

AIMR

research

RESEARCH HIGHLIGHTS

A publication of the WPI-
Advanced Institute for
Materials Research

2024



MESSAGE FROM THE DIRECTOR

ごあいさつ

RESEARCH HIGHLIGHTS

Ordered carbonaceous frameworks: A strategy for tandem catalyst design 規則性炭素化合物構造体: タンデム触媒設計の新戦略	05
Topological phases: Exploring interactions in non-Hermitian many-body systems トポロジカル相: 非エルミート系で相互作用の影響を探究する	07
Organic semiconductors: Methylation for controlling acene crystal structure 有機半導体: メチル化によるアセン化合物の結晶構造制御	09
Metal alloy processing: Breaking the strength-ductility trade-off 金属合金加工: 強度と延性のトレードオフを打破	11
2D transition metal dichalcogenides: Elucidating the interplay between fermiology and exotic quantum phases 2D遷移金属ダイカルコゲナイド: フェルミオロジーとエキゾチック量子相の相互作用の解明	13
Complex borohydrides: Exploring the factors controlling anion reorientation 錯体水素化ホウ素化合物: 陰イオンの再配向を制御する要因の解明	15
Janus TMD nanoscrolls: Breaking the spatial inversion symmetry of one-dimensional crystals ヤヌス遷移金属ダイカルコゲナイドのナノスクロール: 一次元結晶の空間反転対称性を破る	17
Topological data analysis: Unveiling heat conduction in amorphous germanium トポロジカルデータ解析: アモルファスゲルマニウムの熱伝導性を解明	19

Bilayer graphene: Quantum-device design enables high-frequency electronic characterization 二層グラフェン: 高周波電子物性評価を可能とする量子デバイス設計	21
Metallic glass crystallization: Unraveling polymorphic growth near glass-transition temperature 金属ガラスの結晶化: ガラス転移温度近傍における多形成長メカニズムの解明	23
Chiral sensors: Advancements through hybrid silica nanohelices キラルセンサー: ハイブリッドシリカナノヘリックスがもたらす進展	25
Breaking the energy barrier: Advancements in phase-change memory technology 消費エネルギー障壁の打破: 相変化メモリの技術革新	27
Spintronics: Bi/Co bilayers untangle spin currents スピントロニクス: ビスマス/コバルト二層膜におけるスピン流の原理解明	29
Lithium-oxygen batteries: High-energy, durable graphene-mesosponge cathodes redefine performance potential リチウム空気電池: 高エネルギー密度と高耐久性を誇るグラフェンメソスポンジ正極が、電池性能の新たな可能性を切り拓く	31
Neural research: A leap forward with hydrogel technology and modular networks 神経科学研究: ハイドロゲル技術で実現したモジュール構造型ネットワークで研究が飛躍	33
Biomass-derived electrocatalysts: A leap towards sustainable energy conversion バイオマス由来の電極触媒: 持続可能なエネルギー変換への大きな一歩	35
Decoding doubly periodic weaves: A new era in topological classification 二重周期織り込み構造: 織り込み構造の新たなトポロジー分類	37
Antiferromagnets: Micro-ARPES uncovers exotic NdSb surface states 反強磁性: マイクロARPESで明らかになったNdSb表面電子状態のエキゾチックなふるまい	39

All affiliations listed in the articles are current at the time of publication. 記事中の所属はすべて出版当時



MESSAGE FROM THE DIRECTOR

ごあいさつ

Shin-ichi Orimo

折茂 慎一

Director
Advanced Institute for Materials Research (AIMR)
Tohoku University
東北大学 材料科学高等研究所 (AIMR)
所長



I am delighted to bring *AIMResearch* 2024 to successful publication.

In November 2024, Tohoku University was officially accredited as a University for International Research Excellence, and the accompanying Research System Strengthening Plan was approved by the Minister of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) in December. With 2025 marking the full-scale launch of the plan, a critical year lies ahead, and we are committed and ready to rise to the level of the expectations vested in us.

As a University for International Research Excellence, Tohoku University is focused not on the promotion of individual research, but on systemic reforms that enable the University to grow as part of the world's leading institutions. What role should the Advanced Institute for Materials Research (AIMR) play in this extremely ambitious plan? I believe our main contribution will lie in working to achieve the organizational internationalization embodied in the strategies of "comprehensive internationalization" and "attracting diverse talent from around the world." The plan identifies specific goals such as boosting ratios of international researchers, female researchers, and staff with

international expertise. As AIMR has been working toward these very goals since our establishment, I feel that AIMR's role will be to feed that experience back to the University.

AIMResearch 2024 is in fact a great reflection of AIMR's efforts to date. Considering that around half of the 18 articles contained in this issue are research results from international researchers, and that many have been produced by young researchers, AIMR's future is looking bright.

I hope you will enjoy reading this new issue, and I look forward to hearing your frank opinions.



この度、*AIMResearch* 2024を無事刊行することができましたことを、たいへん喜ばしく思っております。

2024年11月、東北大学は国際卓越研究大学として正式認定され、同12月には事業計画となる「研究等体制強化計画」について文部科学大臣より認可をいただきました。2025年はこの新しい取り組みが本格的にスタートする重要な年になると認識しており、託していただいた大きな期待に改めて身の引き締まる思いがいたします。

東北大学が国際卓越研究大学として掲げる取り組みは、個別の研究振興ではなく、大学が世界と伍して成長軌道を描くための「システム改革」に主眼を置いております。この非常に意欲的な計画のなかでAIMRが果たすべき役割とはなにかを考えると、「世界の研究者を惹きつける研究環境」と「全方位の国際化」に代表される、組織の国際化に向けた取り組みではないかと思えます。外国人研究者比率や女性研究者比率、国際対応力のあるスタッフ比率を引き上げること、等が具体的な目標として挙げられておりますが、これらはAIMRが設立以来目指してきたものであり、その経験を大学に還元することこそ、AIMRに求められていることだと考えます。

今回お届けする*AIMResearch* 2024には、AIMRのこれまでの取り組みが表れていると感じております。本号に収められた全18報のうち、約半数が外国人研究者による研究成果であり、また若手研究者によるものが多くを占めていることから、今後の本所の発展も大いに期待いただけるものと思えます。

本号もぜひ一読いただき、忌憚のないご意見を賜れますと幸いです。

About *AIMResearch*

AIMResearch features articles that provide an accessible introduction to some of the most noteworthy research being done at the Advanced Institute for Materials Research (AIMR), Tohoku University. As one of the world's leading centers of research in interdisciplinary materials science research, AIMR researchers publish hundreds of papers every year. Research Highlights presents outstanding examples of this research, from a perspective different from those taken in the papers themselves.

The latest articles are available to read on the institute's website. Readers can also sign up to receive the latest articles to their registered email address.

*AIMResearch*は、東北大学材料科学高等研究所 (Advanced Institute for Materials Research; AIMR)の特筆すべき業績を分かりやすく紹介する特集記事です。世界の最先端をゆく学際的な材料科学研究拠点であるAIMRの研究者は毎年何百報もの論文を発表しており、リサーチハイライトはその中でも特に卓越したものについて、論文とは違う視点からご紹介しています。

研究所ウェブサイトにて最新の記事をご覧いただくことが出来ます。またメール配信にご登録いただくと、ご登録のメールアドレスに最新記事をお届けいたします。

AIMResearch

Search

<https://wpi-aimr.tohoku.ac.jp/en/aimresearch/>





Ordered carbonaceous frameworks:

A strategy for tandem catalyst design

規則性炭素化物構造体：

タンデム触媒設計の新戦略

22 April 2024

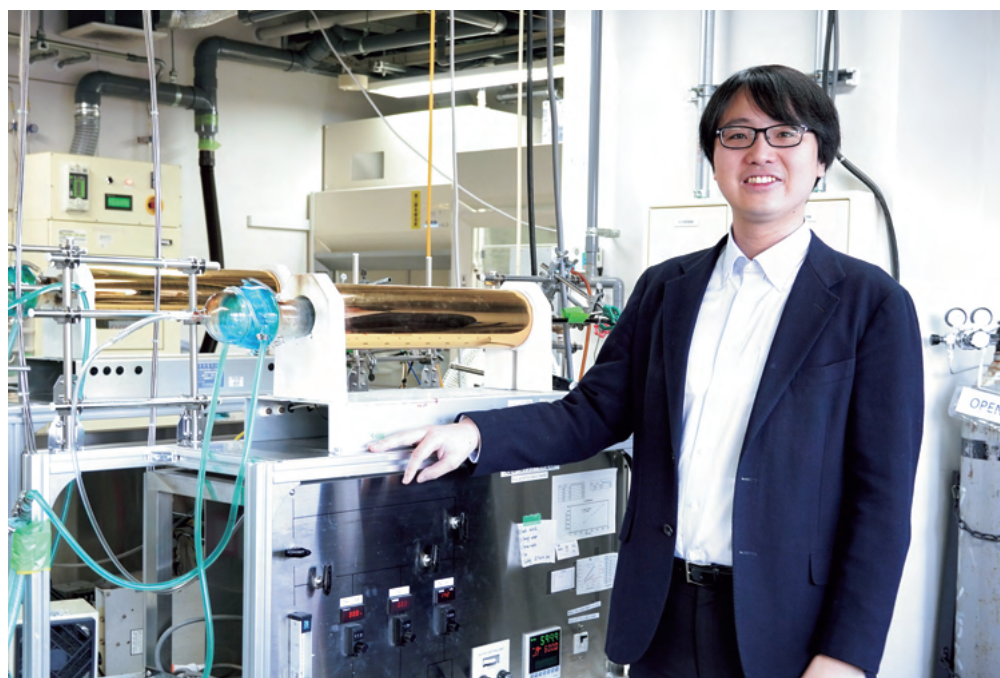
Corresponding Researcher

Takeharu Yoshii

吉井 文晴

Assistant Professor

助教



Unlocking the potential of metal-coordinated porphyrin-derived carbon for efficient CO₂ conversion

Ordered carbonaceous frameworks (OCFs, *i.e.*, carbonized metal-coordinated porphyrins) are well-defined, microporous structures with high specific surface areas, narrow pore-size distributions, and immobile, atomically dispersed metal species.

Because these unique properties can be tailored through molecular-precursor design, OCFs are also ideal platforms for exploring energy storage, conversion, and electrocatalysis applications¹.

In a 2023 article, an AIMR team led by Hirotomo Nishihara and Takeharu Yoshii used this strategy to make a breakthrough in OCF research². By selecting Co- and Cu-coordinated porphyrin precursors with otherwise identical molecular structures, the team successfully synthesized new OCFs including single-metal Co and Cu OCFs, as well as a bimetallic Co-Cu OCF.

“One important result was that our energy-dispersive X-ray spectroscopy elemental mapping and cyclic voltammetry measurements indicated the Co and Cu atoms in the bimetallic OCF were not only homogeneously dispersed, but they also exhibited synergetic effects,” says Yoshii.

Currently, the team is investigating how a single Co-Cu bimetallic OCF catalyst can sequentially convert CO₂ to C₂ compounds via CO.

“We know that immobilized single-atom Co catalysts excel at reducing CO₂ to CO, while their Cu counterparts are great at converting CO to C₂ compounds,” says Yoshii. “If we can use the synergetic effects of bimetallic OCFs to isolate an efficient tandem catalyst, the impact of this research will be significant for advancing CO₂ conversion technologies and beyond.”

効率的なCO₂転換の実現に向けた二元金属含有触媒の合成技術を開発

規則性炭素化物構造体 (ordered carbonaceous frameworks; OCF) は、金属ポルフィリン分子結晶を炭素化することにより得られる材料であり、原子状に分散した金属種に加え、均一なミクロ細孔と高い比表面積を有することを特徴とする。

こうしたユニークな特性は分子前駆体の設計によって自在に調整可能であり、このことからOCFはエネルギー貯蔵・変換や電極触媒への応用に向けて理想的なプラットフォームであるといえる¹。

2023年、西原洋知教授と吉井文晴助教が率いるAIMRの研究チームは、この戦略を用いてOCF研究にブレークスルーをもたらす論文を発表した²。研究チームは、同一の骨格を有するポルフィリン分子にCoおよびCuを配位させ、これを前駆体としてCoあるいはCuのシングルメタルOCF、さらにはCo-CuバイメタルOCFの合成に成功した。

吉井助教は「本研究の重要な点は、エネルギー分散型X線分光 (EDX) 法による元素マッピングおよびサイクリック・ボルタンメトリー測定によって、バイメタルOCF中のCoとCuが原子レベルで均一に分散しており、CO₂転換の触媒として協奏的に作用し得ることが示されたことです」と語る。

現在研究チームは、Co-CuバイメタルOCFを触媒として用い、CO₂からCO、COからC₂化合物へと逐次的に転換する方法を研究している。

「単原子Co触媒はCO₂をCOに還元することに優れている一方、Cu触媒はCOをC₂化合物へと転換するのに優れています。バイメタルOCFのシナジー効果を利用して、CO₂をC₂化合物へと効率的に転換するタンデム触媒を創製することができれば、この研究のインパクトはCO₂転換技術にとどまらず、関連分野の幅広い領域にまで波及すると期待されます」と吉井助教は本研究の展望について述べている。

Highlight Article

2. Chida K., Yoshii T., Hiyoshi N., Itoh T., Maruyama J., Kamiya K., Inoue M., Tani F. and Nishihara H. Bimetallic ordered carbonaceous frameworks from Co- and Cu-porphyrin bimolecular crystals *Carbon* 201, 338-346 (2023).

- Reference** | 1. Yoshii T. *et al.* *Chem. Commun.* 58, 3578-3590 (2022).



