ化物ガラスを作製し、光学およびシンチレーション特性を調査した。

P-04

CaZrO ₃ 単結晶シンチレータの Ti 濃度依存性
福嶋 宏之、中内 大介、加藤 匠、河口 範明、柳田 健之
奈良先端科学技術大学院大学
シンチレータとは X・γ 線といった電離放射線との相互作用によって蛍光を呈する材料であり、主に医療画像診断や資源探査といった用途に応用されている。これまでに多くのシンチレータの研究が行われており、その中でも酸化ジルコニウム系材料は比較的高密度であるため X・γ 線検出用シンチレータの候補として有望であるが、シンチレーション特性報告の例は少ない。本研究ではフローティングゾーン法により Ti 添加 CaZrO ₃ の単結晶育成を行い、その蛍光及びシンチレーション特性評価を行った。

P-05

CH ₃ NH ₃ PbI ₃ ペロブスカイト化合物への CuCl 及び GAI 添加効果
榎本 彩佑 ¹ 、浅川 由悟 ¹ 、寺田 周平 ¹ 、北川 楓 ¹ 、鈴木 厚志 ¹ 、奥 健夫 ¹ 、大北 正信 ² 、福西 佐季子 ² 、立川 友晴 ²
¹ 滋賀県立大学工学部、 ² 大阪ガスケミカル株式会社
ペロブスカイト系太陽電池は変換効率が高く、作製が容易なため、近年では次世代太陽電池として注目されている。デバイスの光電変換効率を向上させる手法として、光活性層である CH ₃ NH ₃ PbI ₃ ペロブスカイト層への添加物導入が有効であり、数多くの研究が行われている。本研究では光電変換効率や長期安定性を改善することを目的とし、CH ₃ NH ₃ PbI ₃ ペロブスカイト化合物に CuCl 及び GAI を添加したデバイスを作製し、電気特性測定、微細構造解析、分子軌道計算等により評価した。

P-06

グアニジニウムを添加したペロブスカイト太陽電池の作製と評価
小野 伊織 ¹ 、浅川 由悟 ¹ 、寺田 周平 ¹ 、鈴木 厚志 ¹ 、奥 健夫 ¹ 、大北 正信 ² 、福西 佐季子 ² 、立川 友晴 ²
¹ 滋賀県立大学工学部、 ² 大阪ガスケミカル株式会社
CH ₃ NH ₃ PbI ₃ ペロブスカイト太陽電池は容易な作製プロセスかつ高い変換効率を持つ太陽電池として知られているが、長期安定性の向上が大きな課題である。近年ではペロブスカイト結晶に様々な元素を添加し置換することで、安定性や光起電力特性が改善されるという報告がある。本研究では CH ₃ NH ₃ ⁺ サイトにグアニジニウム[(NH ₂) ₃] ⁺ (GA)を添加することでペロブスカイトの結晶性を制御し、光電変換効率や長期安定性の向上を目的とした。

P-07

格子近接系 LSAT 基板への酸化タングステン薄膜の MBE 成長と構造および電気特性評価
杉本 直也 ¹ 、リチャード オンコ ¹ 、廣芝 伸哉 ¹ 、稲葉 克彦 ² 、小池 一步 ¹
¹ 大阪工大ナノ材研、 ² リガク X線研究所
格子近接系 LSAT 基板上に酸化タングステン (WO ₃) 薄膜を MBE 成長し、作製した薄膜の構造および電気特性を調べた。成長膜厚 5 nm までは基板に対して面内で約 3%の二軸性引っ張り応力を受けた cubic 相もしくは orthorhombic 相の WO ₃ 薄膜が形成された。膜厚の増加に伴って、格子緩和した orthorhombic 相が現れ、膜厚 50 nm 以上で monoclinic 構造が支配的になった。膜厚 5 nm で最も高いキャリア移動度 (560 cm ² /Vs) が得られたが、格子緩和の進行とともに移動度が減少することも明らかになった。

P-08

量子化学計算によるペンタセン前駆体重合反応の検討
部家 彰 ¹ 、森 彩花 ¹ 、住友 弘二 ¹
¹ 兵庫県立大学
我々はペンタセン (C ₂₂ H ₁₄) と水素ガスから加熱触媒体上で生成した堆積前駆体を用いてグラフェンナノリボンを石英基板上に大面積作製するホットメッシュ堆積 (HMD) 法を開発している。本研究では、ペンタセン重合反応を促進し重合度や収率を向上させるため、ペンタセン前駆体同士や水素との反応を量子化学計算により検討した。

