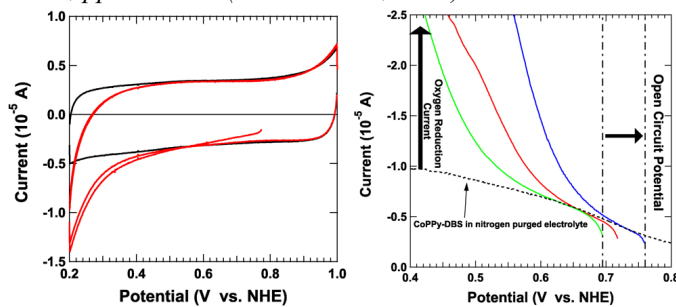


金属配位ポリマーを燃料電池の触媒に使う

A Metal Coordination polymer for Fuel Cell applications: Nanostructure control toward high performance electrocatalysis (Conference-ISSS-5-)

Tetsuaki Hirayama, Takashi Manako, and Hideto Imai, Vol. 6, pp. 237-240 (13 November, 2008)

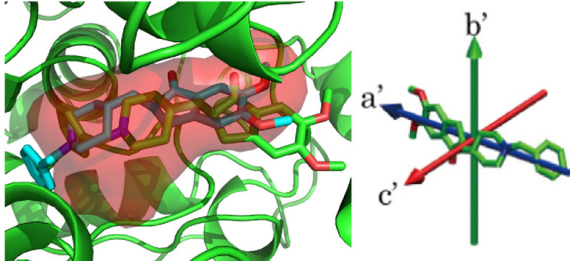


燃料電池とは、酸素と水素の化学反応から電気エネルギーを取り出すもので、地球環境にやさしい次世代のエネルギー源と目されている。その化学反応の触媒として白金または白金化合物がもっとも効率が高いことが知られているが、白金は希少金属で高価なのでその代替触媒の探索研究が盛んに行われている。本研究では、コバルト配位ポリピロールの触媒活性を調べた。その結果、カウンターイオンドーピングによってコバルト・サイトの数を増やすと触媒活性が約5倍に向上することを見出した。

ドラッグ・デリバリーを理論予測する

Development of software program predicting the binding site and the binding mode of ligands against a target protein (Conference-ISSS-5-)

Hideyoshi Fuji, Masaaki Suzuki, Saburo Neya, and Tyuji Hoshino, Vol. 6, pp. 241-245 (13 November: 2008)



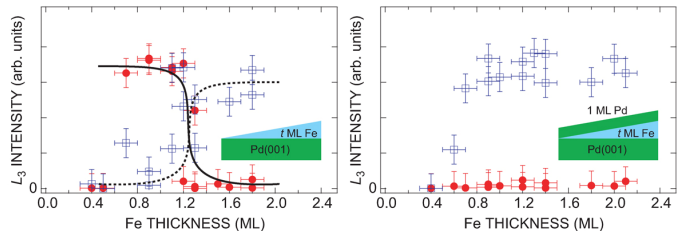
ドラッグ・デリバリーとは、必要な薬物を必要な時間に必要な部位で作用させることであり、そのためには標的となるタンパクの構造に基づいて、それに有効に結合する配位子を持つ薬物のデザインが重要となる (structure-based drug design, SBDD)。本研究では、標的タンパクの疎水性エネルギーマップを理論計算し、それをもとに標的タンパクのどの部位にどのように配位子が結合するかを予測するプログラム

を開発した。疎水性効果が配位子とタンパクの結合を制御する重要な因子なので、結合を探る指針として疎水性エネルギーをつかった。このプログラムによって5種類のタンパクについて計算した結果、実験と合う結果を得ることができた。

Fe 超薄膜のスピン再配向転移

Spin Reorientation Transition of Fe Ultra-Thin Films on Pd(001) Studied by X-Ray Magnetic Circular Dichroism Spectroscopy (Conference-ISSS-5-)

T. Ueno, M. Nagira, S. Tohoda, T. Tagashira, A. Kimura, M. Sawada, H. Namatame, and M. Taniguchi, Vol. 6, pp. 246-250 (18 November 2008)



