

産 総 研

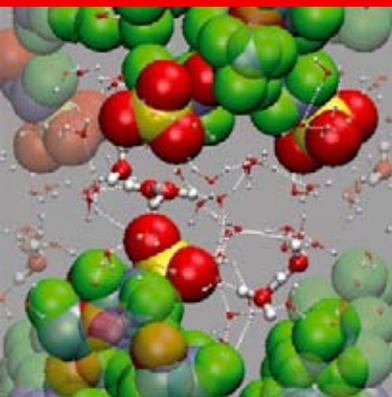
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

TODAY

11

2007 November

Vol.7 No.11



特集

02 ナノワールド・シミュレーション 産業技術開発の羅針盤

12 本格研究 理念から実践へ

高エネルギー密度化と高信頼性の同時達成

高機能3次元視覚システムVVVと応用システム

リサーチ・ホットライン

- 16 脳の発達には脳内コレステロール合成が不可欠
脳の発達に重要な新しいメカニズムの発見
- 17 テラヘルツ帯高精度汎用計測の基盤技術
超伝導ヘテロダイン受信器の開発とガス分光への応用
- 18 空間立体描画技術の高性能化実験に成功
3Dディスプレイの実用化にむけて
- 19 高感度で高精度な水晶振動子センサーシステム
環境汚染物質や疾病マーカー、アレルゲンなどを迅速に計測

パテント・インフォ

- 20 赤外放射計測機器に対する適合性評価
電磁波試験用参照熱源およびその試験方法
- 21 キャビテーション気泡観察装置
光散乱法測定における簡易位置合わせおよび気泡観察を可能に

テクノ・インフラ

- 22 AFMによる二次元グレーティングの校正
精密ピッチ計測法の開発とその展開

シリーズ

- 23 NIMT プロジェクト (第4回)
タイ王国国家計量標準機関 (NIMT) の設立支援

リサーチ・トピックス

- 24 第17回つくば奨励賞 若手研究者部門
鋳型を用いないRNA合成酵素の分子構造基盤研究

産業技術発展を支える計算科学

計算科学と産業

シミュレーション技術は、産業の先端技術を支え、技術革新の原動力となってきました。シミュレーション技術の重要性は21世紀の持続的発展社会の構築や産業競争力強化の観点から一層強まっていますが、特に、ナノテクノロジーやバイオテクノロジーといった最先端技術分野において不可欠な技術となっています。これらが対象とするナノの領域においては、量子効果やナノサイズ特有の現象が支配的となります。これらを、理解し、産業応用に向けた実用的な材料、デバイスなどへと作り上げていくためにはシミュレーションが不可欠な開発ツールとなっています。

先端産業を先導するシミュレーション技術

半導体分野では加工技術の微細化が進み、表面・界面に関する技術的なブレークスルーが求められています。特に、次世代半導体ナノデバイスでは、ナノスケールの構造の形成、機能の高精度な予測などにシミュレーション技術は不可欠です。

先端的な分子エレクトロニクスの研究分野は、まだ基礎的知見を蓄積する段階でもあり、分子とその周辺の電極との相互作用についてのさまざまな現象の観測とその理解が重要となっています。ここでもシミュレーション技術が有力な開発ツールとなっています。さらに、分子エレクトロニクス分野に限らず、有機エレクトロニクス、スピンエレクトロニクス、燃料電池における膜・電極反応など、多くの産業分野での開発が必要とされています。

バイオ分野においても、RNAやたんぱく質の機能発現機構を解明し、それらの知見に基づいてさらなるドラッグデザインやバイオデバイスの設計・開発に展開することが要求されていますが、産総研が開発したフラグメント分子軌道法(図1)などが強力な開発ツールとなることが期待されています。

イノベーションを切り開く羅針盤

コンピュータの性能は、現状のテラ(10^{12})FLOPS級からペタ(10^{15})FLOPS級へと進化し、それに伴いシミュレーション技術もより現実的な系に適用可能となります。もちろん、現実の系そのものをシミュレーションできるわけではありませんが、産業技術開発においては重要な点です。産業競争力の強化や持続発展可能な社会の構築に向け

て、世界各国でイノベーション創出への取り組みがなされていますが、ナノ領域への新たな展開を図っているナノシミュレーション技術がイノベーションを強く促進するものと期待されています。

産総研では、上記のような必要性和重要性に鑑み、計算科学研究部門を中心として、関連するソフトウェア開発を含むシミュレーション技術の開発について精力的に取り組み、産業技術開発に関わるイノベーション創出の羅針盤となることを目指しています(図2にシミュレーション事例を示します)。

研究コーディネータ
(ナノテクノロジー・材料・製造)
五十嵐 一男

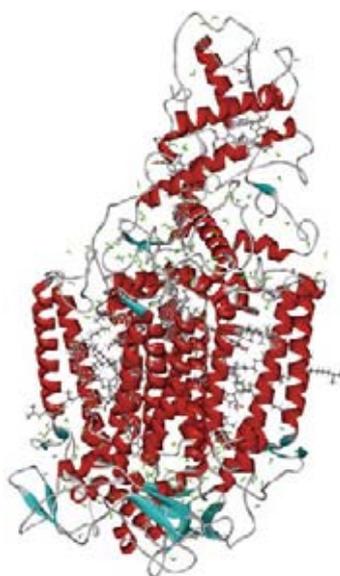


図1 フラグメント分子軌道法(FMO)の計算で対象とした2万原子のタンパク質(紅色細菌の光合成反応中心複合体)

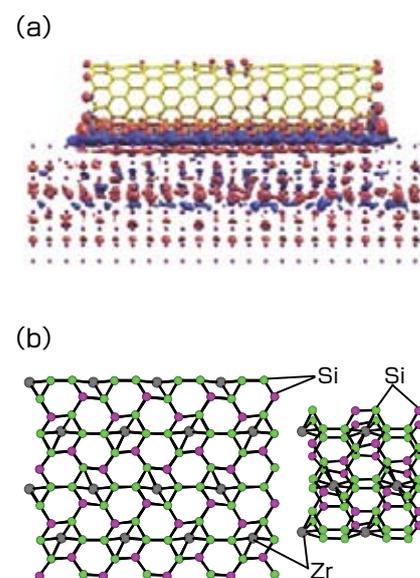
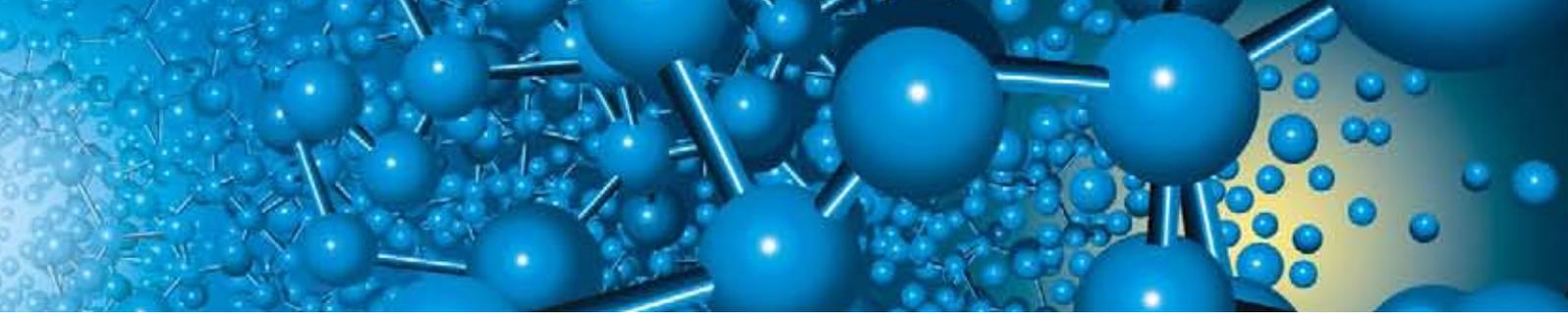


図2 オーダーN法(OpenMX)によるアルミニウム(001)表面上の(10,0)ジグザグカーボンナノチューブの差電子密度(a)、MOSトランジスタの究極の微細化を見据えて提案したシリコン系極超薄膜半導体(b)。



ナノスピネレクトロニクスデバイスのシミュレーション

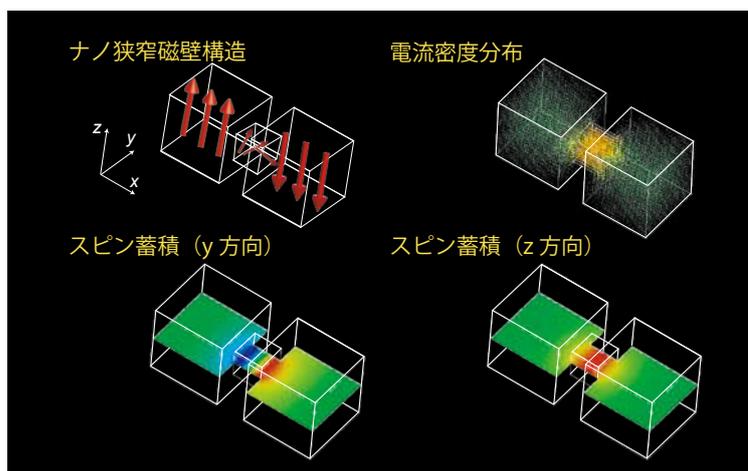
ナノスピネレクトロニクスとは

電子には電氣的な性質を担う電荷と磁氣的な性質を担うスピンという2種類の自由度があります。しかし従来のエレクトロニクスにおいては、トランジスタなどの半導体デバイスでは主に電子の電荷自由度だけ、またハードディスクなどの磁性デバイスでは主に電子のスピン自由度だけしか利用されませんでした。

近年の微細加工技術の急激な進歩により、半導体や磁性材料を用いたナノメートルスケールのデバイスを作成することが可能になり、ナノエレクトロニクスと呼ばれる分野が誕生しました。デバイスのサイズがナノメートルスケールになると、電流や電場によるスピンの操作やナノサイズのスピン構造を使った電気抵抗の操作など、より高度に電子を操ることが可能になります。ナノスピネレクトロニクスとは、このようにナノスケールの微細な構造において電子の電荷とスピンの両方の自由度を巧みに操り、さらに高度な情報処理を行うデバイスを研究開発する分野です。現在、研究開発が行われているデバイスとしては、量子中継器、スピントランジスタ、不揮発性磁気メモリ、超高密度磁気記録用の読み出しヘッドなどがあります。

有限要素法を用いたナノスピネレクトロニクスデバイスのシミュレーション

私たちのグループでは株式会社東芝および東北大学の実験グループと共同でナノ狭窄構造きょうさくにおける磁気抵抗効果を利用した超高密度磁気記録読み出しヘッドの研究開発を行っています。具



ナノ狭窄磁壁構造きょうさくにおける電流分布とスピン蓄積

体的には、自己組織化の手法を用いて酸化物絶縁体薄膜中に安定に強磁性金属のナノ狭窄構造きょうさくを作り込むことにより、これまで基礎研究にとどまっていた強磁性金属原子細線における巨大磁気抵抗効果という現象を利用した新しいデバイスの実現を目指すものです。私たちのグループではコンピュータシミュレーションを用いてデバイスの動作原理の解明、動作特性の予測、高性能な素子のデザインを行います。

例として図に、シミュレーションで求めたナノ狭窄磁壁構造きょうさくにおける電流分布とスピン蓄積の様子を示します。シミュレーションは有限要素法を用いてスピン構造を考慮した電子の輸送方程式を数値的に解くことにより行いました。私たちのシミュレーションではスピン構造の変化による電気抵抗の変化は磁壁の周りに生じるスピン蓄積の変化によって引き起こされます。実験で得られる磁気抵抗比の面抵抗依存性などがシミュレーションにより良く再現されることから、磁気抵抗効果の原因は磁壁周りのスピン蓄積である

と考えられます。

この素子を超高密度磁気記録読み出しヘッドとして実用化するためには、電流によって誘起される磁壁の運動や、それに伴うノイズについてもシミュレーションを行う必要があります。今後はそのような素子のダイナミクスについても研究を行い、デバイス化に向けた研究開発を推進するとともに、新たなナノスピネレクトロニクスデバイスの提案も行っていく予定です。

なお、ここで紹介した研究開発はNEDOナノテク・先端部材実用化研究開発「自己組織化ナノパターンニング法によるナノ狭窄磁壁型HDD磁気ヘッド素子の開発」の委託で実施しているものです。また、有限要素法を用いたシミュレーション手法に関して先進製造プロセス研究部門の手塚 明氏に有益な助言を頂きましたので、ここに深く感謝いたします。

ナノテクノロジー研究部門
今村 裕志

シミュレーションソフトがデバイス産業を加速する

研究の背景

デバイスの基本構造は異種材料の積層構造です。構成物質それぞれの性質に加え、接合面すなわち界面が大きな意味を持ちます。私たちは、自身で開発しているシミュレーションソフト QMAS^[1] をプラットフォームとして、界面を含む系を研究するためのユニークな計算ツールを開発・整備し、実際の適用研究を行なっています。

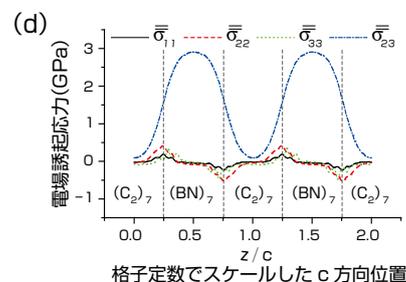
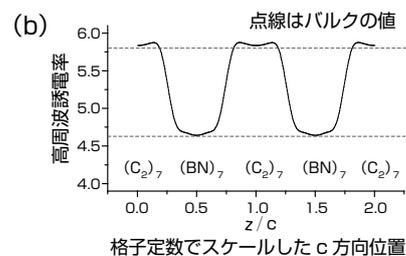
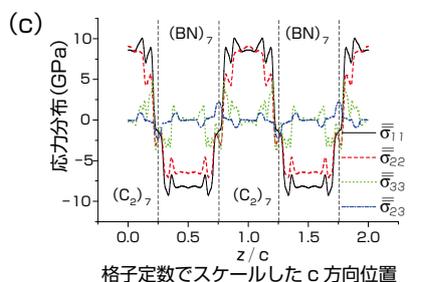
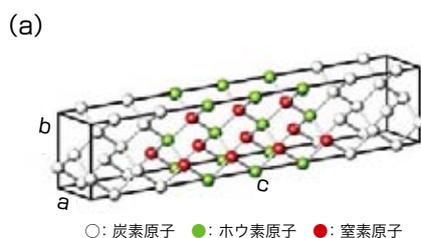
ここでは、未来のデバイス材料としても期待されるダイヤモンドと立方晶 BN (窒化ホウ素) からなるモデル物質の超格子 (図 (a)) を対象として、計算ツールの機能と適用例を紹介します。

誘電率の分布

誘電率は、電子デバイスにとって最も重要な物性値のひとつです。QMAS では、一様な静電場下での電子状態計算ができます。そのとき誘起される分極から、誘電率およびその次元分布を精度良く求めることができます。図 (b) に示したように、高周波誘電率は、超格子の周期に一致した変調構造を持ち、また、界面付近での誘電率の上昇も確認できます。

応力の分布と電場の影響^[2]