P-09

HMDS の大気圧プラズマ処理により生成した粉体に対する焼成処理の影響
高橋 桃世 ¹ 、山原 基裕 ¹ 、登尾 一幸 ¹ 、田口 貢士 ¹ 、酒井 道 ²
¹ 株式会社魁半導体、 ² 滋賀県立大学
大気圧プラズマにより液体 HMDS から SiO _x を主成分とする粉体を直接的に生成した。粉体はメチル基、シラノール基の置換基が末端に存在する構造を有する。粉体作製時の電力を変化させた場合、置換基やシロキサン結合部の結合比に電力依存性を有する。また、粉体を焼成することにより化学構造が変化し、シラノール基、メチル基等の末端基の消失を確認した。焼成によるメチル基の消失効果は粉体作製電力条件にかかわらず一定であると判明した。

P-10

光学顕微鏡による光学的異方性を持つ単分子有機薄膜の観察と画像処理による解析
津田真太郎、服部吉晃、北村雅季
神戸大学大学院工学研究科
有機薄膜トランジスタの性能は有機薄膜の結晶性に依存する。特にゲート絶縁膜界面近傍の結晶性はキャリアが移動するパスとなるので重要であり、性能向上には薄膜の初期成長の観察が効果的だが、極薄膜である故に可視性が乏しく、その評価が難しい。本研究では単分子有機薄膜を、金属顕微鏡に光学フィルタを挿入して波長域を絞り観察した。絶縁膜内の光学干渉を利用することにより、薄膜の結晶性と光学特性を大気圧下で簡便に顕微評価する手法を確立した。

P-11

生細胞のナノ粒子取り込み過程の観察に向けた蛍光顕微鏡・高速 AFM 複合装置の開発
松井 爽斗 ¹ 、仲崇霞 ² 、山下 隼人 ¹ 、辻 明宏 ¹ 、鈴木 団 ² 、阿部 真之 ¹
¹ 大阪大学大学院基礎工学研究科、 ² 大阪大学蛋白質研究所
蛍光ナノダイヤモンド (FND) は細胞内センシングに用いられるナノ粒子の一つであり、粒子の形状によって細胞への侵入量が異なることが先行研究によって示されているが、そのメカニズムは明らかにされていない。そこで本研究では、蛍光によって細胞膜上の FND の位置を特定し、そこを高速 AFM でナノスケール観察できる装置の開発を行った。本装置によって侵入過程を可視化することで、細胞の FND 取り込みメカニズムの解明を目指す。

P-12

TSSG 法を用いた SiC 結晶成長における移動現象のデータ駆動型解析
竹原悠人 ¹ 、岡野泰則 ¹
¹ 大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域
炭化ケイ素(SiC)結晶を高品質に作製する方法として溶液成長法である TSSG(Top-Seeded Solution Growth)法が注目されている。TSSG 法では溶液内部の流れによる溶質の輸送が結晶品質に大きく影響を与える。そのため、溶液内流れの観察と制御が高品質結晶の作製にとって必要不可欠である。しかしながら、実験中における流れの観察、実験による制御手法の確立は装置の形状、費用的に困難である。そこで本研究では、安価に流れを可視化できる数値計算を基に、ベイズ最適化と畳み込みニューラルネットワークを適用することで、効率的に制御手法を提案し、制御による重要な流れの変化を自動的に抽出することに成功した。

P-13

光電子収量分光法による酸素プラズマ処理した SiO_2 絶縁膜表面のエネルギー準位分析
渡邊 悠太、服部 吉晃、北村 雅季
神戸大学大学院工学研究科
有機薄膜トランジスタ(TFT)の SiO_2 絶縁膜表面を酸素プラズマ処理すると、その閾値電圧が正方向にシフトする。これは絶縁膜表面に負の固定電荷が生じたためと考えられる。我々は、X線光電子分光法により、 SiO_2 の価電子帯上端近くに新たな準位が形成されることを確認した。本研究では、大気中光電子収量分光法により同様の観察が可能かを調べた。結果として、酸素プラズマ処理により生じたと考えられるエネルギー準位の存在を示唆する結果が得られた。

P-14

ナノグラフェン中に長方形の周期を持つ電子状態は存在するか？ ～第一原理計算による STM 実験結果の考察～
李 君寰、李 韶賢、稲垣 耕司、川合 健太郎、山村 和也、有馬 健太
大阪大学大学院工学研究科物理学系専攻 精密工学コース
グラフェン中の局所欠陥に由来する特異な電子状態は、様々な工学分野で重要な役割を持つ。我々は、ナノグラフェンの走査型トンネル顕微鏡 (STM) により、長方形の周期を持つ不思議な電子状態を可視化した。この起源を解明するため、エッジ欠陥を持つグラフェンナノリボンの電子構造を第一原理計算により解析した。そして、リボンの幅やバイアス電圧に依存して、実験結果に似た電子状態が存在することを突き止めた。