Topological phases:

Exploring interactions in non-Hermitian many-body systems

トポロジカル相：

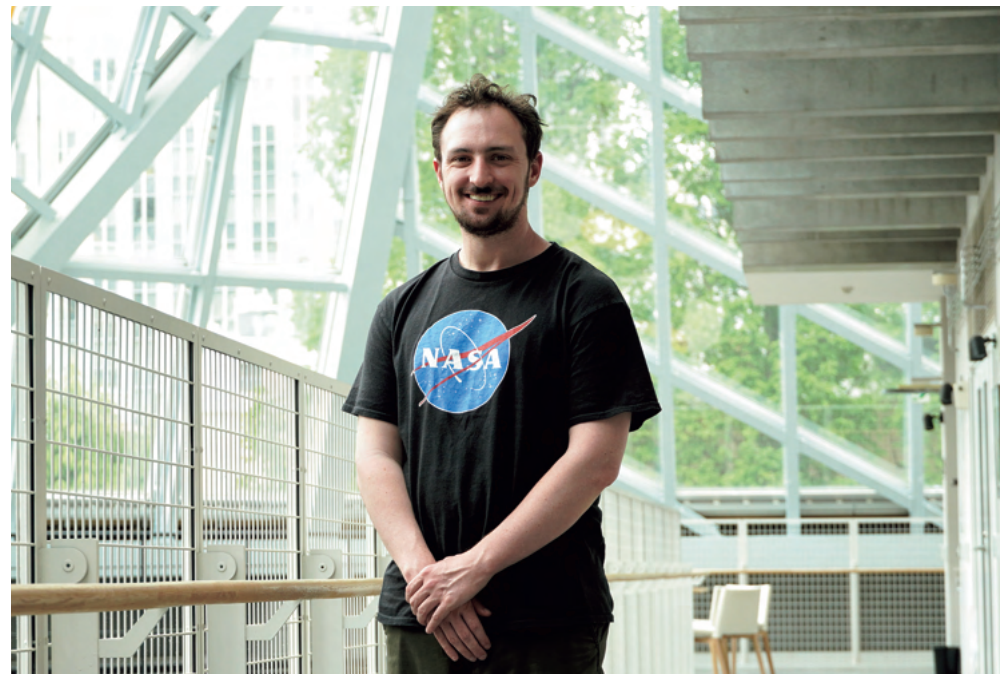
非エルミート系で相互作用の影響を探究する

27 May 2024

Corresponding Researcher

William Naughton Faugno

Specially Appointed Assistant Professor
特任助教



A novel approach to unveiling emergent phenomena and symmetries

In recent years, theoretical studies on non-Hermitian model systems have uncovered a diverse range of topological phases with intricate features. However, because much of the focus has been on single-particle systems, the exploration of interactions and correlations in shaping the topology of open, multi-particle quantum systems remains limited.

In a 2022 article, Faugno and Ozawa at AIMR introduced a novel theoretical approach for studying non-Hermitian Hamiltonians, aiming to bridge this gap¹.

“Our work focuses on emergent phenomena in interacting systems, where a system exhibits unexpected behavior beyond the sum of its parts. This idea forms a cornerstone of modern many-body physics and has improved our ability to understand complex systems,” Faugno explains.

To explore this theme, the team developed a minimal one-dimensional chain model, incorporating a density-dependent dynamical gauge field to represent inter-particle interactions. They then proposed

a two-frequency Floquet protocol to experimentally realize the model system, leading to the discovery of an emergent sublattice symmetry.

This approach both demonstrated the importance of dynamical gauge fields in shaping the behavior of nontrivial topological features, and confirmed the possibility of controlling the behavior of real quantum systems through external driving techniques—such as the Floquet experiment.

“The observed emergent symmetry confirmed that the investigation of non-Hermitian many-body systems can lead to the discovery of novel phenomena,” says Faugno. “This led to our recent study of the classical Hermitian limit where emergent chiral symmetry was found to play a key role².”

Currently, the team is focusing on the out-of-equilibrium physics of the full many-body limit, where preliminary results have suggested the emergence of non-thermalizing scarring effects relevant to future memory-device applications.

創発現象と対称性に迫る新たなアプローチ

近年、環境との相互作用が無視できない非エルミート系における理論的研究から、複雑な特徴を有する多様なトポロジカル相が次々と見出されている。しかし、その多くが一粒子系に焦点を当てたものであったため、複数の粒子が存在するときの粒子間の相互作用と非エルミート系のトポロジーとの関連に関する知見はまだ乏しい。

2022年、AIMRのWilliam Naughton Faugno特任助教と小澤知己教授は、複数の粒子が存在する時にだけトポロジカル相があらわれる非エルミート系を理論的に提唱した¹。

Faugno特任助教はこの研究について、「私たちは、相互作用系における創発現象に焦点を当てて研究を行いました。創発とは、ある系がその部分の総和を超えた予期せぬふるまいを示す現象のことを指します。この概念は現代の多体物理学の礎となっており、複雑な系について理解を深める上で重要な役割を果たしてきました」と説明する。

研究チームはこのテーマに取り組むため、粒子間相互作用が密度に依存する動的なゲージ場の形であらわされるシンプルな1次元鎖モデルを提案した。そしてこのモデルを実験的に検証するため

に、Floquet理論という変調を用いた具体的な実験プロトコルを提案し、多体性に由来してカイラル対称性という対称性が創発することも発見した。

このアプローチにより、非自明なトポロジカル相のふるまいに対する動的ゲージ場の重要性が示されたと同時に、今回のFloquet理論を用いた提案のように、外部駆動技術によって興味深い非エルミート系を実現できる可能性が示された。

「本研究で見つかった創発的な対称性により、非エルミート多体系の研究が新しい現象の発見につながる事が確認されました。さらに私たちは最近、この研究から着想を得て、古典的な(量子的でない)エルミート系に関する研究も行い、創発するカイラル対称性が果たす重要性を明らかにしました²」とFaugno特任助教は語る。

現在研究チームは多体量子系の非平衡物理に焦点を当てており、予備的な結果からは、熱平衡に達しない量子多体傷跡状態の出現が示唆されている。こうした知見は、将来のメモリー・デバイスへの応用につながると期待される。

Highlight Article

1. Faugno W.N. and Ozawa T. Interaction-Induced Non-Hermitian Topological Phases from a Dynamical Gauge Field *Physical Review Letters* **129**, 180401 (2022).

- Reference | 2. Faugno W.N. et al. *Phys. Rev. Lett.* **132**, 023401 (2024).

Organic semiconductors:

Methylation for controlling acene crystal structure

有機半導体：

メチル化によるアセン化合物の 結晶構造制御

10 June 2024

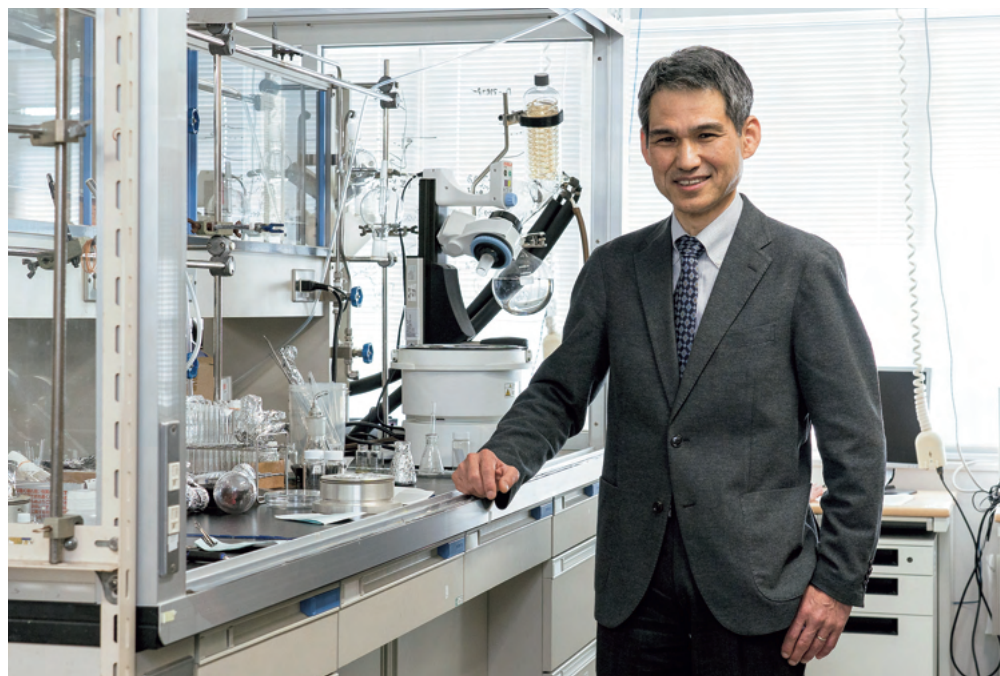
Corresponding Researcher

Kazuo Takimiya

瀧宮 和男

Principal Investigator

主任研究者



website >>>



— Towards predicting the effects of molecular aggregation on product-crystal properties

The performance of organic semiconductors depends both on their molecular structure, and on how the molecules aggregate into solids via crystallization.

However, while current chemistry can reliably determine the effects of molecular structure on performance, it has a harder time predicting the effects of molecular aggregation that must account for both weak intermolecular forces and irregular molecular shapes.

A 2023 article by Takimiya and co-workers from AIMR addressed this gap by interrogating how the introduction of methylthiolate functional groups at specific positions on parent molecules affects both their aggregation and their semiconducting properties¹.

“Previously, we had found that the introduction of methylthio groups at the benzodithiophene molecule β -positions changed the aggregation from the herringbone structure of the parent molecule to the π -stacking structure,” explains Takimiya. “Here, we tested whether this approach on acene-type

parent molecules can also crystallize into structures with higher π - π interactions.”

To this end, the team synthesized four anthracene and tetracene compounds at various extents of methylthiolation, and used single-crystal X-ray analysis and single-crystal field-effect transistors to measure the product crystal structures and transport properties, respectively.

“Our results showed that methylthio groups can also be used to change the crystal structure from the herringbone structure of the parent acenes to different π -stacking structures of the products—enhancing both intermolecular π - π interactions and transport properties” says Takimiya. “This suggests our approach could be adapted for other rigid, planar molecules.”

The team now aims to gather new experimental data exemplified above to leverage future, more powerful quantum-chemical simulations towards predicting the effects of molecular aggregation on product-crystal properties.

— 分子凝集が生成物結晶の特性に及ぼす影響の予測に向けて

有機半導体の性能は、分子構造と、結晶化によってどのように分子が凝集して固体になるかに左右される。

しかし、分子構造が性能に及ぼす影響については現代の化学でも信頼性の高い予測が可能だが、分子凝集の影響については弱い分子間力と不規則な分子形状の両方を考慮しなければならないため、未だに予測は難しい。

この課題を解決すべくAIMRの瀧宮教授らは、親分子の特定の位置にメチルチオ官能基を導入し、それが分子の凝集と半導体特性にどのような影響を及ぼすかを詳細に調べ、2023年に論文を発表した¹。

瀧宮教授は、「これまでに私たちは、ベンゾジチオフェン分子の β 位にメチルチオ基を導入すると、親分子の凝集構造がヘリンボーン構造から π スタッキング構造に変化することを報告していました。そこで今回、アセンタイプの親分子にこの方法を適用することで、より高い π - π 相互作用を持つ構造に結晶化できるのではないかと考え検証を行いました」と説明する。

研究チームは、メチルチオ化の程度が異なる4種類のアントラセンおよびテトラセン化合物を合成し、単結晶X線構造解析と単結晶電界効果トランジスタを用いて化合物の結晶構造と輸送特性を測定した。

「この研究の結果、メチルチオ基の導入により、親分子であるアセン化合物のヘリンボーン構造から π スタッキング構造へと結晶構造を変化させることができ、分子間 π - π 相互作用と輸送特性の両方が向上することが示されました。この結果は、今回のアプローチが剛直な平面構造を有する他の分子にも応用できることを示唆しています」と瀧宮教授はコメントしている。

今後研究チームは、他の分子に対してもこのアプローチを適用して新たな実験データを収集し、高性能な量子化学シミュレーションを活用して分子凝集が生成物結晶の特性に及ぼす影響を予測することを目指している。

Highlight Article

1. Kanazawa K., Bulgarevich K., Kawabata K. and Takimiya K. Methylthiolation of Acenes: Change of crystal structure from herringbone to rubrene-like pitched π -stacking structure *Crystal Growth & Design* 23, 5941-5949 (2023).

Metal alloy processing:

Breaking the strength-ductility trade-off

金属合金加工：

強度と延性のトレードオフを打破

24 June 2024

Corresponding Researcher

Hyoung Seop Kim

Principal Investigator

主任研究者



website >>>



Compositional and microstructural heterogeneities through maraging and reversion treatments

Metal alloys are versatile materials that can be tailored to exhibit desired properties. However, achieving both ultra-high strength and good ductility in these materials has been a long-standing challenge.

For example, established maraging processes can enhance alloy strength via precipitates. However, the presence of these precipitates also makes alloys brittle, limiting their ductility and therefore their applications where both strength and ductility are required.

In a 2023 article¹, Kim and coworkers from AIMR addressed this problem by developing a novel dual-phase medium-entropy alloy (MEA, $\text{Fe}_{68}\text{Ni}_{10}\text{Mn}_{10}\text{Co}_{10}\text{Ti}_{1.5}\text{Si}_{0.5}$ (at%)) with a strength of 1.6 GPa and ductility of ~25% using a maraging and reversion (M&R) process. The strategy used a new rapid low-temperature reversion method to engender both compositional and microstructural heterogeneities.

“Our M&R process generated both a core-shell configuration within the reversed austenite grains of the ferrous alloy, and a dual-phase microstructure containing a large fraction of metastable austenite” says Kim. “Respectively, these two heterogeneities enabled both the precipitation strengthening and the transformation-induced plasticity mechanisms simultaneously.”

By transcending the traditional strength-ductility trade-off that has long challenged the materials-science community, the team demonstrated a new pathway that utilizes chemical heterogeneity and metastable phase transformations for developing advanced structural materials with superior mechanical properties.

Currently, the team is expanding this approach to other MEAs and high-entropy alloys exploring how the versatile compositional landscape of these alloy systems can be leveraged to improve hydrogen storage performance as well as mechanical properties.