ダイヤモンドの格子定数は立方晶 BN のものより 1.4 % 程度小さいので、超格子の積層方向に垂直な面内で、ダ



イヤモンド領域には引張応力が、BN 領域には圧縮応力が働くことが予想されます。

QMAS では、応力の分布を計算できます。図 (c) に示した面内の応力成分 $\bar{\sigma}_{11} \cdot \bar{\sigma}_{22}$ ^[3] の挙動は、この予想を裏付けています。積層方向に平行に静電場をかけた瞬間、極性を持つホウ素・窒素原子と界面の炭素原子に力が働きます。これは、BN 層を中心に働くせん断応力場に対応しています (図 (d))。原子位置緩和後は、このせん断応力場は、超格子全体にほぼ一様に広がります。デバイス作成時、さらに電場印加時に生じる内部応力の大きさ・分布を計算できることも、QMAS の特徴のひとつです。

今後の展開

半導体デバイス開発において、性能向上のためのさらなる微細化には、さまざまな困難が立ちはだかっています。その打破のひとつの方向が、遷移金属酸化物をはじめとする新たな機能性材料の投入です。この場合、磁性や電子相関について、より精密な記述が必要となります。QMAS をプラットフォームとして、私たちは、最新の計算技術を駆使して、新たに生じる問題に取り組んでいきます。

計算科学研究部門
石橋 章司

関連情報

[1] QMAS (Quantum MAterials Simulator): 平面波基底・Projector Augmented-Wave法・LDA/GGAを用いた第一原理シミュレーションソフトウェア。将来の一般公開を目指して、現在、石橋章司・田村友幸 (産総研計算科学研究部門)、田中真悟・香山正憲 (産総研ユビキタスエネルギー研究部門)、寺倉清之 (北陸先端科学技術大学院大学先端融合領域研究院) が開発に取り組んでいる。メンバーの所属機関のほか、国立台湾大学・淡江大学 (台湾) から開発に協力を受けている。

[2] Phys. Rev. B 76, 153310 (2007) に該当論文が掲載。

[3] 記号の上の二重線は、面内平均、および、ある領域での巨視的平均を取っている事を表わす。詳細は上記の論文を参照のこと。

オーダー N 法の開発

第一原理計算とは？

近年、「第一原理計算」と呼ばれる計算手法が広く使われるようになってきました。この方法は実験から得られるパラメータを一切使わず、量子力学の基礎方程式のみから系のエネルギー、安定構造、振動スペクトル、拡散係数などのさまざまな物理量を計算することが可能であり、現在では最大で500原子程度の系まで標準的に扱うことができます。

一方、原子に対するニュートン方程式を（数值的に）解くことで多数の原子の振る舞いを研究する方法は「分子動力学法」として以前から良く知られていますが、この時に必要な「各原子に働く力」を先述の第一原理計算から求めることによってこれらの手法を組み合わせることが可能であり、「第一原理分子動力学法」と呼ばれています。

私たちのグループでは濃リン酸、硫酸水溶液、ナフィオン／水界面など、主に燃料電池と深く関連するような系に対して第一原理分子動力学計算を行い、多くの情報を引き出すことに成功してきました。特に、水溶液中におけるプロトン移動のような現象は他の計算方法では非常に扱いにくく、第一原理計算を行うことで初めて原子レベルでの理解が可能になると言えます。

第一原理計算の問題点

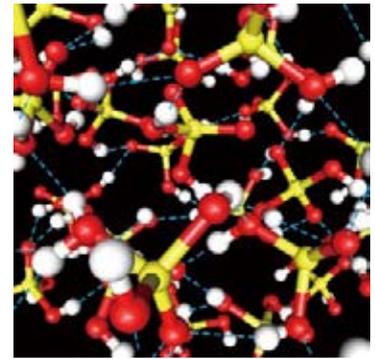
このように第一原理計算自体は非常に有用な方法なのですが、最大の欠点は「計算負荷が大きい」という点に尽きます。具体的に説明すると、500原子程度の分子動力学計算を行うのに必要な時間は、デスクトップPC100台程度

の大規模な並列計算機を専有したとしても、1ステップあたり2～3分程度かかります。十分な統計精度でデータを集めるためには最低でも1万ステップ程度は必要ですので、準備計算まで含めると1ヶ月以上の時間がかかることは珍しくありません。更に、計算量は系の中に含まれる原子数の3乗程度に比例して増加しますので、仮に10倍高速な計算機を使ったとしても、扱える系のサイズは高々2倍強にしかできません。一方、ナノテクノロジーあるいはバイオテクノロジーでターゲットに選ばれるような複雑な系に対して忠実なモデリングを行う場合、500原子では不十分なことがよくあります。例えば高分子の周囲に十分な数の水分子を配置すると、それだけで数千原子になります。

したがって、このような系の第一原理計算を行う場合には、計算コストとモデリングの信頼性との間で妥協を強いられることになります。

オーダー N 法の登場

このような第一原理計算の問題点を回避するため、90年代に「オーダー N 法」と呼ばれる新しいアルゴリズムが提案されました。この方法は、原子数に比例する程度の計算時間で従来の方法と遜色ない結果を得られるという画期的なものであったため、多くの研究者が興味を持ち、分割統治法や密度行列法



濃リン酸中における水素結合の様子を破線で示す。

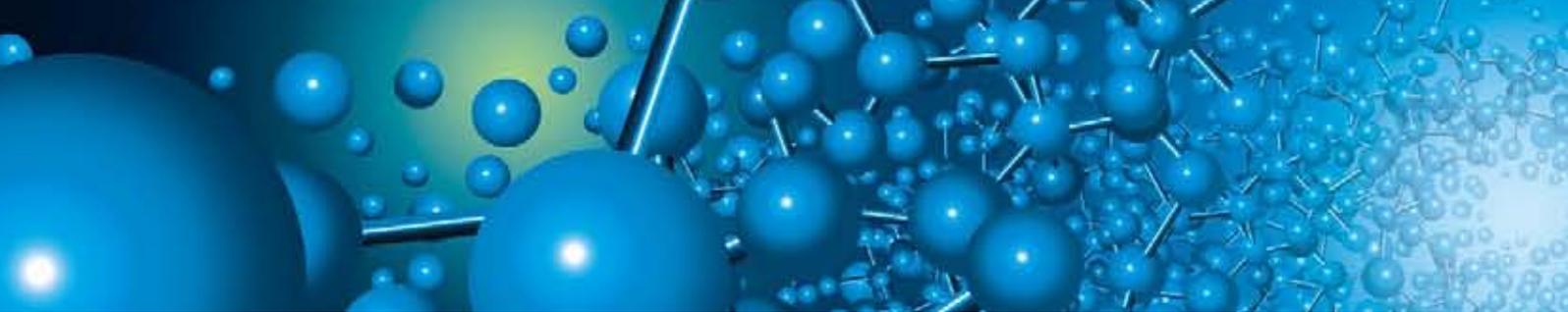
など、いくつかのアルゴリズムが提案されました。しかし、どの方法も現実系のシミュレーションを行う上で信頼性や効率性が不十分であることが次第に判明し、長らく停滞していました。最近、私たち自身によるアルゴリズム上の発展も含めて、ようやくオーダー N 法が実用レベルに達しました。その一部は、尾崎氏（現在は北陸先端科学技術大学院大学准教授）が局在基底を使う OpenMX に組み込んで発表してきました (p2 の図 2 (a) 参照)^[1]。さらに、私たちが有限要素基底を使う第一原理計算プログラムとして開発してきた FEMTECK に新たなオーダー N のアイデアをいれました。このプログラムを用いて最大で 3,000 原子程度の系までオーダー N 法を問題なく適用できることを実際に確認しており、いくつか大規模な実証計算を始めています。

計算科学研究部門

土田 英二

参考

- [1] http://staff.aist.go.jp/eiji.tsuchida/jp_index.htm
- [2] ナノシミュレーション技術ハンドブック委員会 編：「ナノシミュレーション技術ハンドブック」、共立出版株式会社（2006）。
- [3] <http://www.openmx-square.org/>



バイオセンサ用膜材料の物性を予測する

はじめに

分子膜は、人工物であるバイオセンサ用分子膜から天然物である細胞膜までさまざまな構造と性質を持っています。

これらの構造と性質を支配するのは、分子膜を構成する単分子の分子構造と分子間相互作用、そして熱ゆらぎです。単分子の構造はX線構造解析などで実験的に知ることができますが、分子間相互作用と熱ゆらぎを実験的に直接知ることは困難です。分子間相互作用を解析する最適な方法として、量子力学の数値解法である非経験的分子軌道法があります。その分子間相互作用を用いてその分子集合体の形成する構造と物性を解析する最適な方法として、統計力学の数値解法である分子シミュレーションがあります。

ここでは、バイオリアクター、バイオセンサなどのデバイスとして有望視されているテトラエーテル型脂質分子膜の開発において、分子シミュレーションがどのように使われ、役立っているかを紹介します。ここで述べる計算には、高精度高速汎用分子シミュレーションプログラム:MPDyn^[1]を用いました。

脂質分子膜の開発と分子シミュレーション

脂質膜の構造安定性や低分子・イオンの透過性は、膜を構成する脂質分子の構造に依存して大きく変化します。このことは、新しい合成脂質分子により、新しい機能性を持った脂質膜ができる可能性も示しています。バイオリアクター、バイオセンサなどのデバイスを構築しようとするバイオテクノロ

ジー分野においても、合成脂質を使用した材料開発が盛んに進められています。

一方、苛酷な環境下（高温、低pH、高塩濃度など）で棲息する古細菌の持つ膜は高い安定性と低い透過性を持つと考えられ、これは、上記デバイスに要求される性能です。そのため古細菌型合成脂質が開発され、実際それらの膜が外部ストレスに対して安定で、かつプロトンなどを透過しにくいことが示されています。

古細菌膜を構成する脂質の分子構造は、1) 疎水鎖が多くメチル分岐を持ち、2) 疎水鎖とグリセロールがエーテル結合しており、3) 極性基を2つ持つ膜貫通型の脂質分子が含まれるという特徴を持っています。このような特徴が膜の安定性や透過性とどのように関係しているかは合成脂質の分子設計をする際に重要な情報です。分子構造をもとにモデルを組み立て、分子集合体物性を解析する分子シミュレーションは、この情報を得るのに最も有効な研究ツールの1つです。

ここでは、私たちが行っている古細菌の脂質分子膜の分子動力学シミュレーション (Molecular Dynamics: MD) による研究を紹介します^[2]。この研究は、脂質分子構造の特徴が膜物性に与える影響を調べ、合成脂質分子の設計指針を与えることを目標としています。

バイオセンサ用脂質分子膜の物性予測

天然に存在するテトラエーテル型脂質膜 (tetraether phosphatidylcholine: TEPC) は環状構造を持ち (図1のTEPC)、二重層ではなく単層膜を形成

します。環状テトラエーテル型脂質膜は堅いために、デバイスなどへの応用が難しいことがあります。そのため、バイオ材料分野では、擬環状型 (acyclic tetraether phosphatidylcholine: a-TEPC) がジエーテル型脂質 (diphytanyl Phosphatidylcholine: DPhPC) と環状テトラエーテル型脂質の中間的な物性を示すと期待されていますが、膜物性について十分な予測ができていません。

この研究では図1に示したDPhPC、a-TEPC、TEPCから成る膜の物性をMDシミュレーションで予測しました。

MDシミュレーションは等温等圧条件 (298 K, 0.1 MPa) で行いました。平衡化のために2~5 nsのMD計算を行い、その後25 nsの長時間MD計算を行いました。図2には脂質分子の膜面積の経時変化と確率分布を示しました。a-TEPCとTEPCはDPhPCに比べ、疎水鎖の熱運動が制限を受けるために、小さな膜面積を示しました。TEPCは非常に長い時定数 (>10 ns) の膜面積ゆらぎも示しました。そのゆらぎから弾性率を計算すると、DPhPC、a-TEPC、TEPCについてそれぞれ0.67、

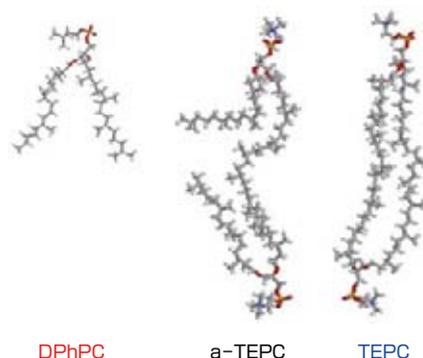


図1 脂質分子の構造脂

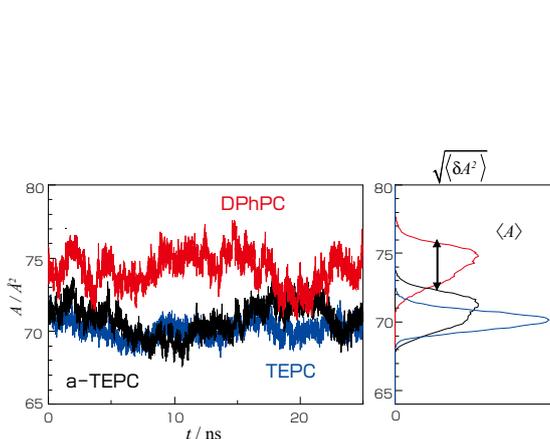


図2 各脂質分子膜の膜面積の時間変化

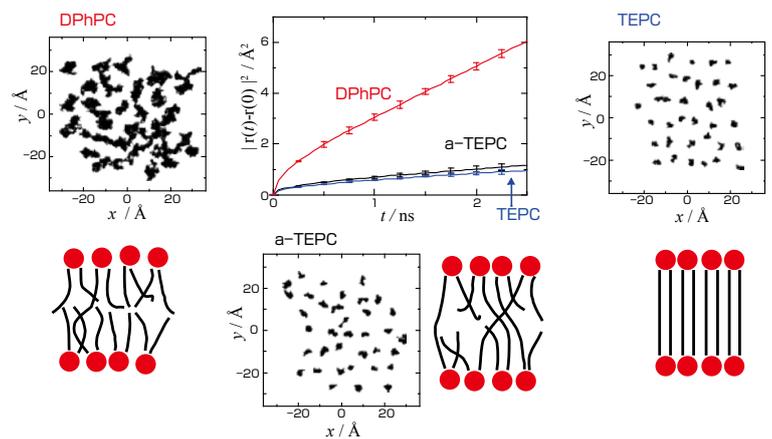


図3 各脂質分子膜の重心の平均移動距離の二乗と膜面内における分子重心の軌跡および分子膜の構造模式図

0.71、2.02 N/mとなり、TEPCのみ3倍程度高い弾性率を持つことが分かりました。

また、図3には、分子膜重心の平均移動距離の二乗 (Mean Square Displacement : MSD) と膜面内における分子重心の軌跡を示しました。a-TEPC、TEPCのMSDは、DPhPCよりも5分の1以下の値を示し、安定性があることが分かりました。

以上の結果、膜貫通型テトラエーテル型脂質の中でa-TEPCはTEPCよりも通常の二重層膜を形成するDPhPCに近い膜弾性を示し、TEPCよりも柔らかいという力学特性を持っています。さらに、a-TEPCは、TEPCと同程度の安定性を持つことが示されました。従来の環状タイプのテトラエーテル脂質膜は堅すぎるため、壊れやすく