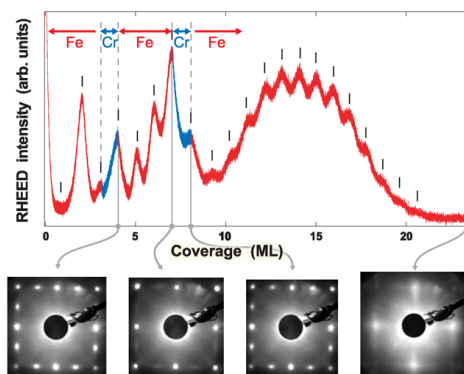
磁性超薄膜や磁性多層膜構造は、低次元磁性物性の基礎研究と同時に磁気記録などの応用研究にとっても重要な系である。そのため、1原子層前後のFe超薄膜の成長構造と磁化の研究が多数報告されているが、確定した描像がまだ得られていないのが現状である。本研究では、軟X線磁気円二色性分光法を用い、Pd(001)単結晶基板上に成長させたFe原子層の磁化方向を調べた。その結果、Fe膜厚が1.2原子層までは垂直磁化であるが、それを1原子層のPdで覆うと面内磁化に磁化方向が変わることを見出した。これはFePd合金やもっと厚いFe膜をPdで覆った場合に見られる垂直磁化と全く異なっていることがわかった。

磁性多層膜の成長様式を探る

Growth mode and surface structure of Cr ultrathin film on Fe/Cu(001) (Conference-ISSS-5-)

Vol. 6, pp. 251-253 (18 November, 2008)

S. Tohoda, M. Nagira, T. Ueno, T. Tagashira, A. Kimura, M. Sawada, H. Namatame, and M. Taniguchi

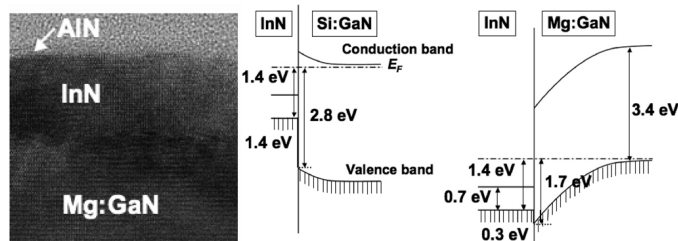


bcc 格子の Fe と Cr の多層膜は面内磁化を持ち、GMR(巨大磁気抵抗効果)素子として利用されている。しかし、Cu(001)表面上では fcc 格子の Fe 膜が成長することが知られている。その膜厚が 4 ML 以下では、fcc 格子を作り、面直磁化成分を持つ。5-11 ML では表面最上の 2 原子層だけが fct 構造で強磁性特性を持つが、その下の原子層は fcc 格子でスピン密度波状態となる。11 ML 以上では bcc 構造となり面内磁化となる。よって、fcc 格子の Fe 層の上に Cr 原子層を成長させると、垂直磁化の GMR 効果が期待できる。しかし、Fe の磁化状態は Cr の成長様式に支配され、まだはっきりしていない。本研究では、Cu(001)表面上に 3 または 6 ML の Fe 層を成長させ、その上に Cr を蒸着すると、RHEED 強度振動が見られ、層状成長することが見出された。また、そのときの表面は 2×1 構造を示し、下地の Fe/Cu(001)表面構造と変わらないことがわかった。さらに、Cr 1 原子層を Fe 層ではさんだ超構造も作製可能となった。このように制御性よく膜構造を作成できることがわかったため、これらの磁気特性の研究が待たれる。

GaN と金属電極の間の界面層

Determination of Band Structures of InN/GaN Interfaces by Synchrotron Radiation Hard X-ray Photoemission Spectroscopy (Conference-ISSS-5-)

Y. Toyoshima, K. Horiba, M. Oshima, J. Ohta, H. Fujioka, H. Miki, S. Ueda, Y. Yamashita, H. Yoshikawa, and K. Kobayashi, Vol. 6, pp. 254-257 (22 November, 2008)