マルエージング処理と逆変態処理による組成および微細構造の不均一性

金属合金は、求められる特性に応じて調整できる汎用性の高い材料である。一方で、これらの材料で超高強度と優れた延性を両立させることは、長年の課題であった。

例えば、既存のマルエージング処理（マルテンサイト相の時効処理）を行うと、析出物を介して合金の強度を高めることができる。しかしながら、これらの析出物は合金を脆くし、延性を制限するといった負の側面もあった。そのため、この手法を強度と延性の両方が求められる用途に適用することは困難であった。

2023年、AIMRのHyoung Seop Kim教授とその研究チームは、マルエージング処理と逆変態処理（高温での追加熱処理）（M&R）により、強度1.6GPa、延性約25%の新たな二相ミディアムエントロピー合金（MEA, $\text{Fe}_{68}\text{Ni}_{10}\text{Mn}_{10}\text{Co}_{10}\text{Ti}_{1.5}\text{Si}_{0.5}$ (at%))を開発することに成功した¹。彼らの研究戦略は、新たな急速低温逆変態法を使用することで、合金の組成と微細構造の両方の不均一性を誘発したことであった。

「今回開発したM&Rにより、鉄合金の逆変態オーステナイト粒子内にコアシェル構造と準安定オーステナイトを多く含む二相微細構造の両方を生成させることができました。これら2つの不均一性により、析出強化と変態誘起塑性の両方が同時に可能となりました」と、Kim教授は語っている。

材料科学分野では、長年にわたり、強度と延性のトレードオフの問題に直面してきた。しかし、Kim教授の研究チームがその問題を解決したことで、化学的不均一性と準安定相変態を利用して優れた機械的特性を持つ高度な構造材料を開発するという新たな手法の有用性が実証された。

現在、研究チームはこの手法を他のMEAやハイエントロピー合金にまで拡大し、これらの合金系の多様な組成を活用して、水素貯蔵性能や機械的特性を向上させる方法を模索している。

Highlight Article

1. Haftlang F., Seol J.B., Zargaran A., Moon J. and Kim H.S. Chemical core-shell metastability-induced large ductility in medium-entropy maraging and reversion alloys *Acta Materialia* **256**, 119115 (2023).



2D transition metal dichalcogenides:

Elucidating the interplay between fermiology and exotic quantum phases

2D遷移金属ダイカルコゲナイド:

フェルミオロジーとエキゾチック量子相の相互作用の解明

8 July 2024

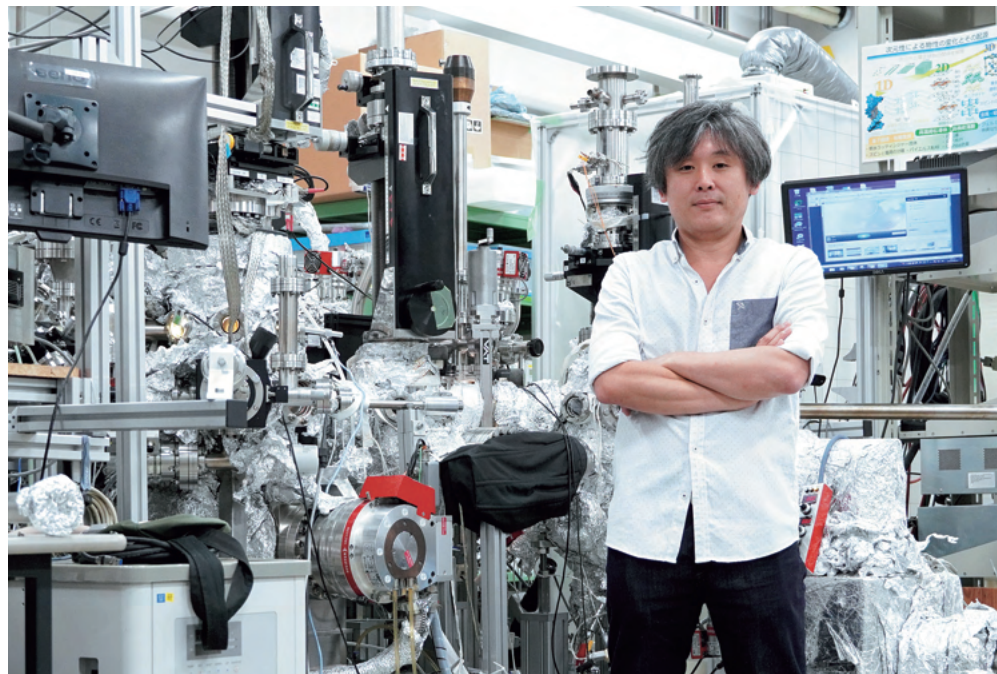
Corresponding Researcher

Katsuaki Sugawara

菅原 克明

Associate Professor

准教授



Insights from the unique correlated metallic state in monolayer NbTe₂

The ability to manipulate exotic quantum phases—such as the Mott-insulating phase and the charge density wave (CDW) metallic states—in two-dimensional (2D) transition metal dichalcogenides (TMDs) promises novel electronic and quantum device applications.

However, realizing this vision requires a deeper understanding of the fundamental mechanisms behind the CDW-Mott phase in TMDs.

In a 2023 article, Sugawara and coworkers from AIMR addressed this gap by demonstrating that the monolayer 1T-NbTe₂ is a new class of 2D TMD exhibiting a metallic ground state characterized by a sparsely occupied star-of-David lattice¹.

“Other TMDs, such as 1T-NbSe₂, were known to exhibit a Mott-insulating ground state coexisting with CDW order,” says Sugawara. “In this study, we wanted to investigate the ground state properties of the isostructural monolayer 1T-NbTe₂, which was unknown at the time.”

Using angle-resolved photoemission spectroscopy, scanning tunneling microscopy, and first-principles calculations, the team found that hidden Fermi-surface nesting and associated CDW formation are the primary causes of a unique correlated metallic state with no signature of a Mott gap—in contrast to the gapped Mott-insulating nature of isostructural 1T-NbSe₂.

“Our results highlighted the key role of underlying fermiology in characterizing the Mott phase of TMDs,” explains Sugawara. “They provided insights into the interplay between fermiology, electron correlation, and exotic quantum phases in 2D materials.”

The team continues to collaborate with other AIMR research groups to explore quantum phenomena and functionalities in monolayer TMDs that have yet to be discovered.

単原子層NbTe₂における特異な電子相関を示す金属状態から見出した新たな知見

2次元(2D)遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)において、モット絶縁相や金属中の電荷密度波(CDW)といったエキゾチックな量子相を制御する技術は、新しい電子・量子デバイスアプリケーションの実現に不可欠である。

一方で、これらを実現するにはTMDのCDW・モット絶縁相などの物性の背後にある根本的なメカニズムをより深く理解する必要があった。

AIMRの菅原准教授率いる研究チームは、単原子層のニテル化ニオブ(1T-NbTe₂)に着目し、このメカニズムの解明に取り組んできた。そして2023年、複数のNb原子によって形成された「ダビデの星」型構造が隙間を空けて配列することで、電子が自由に単原子層内を動き回ることができるようになり、金属としての性質を示すことを明らかにした¹。これは従来とは異なる新たな種類の2D TMDの物性であった。

菅原准教授は、「単原子層1T-NbSe₂などの他のTMDは、CDWとモット絶縁相が共存する系であることが知られていました。本研究は、当時は注目されていなかった1T-NbTe₂の電子状態を明

らかにすることでそれらの発現機構を解明することを目的としていました」と、語る。

AIMRの共同研究チームは、1T-NbTe₂の電子状態について、マイクロ集光角度分解光電子分光法(μ-ARPES)、走査型トンネル顕微鏡法(STM)、第一原理計算を用いて調べた結果、モットギャップの特徴を示さない特異な金属相を発現していることを見出し、その原因が、隠れたフェルミ面のネスティングに伴うダビデの星に関連したCDWの形成であることを突き止めた。これは、同一の結晶構造を有する1T-NbSe₂がダビデの星によってモット絶縁体として示す性質とは対照的であった。

「私たちの研究結果は、TMDのモット絶縁相を特徴付ける上で基礎となるフェルミオロジーが重要な役割を果たすことを浮き彫りにしました。また、フェルミオロジー、電子相関、2D物質におけるエキゾチックな量子相の相互作用について新たな知見をもたらしました」と、菅原准教授は説明する。

現在研究チームは、AIMRの他の研究チームと協力し、まだ発見されていない単原子層TMDの量子現象や機能性を探索している。

Highlight Article

1. Taguchi T., Sugawara K., Oka H., Kawakami T., Saruta Y., Kato T., Nakayama K., Souma S., Takahashi T., Fukumura T. and Sato T. Charge order with unusual star-of-David lattice in monolayer NbTe₂ *Physical Review B* 107, L041105 (2023).

Complex borohydrides:

Exploring the factors controlling anion reorientation

錯体水素化ホウ素化合物：

陰イオンの再配向を制御する 要因の解明

22 July 2024

Corresponding Researcher

Kartik Sau

Specially Appointed Senior Assistant Professor
特任講師



Towards room temperature fast ion-conducting materials through molecular dynamics simulations

Complex borohydrides (CBHs) are promising electrolyte materials for all-solid-state batteries (ASSBs), provided that their phase-transition temperatures can be lowered to room temperature (RT) to enable the practical application of their outstanding Li- and Na-ion conductivities ($\approx 10^{-1} \text{ S cm}^{-1}$).

Because the high conductivity phases of CBHs commonly show anionic rotational motions, understanding the factors affecting anion reorientation can significantly advance the design of future RT fast ion-conducting materials.

“Recent experimental and first-principles molecular dynamics (FPMD) works tried to capture the reorientation of CBH anions,” explains Sau. “However, the limited scope and FPMD timescale of these approaches could not capture the anion reorientational motions in their entirety.”

In a 2021 article, Sau *et al.* from AIMR used force-field based MD simulations to overcome these limitations,

investigating the $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ and $\text{LiCB}_{11}\text{H}_{12}$ systems¹. This strategy allowed for accurate reproduction of structural and dynamic behavior, capturing the entropy-driven order-disorder phase transitions and anion reorientational motions—not feasible with FPMD and experiment alone.

“The results of this work had enabled us to investigate other factors determinant of future designs of ASSB and solid-state cooling/heating materials, such as the role of cation size on CBH phase transition², or the significance of cation diffusion on the CBH colossal barocaloric effects (ability to change temperature when applying pressure)³,” says Sau.

A current direction of the research team focuses on investigating the barocaloric properties of the related closo-borate compounds and other disordered materials for the development of efficient and environmentally friendly cooling solutions.

分子動力学シミュレーションによる室温高速イオン伝導材料の実現

錯体水素化ホウ素化合物 (CBHs) は、全固体電池 (ASSBs) 用の有望な電解質材料として期待されている。実用化するには、相転移温度を室温まで下げ、LiイオンおよびNaイオンの伝導率を $10^{-1} \text{ S cm}^{-1}$ まで向上させる必要がある。

一般的に、CBHsの高伝導相では陰イオンの回転運動が観察される。そのため、陰イオンの再配向に影響を与える要因を解明できれば、次世代の室温高速イオン伝導の設計を大きく進歩させることができる。

AIMRのSau特任講師は、「最近の実験や第一原理分子動力学法 (FPMD) を用いた研究により、CBHの陰イオンの再配向運動を捉えようと試みました。しかしながら、実験の適用範囲やFPMDの時間スケールには限界があり、それらを完全に捉えることはできませんでした」と、語る。

2021年、Sau特任講師の研究チームは力場をベースとした分子動力学シミュレーションを使用することでこれらの制約を克服し、 $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ と $\text{LiCB}_{11}\text{H}_{12}$ 系について詳しく調査した¹。この戦略により、構造的、動的挙動を正確に再現し、エントロピー駆動型の秩序無秩序転移と陰イオンの再配向運動を捉えることに成功した。この成果は、従来の実験やFPMDからのアプローチでは達成することが困難であった。

「この研究成果により、CBH相転移における陽イオンサイズの役割²や、CBHの巨大な圧力熱量効果 (圧力を加えると温度が変化する性質)³における陽イオン拡散の重要性など、次世代のASSBや固体冷却・加熱材料の設計に関わるさまざまな要因を明らかにすることができました」と、Sau特任講師は説明する。

研究チームは現在、効率的で環境に優しい冷却ソリューションを開発するため、クロソボレート化合物やその他の無秩序な材料の圧力熱量特性に焦点を当てて研究を進めている。

Highlight Article

1. Sau K., Ikeshoji T., Kim S., Takagi S. and Orimo S. Comparative Molecular Dynamics Study of the Roles of Anion–Cation and Cation–Cation Correlation in Cation Diffusion in $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ and $\text{LiCB}_{11}\text{H}_{12}$ *Chemistry of Materials* 33, 2357–2369 (2021).