実験的な取り扱いが難しいと懸念されていましたが、この研究で用いた擬環状型は、低い弾性率を示しました。以上のことは、a-TEPCが柔軟性と安定性を併せ持つ理想的な膜材料である可能性を示唆するものです。

まとめ

MDシミュレーションから弾性率が精度良く計算できるようになり、分子シミュレーションによる分子膜設計の実現の可能性が高まってきました。近い将来、分子シミュレーションによる分子膜設計は実用化するものと考えられます。

また、分子シミュレーションは、バイオセンサ用分子膜の開発に限られたものではありません。最近では、リポソームを用いたドラッグデリバリー

システムのマルチスケールシミュレーション技術 (分子シミュレーションに分子軌道法と流体シミュレーションを組み合わせる技術) を開発するため、科学技術振興機構戦略的創造研究本推進事業のプロジェクトとして「DDSシミュレータの研究開発」を進めています^[3]。

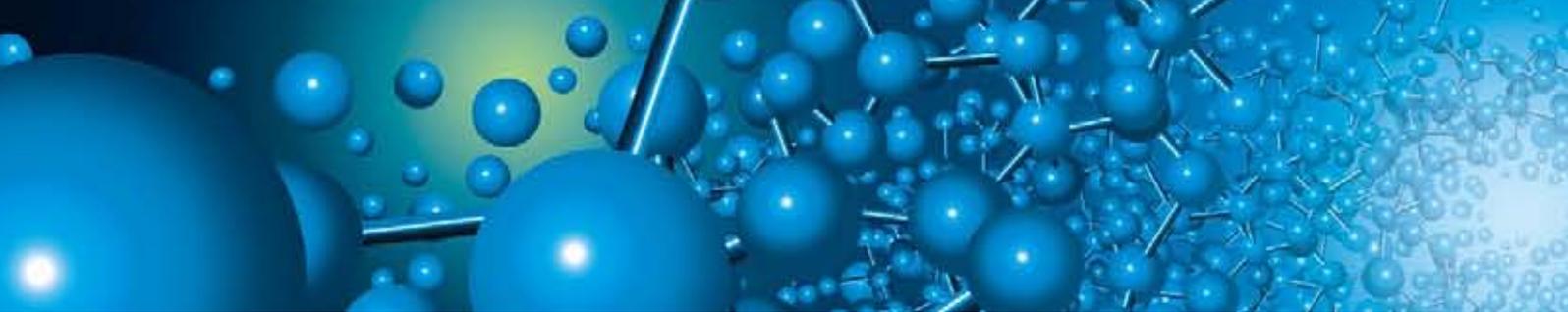
謝辞

ここで述べた脂質分子膜の研究は、産総研計算科学研究部門:篠田渉博士、篠田恵子博士 (現 株式会社三菱化学科学技術研究センター)、バイオニクス研究センター:馬場照彦博士との共同研究の成果であることを記し、各氏に感謝いたします。

計算科学研究部門
三上 益弘

参考文献

- [1] W. Shinoda, M. Mikami, *J. Comp. Chem.* **24**, 920-930(2003).
- [2] W. Shinoda, K. Shinoda, T. Baba, M. Mikami, *Biophys. J.* **89**, 3195-3202(2005).
- [3] <http://www.multi.jst.go.jp/>



水素イオンの反応と伝導 -燃料電池とベックマン転位反応-

水素イオン(プロトン) H^+ は、その濃度(正確には活量)がpHとして表現され、私たちの周りのさまざまなところで重要な役割をはたしています。自動車のエネルギー源として有望な固体高分子形燃料電池では、正極と負極を分離する水素イオン選択透過膜に高い導電性と長寿命が要求されています。

プロトンリレー

水素イオンの特異的な性質として、その水溶液中のイオン伝導度がほかのイオンと比べて1桁ほど大きいことが知られています。

これは、水素イオンのサイズが小さいからでなく、図1のように周囲の水分子との間で H^+ を交換して実質的に非常に高速に移動するからです。プロトンリレーやプロトンホッピングとよばれるこのアイデアは、201年前にグロタスが提案しました^[1]。

このようなグロタス機構によるプロトン移動のダイナミクスを実際に目で見たと示されたのは約10年前のことです。これは、第一原理シミュレーションによるものです^[2]。私たちは、3年前にこのようなプロトンが超臨界水の中で、ナイロンの原料であるε-カプロラクタムの製造工程におけるベックマン転位反応を誘起することを第一原理シミュレーションで示しました^[3]。そして、現在燃料電池の重要な要素である電解質膜(ナフィオン)中の水素イオン伝導について、第一原理シミュレーションを行って、水素イオンの動きを見えています。

このような流体やその中で化学反応では、原子レベルのダイナミクスが

重要なので第一原理分子動力学計算が有効です。

超臨界水中のベックマン転位反応と水素結合ネットワーク

常温常圧の水の密度は、約 1 g/cm^3 であり、この中では水分子同士は水素結合で結ばれています。水素結合は、水分子の水素原子が隣の水分子の酸素原子と弱く結合(化学結合より弱い、普通の分子間力よりは強い)するもので、水中ではこの水素結合で結ばれたネットワークができています。水素イオンは水溶液中では、水分子が1個付加してヒドロニウムイオン(H_3O^+)の形で存在していますが、この周りには同じように、水素結合ネットワークができていて、水素イオンは安定な状態にあります。

超臨界水中では水の密度は 1 g/cm^3 より小さいので、図2のように水素結合のネットワークは不完全になります。そのため、水素イオンのトリガーでベックマン転位反応が起こることをシミュレーションで確認しました。しかし、熱力学的には超臨界状態の温度であっても密度が 1 g/cm^3 の場合には(実験は困難ですが)、水素結合ネットワークはできていて、ベックマン転位反応が起こらないことも確認しました。超臨界状態という高温での反応ですが、温度が反応を起こす因子でなく、密度が重要な要因であることが第一原理シミュレーションで確認できました。超臨界点以下では、液体と気体に相分離して、プロトンは液体水中で安定化されるか、存在しない(気体中)かです。工業的に、濃硫酸が使われることがありますが、

そのような危険な物質を使わなくても、水素結合のコントロールで反応を制御できることも、第一原理シミュレーションからわかります。

このようにして、私たちは産総研東北センターの故 生島氏らが発見した超臨界水中でのベックマン転位反応^[4]を第一原理シミュレーションによりコンピュータ上で再現しその反応機構を明らかにしました。

ナフィオンの第一原理シミュレーション

燃料電池では、負極に水素が供給されて水素イオンが生成し、それがイオン透過膜を通して正極に移動してそこに供給された酸素と反応して水が生成します。この正極と負極を分離するイ

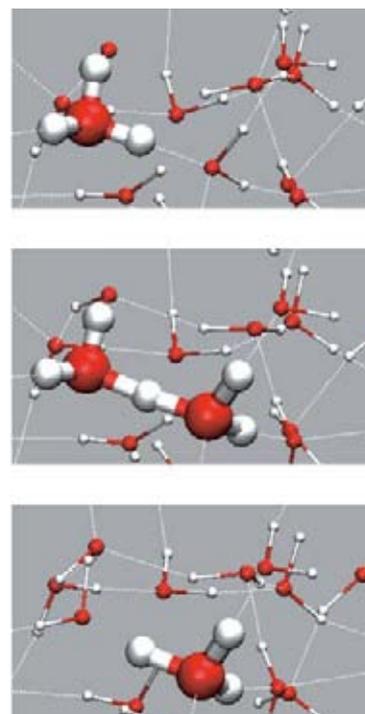


図1 グロタス機構によるプロトン伝導の模式図
●: 酸素 ○: 水素

オン透過膜としては、デュポン社製のナフィオンに代表されるフッ素系の高分子電解質膜が使われています。さらに大きな温度範囲で動作でき、長寿命、低価格の膜が求められています。フッ素系に限らず、炭化水素系の膜も注目されています。このような膜の中では水素イオンはどのように伝導するのでしょうか？その機構を知ることは、これからの新たな膜の開発に重要なことです。

フッ素系の電解質膜は、水の集まった部分と高分子の骨格の部分に相分離したようなメゾ構造をもっています。これをそのまま第一原理でシミュレーションすることは、サイズ的に不可能です。そこで、そのメゾ構造の一部分をぬきだしたような構造をもつ原子配置を、メゾ領域のシミュレーションの経験のある株式会社豊田中央研究所で古典分子動力学計算から作りました。水の含有率が異なる2種類のナフィオン膜の原子配置を作り、20 psほどの第一原理分子動力学計算を行いました。計算には、5ページで紹介したFEMTECKという私たちが開発している有限要素基底の第一原理分子動力学プログラムを使いました。全原子数は400前後であり、しかも電子数の多いフッ素原子を多く含むので、かなり負荷の高い計算です。AIST スーパークラスP32の49ノード(98CPU)を用い、1週間で約2 psのシミュレーションが

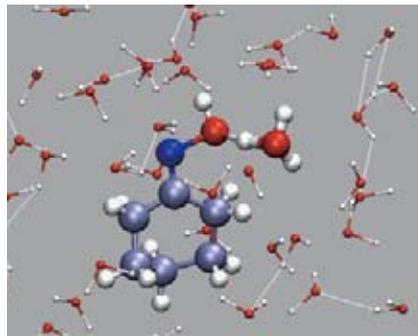


図2 超臨界水中のシクロヘキサノンオキシムとその周りの水素結合
●：酸素 ○：水素 ●：炭素 ●：窒素

可能でした。

その結果、電解質膜の中で水素イオンが、水素結合ネットワークの中をどのように拡散するかがわかりました。FEMTECKでは均一な電場をかけた計算も可能で、イオンの動きを直接に追いかけることができます。そのシミュレーションの結果、水素イオンがどのように硫酸基と相互作用しながら伝導するかなどがわかりました。この移動は含水量に影響されていました。さらに、燃料電池の水管理で問題となる随伴水の挙動もわかります。

ここで紹介したうち超臨界水中の反応シミュレーションは筑波大学 マウロ・ボエロ准教授らとの共同研究であり、ナフィオンについては、JST-CRESTの研究課題「電極二相界面のナノ領域シミュレーション」として、株式会社豊田中央研究所、NEC ナノエレクトロニクス研究所、東京大学物性研

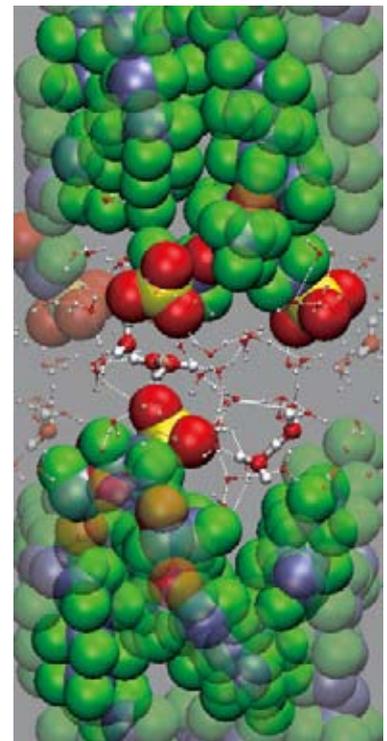


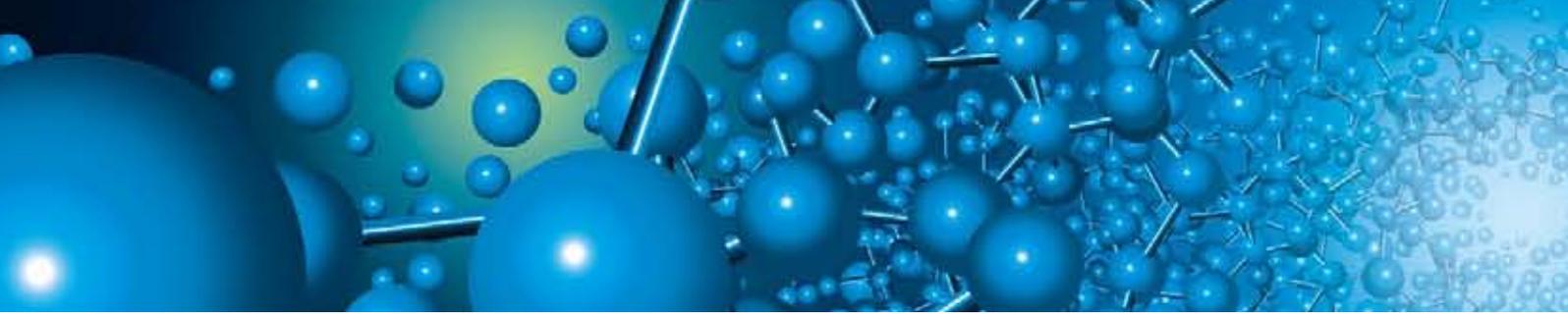
図3 ナフィオン中の水素イオン伝導のスナップショット
●：酸素 ●：硫黄 ●：フッ素 ●：炭素 ○：水素。水分子は小さな球で示した。その中で、ヒドロニウムイオンの原子はやや大きな球で示している。薄い色の部分は周期境界条件の繰り返しのイメージである。

究所、大阪大学産業科学研究所との共同研究の成果です。この共同研究では、電位を制御した電極反応の第一原理シミュレーションにも成功しています。

計算科学研究部門
池庄司 民夫

参考文献

- [1] C.J.T. von Grotthuss, *Annals de Chimie* 58, 54 (1806).
- [2] M. Tuckerman, K. Laasonen, M. Sprik, and M. Parrinello, *J. Phys. Chem.* 99, 5749–5752 (1995), *J. Chem. Phys.* 103, 150–161 (1995).
- [3] M. Boero, T. Ikeshoji, C. C. Liew, K. Terakura, and M. Parrinello, *J. Am. Chem. Soc.* 126, 6280–6286(2004).
- [4] Y. Ikushima, K. Hatakeda, O. Sato, T. Yokoyama, and M. Arai, *Angew. Chem. Int. Ed.* 38, 2910 (1999).