P-15

ミスト CVD 法を用いた Si 基板上酸化ガリウム薄膜成長
菊池 瑛嗣 ¹ 、藤田 静雄 ¹ 、金子 健太郎 ¹
¹ 京都大学
昨今、パワーデバイス新材料として、ワイドバンドギャップ半導体である酸化ガリウムに注目が集まっている。酸化ガリウムを用いたデバイスの課題として、放熱性能の低さが挙げられる。そこで本研究では、熱伝導度と電気伝導度が高い Si に着目した。ミスト CVD 法を用いて Si 基板上に $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 成長を行い、その構造評価を行った。XRD 測定より、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の (20 $\bar{1}$)、(202)面に起因するピークが確認された。

P-16

マクロスケールメッシュ構造を有する金ナノワイヤネットワークのひずみ下における導電メカニズム
高根 慧至 ^{1,2,3} 、野田 祐樹 ¹ 、豊嶋 尚美 ¹ 、関谷 毅 ^{1,2,3}
¹ 大阪大学産業科学研究所、 ² 大阪大学大学院工学研究科、 ³ 産業技術総合研究所先端フォトニクス・バイオセンシングオープンイノベーションラボラトリ
ひずみ下でも安定した導電性を有するストレッチャブル電極の実現に向け、マクロスケールのメッシュ構造を有する金ナノワイヤ(AuNW)ネットワーク電極を作製し、抵抗変化とそのメカニズムを調査した。伸長時の相対抵抗値変化 ($\Delta R/R_0$) は、メッシュ構造のない通常の AuNW ネットワークに比べて、メッシュ構造の形成によって抑制されることを確認した。また微細構造解析モデルによって、メッシュ構造を有する AuNW ネットワーク電極の抵抗変化は、電極の伸長方向とメッシュ状ナノワイヤネットワークを流れる電流方向に依存することが明らかとなった。

P-17

撥水性基板上にスピコート法を用いて作製した有機薄膜トランジスタの評価
井上聡、服部吉晃、北村雅季
神戸大学大学院工学研究科
有機薄膜トランジスタの移動度を向上させる手法として絶縁膜の表面を有機単分子膜で修飾して、トラップサイトとなる OH 基を減少させる方法があるが、撥水性基板となるために、溶液を塗布して製膜するのが困難になる。そこで、本研究では表面を親水化させる目的で UV オゾン処理を追加し検討した。その結果、適切な改質を行えば、製膜と移動度の向上を両立させることが可能で、最大で $4\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ の移動度を持つトランジスタが作成できた。

P-18

フォスフォレンをチャネル材料としたトンネル電界効果トランジスタの電気伝導特性シミュレーション
山口 航輔、相馬 聡文
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻
半導体素子は微細化により性能の向上を果たしてきたが、それに伴いオフリーク電流の増大が問題となっている。オフリーク電流を低下させる素子構造の一つがトンネル電界効果トランジスタ (TFET) であるが、本発表では、TFET のチャネル材料に 2 次元原子膜の一つであるフォスフォレンを材料とした場合について、散乱行列法に基づく低計算負荷シミュレーション手法の構築と、その結果の考察、今後の課題や改善点について述べる。

P-19

インパルス振動を用いた 2 自由度系圧電 MEMS 振動発電素子の特性評価
APHAYVONG Sengsavang ¹ , 吉村 武 ¹ , 神田健介 ² , 村上修一 ³ , 藤村 紀文 ¹
大阪府大工 ¹ , 兵庫県立大 ² , 大阪技術研 ³
本研究では、実環境振動から効率的に電気エネルギーを取りだすことができる圧電振動発電素子の実現を目的として、インパルス振動に焦点を当てて理論的・実験的検討を行った。報告例の多い 1 自由度素子に加えて、Dynamic Magnifier (DM) を用いた 2 自由度素子において、その電気機械特性を解析し、素子の機械的品質係数(Q 値)が高いことが発電電力や発電効率の向上に有効であることを明らかにした。