References

2. Sau K. *et al. Mater. Adv.* 4, 2269–2280 (2023).
3. Zeng M. *et al. Adv. Sci.* 11, 2306488 1–13 (2024).

website >>>



Janus TMD nanoscrolls:

Breaking the spatial inversion symmetry of one-dimensional crystals

ヤヌス遷移金属ダイカルコゲナイドのナノスクロール :

一次元結晶の空間反転対称性を破る

26 August 2024

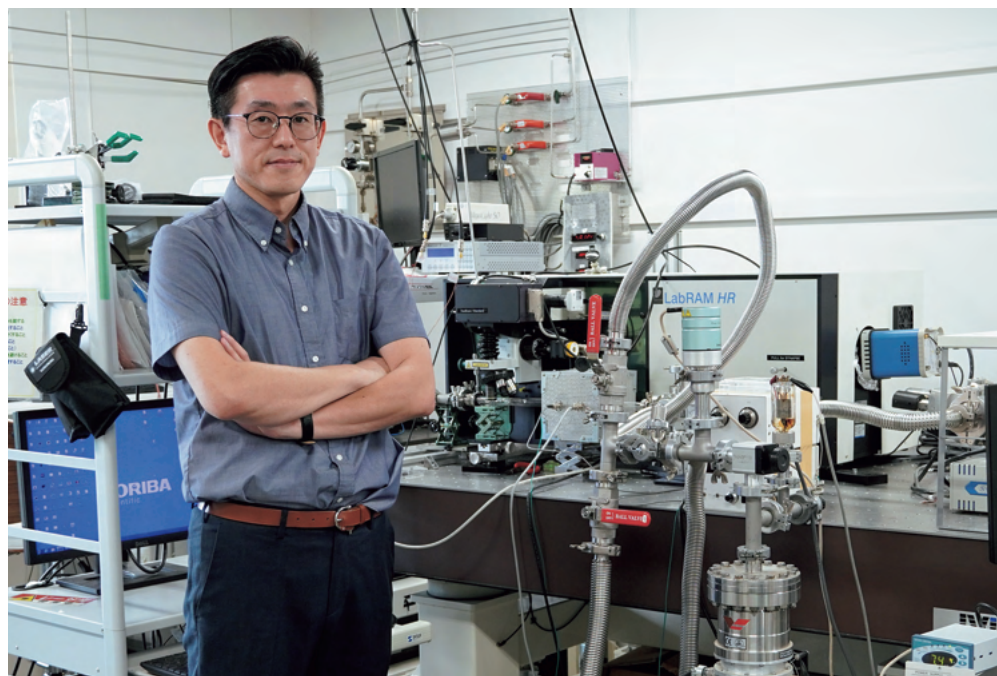
Corresponding Researcher

Toshiaki Kato

加藤 俊顕

Junior Principal Investigator

ジュニア主任研究者



website >>>



A novel method for studying precise one-dimensional nanostructures

Transition metal dichalcogenides (TMDs) are two-dimensional materials with properties that can be shaped by their structural symmetry.

However, while concrete examples—such as the enhanced photovoltaic effects in multiwall WS₂ nanotubes, or the nonreciprocal transport in chiral WS₂ nanotubes—illustrate this structure/property relationship, precise fabrication of desired TMD structures remains a technological challenge.

In a recent article, Kato and co-workers from AIMR explored the fabrication of nanoscrolls using Janus monolayer TMDs¹.

“Typically, TMDs have a structure where a transition metal-atom layer is sandwiched between identical chalcogen-atom layers above and below,” explains Kato. “The ‘Janusification’ process aims to replace the upper chalcogen layer exclusively to break the TMD spatial inversion symmetry, yielding precise nanostructures with new properties not observed in the symmetric monolayer TMDs.”

To maximize the fabrication precision, the team used plasma-assisted surface atom substitution to prepare Janus WSSe and MoSSe monolayers, followed by a solution treatment that rolled the monolayers into one-dimensional nanoscrolls.

“In this work, we not only achieved the direct observation of the TMD Raman spectra for tuning of the Janusification conditions during reaction, but we also developed a simple liquid application and drying process that produced uniform, precise nanoscrolls of unprecedented small diameters,” says Kato.

Using this new strategy, the team is collaborating with theoretical and experimental research groups of AIMR and beyond, to develop a research field dedicated to elucidating new structure/property relationships of low-dimensional materials.

精密な一次元ナノ構造を研究するための新たな手法

遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)は、その構造対称性によって物性を変えることができる二次元材料である。

この構造と物性の関係を示す具体例として、多層の二硫化タングステンナノチューブ(WS₂ナノチューブ)における光起電力効果の向上や、キラルWS₂ナノチューブにおける非相反輸送現象などが挙げられる。しかしながら、理想的なTMD構造を精密に作製することは依然として困難であり、技術的な課題となっている。

近年、AIMRの加藤准教授率いる研究チームは、ヤヌス構造を有する単層TMDを使用したナノサイズの巻物(ナノスクロール)の作製について報告した¹。

加藤准教授は、「通常のTMDは、遷移金属の原子層が上下同一のカルコゲン原子層に挟まれた構造をしています。しかし今回の「ヤヌス化」プロセスにより、上部のカルコゲン原子を別のカルコゲン原子に置き換えることで、TMDの空間反転対称性を意図的に破りました。これは、従来の対称性を持つ単層TMDとは異なる新たな特性を持つ精密なナノ構造を創り出すことが狙いです」と、語る。

研究チームは、作製精度を最大限に高めるために、プラズマ処理による表面原子置換を行い、ヤヌスWSSeおよびヤヌスMoSSe単層シートを作製した。その後、溶液処理によってこれらの単層シートを巻き取り、一次元ナノスクロールを作製した。

「本研究では、「ヤヌス化」の反応条件を精密に調整するために、TMDのラマンスペクトルをヤヌス化処理中に直接測定可能な装置を開発しました。また、非常に小さな直径で均一かつ精密なナノスクロールを作製するために、簡便な液体処理と乾燥プロセスも開発しました」と、加藤准教授は説明する。

研究チームはこの新たな戦略を用いて、AIMRをはじめとしたさまざまな理論・実験研究グループと連携し、低次元材料の新しい構造と物性の関係を解明するための研究分野を開拓している。

Highlight Article

1. Kaneda M., Zhang W., Liu Z., Gao Y., Maruyama M., Nakanishi Y., Nakajo H., Aoki S., Honda K., Ogawa T., Hashimoto K., Endo T., Aso K., Chen T., Oshima Y., Yamada-Takamura Y., Takahashi Y., Okada S., Kato T. and Miyata Y. Nanoscrolls of Janus Monolayer Transition Metal Dichalcogenides ACS Nano 18, 2772–2781 (2024).



Topological data analysis:

Unveiling heat conduction in amorphous germanium

トポロジカルデータ解析：

アモルファスゲルマニウムの熱伝導性を解明

9 September 2024

Corresponding Researcher

Kazuto Akagi

赤木 和人

Associate Professor

准教授



Persistent homology reveals structural features influencing thermal properties in disordered materials

With no periodic atomic configurations, amorphous materials exhibit unique properties, distinct from those of crystalline materials, that promise novel applications—provided that the physical model bridging the microscopic structure and the macroscopic properties of these materials can be understood.

However, the lack of periodic structure is also a major challenge to elucidating which microscopic structural features impact macroscopic properties such as thermal conduction.

“Conventional methods (e.g., X-ray diffraction) provide convoluted information on the local atomic structures of amorphous materials,” explains Kazuto Akagi, a member of an AIMR research team. “Without a clear idea of the local network of atoms, determining the features that impact thermal properties is practically impossible.”

In a recent article¹, Akagi and co-workers overcame this challenge with a new approach that used topological data analysis (TDA) based on persistent

homology to analyze the structural features of amorphous germanium (a-Ge), providing a clearer understanding of the atomic network's influence on thermal conductivity.

Using the persistent homology (i.e., a mathematical framework to quantify the given discrete data based the “holes” within) to investigate a-Ge structures obtained both by transmission-electron microscopy and by ab-initio molecular dynamics simulations, the team uncovered the presence of larger atomic rings (five or six vertices with longer bond length) that may play a key mechanistic role in a-Ge heat conduction.

“In a subsequent paper², our team used the same method to generate the structural descriptors that affect CO₂ adsorption in metal-organic frameworks—a type of material completely different from a-Ge—demonstrating our approach’s versatility,” says Akagi. “Further, both results^{1,2} illustrated how the microstructures reflecting composition and fabrication process affect the macroscopic properties of materials through physical or chemical models.”

パーシステントホモロジーで無秩序な物質の熱伝導に影響する構造的特徴を明らかに

周期的な原子配列を持たないアモルファス（非晶質）材料は、結晶性材料とは異なるユニークな性質を示すことが知られている。そのため、これらの微視的構造と巨視的特性を結びつける物理モデルを理解することが、材料の新たな用途を見出す鍵となる。

しかし、周期的な構造を持たないゆえに、微視的構造の特徴と熱伝導などの巨視的特性の相関性を明らかにすることは容易ではなく、大きな課題となっていた。

AIMRの赤木准教授は、「アモルファス材料中の局所的な原子構造に関して、X線回折などの従来法を用いて得られる情報は非常に複雑です。原子の局所的なネットワークを明確に理解しなければ、熱伝導に影響を与える構造的特徴を特定することは実質的に不可能です」と、説明する。

近年、赤木准教授とAIMRの研究チームは、パーシステントホモロジーに基づくトポロジカルデータ解析（TDA）を使用し、アモルファスゲルマニウム（a-Ge）の構造的特徴を解析する新たな手法を提案

した¹。これにより、従来の課題を克服し、原子ネットワークが熱伝導に与える影響をより深く理解できるようになった。

具体的には、透過型電子顕微鏡と第一原理分子動力学シミュレーションによって得られたa-Ge構造を比較しながら解析するために、パーシステントホモロジー（内部の「穴」に基づいて離散データを定量化する数学的枠組）を活用した。その結果、a-Ge熱伝導において、結合長が長い5個または6個の点からなる原子鎖のリングが重要な役割を果たす可能性のあることを発見した。

赤木准教授は、「その後の研究では、a-Geとは全く異なるタイプの材料である金属有機構造体（MOF）に同じ手法を適用してCO₂吸着に影響を与える構造記述子を特定し、本手法の汎用性を実証しました²。いずれの研究成果においても、組成や製造プロセスを反映した微視的な構造が、物理的・化学的モデルを通じて材料の巨視的特性に与える影響を明らかにすることができました^{1,2}。」と、研究の意義について語っている。

Highlight Article

1. Wu Y.-J., Akagi K., Goto M. and Xu Y. Topological data analysis of TEM-based structural features affecting the thermal conductivity of amorphous Ge *International Journal of Heat and Mass Transfer* 221, 125012 (2024).

- Reference | 2. Akagi K. et al. *Sci. Rep.* 14, 12021 (2024).



Bilayer graphene:

Quantum-device design enables high-frequency electronic characterization

二層グラフェン：

高周波電子物性評価を可能とする
量子デバイス設計

24 September 2024

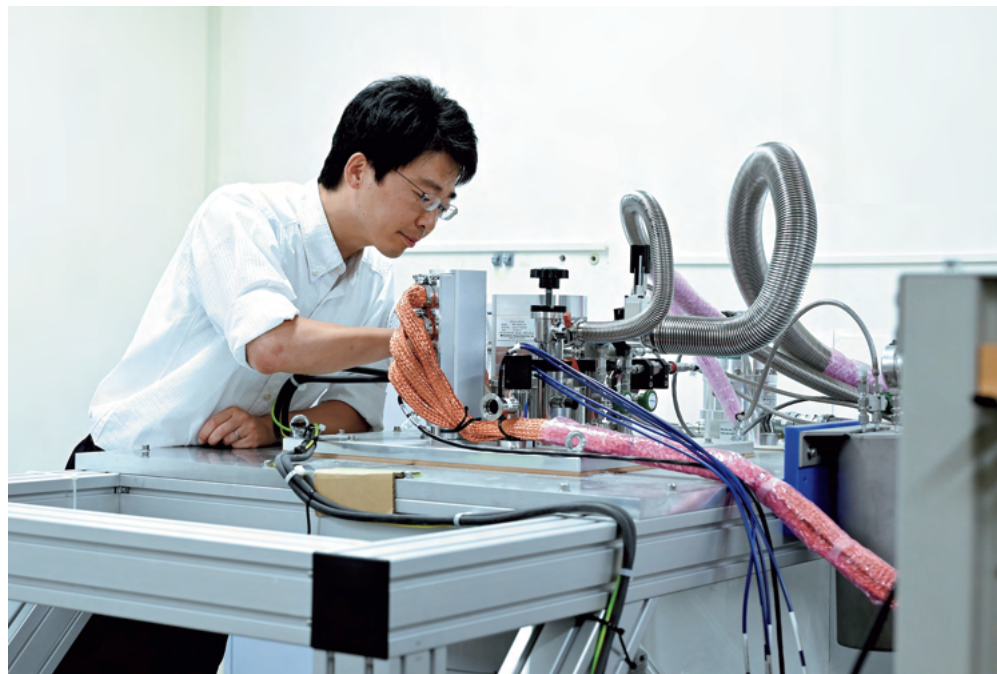
Corresponding Researcher

Tomohiro Otsuka

大塚 朋廣

Junior Principal Investigator

ジュニア主任研究者



Unlocking the potential of 2D materials with innovative high-frequency measurements

For two-dimensional (2D) materials—such as bilayer graphene—the path toward practical device applications that promise to revolutionize electronics must first go through the precise characterization of their exotic electronic properties.

Because the properties of these 2D materials often involve changes in electronic states on very short timescales, their characterization requires high-frequency measurement methods, such as radio-frequency (RF) reflectometry.

However, conventional quantum-device setups used for this kind of measurement typically use SiO₂ as an insulator and highly doped Si as back-gates; these materials increase the stray capacitances that lead to substantial RF signal leakage.

In a 2023 article, Otsuka and co-workers from AIMR addressed this problem with a new quantum-device design that excludes SiO₂ and doped Si¹.

“Our design integrated a microscale graphite back-gate using undoped Si as the substrate and hexagonal BN as the insulator,” explains Otsuka. “This approach produced a bilayer-graphene device that not only improved the matching condition of the tank circuit but also enhanced the sensitivity of the RF reflectometry measurements.”

The research team probed the quantum dots formed within the bilayer graphene of the device and observed the Coulomb blockade using both direct-current and RF reflectometry measurements. The detection of Coulomb diamonds by the latter method further suggested that real-time characterization of 2D material properties can be achieved with the new quantum-device design.

“By demonstrating high-speed, precise measurements in bilayer graphene-based quantum devices, our work has opened new avenues for interrogating the quantum dynamics of 2D materials,” says Otsuka. “We look forward to exploring new 2D quantum systems with this approach.”