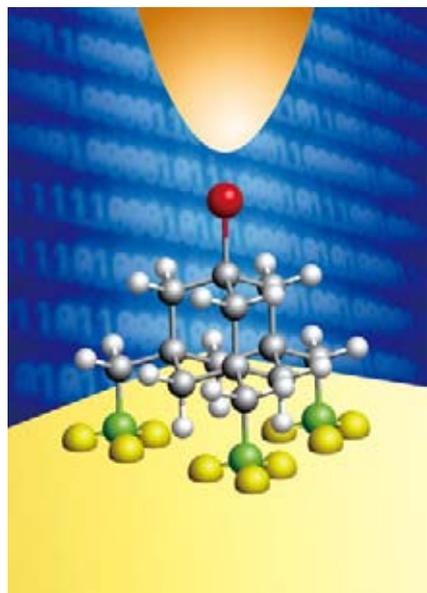


シミュレーション基礎理論の展開

極微領域での過渡的現象を見る

実環境下に置かれた物質の理論シミュレーションを行うことにより実験では捕らえにくい、極微領域での過渡的現象を“見る”ことが可能になりつつあります。これによりナノテクノロジーにおける計算科学はその重要性を飛躍的に増すでしょう。こういった進展をさらに加速するためには、シミュレーション基礎理論を重視し、それに先導された大規模・高精度計算と、その結果を普遍化するためのモデル理論構築を併せて力強く推進していくことが重要です。

これまでの物質科学分野におけるシミュレーションは基底状態・平衡状態などの静的な状態を研究対象にしており、非平衡性が際立つ動的な実環境下での物質の挙動そのものは研究対象とはしてきませんでした。しかしこの状況が変わってきました。



トンネル顕微鏡の概念図
基板上的分子とその直上の探針

1982年、ゲルト・ビーニツヒとハインリッヒ・ローラーによる走査型トンネル顕微鏡の発明以来、ナノテクノロジーの最も際立った特徴は、原子・分子スケールでの計測・観測・操作です。近年こういった原子・分子スケールでの非平衡現象そのものを理論的にシミュレーションできるようになり、ナノテクノロジー研究を推進していく際の不可欠な道具となりつつあります。

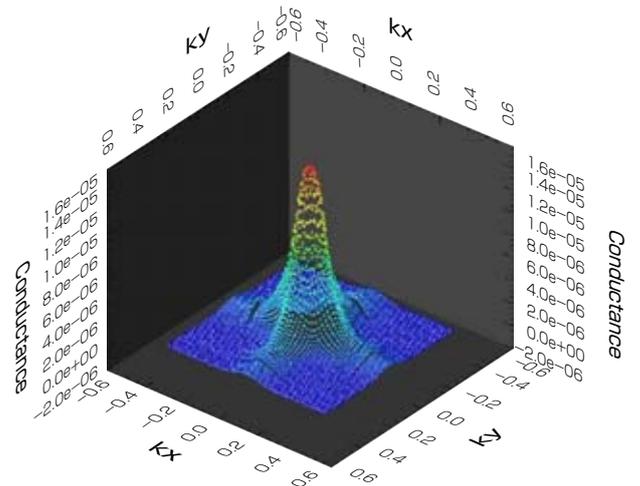
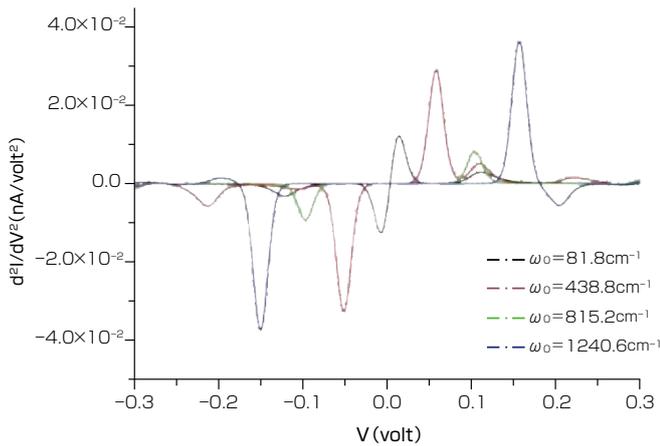
単一分子伝導

例を2つ挙げます。1つ目の例は、1個の分子(単一分子)に電流を通したときの、分子の振動励起です。通常の物質では、フォノンがあれば電子が散乱され抵抗が増大するという、常識的な振る舞いが見られます。一方、単一分子に電気を流すと、分子振動の励起に伴って電流が増大するという、常識に反した振る舞いが現れることが知られています。分子振動の励起により、無理やり伝導のチャンネルを増やしていると理解できるかも知れません。分子と電極がどのような条件を満たすときに、抵抗が増大したり、電流が増大したりするかは、最近理論的に理解できるようになり、実際の分子・電極系で、そのような効果を含んだ電流シミュレーションが行われています。このような計算は、分子の電子的な性質を利用してエレクトロニクス・デバイスを作ろうという、分子エレクトロニクス分野で大きな威力を発揮します。分子は小さすぎるので、電極の間に挟まっているところを実際に顕微鏡で確認することはできませんが、分子振動励起に伴った電流の変調を解析・確認でき

れば電流が実際に分子上を流れたという証拠になるのです。その変調の解析に理論シミュレーションが大いに役立ちます。今までお話ししてきたことは電気伝導に伴う非弾性過程、つまり電子と分子振動の間でのエネルギーのやり取りが関係しています。このような非弾性過程の結果、電気伝導に伴って熱が発生しますが、発生した熱をどのようにして逃がすか、つまりフォノン熱伝導過程も重要な問題です。この問題も、最近さまざまなことが理論・シミュレーション研究によりわかり始めています。

これと密接な関係にある問題に単一分子化学という話題があります。走査型トンネル顕微鏡を用いて表面上の分子に電気を流すと、分子が化学反応を起こすという現象が知られています。電圧のかけ方などのコントロールにより、自在に化学反応を操ることが可能になってきています。この問題も先ほどの非弾性過程やその後の分子振動やフォノンの間でのエネルギー移動と深くかかわっていて、最近大きな興味を持たれている問題になっています。

分子エレクトロニクスに限っても、ここで紹介したシミュレーション研究の応用が、まだほかにたくさん可能だと思えますが、バルク物質間の界面における散乱抵抗や、キャリア注入効率の理論シミュレーションも大きな理論上の変更無しに研究できる問題です。散乱抵抗やキャリア注入効率はデバイスの性能を左右するので、材料設計による最適化が実現すれば技術的にも大変有用であると思われます。これまで、散乱抵抗にはいろいろな要因



分子を介したトンネル電流の電圧二次微分
分子振動エネルギー正值でのピークは分子振動励起に伴う電流増大を意味する。^[1]

SrRuO₃/SrTiO₃/SrRuO₃ 接合のコンダクタンスの平面波数依存性^[2]

がかかわるので、あまり詳しい研究は行われてきませんでした。1分子という究極のナノ接合・界面での研究が進むにつれ、バルク材料での散乱抵抗問題を見直すきっかけになるのではないかと思います。

スピン伝導

2つ目の例はスピン伝導問題です。トンネル接合を介したスピン依存伝導の理論シミュレーションが大変高い精度で行えるようになってきています。

計算例の図を1つ示します。SrRuO₃/SrTiO₃/SrRuO₃ ナノキャパシタにおけるトンネル接合のゼロ・バイアスでのマイノリティ・スピンの伝導度の平面波数依存性です。ガンマ点でのコンダ

クタンスが支配的であることがわかります。このような計算はTMR（トンネル磁気抵抗）素子の性能向上を目指した物質設計で大きな役割を果たします。産総研が開発した巨大な磁気抵抗比率を持つTMR素子Fe(100)/MgO(100)/Fe(100)の開発には、それに先んじた2001年に発表されたバトラーと言う理論家の表面バンド計算結果が大きな影響を与えたようです。理論・シミュレーションが役に立った好例に挙げられます。

まとめ

物質科学における理論・シミュレーションは、流体力学・連続体力学などの巨視的な物体を対象としたシミュ

レーションと比べ難しい部分が多く、まだまだ未成熟な面が残っていますが、それを克服するためのシミュレーション基礎理論の研究が進められていて、より実験環境に近づいた真の“実在系”に対するシミュレーションが可能になってきています。このように補強されたシミュレーション方法の駆使により、その予言性がより強くなり、“見ること”が困難なナノ物質・ナノ材料の開発において、ほかに得がたい貴重な道しるべを与えられるようになって考えています。

計算科学研究部門
浅井 美博

参考文献

- [1] Y.Asai, Physical Review Letters 93, 246102 (2004); 94, 099901 (2005).
- [2] D. Wortmann, a private communication.

リチウム電池材料における本格研究 高エネルギー密度化と高信頼性の同時達成

電池材料開発に求められる2つの目標

二次電池は、携帯電話やノートパソコン、電気自動車・ハイブリッド自動車などの電源として、私たちの生活との結び付きはますます強まっています。特に、リチウムイオン電池は、携帯電子機器の軽量化に大きく貢献してきました。しかし、さらなる利便性向上や応用範囲の拡大の要求は強く、電池のエネルギー密度の向上が必要とされることから、次世代リチウム電池材料の研究開発が活発に行われています。一方、エネルギー密度の向上と同時に、安全性に対する要求もますます強くなっています。

このように、エネルギー密度向上と高信頼性の同時達成は重要な研究目標であり、私たちは、図1に示すアプローチで次世代リチウム電池に向けた新材料開発に取り組んでいます。

難燃性電解液の開発

リチウム電池では、十分な安全性の確保が大前提です。その鍵の1つである電解液について、飽和蒸気圧がきわめて低い常温熔融塩（イオン液体）に着目し、これを溶媒とした難燃性電解液の開発を進めています。しかし、イオン液体はこれまで、リチウム電池系負極によって還元分解されるという問題がありました。そこで、リチウム電

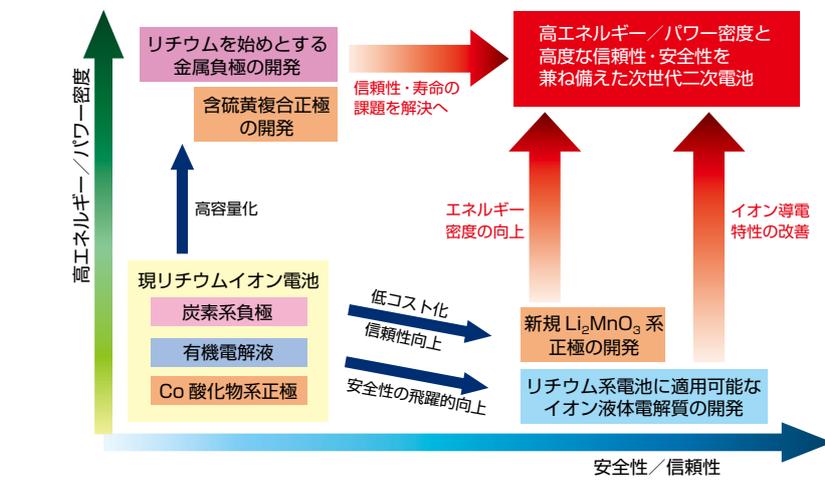


図1 研究テーマと開発ロードマップ

池系負極によっても還元されない脂肪族四級アンモニウム塩からなる新規イオン液体を開発するとともに^{*1}、その電解液中ではリチウム金属負極の問題であった充電時のデンドライトが成長しにくいことも見つけました^{*2}（図2）。

新規正極材料の開発

正極材料について、エネルギー密度向上と低コスト化の観点から、リチウム含有比が高く、かつ安価な元素からなる新規化合物として鉄含有 Li_2MnO_3 ^{*3}に注目し、3V級ながら既存正極材料 LiCoO_2 の約1.5倍の放電容量（220mAh/g）を持つ $\text{Li}_{1-x}(\text{Fe}_{0.5}\text{Mn}_{0.5})_{1-x}\text{O}_2$ を開発しました（図3）。現在もさらなる高容量化（一部Ti置換により262mAh/g）に取り組んでいます。

また、2030年ごろの本格的な電気自動車の実現に向けて、600mAh/g以上の高容量が期待される含硫黄複合材料についても、二次電池正極として基礎的な検討を開始しています。

新規電池材料の実用化の方向性

電池には、残念ながら万能なものは存在せず、用途ごとの研究開発が必要です。そのため、電池材料の研究では、目指す用途の明確化が、本格研究を推進する上で重要と考えています。

最近、次世代自動車の実現・普及に向けて、経済産業省の研究会で次世代リチウム電池の研究開発戦略がまとめられ^{*4}、特に外部充電が可能なプラグインハイブリッド車に向けては、現状のリチウムイオン電池の約1.5～3倍のエネルギー密度の向上が必要であることが提言されています。そこで、私たちの研究も、車載用途を念頭に上記の研究開発戦略で示された方向に調和させながら、実用材料として発展させるべく取り組んでいます。

製品化の段階を目指して

電池用材料の実用化に向けた研究段階では、実際に実用電池に組み込み、実使用を想定した温度や充放電の条件



1988年に京都大学大学院工学研究科修士課程を修了し、大阪工業技術試験所入所。黒鉛層間化合物に関する研究を端緒に、リチウムイオン電池の黒鉛/炭素負極の研究に取り組み、以来、リチウムおよびリチウムイオン電池に関する研究に従事しています。2002年より蓄電デバイス研究グループ長です。

辰巳 国昭（たつみ くにあき）
ユビキタスエネルギー研究部門
蓄電デバイス研究グループ

で性能が十分に発揮されるかなどの検討を行う必要があり、電池メーカーの協力が不可欠です。これまで、車載用電池に関するNEDOプロジェクト⁵に参画している電池メーカーや材料メーカーの協力を得て、実用電池での課題の抽出を行ってきました。2006年度までに明らかとなった課題としては、鉄含有Li₂MnO₃系正極では電極特性の温度依存性の低減およびサイクル寿命の向上、イオン液体電解液では車載用途に対応した低温を含む温度領域でのイオン伝導特性の改善などです。

2007年度からは、得られた課題を解決すべく協力体制の強化を図りましたが、材料系によって強化の方針が必ずしも同じではありません。鉄含有Li₂MnO₃系正極では、電極特性に合成条件が強い影響を与えることから、材料メーカーとの連携を強化し、知見・ノウハウについても協力して進めています。他方、イオン液体電解液では、イオン液体に適した電池構成材料の探索を行うことに加え、格段の低粘性・低融点を示す新しい系の探索が必要に



図2 開発されたイオン液体電解液中（上）および一般の有機電解液中（下）でのリチウム金属負極の充電後の表面形態。

なり、これまでの研究で蓄積された分子構造と電解液特性に関する知見をもとに、産総研内の計算科学の専門家も参画し、基礎的な検討も強化しながら取り組んでいます。

このように、材料系の適性や研究フェーズ、課題のあり方などを考慮して、方針・体制に適宜修正を加えながら、死の谷を越えて製品化の段階に至ることを目標に材料開発を進めています。

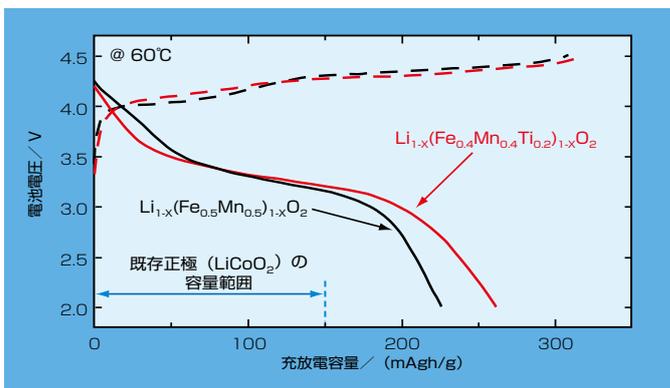


図3 開発された高容量Li_{1+x}(Fe_{0.5}Mn_{0.5})_{1-x}O₂正極の放電曲線とTiの添加効果。代表的な4V級正極(LiCoO₂)の放電容量を図中に示す。

参考文献など

- * 1 H. Matsumoto et al., Chem. Lett., 922 (2000).
- * 2 H. Sakaebe, H. Matsumoto, Electrochem. Commun., 5, 594-598 (2003).
- * 3 M. Tabuchi et al., J. Electrochem. Soc., 154, A638-A648, (2007).
- * 4 経済産業省 新世代自動車の基礎となる次世代電池技術に関する研究会報告「次世代自動車用電池の将来に向けた提言（2006年8月）」
- * 5 独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構「燃料電池自動車等用リチウム電池技術開発（02～06）」、「次世代自動車用高性能蓄電システム技術開発（07～11）」