P-20

高速原子間力顕微鏡による光応答転写因子 Photozipper の二量体形成メカニズムに関する研究
辻 明宏 ¹ , 山下 隼人 ¹ , 久富 修 ² , 阿部 真之 ¹
¹ 大阪大学大学院基礎工学研究科、 ² 大阪大学大学院理学研究科
転写因子は遺伝子発現を制御する DNA 結合タンパク質である。多くの転写因子は二量体として DNA に結合するが、二量体の形成の詳しい意義とメカニズムは分かっていない。本研究では高速原子間力顕微鏡により、光応答転写因子 Photozipper(PZ)を直接観察し、単量体 PZ が青色光により二量体化する様子を観察した。さらに、単量体 PZ の青色光による構造変化を捉えることにも成功した。本研究は、様々な転写因子の二量体化機構の解明に繋がることが期待される。

P-21

多層グラフェンの広帯域吸収スペクトルにおける乱層積層効果の検証
菊堂裕己 ¹ , 中嶋誠 ² , 仁科勇太 ³ , 井ノ上泰輝 ¹ , 小林慶裕 ¹
¹ 大阪大学 大学院工学研究科物理学系専攻、 ² 大阪大学 レーザー科学研究所、 ³ 岡山大学 異分野融合先端研究コア
単層グラフェンは線形分散の電子状態を有し、広いエネルギー範囲で吸光度が一定という特異な物性を持つ。しかし、デバイス応用には単原子層では信号強度が弱いことが課題である。強度増大のため多層化すると、最安定な AB 積層では単層グラフェンの特長である線形分散性が失われる。本研究では、線形分散が維持される乱層グラフェンを作製し、広帯域で吸光度を測定した。紫外域を除き、遠赤外から可視光までの広い範囲で吸光度は層数に比例することがわかった。これは多層化しても単層グラフェンの特長が維持される乱層グラフェンの光学材料としての優位性を示す。

P-22

高空隙 CNT/グラフェン複合体を用いた歪みセンサの作製と CNT 添加効果の検証
¹ 比村 優奈、 ¹ 石黒 稚可子、 ¹ 許 梓釗、 ¹ 井ノ上 泰輝、 ² 仁科 勇太、 ¹ 小林 慶裕
¹ 大阪大学 大学院工学研究科 応用物理学コース ² 岡山大学 異分野融合先端研究コア
高い伝導率と引張強度などの優れた電気・機械特性と生体適合性を備えるグラフェンやカーボンナノチューブ(CNT)はウェアラブルデバイスの素材として注目されている。本研究では、両者を複合化した高空隙ナノカーボン構造体を用いて伸縮性歪みセンサを作製し、複合化による高感度化と耐久性の向上を目指した。多孔質複合体は酸化グラフェンと CNT の混合物を凍結乾燥した後、超高温で処理して形成した。複合化によりセンサ性能の指標であるゲージ率は低下したが、応答の線形性や再現性は向上し、複合化の有効性が示された。

P-23

バルク熱電材料の学術論文に対する合成プロセス自動抽出の試み
Chowdhury Mohammad Mahir Asef ¹ 、上沼 睦典 ¹ 、 Shanshan LIU ² 、進藤 裕之 ¹ 、松本 裕治 ² 、浦岡 行治 ¹
¹ 奈良先端大、 ² 理研 AIP
近年、各研究分野では文献のプロセス情報から知識を抽出して利用するプロセスインフォマティクスが研究されつつある。本研究では、バルク無機熱電材料の合成プロセスに注目し、学術論文から合成プロセス自動抽出を試みた。約 400 本の熱電関連論文を収集すると共に、材料合成に関する用語や手法および条件とプロセスの進行関係についてタグ付け(アノテーション)を行った。このデータを用いて学術論文から合成プロセスを表す用語を自動抽出し、抽出システムの改善を行った。

P-24

表面プラズモン共鳴を用いたカリウムイオン濃度分布の顕微イメージング
田中 宏知 ^{1,2} 、増井 恭子 ^{1,3} 、Zouheir Sekkat ^{2,4,5} 、石飛 秀和 ^{1,2,3} 、井上 康志 ^{1,2,3}
産総研フォトバイオOIL ¹ 、阪大院工 ² 、阪大院生命機能 ³ 、MAScIR ⁴ 、Mohammed V Univ. ⁵
カリウムイオンの細胞内外へのイオン流出および流入の動態をイメージングすることは生命機能の詳細な理解につながり、様々な病気の原因究明や新薬の開発への展開が期待されている。これに対して近年、金属イオンイオノフォアを添加した可塑化 PVC 膜を利用した表面プラズモンセンサーの開発が試みられており、私たちはカリウムイオン動態の観察を目指し顕微イメージング手法の開発を行った。

P-25

TEM and STEM Observation of Polarity Inversion in Sputtered AlN Films
Li Jiaying ¹ , Yusuke Hayashi ¹ , Tetsuya Tohei ¹ , Akira Sakai ¹
¹ Osaka Univ. School of Engineering Science
In this work, we report the polarity inversion of an AlN film from N to Al polarity and investigated the atomic structure of the polarity inversion boundary (IDB) by S/TEM. The 900 nm thick sample was fabricated by reactive sputtering with Al and AlN targets. Polarity inversion was successfully observed below 50nm of AlN surface, and IDB thickness was confirmed to be ranging from 4~6 monolayers (1~1.3nm). The detailed analysis revealed that interlayer distances in the IDB are increased compared to Al- or N-polar AlN region, suggesting the existence of Al _x O _y or Al _x O _y N _z working as a polarity inversion trigger.