二次元材料の可能性を拓く革新的な高周波測定法

二層グラフェンのような二次元材料は、エレクトロニクスに革命をもたらすと期待されている。しかし、実用的なデバイスへの応用にあたっては、まず、そのエキゾチックな電子物性を把握する必要があり、そのための精密な測定手法が求められる。

二次元材料の電子状態は非常に短い時間スケールで変化することが多いため、その特性を評価するためには高周波反射測定法などの高周波測定法が必要となる。

しかし、従来の高周波測定法に使用される量子デバイスのセットアップでは、絶縁体としてSiO₂、バックゲートとして高濃度ドーピングSiを用いており、この構造は浮遊容量を増大させるため、高周波信号のリークが問題となる。

この課題を解決するため、AIMRの大塚准教授らは2023年、SiO₂とドーピングSiを用いない高周波用二層グラフェン量子デバイスを設計した¹。

「私たちは、基板にアンドープSi、絶縁体に六方晶窒化ホウ素、バックゲートにマイクロスケールのグラファイトを用いた、高周波用二層グラフェン量子デバイスを設計しました。このアプローチにより、高周波信号のリークを低減し、さらに共振回路整合条件の改善や高周波反射測定の感度向上が可能となりました」と大塚准教授は説明する。

研究チームは、直流電流測定と高周波反射測定の両方を用いて二層グラフェン内に形成された量子ドットを精査し、クーロンブロックード（電子が一つずつ量子ドットを介して流れることを示す菱形構造）を観測した。高周波反射測定でクーロンダイヤモンドを検出できていることから、今回開発したデバイス構造を活用することで、二次元材料の特性を高速に評価できることが示唆された。

大塚准教授は、「今回、二層グラフェンを用いた量子デバイスで高周波の精密な測定が実証できたことで、二次元材料の量子ダイナミクスを解明する新たな道が開かれました。このアプローチによって、これまでにない二次元材料量子系のふるまいが明らかになると期待しています」と今後の進展への期待を語っている。

Highlight Article

1. Johmen T., Shinozaki M., Fujiwara Y., Aizawa T. and Otsuka T. Radio-frequency reflectometry in bilayer graphene devices utilizing microscale graphite back-gates *Physical Review Applied* 20, 014035 (2023).



Metallic glass crystallization:

Unraveling polymorphic growth near glass-transition temperature

金属ガラスの結晶化：

ガラス転移温度近傍における多形成長メカニズムの解明

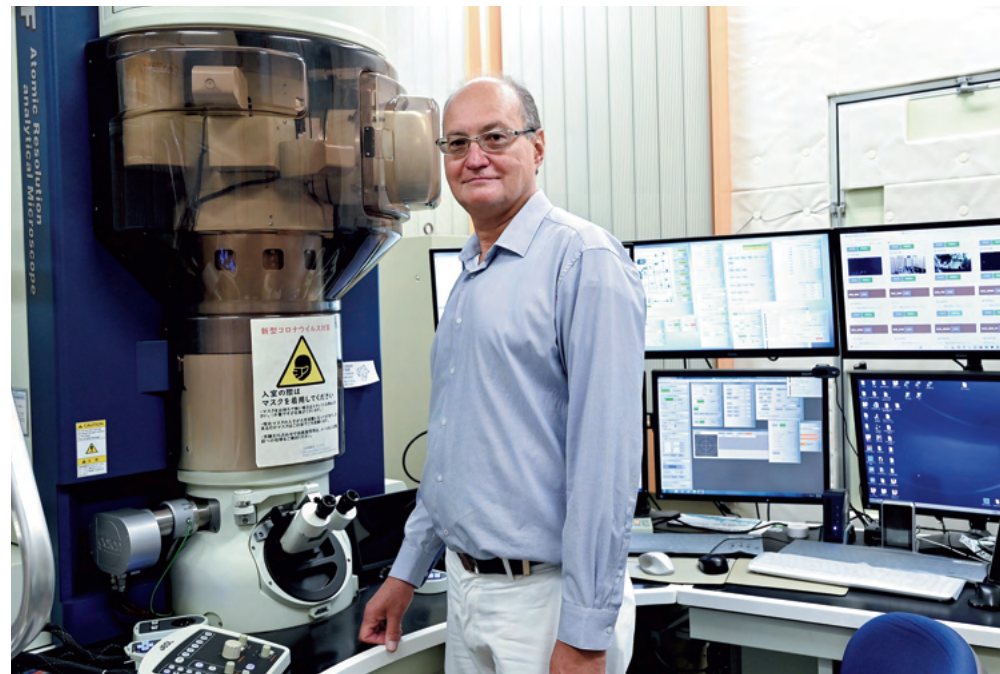
15 October 2024

Corresponding Researcher

Dmitri Louzguine

Principal Investigator

主任研究者



In-Situ TEM reveals faster-than-expected crystal growth rates in a Ti-Ni-Cu-Fe metallic glass

A fundamental understanding of how metallic glasses undergo polymorphic crystal growth near their glass-transition temperature (T_g) can lead to the design of novel composite crystal-glassy materials with precise property control.

Further, due to the slow and decoupled atomic diffusion near T_g , experimental studies on metallic glass crystal growth often yield unexpected results. The exact crystallization mechanisms and growth rates—whether controlled by short- or long-scale atomic diffusion—remain to be fully understood.

In a recent article¹, Louzguine *et al.* from AIMR addressed this problem using a combination of in-situ transmission electron microscopy (TEM), analytical TEM, differential thermal analysis, and differential scanning calorimetry to study the crystallization of a Ti-Ni-Cu-Fe metallic glass at 703 K.

"The key advancement of this work lies in our use of *in-situ* TEM at 703 K—near T_g of the $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{22}\text{Cu}_{22}\text{Fe}_6$ glass," explained Prof. Louzguine. "This approach enabled real-time observation of the crystallization

process and direct measurement of crystal growth rates at a temperature where atomic diffusion is typically slow."

The study found that crystal growth rates in the $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{22}\text{Cu}_{22}\text{Fe}_6$ glass ($\sim 2 \times 10^{-10}$ m/s) were significantly faster than predicted by standard diffusion models.

"Our *in-situ* TEM study measured the crystal growth rate to be orders of magnitude higher than that allowed by thermal long-range diffusion estimated from viscosity indicating a breakdown of the Stokes–Einstein equation", says Prof. Louzguine. "We believe the diffusion at the glass/crystal interface, can be accelerated by differences in thermodynamic and chemical potentials between the phases."

Future work will use this approach to confirm this hypothesis and explore the crystallization of more complex multicomponent alloys, including quasicrystalline phases.

透過電子顕微鏡のその場観察により、Ti-Ni-Cu-Fe合金が予想よりも速く結晶成長することを発見

金属ガラスが、ガラス転移温度(T_g)付近でさまざまな結晶多形どのように成長させていくのか、そのメカニズムの根幹を理解することは、材料の特性を精密に制御することにつながり、従来とは異なる複合的な結晶ガラス材料の開発指針となる。

また、金属ガラスの T_g 付近における原子拡散は結晶成長よりも遅く、独立しているため、実際の結晶化実験では予期せぬ結果が得られることが多い。そのため、原子の拡散距離に関わらず、正確な結晶化メカニズムと成長速度については、依然として解明されていない。

この課題を解決するため、AIMRのLouzguine教授らは、透過電子顕微鏡(TEM)のその場観察、分析TEM、示差熱分析(DTA)、示差走査熱量測定(DSC)を組み合わせ、703 KにおけるTi-Ni-Cu-Fe合金の結晶化に関する研究を行った¹。

「本研究の重要なポイントは、 $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{22}\text{Cu}_{22}\text{Fe}_6$ 合金の T_g に近い703 KでTEMのその場観察を行ったことです。これにより結晶化の過程

をリアルタイムで観察し、通常原子拡散が遅い温度における結晶の成長速度を直接測定できるようになりました」と、Louzguine教授は語る。

本研究では、実際の $\text{Ti}_{50}\text{Ni}_{22}\text{Cu}_{22}\text{Fe}_6$ 合金の結晶成長速度(約 2×10^{-10} m/s)が、標準的な拡散モデルで予測される数値よりも著しく大きいことが判明した。

「TEMのその場観察を用いたことにより、結晶成長速度が、粘性から推定される熱的な長距離拡散で許容される速度よりも著しく大きいことがわかりました。これは、ストークス・アインシュタイン方程式が成立しないことを示唆しています。この原因は、ガラスと結晶の界面における拡散が、相間の熱力学ポテンシャルや化学ポテンシャルの違いによって加速されるためであると考えられます」と、Louzguine教授は説明する。

今後はこの手法を駆使して仮説を検証し、準結晶相を含むより複雑な多成分合金の結晶化について探究していくことにしている。

Highlight Article

1. Louzguine-Luzgin D.V., Ivanov Y.P., Semin V., Nohira N., Hosoda H. and Greer A.L. On polymorphic crystal growth in a Ti-Ni-Cu-Fe system metallic glass at the glass-transition temperature *Scripta Materialia* 242, 115927 (2024).

Chiral sensors:

Advancements through hybrid silica nanohelices

キラルセンサー：

ハイブリッドシリカナノヘリックスが
もたらす進展

28 October 2024

Corresponding Researcher

Reiko Oda

小田 玲子

Principal Investigator

主任研究者



Novel water-dispersible platform enhances enantioselective recognition and sensitivity

One goal in hierarchical chiral-material design is to develop versatile water-dispersible sensors capable of enantioselective recognition in aqueous solutions. Such sensors would enable practical applications like chiral separation, catalysis, and pollutant detection.

“Conventional methods for developing chiral sensors typically take an ad hoc approach, where new sensors must be designed from the ground up to address specific needs,” explains Reiko Oda, principal investigator of an AIMR team. “A better strategy is to develop a platform that both amplifies chiral detection sensitivity and enables broader testing across various chiral and achiral components.”

In a recent article, Oda and co-workers used this strategy to develop a water-dispersible platform based on hybrid silica nanohelices that amplifies chiral sensitivity when porphyrin-based molecules are confined within the nanohelical structures¹.

The team demonstrated that the confinement of porphyrin derivatives—both chiral and achiral—within the nanohelical structures amplified by ten-fold the chiral optical activity of the porphyrin molecules, significantly enhancing the sensitivity of chiral recognition, especially for water-dispersible sensors.

“In this work, we have successfully integrated porphyrin-based receptors into water-dispersible silica nanohelices to obtain highly sensitive chiral sensors,” says Oda. “But more importantly, our innovative use of nanohelices provided a generalizable system for testing various chiral analytes without needing a unique sensor for each case.”

The team continues its collaboration with various groups from France, Italy, Estonia, Ireland, and Finland, with the ultimate goal of realizing a column capable of chiral separation.

新たな水分散性プラットフォームによるエナンチオ選択的認識および キラル検出感度の向上

階層的なキラル材料設計の目標の一つは、水溶液中でエナンチオマー（鏡像異性体）を選択的に認識でき、水に分散可能なセンサーを開発することである。このセンサーは、キラル分離、触媒、汚染物質の検出など、広範な分野での応用が期待されている。

AIMRの小田玲子主任研究者は、「従来のキラルセンサーの開発では、特定のニーズに応じて新しいセンサーをゼロから構築する必要がありました。より優れた戦略として、キラルの検出感度を高め、より広範的にさまざまなキラル、アキラル成分に幅広く対応できるプラットフォームを開発することが求められていました」と、語る。

近年、小田博士率いる研究チームは、この戦略に従い新たな水分散性プラットフォームを開発した¹。このプラットフォームは、無機物質シリカナノヘリックスをベースとしており、さまざまな分子や粒子をナノヘリックス構造内に閉じ込めることでキラル誘導、キラル認識が観察されてきた。

本研究においては、キラルとアキラルの両方のポルフィリン誘導体をナノヘリックス構造内に閉じ込めることで、ポルフィリン分子の光学活性が10倍に増幅されることを実証した。また、水分散性センサーのキラル認識の感度が大幅に向上することを見出した。

「本研究では、ポルフィリン系受容体を水分散性のシリカナノヘリックスに組み込むことで、非常に高感度なキラルセンサーを開発することに成功しました。しかし特に重要なのは、このような無機ナノヘリックスを革新的に活用することで、各ケースごとに特別なセンサーを開発しなくても、さまざまなキラル分析物を検出できる汎用的なプラットフォームを実現できた点です」と、小田博士は説明する。

研究チームは、フランス、イタリア、エストニア、アイルランド、フィンランドのさまざまなグループと引き続き協力し、最終目標であるキラル分離が可能なカラムの実現を目指している。

Highlight Article

1. Anfar Z., Kuppan B., Scalabre A., Nag R., Pouget E., Nlate S., Magna G., Di Filippo I., Monti D., Naitana M.L., Stefanelli M., Nikonovich T., Borovkov V., Aav R., Paolesse R. and Oda R. Porphyrin-Based Hybrid Nanohelices: Cooperative Effect between Molecular and Supramolecular Chirality on Amplified Optical Activity *The Journal of Physical Chemistry B* **128**, 1550-1556 (2024).

website >>>



Breaking the energy barrier:

Advancements in phase-change memory technology

消費エネルギー障壁の打破：

相変化メモリの技術革新

25 November 2024

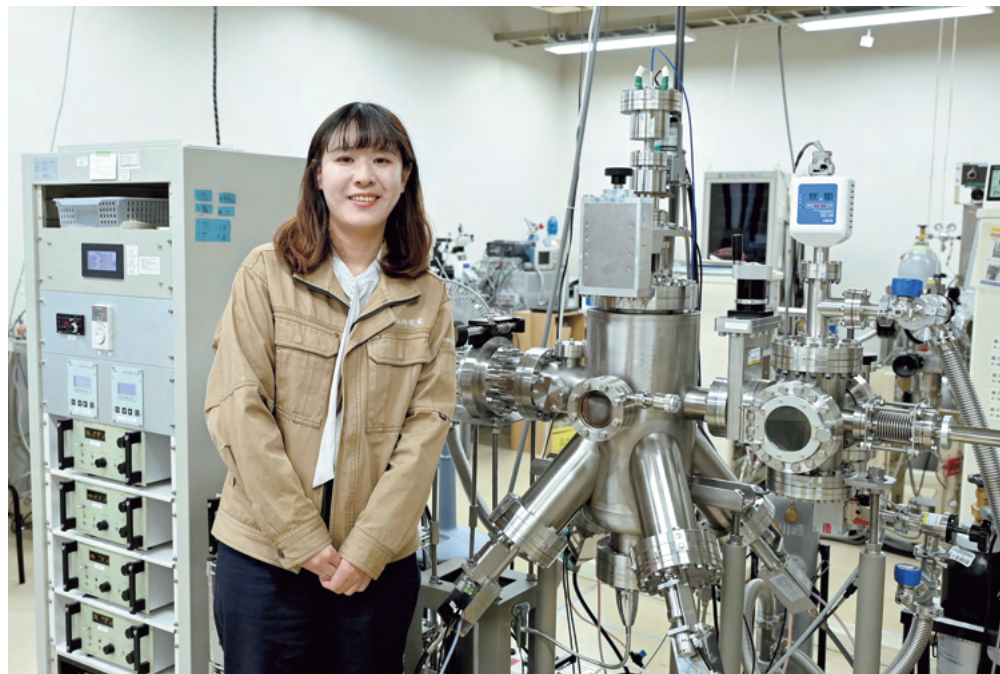
Corresponding Researcher

Yi Shuang

双逸

Assistant Professor

助教



Nitrogen-doped $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ reduces energy consumption in next-generation memory devices

In the race to develop more efficient non-volatile memory devices, phase-change materials (PCMs) stand out for their potential to offer faster speeds, higher durability, and better scalability compared to other emerging technologies.