新しい研究と開発の定義

産総研では、
経済・社会ニーズへ対応するために異なる分野の知識を幅広く選択、融合、適用する研究（第2種基礎研究）を軸に、「第1種基礎研究」から「製品化研究」にいたる連続的な研究を「本格研究」として推進することを組織運営理念の中核に捉えています。

第2種基礎研究を軸に本格研究へ！

	定義	活動	成果物
「第1種基礎研究」	未知現象を観察、実験、理論計算により普遍的な理論（法則、原理、定理など）を発見、解明、形成するための研究をいう。	発見・解明	学術論文
「第2種基礎研究」	特定の経済的社会的な必要性（ニーズ）のために、既に確立された複数の理論（法則、原理、定理など）を組み合わせて、観察、実験、理論、計算を繰り返し、その手法と結果に規則性や普遍性のある知見および目的を実現する具体的道筋を導き出すことをいう。	融合・適用	手法論文 特許 実験報告書 データベース
「製品化研究」	第1種基礎研究、第2種基礎研究および実際の経験から得た成果と知識を利用し、発明された新しい材料、装置、製品、システム、工程、サービスの事業化可能性を工学的かつ社会経済学的アプローチで具体的に検討する。	実用	事業価値

高機能3次元視覚システム VVV と応用システム

視覚は情報源

20年以上にわたって産総研の研究者だけでなく、企業からの研究者を含めて、多くの仲間と協力して独自に培ってきた高機能3次元視覚システム VVV (Versatile Volumetric Vision) を基盤技術として、基礎から応用、そして実用まで連続的で相互にフィードバックのある「本格研究」を実践しています(図1)。VVVは、多様な状況で任意の形状の立体を対象として、距離計測、形状表現、物体認識、運動追跡などの処理を実時間で高精度に実行できます。その機能の高さと適用範囲の広さにおいて、ほかに類を見ないソフトウェアシステムであると自負しておりますが、逆にまだ多くの課題も残されています。

人が利用する情報の80%以上が視覚情報だそうです。そして、人が視覚を使うとき、脳内では視覚野だけでなく脳全体が活性化することがわかっています。これは、視覚が人にとって非常に重要な情報源として、多くの活動にかかわっていることを示しています。このあたりまえの機能を工学的に実現することが課題となります。この課題の難しさは、情報処理分野全般に言えることですが、必ずしも論理だけで問題を解決することができないこと、ユーザーの目的によって解が異なる

こと、状況が変化し再現性がないこと、などが挙げられます。

視覚機能のモジュール化

これまでの技術の多くは、統計的解析に基づく2次元視覚(単眼視)による処理である一方、VVVの技術は構造的解析に基づく3次元視覚(立体視)による処理です。そして、立体を対象とする場合、2次元視覚技術では、原理的に情報が不足しているため機能的に限界があります。また、これまでの3次元視覚技術に関しては、センサ、合成(CAD)、表示(CG)の進捗に比較して、解析(図2の赤で囲んだ部分)が遅れています。VVVは、対象物として、任意の3次元形状(多面体から自由曲面体まで)でよい、表面に模様、光沢があってもよい、任意の3次元位置・姿勢でよい、不特定の背景に不特定の物体と混在してよい、部分的に隠れて見えなくてもよいなど、これまでの技術のように、機能不足を補うために観測環境や対象を限定する必要がなくなってきました。

VVVの技術は、人間の眼が必要とされる多くの作業や機械に共通的に利用でき、その支援・代行を促進できることを目指しています。これには、従来では使用がはばかられた挑戦的なフレーズがあります。「多くの」と「共

通的」です。「汎用的」と言ってもよいです。このような言い方をすると、まゆつば物と思われる保守的な土壌がおそらく現在でも産学ともにあります。そういう捉え方は、もう時代遅れにさせたいと思っていますし、実際に、最近では企業の方から要求するようになってきています。

ところで、あくまでも私見ですが、工学系で理学系の「真理」に対応するものがタスクに依存しない「機能」であると考えています。したがって、第1種基礎研究は、多くのタスクに共通的な視覚機能をモジュール化して、蓄積、整備することです。結果として、VVVは非常に多くの要素技術(機能)で構成されています。ひとつのタスクを実行するのに、すべての要素技術を実装する必要はありませんが、総合すると大規模なシステムで、現在も進化しています。

応用システムの高性能化

VVVの有効性を実証するためには、アルゴリズムを説明しても理解されるのは困難ですので、標準的な応用システム(タスク)に実装してデモすることが効果的です。また、VVVによって応用システム自体の高性能化をはかる目的もあります。具体的には、1) プログラミング不要のマニピュレータ、2) 運転不要の自律走行車、3) 番犬、介助犬、盲導犬を目指したパーソナルロボット、4) 即時的な空撮環境マップ生成システム、などを開発しています。このほか、産総研とNEDO(独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構)で開発しているヒューマノイドHRP-2の視覚を担当し、多くの展示会でほかのロボットと差別化できる3次元視覚技術を紹介しています。いわゆる「死の谷」はタスクに依存す



知識情報処理の研究開発は半世紀を経過しようとしており、私はその技術の栄枯盛衰を体験してきた世代です。今や開発すべきシステムは複雑化、大規模化しています。当初の個人プレイ型研究だけでは新規的にも規模的にもできることに限界があり、今後はチームプレイ型研究が要求される時期に来ていると考えます。また、理論に偏重し過ぎても、応用に特化し過ぎても、よい成果は生まれにくいと考えます。

富田 文明 (とみた ふみあき)
関西産学官連携センター
知的機能連携研究体長

基礎研究：基盤的な視覚機能のモジュール化



応用研究：タスクに依存する知識の体系化



実用研究：①民間共同研究、②産総研技術移転ベンチャー企業 (AVS、FAVIS)、③産学官連携コンソーシアム



図1 高機能3次元視覚システム VVV の本格研究

る知識を体系化するべき時期かもしれません。後で開発の指針として必ず役に立つと思います。

ベンチャー企業の創設・発展

分野を問わず、さまざまなニーズがあるのが視覚技術の特徴です。実用研究としては、多くの民間企業との外観検査、組み立て作業、土木測量、安全監視などに関する共同研究や技術指導のほかに、2005年11月に、既存の企業に依存しない純粋な産総研技術移転ベンチャー企業として株式会社アプライド・ビジョン・システムズ (AVS) を設立し、VVVの一部の機能の販売と多少の受託開発もできるようにしています。また、2007年8月には、事業規模として大きなFA分野（生産工程の自動化）に特化して、関西の大企業とのジョイントベンチャー企業として株式会社ファクトリービジョンソリュー

ションズ (FAVIS) を設立しています。さらに、今後予測される人手不足と、製品の多様化に起因するであろう需要の急増に対処するために、経済産業省のネオクラスター計画に関連した、多

くの企業が協力してグローバルな共同研究を実施する産学官連携コンソーシアムの設立を検討しています。このような共同研究体が本格研究の最終課題かもしれません。

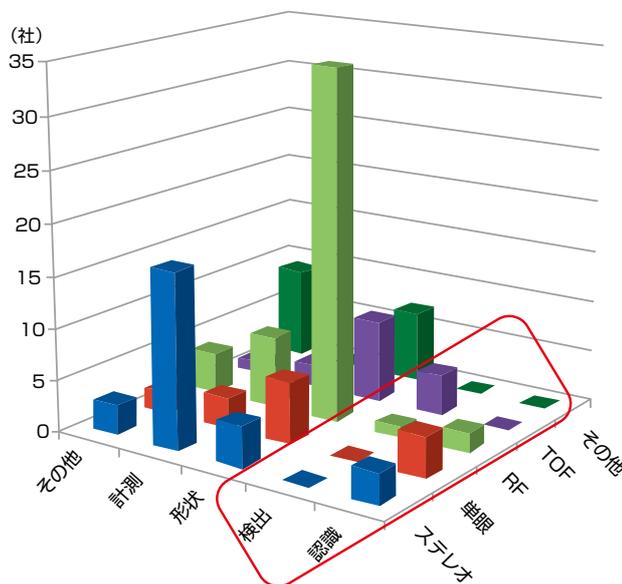
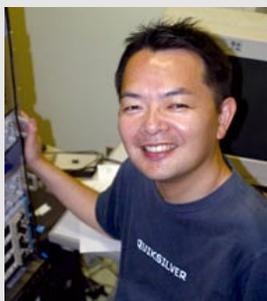


図2 3次元視覚関連商品分類調査

脳の発達には脳内コレステロール合成が不可欠

脳の発達に重要な新しいメカニズムの発見



小島 正己

こじま まさ己

m-kojima@aist.go.jp

セルエンジニアリング研究部門
主任研究員
(関西センター)

アリストテレスの時代から議論されてきた脳は、今や分子科学から認知科学までを含む「脳科学」という大きな学問に発展しつつあります。私たちは脳由来神経栄養因子 BDNF とよばれる脳の成長因子に注目しながら、分子レベルからヒトのレベルまで脳を研究し、健やかな心を育む産業の発展に貢献したいと考えています。

関連情報:

● 参考文献

The Journal of Neuroscience
27, 6417-6427, 2007

The Journal of Cell Biology
67, 1205-1215, 2004

Neuron 54, 755-770,
2007

● 共同研究者

鈴木辰吾 (科学技術振興機構)、
清末和之 (産総研)

● プレス発表

2007年6月13日「脳の発達には脳内コレステロール合成が欠かせないことを発見」

●この研究は、科学技術振興機構の戦略的創造研究推進事業・発展研究 (SORST) および文部科学省の科学研究費補助金 (特定領域研究「統合脳」) の支援を得て行ったものです。

脳機能の解明

脳機能の発達過程を解明することは、私たちの脳が健康なことの理解や脳疾患の治療のために重要です。うつ病、統合失調症、アルツハイマー病、ハンチントン病などの脳疾患に共通する機能障害として、神経伝達の変調や発達障害が指摘されています。

神経細胞におけるコレステロール代謝のメカニズムとその生理的役割

一般に神経細胞膜は、脂質2重層でできており軟らかく流動的です。この流動的な脂質2重層を大洋に見立てると、あたかも大洋に浮かぶいかだのような固い微小領域が存在し、「脂質ラフト」と呼ばれています。脂質ラフトは特にコレステロールの多い部分です。

私たちは、ラットの大脳皮質の培養神経細胞と海馬の培養神経細胞を用いて実験しました。まず、これらに脳由来神経栄養因子 BDNF (Brain-derived neurotrophic factor) を添加すると、これらの培養神経細胞のコレステロール含量が増えることがわかりました。そして、この増加は BDNF の働きを特異的に止める阻害剤によって抑制されました。

さらに、BDNF は、コレステロールを合成する酵素 (ヒドロキシメチルグルタリル-CoA レダクターゼ) やコレステロール合成経路の複数の酵素の遺伝子発現を上昇させていたこともわかりました。

さらに解析を進めたところ、まず、BDNF に

よってコレステロール量が増加した神経細胞では、シナプス伝達機能が顕著に上昇していました。つまり、電気生理学による検討で、シナプス終末において神経伝達物質を放出しうるシナプス小胞の数が顕著に増加していることが判明したのです。

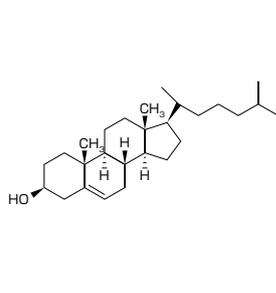
また、コレステロール量が増加した神経細胞では、神経伝達を担うタンパク質群が顕著に増加していました。つまり、BDNF によるコレステロールの増加は、神経伝達の分子基盤の増強において重要な役割を果たしていることを意味します。

そして、コレステロール合成酵素の阻害剤「メバスタチン」を添加すると、神経細胞内のコレステロールの合成量は低下し、シナプス伝達機構の成熟も著しく抑制されました。

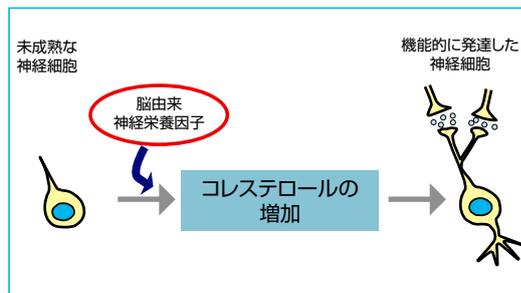
これらの結果は、(1) 神経伝達という脳の生理機能が発達するためには、神経細胞内のコレステロールの増加が重要なステップになること、(2) 神経細胞のコレステロール代謝の調節因子として BDNF をはじめ脳の成長因子類が作用していること、を示しています。

今後の展開

この発見をきっかけに、脳機能の発達とコレステロール代謝の関係をより詳しく研究し、その成果を脳の健康維持や疾患治療、創薬に役立つ技術開発に結び付けていきたいと考えています。



コレステロールの分子構造 (左) とコレステロール結合色素による神経細胞の蛍光染色写真 (右: 青く光っている部分にコレステロールが多く含まれている。)



神経細胞のシナプス機能発達のメカニズム
脳由来神経栄養因子 BDNF は、神経細胞内におけるコレステロールの合成の促進を介して、シナプス機能の発達作用を行う。

テラヘルツ帯高精度汎用計測の基盤技術

超伝導ヘテロダイン受信器の開発とガス分光への応用



菊池 健一

きくちけんいち

kikuchi.kenichi@aist.go.jp

エレクトロニクス研究部門
超伝導計測デバイスグループ
テクニカルスタッフ
(つくばセンター)

2007年4月より現職。SIS受信器を搭載した衛星からの地球大気観測ミッションに参加するなど、極低温分光検出器の開発をテーマの柱として研究を進めています。

関連情報：

● 共同研究者
神代暁、前澤正明（産総研）

● 参考文献

[1] S. Kohjiro et al., IEEE Trans. Applied Supercond., vol. 17, 355 (2007).