P-26

高速原子間力顕微鏡による光触媒材料上における脂質膜の分解過程の研究
天木 里奈、山下 隼人、阿部 真之
大阪大学大学院基礎工学研究科
光触媒の分解作用を応用した抗菌効果に着目し、当研究室では細胞膜を構成する脂質膜を光触媒材料基板上に展開し、高速原子間力顕微鏡を用いてその分解反応過程の研究を行っている。本研究では材料による違いを明らかにするため二酸化チタン(TiO ₂)とチタン酸ストロンチウム(SrTiO ₃)を用いた測定を行った。本発表ではそれぞれの材料上での脂質膜の分解過程の詳細を議論する。

P-27

マイクロ流体デバイスによるシングル T 細胞活性化計測と遺伝子発現解析の相関評価
井手 大輝 ^{1,2} 、齋藤 真人 ^{1,2} 、青枝 大貴 ³ 、高松 漂太 ⁴ 、Wilfred Villariza Espulgar ² 、細川 正人 ^{5,6} 、松永 浩子 ⁵ 、鈴木 直子 ⁵ 、有川 浩司 ⁵ 、竹山 春子 ^{5,6,7} 、民谷 栄一 ^{2,8}
¹ 阪大院工、 ² 産総研・阪大先端フォトバイオ、 ³ 阪大微研、 ⁴ 阪大院医、 ⁵ 早大ナノライフ創新研、 ⁶ 早大院先進理工、 ⁷ 産総研・早大CBBD-OIL、 ⁸ 阪大産研
がんに対する治療法として、細胞傷害性 T 細胞(Cytotoxic T Lymphocyte; CTL)を用いた免疫療法が注目を集めている。しかし、抗原特異的 CTL の存在割合は 1/10 ⁶ と少ないため、その検出・評価方法の確立が課題となっている。これに対し、独自のマイクロ流体デバイスを作製し、マウス由来のモデル細胞を用いて 1 細胞 (CTL) 毎の測定による抗原特異的活性化の検出に成功し、更に、各 1 細胞の発現遺伝子解析によって、初期免疫応答である T 細胞内 Ca ²⁺ 濃度変化の細胞間差と CTL 活性化における発現遺伝子との相関を示唆する結果も得られた。この成果は抗原特異的 CTL の新たな検出評価手法となることが期待される。

P-28

Na フラックス法における電気抵抗測定を用いた結晶成長モニタリング
糸澤 孝一 ¹ 、Ricksen Tandryo ¹ 、村上 航介 ¹ 、今西 正幸 ¹ 、 宇佐美 茂佳 ¹ 、丸山 美帆子 ¹ 、吉村 政志 ^{1,2} 、森勇介 ¹
¹ 大阪大学院工学研究科、 ² 大阪大学レーザー科学研究所
Na フラックス法は高品質な GaN 結晶作製技術として有望であるが、成長環境が過酷であり、成長過程の観察が困難であった。育成プロセス安定化には、成長中におけるフラックス状態を観察する技術が必要である。そこでフラックスの電気抵抗を測定することで、原料である窒素の溶解量をモニタリングしてきた。本研究では、実際に抵抗測定をしながら結晶成長を行うことで、成長に伴うフラックス状態の変化を初めてモニタリングしたので報告する。

賛助会員

応用物理学会関西支部の本事業活動に関し、下記賛助会員各位よりご支援を頂いております。ここに社名を記載させて頂き、感謝の意を表します。

エア・ウォーター（株）
（株）大阪真空機器製作所
京セラ（株）
（株）神戸製鋼所 技術開発本部
（株）島津製作所
シャープ（株） 研究開発事業本部
住友電気工業（株）
（株）知能情報システム
東京エレクトロン（株）
東京応化工業（株）
日新イオン機器（株）
日本製鉄（株） 技術開発本部 尼崎研究開発センター
パナソニック（株）
三菱電機(株) 先端技術総合研究所
（株）村田製作所
ローム（株）

（2021 年 4 月現在、50 音順）