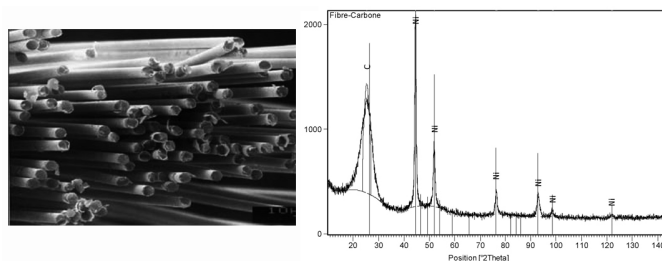


窒化ガリウム(GaN)は青色発光ダイオードとして有名だが、高輝度化を実現するには、金属電極と p 型-GaN との接触抵抗を減らす必要がある。通常用いられる Au/Ni 電極では接触抵抗は低いが、透明度および熱安定性に問題がある。透明電極として用いられる ITO 膜と p 型 GaN の間には高いショットキー障壁(SB)のために極めて高い接触抵抗を示す。したがって、GaN と ITO 膜の間に、ある種の界面層を挿入してショットキー障壁高(SBH)を制御する必要がある。本研究では、InN を GaN 上にパルスレーザー蒸着法で成長させ、その界面でのバンドオフセットを硬 X 線光電子分光法によって測定し、その界面での SBH を決定した。その結果、Mg ドープ GaN と InN の間の SBH は 0.3 eV と小さく、一方 Si ドープ GaN と InN の間の SBH は 1.4 eV と非常に大きかった。これより、InN 層を p 型 GaN と ITO との界面に挿入することによってオーミック接触が得られる可能性がでてきた。

ニッケル被覆カーボンファイバー

Structural Characterization of Nanostructured Nickel Coated Carbon Fibers by X-Ray Line Broadening (Regular Paper)

M.Fares and M.Y.Debili, Vol. 6, pp. 258-262 (26 November, 2008)



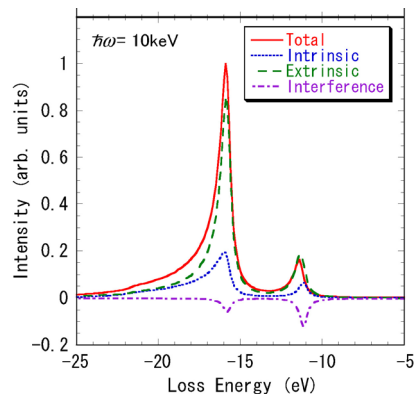
さまざまな種類の被膜が、電気化学メッキ法、PVD、CVD、レーザー蒸着、イオンインプラ、プラズマ、スプレー法など種々の方法によって作製され、さまざまな用途に用いられている。その構造は一般にはナノサイズの微結晶からなるので、その構造を明らかにすることは特定の応用目的のために極めて重要である。本研究では、直径数ミクロンのカーボンファイバー表面上に、CVD によって Ni 被膜を作製し、X線回折の測定を行い、それを拡張 Williamson-Hall 法によって解析した。このファイバーは中性子ガイドとして利用可能であり、被膜の構造はその性能を左右する。解析の結果、Ni 被膜の粒界サイズ、歪み、転移の異方性などが明らかとなった。また、Ni 膜を酸化させることによって透明な酸化ニッケル膜を作製することもできた。これは、太陽電池や化学センサーなどに利用可能となるだろう。

内殻光電子スペクトルでのプラズモン損失

Theoretical Study of Plasmon Losses in Core-level Photoemission Spectra (Conference-ISSS-5-)

Vol. 6, pp. 263-268 (6 December, 2008)

T. Fujikawa, M. Kazama, and H. Shinotsuka



内殻光電子スペクトルには、メインピークの脇に副ピークが出る。これは光電子がプラズモン励起してエネルギー損失した結果現れたものである。このエネルギー損失過程は光電子の励起のときにも (intrinsic loss), 光電子が物質表面まで移動する間にも (extrinsic loss) 起こる。後者は、Berglund-Spicer の光電子放出の 3 段階モデルではじめて考慮された。それは、光電子放出過程を励起、輸送、表面透過の 3 段階に分けて考えるモデルであるが、光電子輸送過程でのエネルギー損失と光電子励起での損失は実は分離して考えることはできない。本研究では、光電子放出過程すべてを第一原理多体理論に基づいて一括して取り扱う理論式を導いた。これによって、従来の古典的なモデルで計算された光電子のエネルギー損失とスペクトル形状を全量子力学的計算によって記述することができた。