However, due to their high cost and energy consumption, PCMs are still primarily found in high-performance computing, niche markets, and experimental technologies where their unique properties are leveraged for faster, more efficient data storage.

“The problem with using PCMs in memory devices lies in the ‘reset’ process,” explains Yi Shuang, a member of an AIMR research team. “This process consumes a lot of energy due to the heat required to melt-quench the crystalline PCM to an amorphous phase.”

In a 2024 article, Shuang, Sutou et al. addressed this issue by investigating nitrogen-doped $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ (NCrGT) as an alternative PCM, by demonstrating how NCrGT can dramatically reduce the energy

needed for the amorphization (reset) process in memory devices¹.

Using a combination of advanced contact-resistivity measurements, microscopic, and spectroscopic techniques, the team found that only a small phase-change volume (amorphization/crystallization) near the electrode interface was observed, attributed to the contact resistance-dominated conduction process in memory cells.

“Instead of relying solely on the bulk material properties of the PCM,” says Shuang, “our approach to developing a contact phase-change material enables a smaller phase-change volume—achieving a 90% reduction in reset energy compared to conventional bulk resistance-dominated PCMs.”

The team is currently working on exploring more energy-efficient PCMs, including those capable of crystalline-to-crystalline phase transitions without melting, such as a nitride PCM².

窒素ドーブ $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ により、次世代メモリデバイスの消費エネルギーを低減

より効率的な不揮発性メモリ (NVM) デバイスの実現に向けて、相変化材料 (PCM) が注目されている。PCMを用いた相変化メモリデバイス (PCRAM) は他のNVM技術と比較して、速度、耐久性、微細化の面で優れた性能を発揮する可能性が高いからだ。

従来のPCRAMは高コストでエネルギー消費量も大きいため、主に高性能コンピューティング、ニッチ市場、実験的技術にしか採用されていなかった。一方、その独自の特性を活かし、より高速で効率的なデータストレージが実現されてきた。

AIMRの双逸助教は、「メモリデバイスへのPCMの応用において、『リセット』プロセスの消費エネルギーが課題の1つとなっています。このプロセスでは、結晶相PCMを熔融急冷してアモルファス相に変化させるために、大量のジュール熱が必要です」と、説明する。

2024年、双助教、須藤教授らの研究チームは、PCMの候補材料として、窒素ドーブ $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ (NCrGT) の特性を調べた。その結果、

NCrGTでは、メモリデバイスのアモルファス相化 (リセットプロセス) に必要なエネルギーを大幅に削減できることを明らかにした¹。

研究チームは、高度な接触抵抗測定、電子顕微鏡技術、分光技術を組み合わせて、電極界面付近の非常に限定された領域のみが相変化 (アモルファス相/結晶相変化) していることを発見した。また、メモリセルにおけるこの微小な相変化が、接触抵抗が支配的な伝導プロセスに起因することを明らかにした。

「私たちが開発した接触抵抗PCMでは、PCMのバルク特性に依存せず、相変化領域を微細化することができます。また、従来のバルク抵抗を利用したPCMと比較して、リセットプロセスに必要なエネルギーを90%削減することが可能です」と、双助教は語る。

研究チームは現在、窒化物PCMなど、熔融せずに結晶/結晶相転移が可能な物質を対象とし、よりエネルギー効率の高いPCMを探索している²。

Highlight Article

1. Shuang Y., Ando D., Song Y. and Sutou Y. Direct observation of phase-change volume in contact resistance change memory using N-doped $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ phase-change material *Applied Physics Letters* 124, 061907 (2024).

- Reference | 2. Shuang Y. et al. *ACS Nano* 18, 21135–21143 (2024).

website >>>





Spintronics:

Bi/Co bilayers untangle spin currents

スピントロニクス：

ビスマス/コバルト二層膜における スピン流の原理解明

9 December 2024

Corresponding Researcher

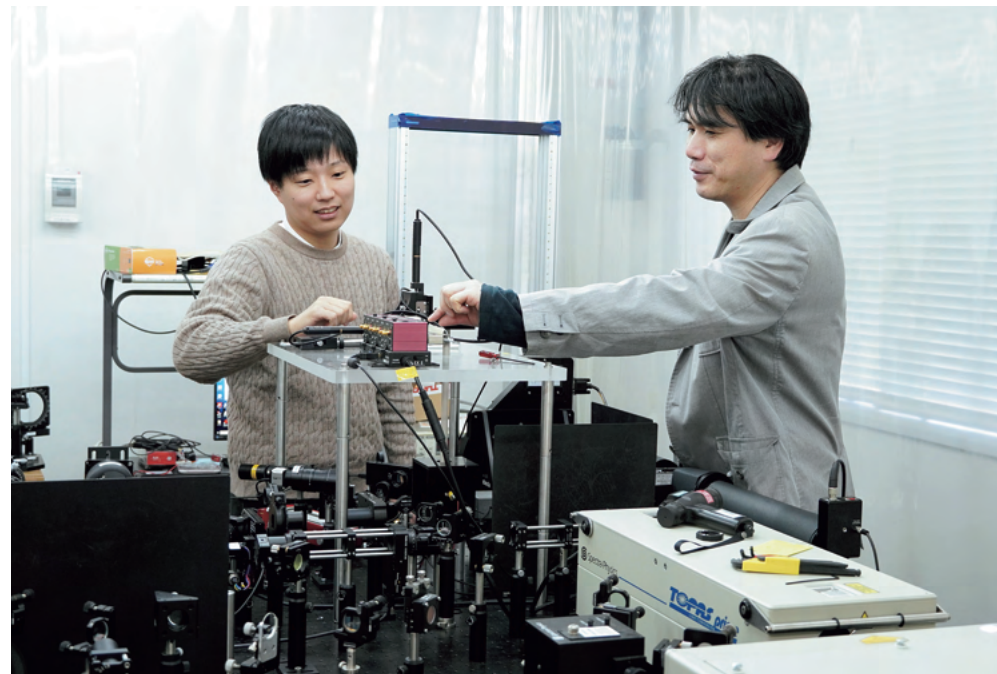
Kazuaki Ishibashi
石橋 一晃

Ph.D. Student
(Graduate School of Engineering, Tohoku University)
博士後期課程学生(東北大学大学院工学研究科)

Corresponding Researcher

Shigemi Mizukami
水上 成美

Principal Investigator
主任研究者



Spin-current generation mechanisms to reveal relaxation times and optimize spintronic applications

Recent observations of spin currents (SCs) generated via different mechanisms in different materials have raised important questions: do these mechanisms lead to SCs with distinct properties, and if so, can their relative pros and cons be teased out?

“Both helicity-dependent photocurrent via photon-spin conversion and spin-charge conversion in Bi thin films have been reported recently,” explains Kazuaki Ishibashi, a member of the AIMR research team. “However, because the two SC-generation mechanisms occur simultaneously during photocurrent measurements, isolating and studying photon-spin conversion alone has been impossible.”

In a recent article, Ishibashi, Mizukami and co-workers addressed this challenge by designing a Bi/Co bilayer system that supports both SC-generation mechanisms, enabling direct comparison of the generated SCs on the same sample for the first time¹.

Using either circularly or linearly polarized light exclusively on Bi/Co samples, the team analyzed the respective SC THz signals with a custom-made THz time-domain spectroscopy with Ti: Sapphire laser², allowing them to separately study the contributions from Co demagnetization and from photon-spin conversion—including the helicity-dependent THz emission induced by the latter mechanism.

“Our approach enabled us to compare how the SC-generation mechanisms affect key SC properties, such as relaxation times,” says Ishibashi. “By investigating the thickness dependence of the Bi layer in the Bi/Co bilayers, we determined that SCs generated by photon-spin conversion exhibit significantly longer relaxation times.”

Currently, the team is using this approach to study helicity-dependent THz emission in other Bi-like metals with high spin-orbit coupling properties.

スピン流生成メカニズムを通じて緩和時間を明らかにし、スピントロニクスの応用を最適化

スピン流はさまざまな手法で生成されるが、異なる手法によって生じるスピン流の特性を明らかにすることは、未だ重要な課題として残されている。

AIMRで研究を行う石橋 一晃氏(博士後期課程学生)は、次のように説明する。「近年、ビスマス薄膜において、光のヘリシティに依存した光-スピン変換とスピン-電流変換に起因した光電流の発生が報告されました。しかし、両者が同時に起こるため、光-スピン変換のみを分離して研究することは困難でした。」

石橋氏と水上教授らの研究チームは、この課題を解決するため、ビスマス/コバルト二層膜を検討した。この構造により、同一サンプル内で生成された2種類のスピン流を直接比較することで光-スピン変換について明らかにすることができる¹。

研究チームは、ビスマス/コバルト二層膜に円偏光または直線偏光を照射し、チタンサファイアレーザーを用いたテラヘルツ時間領域分

光法で、スピン流に起因するテラヘルツ信号を解析した²。この手法により、スピン流の生成源としてコバルトの超高速減磁とビスマスのヘリシティに依存した光-スピン変換の寄与を分離することができる。その結果、後者のメカニズムによって生成されるスピン流由来のヘリシティ依存テラヘルツ波放射を詳しく調べることに成功した。

「今回のアプローチにより、スピン流の生成メカニズムが、緩和時間などの特性にどのような影響を与えるかを比較することができました。ビスマス膜厚依存性を調査した結果、光-スピン変換によって生成されたスピン流は、緩和時間が非常に長いことが明らかになりました」と、石橋氏は語る。

現在研究チームは、ビスマスのように大きなスピン軌道相互作用を持つ他の金属におけるヘリシティ依存テラヘルツ波放射についての研究を進めている。

Highlight Article

1. Ishibashi K., Iihama S. and Mizukami S. Different spin relaxation properties observed in linearly and circularly polarized laser induced terahertz emission from a Bi/Co bilayer *Physical Review B* **107**, 144413 (2023).

- Reference | 2. Mandal R. et al. *NPG Asia Mater.* **16**, 30 (2024)



Lithium-oxygen batteries:

High-energy, durable graphene-mesosponge cathodes redefine performance potential

リチウム空気電池：

高エネルギー密度と高耐久性を誇る
グラフェンメソスポンジ正極が、
電池性能の新たな可能性を切り拓く

23 December 2024

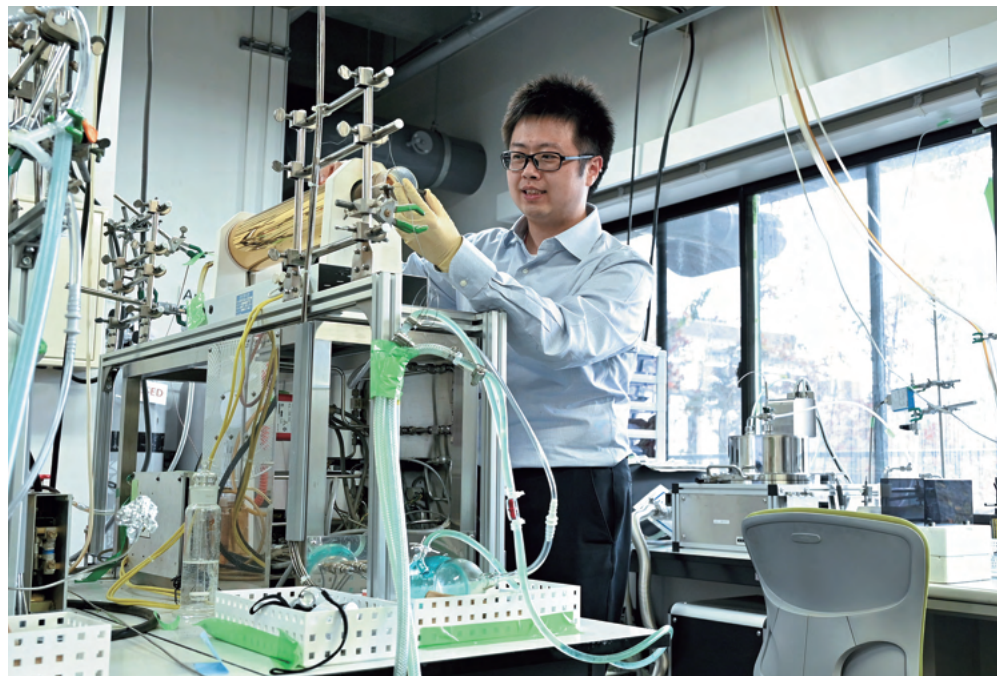
Corresponding Researcher

Wei Yu

余 唯

Assistant Professor

助教



New graphene-based cathode design achieves impressive capacity, stability, and sustainability

Lithium-oxygen (Li-O₂) batteries promise both extremely high energy density and reduced reliance on finite materials such as Co and Ni used in conventional lithium-ion batteries (LIB). However, the practical application of these benefits still requires the development of durable, high-capacity Li-O₂ cathodes.