[2] アキリスのホームページ
<http://acqiris.tm.agilent.com>

●この研究の一部は独立行政法人情報通信研究機構の委託研究「ICTによる安全・安心を実現するためのテラヘルツ波技術の研究開発」として行われています

研究のねらい

電波と光の間であって「未利用周波数帯」と呼ばれているのがテラヘルツ帯(0.1～10 THz)です。近年、この周波数帯の電磁波を、秘匿危険物の透視や大容量無線通信に利用するなど、広範な応用を目指した研究が活発化しています。こうした応用の発展には、その基盤となる高精度で汎用性のある計測技術の確立が急務です。

超伝導ミキサ(SISミキサ)を使用したヘテロダイン受信器は、0.1～1 THz帯において、高い周波数分解能と量子論による雑音限界に迫る高感度を併せ持つほとんど唯一の分光観測器として、天文観測など限られた分野で使われてきました。私たちは1980年から培ってきた超伝導デバイスの設計・製作技術を活かして、SIS受信器の高感度・広帯域・高精度といった特長をテラヘルツ帯の汎用型計測器として実現し、さらにこの計測器を使って災害時に発生する有毒ガスの遠隔分光を行うための研究開発を進めています。

超伝導受信器の性能

図1は私たちのSIS受信器システムの構成です。観測対象から発せられるテラヘルツ信号(RF信号)と局部発振器からの基準信号(LO信号)は、ともにクライオスタット内で4 Kに冷却されたSISミキサに入射します。SISミキサからはRF信号とLO信号の差周波(IF信号)が出力され、後段のアンプで増幅された後、最終的には分光計で周波数解析されます。

広帯域性を実現するため、私たちは8個の超

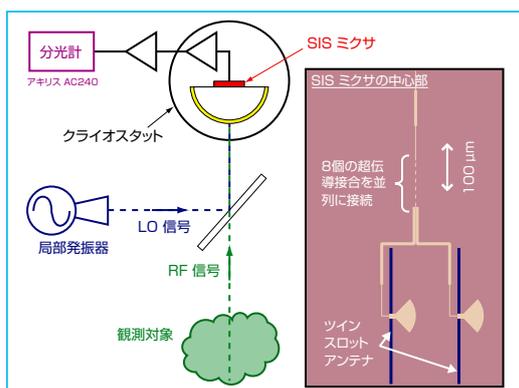


図1 SIS受信器システムの構成

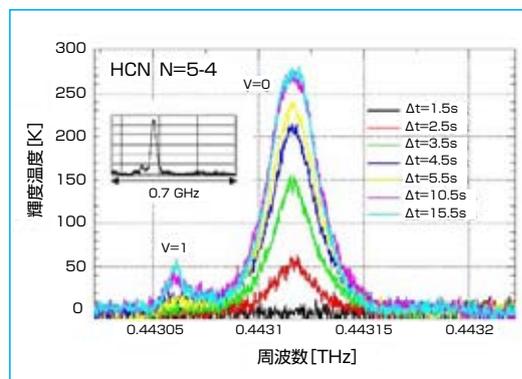


図2 アセトニトリルの放電によって発生したシアン化水素(HCN)のスペクトルの時間変化
放電開始時刻を $\Delta t=0$ とした。振動基底状態 ($V=0$) に続く振動励起状態 ($V=1$) の生成のダイナミクスを1秒以内の時間分解能で見取れる。挿入図はIF信号の全帯域を示した例である。

伝導接合を並列に配置した素子と、同相給電型ツインスロットアンテナからなるSISミキサを開発しました。その結果、3 dB比帯域(=帯域幅/中心周波数)63%(0.23～0.44 THz)という、広帯域で優れた雑音特性を示す世界でもトップクラスのSISミキサを完成しました^[1]。

また、近年のFPGA(Field Programmable Gate Array)技術の目覚ましい発展により、GHz程度のサンプリングをリアルタイムで高速フーリエ変換(FFT)する分光計が市販されています。今回、私たちはアキリス^[2]のシグナルアナライザAC240によるFFT分光計を用いて、シアン化水素から発生するテラヘルツ信号を測定しました(図2)。1秒の積分時間でIF信号の帯域(約0.7 GHz)を60 kHz程度の分解能で分光することに成功しており、輝線スペクトルの高速検出にも十分な威力を発揮することを確認しました。

今後の展開

さらなる広帯域化の実現のため、光混合技術を利用した局部発振器(photonic local)の開発をNTTと共同で進めています。そして今後は、小型冷凍機を用いた簡便な冷却系の導入など、計測器としてのシステム化を念頭に置いた研究を進める予定です。

空間立体描画技術の高性能化実験に成功

3Dディスプレイの実用化に向けて

島田 悟 しまだ さとる
主任研究員

欠端 雅之 かけはた まさゆき
主任研究員

佐々木史雄 ささき ふみお
主任研究員

木村 龍実 きむら たつみ
研究員

屋代 英彦 やしろ ひでひこ
研究員

森 雅彦 もり まさひこ
研究グループ長

鳥塚 健二 とりづか けんじ
副研究部門長

photonics-sec@m.aist.go.jp
光技術研究部門
(つくばセンター)

空間に3次元の実像を映し出すことができる「空間立体描画」技術の開発を進めながら、この技術に内在するさまざまな可能性を社会に提示していきたいと考えています。

関連情報：

● 参考文献

産総研 TODAY Vol.6 No.4
pp.16-19

● 共同研究者

木村秀尉、相田繁夫、浅野明、Songkran Jarusirisawad (株式会社バートン)、菅博文、中村俊一、久保村浩之、松岡伸一、吉井健裕、佐藤方俊 (浜松ホトニクス株式会社)

● プレス発表

2007年7月10日「空間立体描画(3Dディスプレイ)技術の高性能化実験に成功」

2006年2月7日「空中に浮かび上がる3次元(3D)映像」

3次元に立体視できる映像

株式会社バートン、産総研、慶應義塾大学は、2006年2月に、世界に先駆けて、集光レーザー光で焦点近くの空気をプラズマ化して発光させることにより、空気以外に何もない空間に、ドットからなる“3次元映像”を実像として描画する「空間立体描画」技術を発表しました。

これは、映像にスクリーンという束縛がなくなった史上初の革新的な技術です。この技術では、3次元スキャニングシステムを用いてレーザー光の焦点位置を自在かつ正確に決め、空間の任意の位置に光のドットをつくることができます。また、1ドットあたりのパルス数を制御することで、発生するプラズマの輝度、コントラストを制御できます。

高強度フェムト秒全固体レーザーシステム

一方、浜松ホトニクス株式会社は、2005年11月に、独立行政法人科学技術振興機構(JST)の委託を受け、財団法人光科学技術振興財団が実施した静岡県地域結集型共同研究事業「超高密度フォトン産業基盤技術開発」に参加して、「高強度フェムト秒全固体レーザーシステム」を開発しています。

このシステムは、繰り返し周波数1 kHz、ピーク出力0.1 TW (1 TWは 10^{12} W)、パルス幅100 fs (1 fsは 10^{-15} 秒)を実現した、世界に例のない小型で高強度な全固体フェムト秒レーザーシステムです。このレーザーシステムは、0.1兆 Wの光パルスを10兆分の1秒間、超高密度にして照射します。



新世代“立体テレビ”の想像図

空間立体描画技術の高性能化

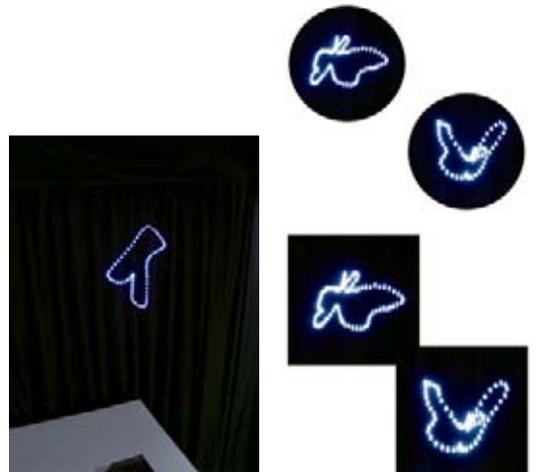
株式会社バートン、産総研、浜松ホトニクス株式会社は、それぞれの技術を組み合わせて「空間立体描画」技術を高性能化するために共同研究を開始しました。

レーザー光源部分は浜松ホトニクス株式会社が「高強度フェムト秒全固体レーザーシステム」をベースに、新しい技術のために開発した高繰り返し(1,000 Hz)で高平均出力(200 W)のレーザーを用いました。

走査系には、株式会社バートン他が川崎市産学共同研究開発プロジェクト助成事業の支援を受けて開発した3次元スキャニングシステムを使用しました。

さらに、産総研が設計した光学系をレーザーの繰り返し性能の向上に合わせて調整することで、3次元映像をスムーズに描画することに成功しました。この技術では、毎秒最高で1,000ドットを描画することができます。

1秒あたりの発光数が大幅に向上したことで、これまでに比べて3次元の描画がスムーズになり、動画表現の自由度も大きく広がりました。80年前に「イ」の字を映し出したブラウン管が、現在ハイビジョンテレビに進歩しているように、技術革新によって、これまでは概念でしかなかった“立体テレビ”など新世代の描画装置が実現のものになることを期待しています。



空間に描画した「イ」の字 描画装置による蝶々の映像 (大きさ約40 cm)

高感度で高精度な水晶振動子センサーシステム

環境汚染物質や疾病マーカー、アレルゲンなどを迅速に計測



黒澤 茂

くろさわ しげる

shigeru-kurosawa@aist.go.jp

環境管理技術研究部門
計測技術研究グループ
主任研究員
(つくばセンター)

水晶振動子を利用した環境モニタリングと健康状態モニタリング用の免疫センサーの開発に従事しています。測定現場で使えるセンサーシステムの構築を目指した研究を継続して進めていきたいと考えています。

関連情報：

● 参考文献

1) S. Kurosawa, J. W. Park, H. Aizawa, S. Wakida, H. Tao, K. Ishihara, *Biosensors and Bioelectronics* 22 (2006) 473-481.

2) S. Wakamatsu, S. Watanabe, T. Ishii, M. Koyama, H. Aizawa, S. Kurosawa, *Proc. 2007 EFTF/ IEEE FCS* (2007) 16-19.

● 共同研究者

愛澤秀信 (産総研)、小山光明、若松俊一 (日本電波工業株式会社)

● プレス発表

2007年6月14日「高感度・高精度な水晶振動子式免疫センサーシステムを開発」

● 用語解説 QCM

Quartz Crystal Microbalance (水晶振動子マイクロ天秤)。水晶振動子の電極上に物質を付着させると付着した質量に対応して発振周波数が定量的に減少する。

健康な社会、安全・安心な社会の実現に向けて

生涯にわたって健康な社会、安全・安心な社会を実現させるために、日常の健康状態のモニタリングによる健康管理が必要であり、ストレスマーカーや疾病マーカー測定用のバイオセンサーの開発が重要課題になっています。また、ダイオキシン類や残留農薬などの有害物質による環境汚染のモニタリング用にppm～ppt (10^{-6} ～ 10^{-9}) レベルで化学物質測定を行う高度な化学計測技術が必要となっています。

現在のところは、高分解能GC/MS (ガスクロマトグラフィー/質量分析法) のように大型で高価な装置、前処理を含めて熟練者による作業が必要であり、高額な分析費用、さらに試料の前処理を含めた長い測定時間を要しています¹⁾。

流路型水晶振動子式免疫センサーシステムの開発

私たちが開発した従来の流路型水晶振動子式免疫センサーシステム (QCMシステム) では、QCM上に付着する対象物の質量の変化を発振周波数に変換して測定するので、溶液中での発振周波数の安定度、周波数測定の高精度化、ノイズの低減が高感度QCM免疫センサーの構築では大きな課題となっていました。

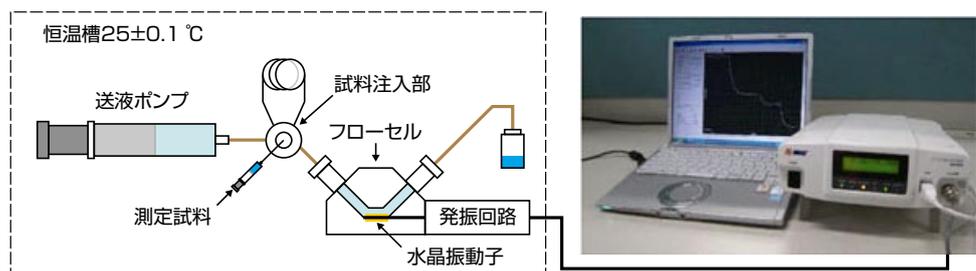
今回、産総研独自で培った、ダイオキシン類のQCM式免疫反応測定技術、流路型QCM測定技術と、日本電波工業株式会社 (NDK) の宇宙用などの特殊な高精度水晶振動子に関するノウハウや高性能な低位相雑音回路技術を融合して、従来のQCMシステムでは計測できなかった低濃度試料や、より分子量の小さい抗原を測定する高精度・高感度のQCM式免疫反応測定システムを開発しました。

課題となっていた溶液中での水晶振動子の発振周波数の安定度は、QCM免疫センサー用に設計した水晶振動子と特殊低雑音回路によって、これまでに比べて1桁以上改善し、しかも、従来にはない10 mHzの周波数精度で計測ができる高感度・高精度・迅速な技術を確立しました。

最も標準的なELISA測定条件での測定結果とこのQCMシステムとを比較したところ、抗原であるヒトグロブリン (IgG) を固定化したQCMに対して、抗IgG免疫グロブリン抗体濃度を100 $\mu\text{g/mL}$ から100 ng/mL の濃度範囲で測定し、Dose-Responseの濃度に対する直線性を確認しました。この濃度範囲は、採血で得られた血液中の免疫グロブリンをモニタリングするには十分です。また、このQCMシステムは、ELISA法の測定結果と良い相関性を示すとともに、ELISAの測定時間の60分に対し、10分以下の短時間で分析ができるようになりました²⁾。

今後の展開

今後は、代表的な分析対象ごとに現場でのオンサイト測定が行えるQCMシステムの研究を進めていきます。特に、この研究分野で大きな議論点となっている溶液中での各種の生体由来分子のQCM上への吸着量と発振周波数変化量との関係を、放射性同位体標識タンパク質を用いて明らかにし、その動作原理と動作範囲を生体分子ごとに確証します。また、QCM上での免疫反応時の発振周波数の変化量についても、同様の放射性同位体標識抗原や抗体を用いて、タンパク質吸着量と発振周波数の変化量との関係を明らかにしたいと考えています。



流路型水晶振動子式免疫センサーシステム構成図

赤外放射計測機器に対する適合性評価

電磁波試験用参照熱源およびその試験方法

特許 第 3692406 号
(出願 2003.4)

● 関連特許
出願中 : 国内 1 件

研究ユニット:

計測標準研究部門

適用分野:

- 電磁波試験
- 赤外線式体温計
- 黒体炉

目的と効果

赤外放射計測機器が電磁波を受けた場合、誤動作なく作動するかどうかの適合性の評価をすることを目的として、参照熱源とその試験方法を開発しました。一般的な参照熱源は、金属製の材料や電気ヒーターなどで構成された黒体炉のため、的確に電磁波試験を実施するのは不可能でしたが、金属材料や電気回路を使用しない参照熱源を開発することにより、電磁波試験の実施を可能にしました。

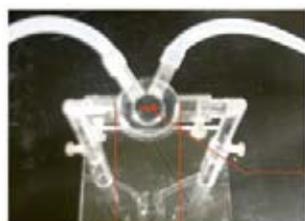
技術の概要、特徴

一般に、赤外放射計測機器用の参照熱源には、金属製の高放射率の黒体空洞を使い、その黒体空洞を電気ヒーターなどで温度制御する「黒体炉」が使われています。このように構成された黒体炉システムは、高い温度安定性・信頼性を持っているのですが、電磁波試験を行う場合には黒体炉システム自体がその電磁波を乱してしまいます。さらに、試験に用いる電磁波の影響により、黒体炉の正常な温度制御が困難となるケースも想定され、赤外放射計測機器を正しく

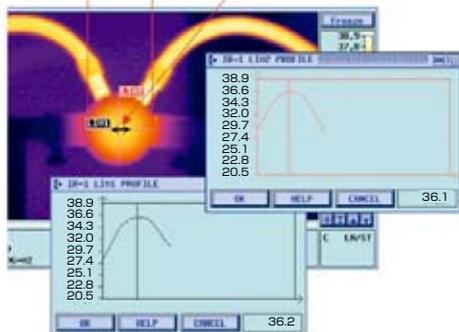
評価することができなくなります。そこで、金属材料や電気回路を使わず、構造材料として透明樹脂を採用した参照熱源を開発し、動作中の赤外放射計測機器の電磁波試験を可能としました。使用する樹脂材料は、可視光領域では光学的に透明ですが、赤外放射計測機器が観測する熱赤外波長域では吸収が強く、放射率が高いという特徴を持っています。また、本参照熱源は水やオイルなどの液体を熱媒体とした精密な循環恒温槽装置と組み合わせて温度制御を行っています。これにより、37℃相当の輝度温度において、50 mK以下の温度安定性を容易に実現することができます。

発明者からのメッセージ

赤外線式(耳式)体温計に対して、電磁波試験の実施は非常に重要です。日本をはじめ、ヨーロッパ、米国の規格では当試験を必須としています。さらに、今後、当試験法はISO規格にも盛り込まれる予定であり、世界的に必要な条件となります。従って、この発明は有用性が極めて高いものです。



直径1.74 mmの範囲において、 p - p が1℃



参照熱源の外観とその温度分布



熱媒体の流れ



赤外線式体温計における電磁波試験の風景

知的財産権公開システム (IDEA) は、皆様に産総研が開発した研究成果をご利用していただくことを目的に、産総研が保有する特許等の知的財産権を広く公開するものです。

IDEA

産総研が所有する特許のデータベース
<http://www.aist.go.jp/aist-idea/>

キャビテーション気泡観察装置

光散乱法測定における簡易位置合わせおよび気泡観察を可能に

特許 第 3834611 号
(出願 2001.8)

研究ユニット：

先進製造プロセス研究部門

適用分野：

- キャビテーション気泡のモニタリング
- 光散乱法測定における位置合わせ装置

目的と効果

キャビテーションによる微細気泡の径変化の測定は、光散乱法で行われています。しかし、光散乱法は装置の光軸合わせが難しく、かつ測定値は相対値であるという問題があります。この装置を用いると、対象とする気泡をカメラで確認できるため、光軸合わせが容易になります。また、カメラによる気泡像から気泡径の絶対値を測定することで、光散乱法による測定データを気泡径の絶対値に変換できるようになります。

技術の概要、特徴

気泡観察のためのストロボ光と、光散乱法による気泡径の測定のためのレーザー光の波長が異なることを利用して、同一のレンズを用いて気泡観察と光散乱法の同時測定を可能としました。受光部は、高倍率のレンズの後にビームスプリッターを挿入して、光を2方向に分岐します。そして、光路の一方に気泡観察用の CCD カメラを接続し、他方に光散乱測定用の PMT (Photomultiplier)

Tube：光電子増倍管(高感度の光センサ))を接続します。こうすることで、PMT 上に入射する光をカメラで観察することができます。すなわち、カメラで気泡が観察できるように位置を合わせることで、同時に光散乱法の測定のための光学系も合わせることができます。また、必要に応じて、気泡観察に用いる光のみを透過する光学フィルタを、ビームスプリッターとカメラの間に挿入します。このフィルタを挿入した場合、散乱光の像は見えなくなりますが、気泡形状の観察および気泡の大きさの測定が可能となります。

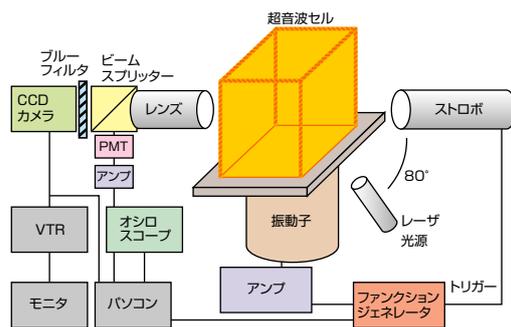
発明者からのメッセージ

光散乱法で気泡径を測定する実験において、気泡が実験ごとに微妙に移動して困っていました。この技術は、そのような状況下での光学系の位置合わせを容易に行うために発明しました。なお、キャビテーション気泡の観察に限らず、光散乱法全般の位置合わせに用いることができます。

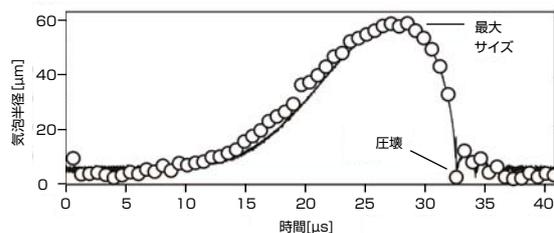
Patent Information のページでは、産総研所有の特許で技術移転可能な案件をもとに紹介しています。産総研の保有する特許等のなかにご興味のある技術がありましたら、知的財産部門、産総研イノベーションズまでご連絡なくご相談下さい。

産総研イノベーションズ

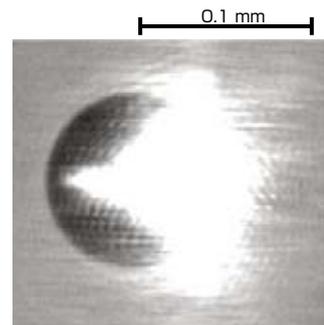
(経済産業省認定 TLO)
〒 305-8568
つくば市梅園 1-1-1
産業技術総合研究所
つくば中央 2
TEL：029-861-9232
FAX：029-862-6159
E-mail：aist-innovations@ma.aist.go.jp



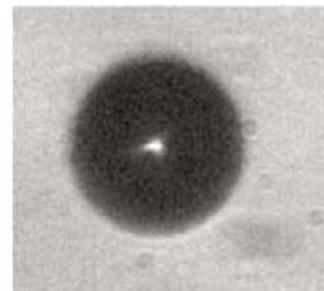
装置構成図



画像処理および光散乱法による気泡径の変化



(a)気泡像と散乱光像



(b)ブルーフィルタで散乱光を除去した気泡像

CCDカメラで撮影した気泡像

AFMによる二次元グレーティングの校正

精密ピッチ計測法の開発とその展開



菅原 健太郎

すがわら けんたろう

sugawara.k@aist.go.jp

計測標準研究部門
長さ計測科 幾何標準研究室
研究員
(つくばセンター)

2005年に入所後、原子間力顕微鏡や電子顕微鏡を用いた精密計測に従事しています。基礎研究の分野から、計量標準や校正技術といった産業界とつながりのある分野に携わるようになり、正しく校正された装置によって定量的に信頼性のあるデータが生み出されることの重要性を強く認識しています。

関連情報：

● 共同研究者

佐藤 理、三隅 伊知子、権太聡 (産総研)

● 参考文献

[1] 権太聡, 産総研 TODAY Vol.7 No.5 p.19

[2] S. Gonda, et al., Rev. Sci. Instrum. 70 (1999) 3362.

[3] 三隅 伊知子, AIST TODAY Vol.2 No.1 p.15

[4] 佐藤 理, 産総研 TODAY Vol.6 No.3 p.20

● 用語説明

※ナノメートル
nm: 10億分の1メートル

ナノメートルの精密計測学

ナノメトロロジー (Nanometrology) とは、ナノメートル*オーダーの大きさのものを正確に計測する研究です。電子回路の微細化が進む半導体製造工程では、現在、光の波長よりも小さな100 nm以下の回路パターンをシリコンウェハ上に作製しています。品質管理のためには回路寸法を正確に計測する必要がありますが、パターンが小さくなればなるほど計測値の信頼性・再現性などの計測精度に対するハードルは高くなり (1 nm以下の計測精度が求められる)、ナノメトロロジーの重要性が大きくなっています^[1]。

原子間力顕微鏡 (AFM: Atomic Force Microscope) は、鋭利な探針 (先端の曲率半径が10 nm程度) で試料表面を走査することにより、その形状をナノメートルオーダーで計測する顕微鏡です。その計測精度は、探針走査時のXYZ3軸方向の移動距離を正確に計測する装置の開発^[2] や計測データの解析法の考案^[3, 4] などにより、原子数個分の精度 (不確かさ) に到達しています。

精密なナノのものさしへの応用

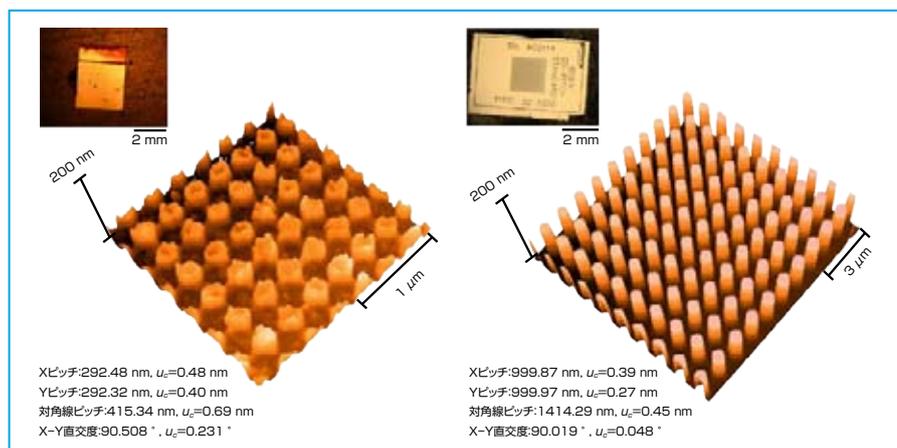
AFMによる精密計測技術は、人工的なパターンが刻まれた構造体「ものさし」に正確な目盛りを与える作業 (校正) へ応用されています。精密計測によって高精度な目盛りが保証された「ものさし」は、各種の精密計測器や精密加工装置

のスケール校正に必要不可欠です。産総研では、これまで一次元グレーティング^[3] や段差試料^[4] へのピッチ値や段差値の値付けの校正サービスを行ってきました。さらに今回開発した二次元グレーティング (図) を使うことで、XY2軸同時のスケール校正のほかに、X-Y軸の直交度の校正ができます。

二次元グレーティングの精密計測技術

私たちは、一次元からの拡張技術として、二次元グレーティングの精密ピッチ計測法を新たに開発し、校正サービスを開始しました。値付けの方法は、X方向ピッチ、Y方向ピッチ、そして対角線方向ピッチを計測して、この3つのピッチ値から三角形の余弦定理を用いてX-Y直交度を求めるものです。ナノの計測精度を実現するキーポイントは、①探針の走査方向とパターン配列方向を角度0.1°以下の回転角度で一致させる高精度なアライメント調整、②パターンに対して0°、45°、90°の3方向からの探針走査により3つのピッチ値の精密計測、③パターン形状の不均一さ (数10 nm) の影響を受けにくい解析法の開発、の3点でした。

今回の研究開発により、XYピッチ値とX-Y直交度をそれぞれ長さ1 nm、角度0.1°以下の不確かさで値付けする計測技術が実現できました。また、別の測定手法である光回折計^[1] によるピッチ計測を行い、その結果と比較して、この計測技術の信頼性・妥当性を確認しています。



二次元グレーティングのAFM像 (ピッチ値 300 nm と 1,000 nm)

(注) u_c は合成標準不確かさを表す。

タイ王国 国家計量標準機関(NIMT)の設立支援

計量標準総合センター 国際計量室

認定審査

シリーズ第3回では、タイ王国に日本の専門家を派遣し、本邦研修の習得状況の評価と補足研修を行うためのフォローアップ研修について紹介しました。フォローアップ研修は、2007年9月上旬に派遣した専門家によってプロジェクトで計画した42の標準量目の技術移転を終了しました。

今回は、プロジェクトの最終目標である認定審査について紹介します。

計量標準は、国の技術基盤や社会基盤に限らず、経済基盤としても重要な役割を果たしています。計量標準は貿易の自由化の1つのツールとして重要です。計量標準を要として構成されたOne Stop Testing Systemを活用することにより、輸出する国で生産された製品の試験と検査を輸出前に行えば、輸入する相手国では、あらためて製品の試験や検査をしなくても受け入れることができます。

輸出入の簡素化を図るためには、計量標準を維持管理・供給する国家計量標準機関をトップに、計量標準を産業界に供給する校正機関と、生産された製品が国際工業規格や国内の工業規格に適合しているかの試験を行う適合性試験所で構成されているOne Stop Testing Systemが必要です。そして、これらの計量標準機関や試験所は、技術能力に関する基準の国際的な調和のもとで、認定機関が国家計量標準機関、校正機関や適合性試験所を適正に審査し、国際的に承認できることを証明することが義務づけられています。このようなシステムが完成すれば、次のようなことが期待されます。

1. 産業界は、認定された計量標準を利用して製品を製造し、製品を適合性試験所で試験することにより、貿易の自由化の道が拓けます。
2. さらに、高品質の製品を作ることができるようになります。
3. 生産性の向上にも役立てることができます。

このため、タイ王国に技術移転した計量標準も認定機関の審査を受けることとし、技術移転した計量標準の認定審査をIAJapan（製品評価技術基盤機構認定センター）とNMIJ（産総研計量標準総合センター）に依頼し、国際的に通用する計量標準の整備を図ってきました。

プロジェクトでは、認定審査を受ける前に校正手順書の専門家をNIMTに派遣し、校正サービスに不可欠な条件がISO/IEC17025の規定にしたがって手順書が作成されているかどうかの確認と修正を行い、その後、NIMTは認定審査の申請を行います。

これまでに4回の認定審査が行われ、音響標準、振動標準、加速度標準、直流高電圧標準、時間・周波数標準、波長標準、内径/外径標準、真円度標準、平面度標準、粗さ標準、角度標準、ロックウエル硬さ標準、pH標準液、pH標準について認定証の交付を受けました。また、2007年10月上旬から5回目の認定審査を実施しており、10月末までに交流電力標準、高周波減衰量標準、高周波電力標準、高周波電圧標準、CMM（三次元測定機）、湿度標準を含め、延べ20の標準の認定審査を終了しました。

そして、群管理抵抗標準、量子ホール抵抗標準、磁界標準、磁束標準、レーザパワー標準、標準尺、力標準、大容量質量標準、圧力標準、ビッカース硬さ標準、強度・全測光標準、分光放射照度標準、放射温度、温度定点の15の標準についてはプロジェクトを1年間延長して、当初の目標を達成することにしています。

これによって、NIMTは、アセアン地域で最も多くの計量標準を整備し、国際的にも信頼できる、名実ともにアセアン地域最大の国家計量標準機関になります。NIMTは、タイ国内の産業界に標準を供給するだけでなく、アセアン地域の国家計量標準機関に技術指導を行うことや、標準を供給することが期待されています。



品質システムの認定審査



CMMの校正手順書指導



理工学および生命科学などの研究分野に携わり、その研究成果が実用化される等、茨城県内の科学技術振興に寄与し、今後飛躍的な研究成果が期待できる研究者に対して茨城県科学技術振興財団が授与するものです。

今年度のつくば奨励賞若手研究者部門は、生物機能工学研究部門 機能性核酸研究グループ長の富田 耕造氏に授与されました。

富田 耕造 kozo-tomita@aist.go.jp
生物機能工学研究部門 機能性核酸研究グループ長（つくばセンター）

【受賞の功績】

鋳型を用いないRNA 合成酵素の分子構造基盤研究

研究の背景

生命は長い年月を経て、核酸の鋳型を用いてそれに相補的な核酸を合成する鋳型依存的な核酸合成システムを構築してきました。一方で、生体内では核酸性の鋳型を用いることなく、核酸を合成するシステムも存在しますが、その分子メカニズムは長年の謎です。DNA上の情報は塩基の相補性にしたがってRNAへと忠実に写し取られますが、その後、RNAの末端にはDNA上に記載されていない配列が付加、合成されることが古くから知られていました。この鋳型に依存せずに合成されるRNA配列が遺伝子発現において重要な役割を果たしていることが近年、ますます報告されてきています。