“Traditional LIB cathode designs not only fail to promote adequate atmospheric oxygen flow but also rely on binder materials that degrade on contact with reactive oxide species” explains Wei Yu, a member of an AIMR research team. “These aspects lead to limited battery capacity and cycle life—hindering the practical application of Li-O₂ batteries.”

In a recent article, Yu, Nishihara and co-workers fabricated a Li-O₂ battery cathode material using free-standing graphene mesosponge (GMS)-sheets with a hierarchically porous, minimally stacked, and

edgeless design¹. This graphene-based approach eliminated the need for oxygen-vulnerable binders.

“Our design’s structural specificity aims to enhance performance by achieving three objectives: hierarchical porosity for better oxygen and Li-ion flow; reduced stacking to maximize specific reaction sites; and the elimination of weak graphene edges for improved stability,” says Yu.

Through a multi-step fabrication process that precisely controls pore sizes across multiple scales, the team demonstrated this cathode material can achieve over 6300 mAh/g mass capacity, 30 mAh/cm² areal capacity, and 480 mAh/cm³ volumetric capacity, along with a stable cycle performance surpassing 260 cycles at moderate current densities.

A future direction will focus on the rational design of Li metal anode to further improve the cycling stability of Li-O₂ batteries under extreme conditions.

新しいグラフェンベースの正極設計が、優れた容量、安定性、持続可能性を実現

リチウム空気電池 (Li-O₂) が注目されている。従来のリチウムイオン電池 (LIB) で使用されるコバルト (Co) やニッケル (Ni) などの希少金属を必要とせず、非常に高いエネルギー密度を有するからであるが、その利点を最大限に活かすためには、高い耐久性と大きな容量を持つ Li-O₂ 正極の開発が急務である。

AIMRの余唯助教は「従来のLIB正極設計では、大気中の酸素を十分に取り込むことができないだけでなく、充放電中に劣化しやすいバインダーポリマーを使用していました。そのため、電池の容量とサイクル寿命に制限が生じ、Li-O₂の実用化が進まない原因となっていました」と、説明する。

近年、余助教、西原教授らの研究チームは、グラフェンの端（エッジ）がほとんど存在せず、グラフェン同士の積層が最小限で、階層的な多孔質構造を有する自立型グラフェンメソスポンジ (GMS) シートを使用して、Li-O₂の正極材料を作製した¹。このグラフェンベースのアプローチにより、酸素によって劣化するバインダーを使用しなくて済むようになった。

「本研究における正極設計では、①酸素とリチウムイオンの流れを改善するための階層的な多孔質構造、②特定の反応サイトを最大化すると同時に材料を軽量化するための積層の削減、③安定性を向上させるためのエッジの排除、という3つの目的の達成による性能向上を目指しました」と、余助教は語る。

研究チームは、複数のスケールで孔径を精密に制御する多段階の製造プロセスを通じて、この正極材料が6300mAh/gの質量容量、30mAh/cm²の面容量、480mAh/cm³の体積容量を達成できることを実証した。また、適切な電流密度条件で260サイクル以上の安定したサイクル性能を示した。

今後は、過酷な条件下におけるLi-O₂のサイクル安定性の向上を目指し、リチウム金属負極設計の最適化に注力していく予定だ。

Highlight Article

1. Yu W., Shen Z., Yoshii T., Iwamura S., Ono M., Matsuda S., Aoki M., Kondo T., Mukai S.R., Nakanishi S. and Nishihara H. Hierarchically porous and minimally stacked graphene cathodes for high-performance lithium-oxygen batteries *Advanced Energy Materials* **14**, 2303055 (2024).



Neural research:

A leap forward with hydrogel technology and modular networks

神経科学研究：

ハイドロゲル技術で実現した モジュール構造型ネットワークで研究が飛躍

14 January 2025

Corresponding Researcher

Yuya Sato

佐藤 有弥

Ph.D. Student
(RIEC, Tohoku University)
博士後期課程学生
(東北大学電気通信研究所)

Corresponding Researcher

**Ayumi
Hirano-Iwata**

平野 愛弓

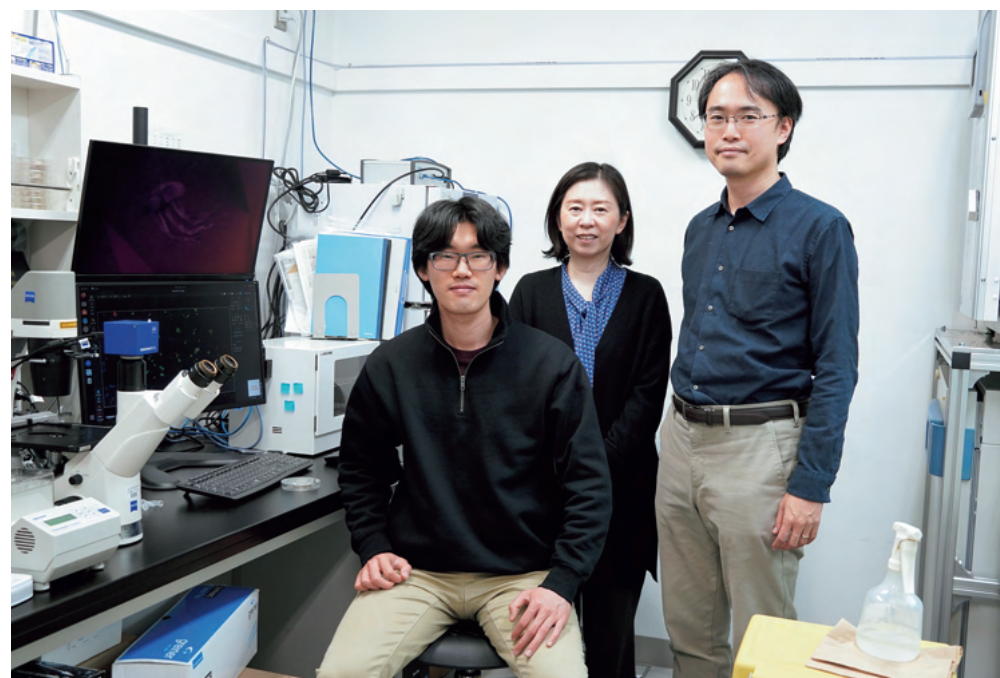
Principal Investigator
主任研究者

Corresponding Researcher

**Hideaki
Yamamoto**

山本 英明

Associate Professor
准教授



— AIMR-led innovations bridge spatial and temporal gaps in neuronal network studies

Understanding the relationship between the structure and function of biological neuronal networks is key to uncovering how specific architectures influence network behavior in healthy and diseased states—providing insights into brain functionality and disorders.

To this end, researchers are actively looking for a way to manipulate neuronal networks into a device that enables the recording of neural activities with both spatial and temporal precision.

“Traditional microelectrode arrays can record neural activities with high temporal precision, but they ignore fine spatial details,” explains Hideaki Yamamoto, a member of an AIMR research team. “We wanted to find a recording method that can also provide exquisite spatial information.”

In a 2023 article¹, Yamamoto, Ayumi Hirano-Iwata and co-workers achieved this objective by combining microfluidic cell engineering with high-density micro-electrode arrays (HD-MEAs).

“In this work, our strategy was to use a hydrogel coating technique to seamlessly integrate microfluidic devices with HD-MEAs,” says Yamamoto. “This approach stabilized the construction of complex neuronal architectures on HD-MEAs that facilitated neuronal activity measurements, while providing precise structural information on the neuronal networks.”

The demonstration of a neuronal-network manipulation and recording method capable of providing precise information on both structure and activity has expanded the team into a fifteen-university research consortium, including AIMR, RIEC, Oita University, Waseda University, and Future University Hakodate. Funded by the MEXT Grant-in-Aid for Transformative Research Areas (A) program, the consortium is entitled “Multicellular Neurobiocomputing².”

A recent result from the consortium explored the possibility of replacing artificial neuronal networks in reservoir-based predictive coding with biologically inspired neuronal network models³.

— 人工神経細胞回路の活動計測を空間・時間双方に高解像度化した AIMR主導のイノベーション

生物の脳を構成する神経細胞がどのようにつながっていて、どのような機能を生み出しているのかを理解することは、健康状態と疾患状態におけるネットワークの動作の違いを明らかにし、脳の働きや神経疾患のメカニズムを解明する上で重要な鍵となる。

こうした神経回路の構造と機能の関係を探るために、時間的にも空間的にも高い解像度で神経活動を記録できるデバイスの上で、神経細胞を自在に操作する技術の開発が進められている。

「従来の多点電極アレイは、高い時間精度で神経活動を記録できるものの、空間解像度には限界がありました。より精緻な空間情報も同時に取得できる方法を模索したことが、今回の研究の出発点です」と、AIMRの山本英明准教授は説明する。

2023年、山本准教授、平野愛弓教授らの研究チームは、マイクロ流体デバイスを用いた細胞操作技術と高密度多点電極アレイ(HD-MEA)を組み合わせることで、この目的を達成した¹。

「私たちは、ハイドロゲルを使った表面修飾技術を応用し、HD-MEA上でマイクロ流体デバイスを自由に扱えるようにしました」と山本准教授は語る。「この技術によって、培養細胞をHD-MEA上に自在に配置し、様々な構造の神経回路を作れるようになりました。その結果、細胞同士の接続情報があらかじめ分かった神経回路(人工神経細胞回路)の活動を詳細に解析することが可能になったのです。」

この細胞操作技術の応用範囲は多岐にわたる。研究チームはAIMR、RIEC(東北大学電気通信研究所)、大分大学、早稲田大学、公立はこだて未来大学など15機関の研究者と連携して、文部科学省 科学研究費助成事業 学術変革領域研究(A)「脳神経マルチセルバイオ計算の理解とバイオ超越への挑戦²」を立ち上げた。

この領域からは2024年10月、リザーバーコンピューティングと予測符号化を統合した脳型情報処理モデルにおいて、従来型的人工ニューラルネットワークを、HD-MEA上での状態を想定した神経細胞ネットワークの数理モデルに置き換えられることを示唆する興味深い成果が発表されたばかりである³。

Highlight Article

1. Sato Y., Yamamoto H., Kato H., Tanii T., Sato S. and Hirano-Iwata A. Microfluidic cell engineering on high-density microelectrode arrays for assessing structure-function relationships in living neuronal networks *Frontiers in Neuroscience* **16**, 943310 (2023).

References

2. Project page: <https://www.mnbc.riec.tohoku.ac.jp/en/about.html>
3. Sato Y. et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **63**, 108001 (2024).



Biomass-derived electrocatalysts:

A leap towards sustainable energy conversion

バイオマス由来の電極触媒：

持続可能なエネルギー変換への大きな一歩

27 January 2025

Corresponding Researcher

Hiroshi Yabu

藪 浩

Principal Investigator

主任研究者

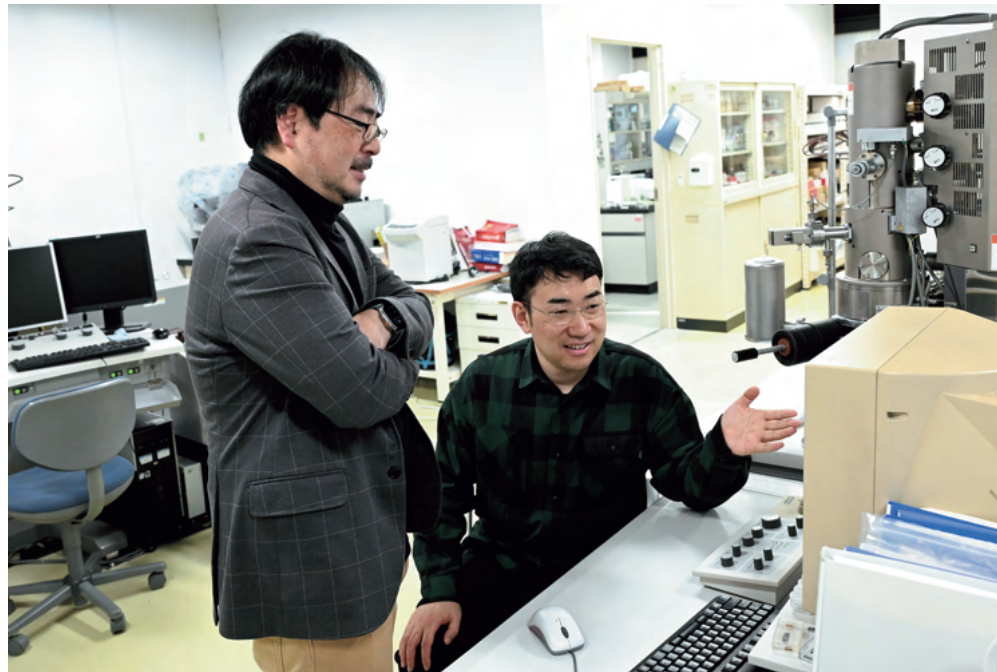
Corresponding Researcher

Tengyi Liu

Specially Appointed

Assistant Professor

特任助教



A functional classification method for biomass-based electrocatalysts

Researchers developing biomass-derived electrocatalysts (BDEs) faced a critical limitation in systematically optimizing these materials. Traditional classifications, which categorized catalysts based on biomass feedstocks like proteins or polysaccharides, fell short: this approach did not adequately account for the diverse functional roles BDEs could play within a catalytic system.

“Without a clear functional understanding of how biomass components contribute as active sites, supports, or fully bio-based systems, new catalysts with desired purposes remained difficult to design,” explains Tengyi Liu, a member of an AIMR research team. “This limitation hindered the broader adoption of BDEs for sustainable energy technologies.”

In a 2023 review article, Liu and Hiroshi Yabu analyzed the progress in biomass-derived electrocatalysts by examining relevant works from the literature, addressing the challenges of inconsistent performance through a more systematic approach¹.