研究の概要

生体内でのタンパク質合成システムにおいて重要な役割をはたす転移RNAの末端には普遍的にCCA（シチジン-シチジン-アデノシン）という配列が存在します。この配列は、翻訳システムにおいて重要な役割を果たしており、CCA付加酵素という酵素によって、付加されます。この酵素は、核酸性の鋳型を用いることなく定まった配列を合成することができるユニークな酵素であり、30年以上、その分子機構は謎でした。

CCA付加酵素の複合体の構造解析に世界で初めて成功

真正細菌由来のCCA付加酵素-RNA-付加されるCCAヌクレオチドの三者複合体の構造を決定し、CCA付加酵素がRNAを合成する瞬間のスナップショットを捉えることに成功しました。これは世界で最初の鋳型非依存的なRNA合成酵素の三者複合体構造の報告となりました。構造解析および構造に基づいた50以上の変異体酵素の生化学的解析を行い、この酵素のヌクレオチドの選択がRNAとタンパク質との協同で行われていることを新たに発見しました(Tomita et al, Nature, 2004)。

CCA付加酵素によるCCA付加反応の時間分解動画の作製に成功

古細菌由来のCCA付加酵素がRNAの末端へ核酸性の鋳型を用いずヌクレオチドをひとつずつ付加していく様子の各反応ステップ（開始、伸張、終結）の複数の構造決定に成功しました。この一連のRNA重合反応の“時間分解動画”から、この酵素の反応性、および特異性が酵素とRNAとの動的な協同で規定されていることを新たに発見しました。これにより、30年以上にわたり謎であったCCA付加酵素のユニークな分子機構を目で見える動画で提示し、解明しました(Tomita et al, Nature, 2006)。

今後の展望

鋳型非依存的なRNA合成は生体内における遺伝子発現制御に重要な役割を果たしているという報告が増えています。今後はこれらの鋳型非依存的なRNA合成プロセス装置複合体の分子機構の全解明によって、RNAとタンパク質の協同的な機能発現の分子基盤の提示、およびその機能発現システムの分子進化基盤が明確になっていくと期待しています。



CCA付加酵素とRNAの複合体構造
(左：古細菌、右：真正細菌由来)

「ナノテクディベート2 ～ナノテクはどのように伝えられているか～」を開催 報告

8月23日、産総研臨海副都心センターにおいて産総研技術情報部門主催による「ナノテクディベート2 ～ナノテクはどのように伝えられているか～」を開催しました。

市民の科学技術に関する情報ソースのほとんどは新聞やテレビなどのマスメディアです。しかし、情報がどの程度正確に伝えられているのかは疑問です。そこでまず「メディアから見たナノテクノロジーについて」や「リスク報道の課題について」を取りあげ、討論を行いました。

討論を通じ、市民の科学リテラシー向上のためには、市民が情報を得やすい新聞やテレビといった報道をどのように活用すればよいのか、メディア、研究者、事業者、市民がなすべきことがそれぞれ見えてきたように思われます。

また、私たちが発信する情報も簡潔で分かりやすいものにしていかなければと思ひ、これまでのレポートといった活字ではなく、今回は討論の様子をビデオ撮影し、動画の配信を行っています (http://unit.aist.go.jp/techinfo/ci/nanotech_society/)。



ディベートの様子

私たちは、これからもこういった活動の成果を確認しながら、ディベートのさらなる充実とともに、より有効な情報発信のあり方を考えていきます。

中国の「JAPAN フェア in 広州」へ出展 報告

9月15日から18日にかけて、「JAPAN フェア in 広州」(主催：経済産業省、独立行政法人 日本貿易振興機構(ジェ



産総研ブース(光触媒、バイオサーファクタント、難燃性 Mg 合金を展示)

トロ)ほか)が広州国際会議展覽中心において開催されました。

このフェアは本年4月、安倍総理(当時)と温家宝國務院総理の日中首脳会談で「第4回中国国際中小企業博覧会」に日本が主賓国として参加することが合意され、同博覧会におけるフェア・イン・フェアとして開催されたものです。30万人を超える来場者のなか、日本の企業・大学・自治体など450を超える法人などが参加し、中国市場への日本製品・サービスの参入、現地日系進出企業による現地販路拡大などの促

進に向け、展示とその宣伝を行いました。またフェア開催期間中、「中国知的財産セミナー」など対中国ビジネスに役立つ講演会・セミナーも併せて開催されました。

産総研は、ブース出展を行い、中国における産総研の知名度向上を図るとともに、中国への技術移転の可能性を探りました。産総研出展技術への関心は高く、多くの来場者が熱心に技術説明を聞くなど、今後の連携の可能性が期待されるフェアでした。

バイोजパン2007へ出展 報告

9月19日から21日の3日間、「バイोजパン2007」がパシフィコ横浜で開催されました。バイोजパンは、多くのバイオテクノロジー関連組織が参加する、国際バイオ総合イベントです。主催者の発表によれば、この3日間の来場者数は延べ1万6千人に達し、テーマであるオープンイノベーションを意識した多くのビジネスマッチングが行われました。

産総研ではバイオ関連企業とのマッチングを目指して、16件の展示を行い、

さらにその中から4件「薬剤包接・徐放に新たな道を開く“オーガニックナノチューブ AIST®”」、「バイオサーファクタントの量産と機能開拓」、「NMR-メタボリック・プロファイリング法の応用と展開」、「レーザで駆動するディスプレイブルサンプルインジェクター」についてのワークショップ講演も行いました。多くの見学者が訪れ、講演後には展示担当者への相談や試料の提供依頼などもあり、手応えを感じました。また、展示会全体を通し、来

場者に加え、他の出展者との交流もあり、有意義な機会となりました。



産総研ブース(健康産業創出分野など16件を展示)

厨川 道雄 顧問 アルゼンチン科学アカデミー会員に認定

報告

地圏資源環境研究部門 厨川 道雄顧問がアルゼンチン科学アカデミー会員に日本人として初めて認定され、9月10日にアレハンドロ・アルビア総裁からブエノスアイレスにおいて認定書が授与されるとともに、記念講演を行いました。

アルゼンチン科学アカデミーは、1874年に「科学の発展・開発・普及を促進するため」に設立され、会員には、国内会員と海外会員とがあり、アルゼンチンで科学および工学の分野において顕著な活動を行った者を会員としています。会員には、アルゼンチンのノーベル賞受賞者3名も含まれており、またアルゼンチンで研究活動を行ったアルベルト・アインシュタインも海外会員でした。

厨川顧問は、2001年5月から2005年3月までアルゼンチンにおいて、JICA（独立行政法人 国際協力機構）の「産業公害防止プロジェクト」にチーフアドバイザーとして参加しました。

この間、国立水研究所・水利用技術センターに対して環境分野における研究のレベルアップ（若手研究者の育成やISO 14025の取得など）を図るとともに、アルゼンチン国内において多くの汚染現場の調査を実施し、その対策を提言してきました。例えば、リオガジェゴス市の水質汚染調査を行って汚染の実態を明らかにし、この調査結果に基づいてリオガジェゴス市は工場排水などの対策を行いました。また、環境問題の解決のためには、環境教育が重要との認識から、アルゼンチン各地



アレハンドロ・アルビア総裁からディプロマを授与される厨川顧問

においてセミナーを実施しました。

厨川顧問は、今回の受賞は「多くの関係者の協力があったこそこの賜」であり、今後「アルゼンチンを訪問する機会を捉え、環境分野における科学教育を通して、アルゼンチン科学アカデミーに貢献したい」と述べています。

タイ NSTDA、TISTR およびベトナム VAST とのワークショップ報告

報告

10月1～2日に、タイにおいて研究協力に関するワークショップが開催されました。タイの国家科学技術開発庁（NSTDA）、タイ科学技術研究院（TISTR）とは2004年にそれぞれ包括研究協力協定を結んでいます。特にNSTDAのサッカリンド長官は産総研の運営諮問会議のメンバーであり、また吉川理事長がNSTDAの国際アドバイザーボード議長を務めるなどの密接な関係があります。

今回のバンコクでの第5回ワーク

ショップではNSTDAによる研究クラスターの分類に従って、共同研究テーマを3つのセッションに分けて討論し、将来の研究展開・プロジェクト化計画などをまとめました。また、「研究開発マネジメントと連携」のセッションを設け、2日間にわたりお互いの経営戦略やイノベーション戦略、TLO、産学官連携、評価などを紹介しました。産総研の事例についてタイ側からは強い関心が寄せられました。次回以降もこの分野でさらに意見交換を深めていきます。

また、10月4～5日にはハノイでベトナムの中核的研究機関であるベトナム科学技術院（VAST）との第4回ワークショップを開催しました。VASTとはやはり包括研究協力協定を結んでおり、交互にワークショップを開催しています。「バイオマス・新エネルギー」、「IT」、「環境」、「GEO Grid及び持続的発展のための海洋地質及び陸海相互作用」のセッションに分かれて研究報告、



第4回日越ワークショップで、排水処理に関するMOUに調印する原田部門長（前列中央）。後列に、曾良副理事長と山崎理事、ソン VAST 副院長ほか。

将来計画などを議論しました。また、今年度採択された独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構の提案公募型プロジェクト（染色排水処理）に参加する企業、大学からの関係者も参加し、ベトナム側と具体的な実施について議論を行いました。これを踏まえてプロジェクト実施の担当者である原田 晃 環境管理技術研究部門長とVAST化学技術研究所のロック所長および環境技術研究所のドン所長との間でMOUを締結しました。今後のプロジェクトの進展が期待されます。



第5回日タイワークショップオープニングセレモニー 左から サッカリンド NSTDA 長官、曾良副理事長、ノンラック TISTR 理事長

第22回 産総研・技術情報セミナー

お知らせ

産総研では、研究開発の推進に有用な、企業・諸機関の研究開発に関わる戦略、国の技術政策、技術予測などについての最新情報を紹介する「産総研・

技術情報セミナー」を開催しています。今回は、「公的研究機関の長期的存在価値」について、産総研運営諮問会議委員のレスター氏と小野理事から話

題提供していただきます。

参加ご希望の方は、11月27日までに参加申込URLからお申し込みください。

日時：2007年11月30日（金）13:30～16:50
 場所：東京都千代田区丸の内2-5-2 コンファレンススクエア エムプラス（三菱ビル）1F サクセス
 プログラム：13:35～15:05 「公的研究機関の存在価値」 マサチューセッツ工科大学 MIT 産業生産性センター長 Richard K.Lester
 15:15～16:45 「国立研究機関の存在価値」 産総研 理事 小野 晃

参加申込 <http://unit.aist.go.jp/techinfo/ci/dep/seminar/seminar22>

環境報告書2007の発行

お知らせ

平成18年度の事業活動における環境配慮の状況等を取りまとめた「環境報告書2007」を刊行しました。

冊子をご希望の方は、右記あてにご連絡を戴きましたら、お送りします。

また、報告書についてのご意見・ご感想をお寄せいただければ幸いです。

なお、平成19年9月28日より産総研のホームページ上でも公表しています。

連絡先：産総研 環境安全管理部
 電話：029-861-2124
 FAX：029-861-2125
 E-mail：safe@m.aist.go.jp

http://www.aist.go.jp/aist_j/unit/sep/env/e_repo/



訂正

2007年9月号の特集ページ中に誤りがありました。下記の通り訂正いたします。

Vol.7 No.9 P.2 特集 「未来を見つめるエレクトロニクス」

(誤) ユビキタス社会を支える次世代ハードディスク

(正) ユビキタス社会を支える次世代ハードウェア

EVENT-Calendar

イベントの詳細と最新情報は、産総研のウェブサイト（イベント・講演会情報）に掲載しています
<http://www.aist.go.jp/>

2007年11月→2008年1月

10月10日現在

期間	件名	開催地	問い合わせ先
11 November			
3～4日	The Interface between Statistical Causal Inference and Bayesian Networks	横浜	06-6850-6486
5～7日	システム検証の科学技術シンポジウム	名古屋	06-4863-5022●
8～9日	IEEE国際ワークショップ「3次元積層のための低温接合」	東京	03-5841-6491
15日	明日の関西会議 ベンチャー 2007 KANSAI	大阪	072-751-9606●
16～18日	マイクロマウス2007（全国マイクロマウス大会）	つくば	03-3756-8564
20～22日	日本第四紀学会創立50周年記念国際シンポジウム	つくば	042-677-2592
22日	計測標準フォーラム	東京	029-861-4120●
22日	システム設計検証技術研究会	大阪	06-4863-5022●
28～30日	2007産学官技術交流フェア	東京	03-5644-7221
30日	産総研・技術情報セミナー	東京	029-862-6122●
12 December			
3～4日	感覚代行シンポジウム	東京	029-861-6716●
5日	産総研研究講演会 in 中部 産総研ライフサイエンス研究シーズ発表	名古屋	029-862-6147●
6～8日	アジアバイオマテリアル会議	つくば	029-860-4490
7日	産総研 環境・エネルギー分野シンポジウム	東京	029-861-8942●
12日	計算科学シンポジウム	東京	029-861-3170●
13～14日	界面ナノアーキテクトニクスワークショップ	つくば	029-861-4460●
20日	ミニマルマニュファクチャリングシンポジウム	東京	029-862-6057●
26～28日	ウィンター・サイエンスキャンプ（産総研会場） 生きていることと生きること	大阪	03-3212-2454

●は、産総研内の事務局です。

システム検証技術の現場導入への取り組み

システム検証研究センター 自動検証研究チーム 高井 利憲

社会の隅々にまで浸透したコンピューター。日々の生活が便利になるだけでなく、さまざまな社会基盤に組み込まれているため、現代人の生活には欠かせないものになりました。一方で、情報処理システムの不具合が、社会に深刻な影響を及ぼす事態も起きています。高井さんのチームは、システムの不具合を科学的に発見する技術の開発を目指し、民間企業と連携して研究に取り組んでいます。高井さんは、実際のソフトウェア開発の現場に数理的技法を適用するとともに、項書換え系とよばれる計算モデルの研究も行っています。



サーバー室での様子



高井さんからひとこと

項書換え系は、計算をいくつかの規則による式の「書換え」と見なすことにより、その性質を研究する計算モデルで、システム検証も重要な応用分野のひとつです。枠組みは単純なのに、奥の深い考察ができるところが研究の面白いところです。また、企業との共同研究では、項書換え系だけではなく、もう少し応用に近いモデル検査という数理的技法をソフトウェアの開発現場に適用しています。そこでは、理論研究の成果を実際の社会に適用するときの「大きな壁」を感じると同時に、「小さな成功」でも、その効果の広がり到手応えを感じています。

産 総 研
TODAY

2007 November Vol.7 No.11

(通巻82号)

平成19年11月1日発行

独立行政法人
産業技術総合研究所編集・発行
問い合わせ独立行政法人産業技術総合研究所
広報部出版室

〒305-8568 つくば市梅園1-1-1 中央第2

Tel : 029-862-6217 Fax : 029-862-6212 E-mail : prpub@m.aist.go.jp

ホームページ

<http://www.aist.go.jp/>

● 本誌掲載記事の無断転載を禁じます。 ● 所外からの寄稿や発言内容は、必ずしも当所の見解を表明しているわけではありません。