The team introduced a novel classification system for these BDEs. Rather than focusing on feedstocks, the review categorized them based on their roles in the catalytic system—whether as active components, carbon supports, or entirely bio-based catalysts.

“To address these challenges, we carefully analyzed existing studies, distinguishing key insights through a novel approach,” says Liu. “By thoroughly examining synthesis processes, identifying true active sites, and using characterization data to determine scale, we proposed a new framework for categorizing BDEs.”

The novel categorization of BDEs based on their roles and component scales provided a foundation for a biomass-derived database—a resource designed to accelerate the development of tailored catalysts and help researchers address challenges in sustainable energy technologies more efficiently.

バイオマス由来の電極触媒の機能に基づく分類法

バイオマス由来の電極触媒 (BDE) の開発において、材料の最適化を体系的に進めることは難しかった。なぜなら、タンパク質や多糖類など、バイオマス原料に基づいた触媒の分類法が活用されてきたが、BDE が果たす多様な機能的役割を十分に考慮することができていなかったからである。

AIMR 研究チームの Tengyi Liu 特任助教は、「バイオマス成分が活性部位、担体、触媒全体にどのように影響するかについて明確な理解がない状態では、理想的な触媒を設計することは困難でした。この課題が、持続可能なエネルギー技術における BDE の可能性を狭めていました」と説明する。

2023 年、Liu 特任助教と藪浩教授は、先行研究を基にバイオマス由来の電極触媒の進展を分析した。そして、設計に一貫性の欠ける従来のやり方に対して、より体系的に触媒性能を発現させる方法を探った¹。

今回、研究チームは BDE に新しい分類法を導入することで、バイオマス原料そのものではなく、バイオマス材料が触媒システム全体で果たす役割 (活性成分、炭素担体、触媒全体) に焦点を当てている。

「従来法の課題に対処するため、私たちは先行研究を慎重に分析し、新たな手法を通じて鍵となる知見を見出しました。また、合成プロセスを徹底的に調査して真の活性部位を特定し、触媒性能データを検討して指標を決定することで、BDE を分類するための新たな枠組みを構築しました」と Liu 特任助教は語る。

BDE を機能的役割と成分指標に基づいて分類したことで、バイオマス材料のデータベースの基盤が完成した。このデータベースは触媒開発の迅速化や持続可能なエネルギー技術の開発効率化に貢献し、さまざまな課題解決に寄与することが期待される。

Highlight Article

1. Liu T. and Yabu H. Biomass-derived electrocatalysts: Low-cost, robust materials for sustainable electrochemical energy conversion *Advanced Energy & Sustainability Research* 5, 2300168 (2024).



Decoding doubly periodic weaves:

A new era in topological classification

二重周期織り込み構造：

織り込み構造の新たなトポロジー分類

25 February 2025

Corresponding Researcher

Sonia Mahmoudi

Assistant Professor

助教



Novel approach to studying periodic structures with crossing matrices

Doubly periodic weaves—entangled structures with repeating patterns in two independent directions—pose a mathematical challenge. Originally conceived to model real-world structures, such as woven textiles and molecular weaving of polymers, mathematicians have generalized the theory to include weaves with any number of distinct directions, extending beyond practical weaving to a broader topological framework.

However, one major obstacle has been the lack of suitable invariants to classify periodic weaves consistently. Traditional knot invariants struggle to capture the complexity of repeating patterns, particularly in distinguishing different weaves or defining minimal units for analysis.

In a 2023 article, Sonia Mahmoudi and co-workers from AIMR introduced crossing matrices and adapted the concept of crossing numbers to periodic structures¹. These tools offered a framework for the topological classification of doubly periodic untwisted weaves, bridging gaps in prior approaches by including both biaxial and triaxial weaves.

“The use of crossing matrices enabled us to encode the arrangement of crossings in periodic weaves systematically and to compute their crossing number within their minimal unit cells,” explains Mahmoudi. “This provided a robust combinatorial method for analyzing and classifying these topological structures.”

The team demonstrated this by calculating the total crossing number of a weave precisely and by establishing equivalence classes of weaves through cyclic permutations of matrix rows and columns. These results paved the way for advancements—beyond mathematics—in materials science, such as creating more resilient fabrics or designing nanostructures with tailored properties.

Future research aims to extend these methods to more complex periodic entanglements, opening exciting new possibilities in both theoretical and applied sciences, including technical fabrics, molecular weavings, and metamaterials.

交差行列を用いた周期構造研究の新アプローチ

二つの独立した方向に対して周期性を持ったパターンで織り上げられた『二重周期織り込み構造』は、構造はわかっているものの、その仕組みは数学的に解明されていない。もともとこの構造は、織物やポリマーの織り込み構造のような実世界の構造をモデル化するために考案されたものだが、数学者たちはこの理論を一般化して、実用的な織物だけでなく、任意の数の異なる方向性を持つ織り込み構造も含めた、より広範な位相幾何学的枠組みにまで拡張しようと試みている。

しかし、周期的な織り込み構造を分類するのに適した、数学的に一貫性のある不変量がないことが一つの大きな障害となっている。従来の結び目不変量は、特に異なる織り込み構造を区別したり、解析のための最小単位を定義したりするなどの、繰り返しパターンの複雑さをうまく記述できなかった。

AIMRのSonia Mahmoudi助教らの研究チームは、2023年の論文で、交差数の概念を周期構造に適用させた交差行列を導入するというアプローチで、この課題に挑戦した¹。交差行列を用いることで、ねじれない二重周期織り込み構造をトポロジカルに分類することが可能になり、二重周期だけでなく三重周期にも適用できることを証明し、これまでのアプローチのギャップを埋めた。

「交差行列を使うことで、周期的な織物における交差の配置を系統的に符号化し、その最小単位セル内での交差数を計算することができました。これは、周期的な織り込み構造をトポロジカルに分析・分類するための、信頼性の高い組合せ論的手法といえます」と Mahmoudi助教は説明する。

研究チームは、織物の交差数の合計を正確に計算し、行列の行と列の巡回置換によって織り込み構造の同値類を確立することで、これを実証した。

今回の成果は数学分野のみにとどまるものではなく、より弾力性のある織物の作成や、所望の特性を付与したナノ構造の設計など、材料科学の進歩への道を開くものである。

今後は、これらの方法をより複雑な周期的もつれへと拡張し、理論科学だけでなく、テクニカルファブリック、分子レベルの織り込み構造、メタマテリアルなど、応用科学にも適用し、社会実装することを目指している。

Highlight Article

1. Fukuda M., Kotani M. and Mahmoudi S. Classification of doubly periodic untwisted (p, q) -weaves by their crossing number and matrices *Journal of Knot Theory and Its Ramifications* 32, 2350032 (2023).



Antiferromagnets:

Micro-ARPES uncovers exotic NdSb surface states

反強磁性：

マイクロARPESで明らかになった
NdSb表面電子状態のエキゾチックなふるまい

24 March 2025

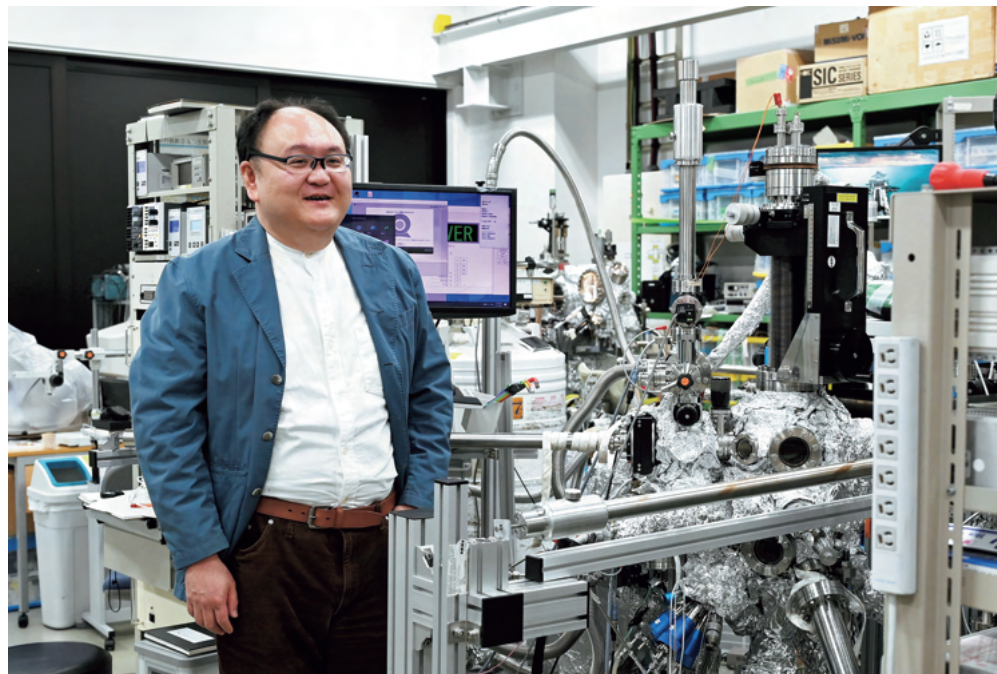
Corresponding Researcher

Seigo Souma

相馬 清吾

Associate Professor

准教授



Possible mechanism for generating spin-split surface states revealed

Understanding the relationship between electronic states and crystal symmetries has driven advancements in superconductors, spintronics, and topological insulators. In antiferromagnetic (AF) materials, an open question is how magnetic symmetry breaking generates exotic surface states (SSs).

However, AF materials like NdSb are composed of grains with varying orientations, making SS investigation challenging: averaging techniques, such as angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES), produce convoluted results due to contributions from multiple surface domains.

In a 2023 article, a team from AIMR used scanning micro-focused ARPES to distinguish the electronic structures of NdSb across three types of AF domains, achieving the first identification of domain-specific SSs¹.

"Our instrument can scan a micro-focused beam to collect electronic information across the surface," explains Seigo Souma, a member of the research

team. "This capability allows us to select single-domain areas for high-resolution, temperature-dependent investigations."

The key result of this study revealed that in the low-temperature AF-ordered phase of NdSb, spin-split SSs completely disappeared at higher temperatures ($T > 16$ K, the Néel temperature of NdSb)—suggesting that the spin order of bulk electrons may induce the emergence of these spin-split SSs.

"Our findings are significant because they demonstrate that SSs in AF magnets can emerge through specific symmetry-breaking mechanisms," says Souma. "The elucidation of this mechanism could open the door to dynamically controlling surface electrons by manipulating bulk magnetic order."

Future research will focus on confirming the topological nature of the AF material SSs and harnessing their external control for applications in spintronics, catalysis, and quantum technologies.

スピン分裂を示す表面電子状態を形成するメカニズム

近年、結晶対称性が電子状態にどのような影響を与えるかについて理解が深まり、その知見に基づき、超伝導体やスピントロニクス、トポロジカル絶縁体などの次世代技術の開発が進んでいる。しかし、次世代スピントロニクスの新材料候補として注目されている反強磁性材料においては、磁気的対称性の破れが表面電子状態のエキゾチックなふるまいにどのような影響を与えるかについてはよくわかっていない。

希土類合金ネオジウムアンチモン (NdSb) のような反強磁性材料は、スピンの向きがバラバラな原子で構成されているため、表面電子状態の計測が難しいという課題がある。これは、角度分解光電子分光 (ARPES) のような固体表面の電子状態を調べる一般的な方法では、スピンの向きが異なる複数の微小領域を含む広い領域を計測対象とするため、平均化した結果しか得られないためだ。

そこで、AIMRの相馬清吾准教授らの研究チームは、微小な領域をピンポイントで測定できるマイクロARPESを用いてNdSbの計測を行った。その結果、3つの異なる領域ごとの表面電子状態を計測することに成功し、その成果を2023年に論文として発表した¹。

「私たちが開発したマイクロARPESでは、表面をマイクロフォーカスビームで照射することで、より微細な面積の電子状態を計測することができます。これにより、単一の微小領域における高解像度計測や温度依存性の測定が可能になります」と相馬准教授は説明する。

マイクロARPES解析からは、NdSbにおいて低温で観測される反強磁性秩序は、より高い温度 ($T > 16$ K, NdSbのネール温度) で電子状態のスピン分裂が完全に消失するという興味深い結果が得られた。これは、バルク電子のスピン配向が表面電子状態のスピン分裂をもたらしている可能性を示唆している。

「この研究は、反強磁性体の表面電子状態は特定の対称性破れによって生じる可能性があることを示した画期的な知見です。この知見を応用することで、バルクの磁気秩序の制御によってダイナミックに表面電子を制御する技術の開発につながると期待されます」と相馬准教授は語る。

今後の研究では、反強磁性体の電子状態がトポロジカルな性質を有することを確認し、電子状態の制御技術をスピントロニクスや触媒、量子コンピューティングへの応用に活用していく予定である。

Highlight Article

1. Honma A., Takane D., Souma S., Wang Y., Nakayama K., Kitamura M., Horiba K., Kumigashira H., Takahashi T., Ando Y. and Sato T. Unusual surface states associated with PT -symmetry breaking and antiferromagnetic band folding in NdSb *Physical Review B* 108, 115118 (2023).

AIMResearch

wpi-aimr.tohoku.ac.jp/en/aimresearch/



AIMResearch is published by the Advanced Institute for Materials Research (AIMR) at Tohoku University in collaboration with Patrick Han from SayEdit.com.

© 2024–2025 AIMR, Tohoku University. This publication may be reproduced in its original form for personal use only. Modification or commercial use without prior permission from the copyright holder is prohibited.

Editorial

**Strategic Public Relations Office
Advanced Institute for Materials Research (AIMR)
Tohoku University**

2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai, 980-8577 Japan
+81-22-217-6146
aimr-outreach@grp.tohoku.ac.jp

東北大学材料科学高等研究所 (AIMR)

広報戦略室

〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平2-1-1
022-217-6146
aimr-outreach@grp.tohoku.ac.jp

ISSN 1884-491X