

AIMR

research

RESEARCH HIGHLIGHTS

A publication of the WPI-
Advanced Institute for
Materials Research

2023



MESSAGE FROM THE DIRECTOR

ごあいさつ

RESEARCH HIGHLIGHTS

| | |
|--|----|
| Thermal biomass upgrading: Synthesizing new multifunctional catalysts 電極触媒: 海洋・畜産廃棄物から新たな多機能触媒を開発 | 05 |
| Amorphous materials: Towards understanding the glass-transition phenomenon 非晶質材料: ガラス転移現象解明への挑戦 | 07 |
| Complex hydride electrolytes: A platform towards divalent metal-ion batteries 錯体水素化物: 二価金属イオン電池実現の鍵を握る固体電解質 | 09 |
| Quantum computing: Towards the spectroscopic observation of Majorana fermions 量子コンピューティング: 幻の粒子「マヨラナ粒子」の分光学的観測を目指して | 11 |
| Single-atom catalysis: Scouting the paths of Hg ⁰ oxidation 単原子触媒: Hg ⁰ をHg ²⁺ へ迅速かつ持続的に酸化 | 13 |
| Organic semiconductors: Towards a new dynamic understanding 有機半導体: 新たな分子ダイナミクスの解明に向けた挑戦 | 15 |
| Magnetic insulators: Investigating the stochasticity of the magnon parametron 磁性絶縁体: 『マグノンパラメトロン』の確率論的性質を探る | 17 |
| Inverse design: A patchy-particle system that can reproduce desired two-dimensional structures 逆設計: 目的の二次元構造を再現するパッチ粒子系を開発 | 19 |
| Graphene mesosponge: A step towards practical lithium-oxygen batteries グラフェンメソスポンジ: 実用的なりチウム空気電池の実現に向けて | 21 |

| | |
|--|----|
| Two-dimensional Chern insulators: Expanding perspectives towards graphene 2次元チャーン絶縁体: グラフェン領域への新展開 | 23 |
| Numerical linear algebra: New communication-hiding methods in high-performance computing 数値線形代数: ハイパフォーマンス・コンピューティングにおける新たな通信隠蔽技術 | 25 |
| Layered borides: New insights from rhombohedral boron monosulfide 層状ホウ化物: 菱面体硫化ホウ素の物性解明に資する手法を開発 | 27 |
| Spintronics: A magnetic tunnel junction design with a MnGa(001) electrode スピントロニクス: マンガンガリウムを用いた磁気トンネル接合 | 29 |
| Electrochemical catalysis: Adapting a thermochemical process to the electrochemical realm 電気化学触媒: 熱化学的プロセスの電気化学分野への適用 | 31 |
| Ferroelectric materials: Unveiling the “ferron” quasiparticle 強誘電体材料: 準粒子『フェロン』を解き明かす | 33 |
| Perforated honeycomb thin films: A new approach to oil–water separation ハニカム状多孔質膜: 油水分離の新たなアプローチ | 35 |
| Spintronics: Entropy probes stochastic relaxation times of nanomagnets スピントロニクス: エントロピー解析によりナノ磁石の確率論的緩和時間を探る | 37 |
| Chiral optics: Helical ribbons templates for chiral perovskite nanocrystal growth キラル光学: キラルペロブスカイトのナノ結晶成長のためのヘリカルリボン状テンプレート | 39 |
| Shape memory alloys: Unlocking the potential of an ultra-light biocompatible alloy 形状記憶合金: 生体適合性を有する超軽量合金の可能性を拓く | 41 |
| Igniting scientific sparks: How public imagination drives research breakthroughs 科学を社会へ: 研究の思わぬ展開を切り拓いたのは人々のイマジネーション | 43 |

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 you AIMResearch 2023.

Since its foundation in 2007, the Advanced Institute for Materials Research (AIMR) has welcomed outstanding researchers from around the world and produced numerous innovative research results in materials science. In 2012, we introduced a mathematical perspective with the aim of identifying universal principles common to different material systems.

This approach of bringing mathematicians and materials scientists together to conduct their research under one roof has been highly successful and has led to the establishment of materials science based on predictions. Building on this collaboration between mathematics and materials sciences, in 2024 we launched a new “3 Fields × 3 Tops” strategy, which will drive the further evolution and development of the institute.

This is a strategy to conduct research in three key fields (3 Fields): Quantum/Spin, Bio/Soft, and Energy, with a focus on achieving Top Science, Top Fusion, and Top Innovation in each field (3 Tops).

この度、AIM Research 2023を皆様にお届けする運びとなりましたことを、大変喜ばしく思っております。

材料科学高等研究所 (AIMR) は、2007年の創設以来、世界中から優秀な研究者を迎え、材料科学分野で多くの革新的な研究成果を生み出してきました。2012年には、異なる材料系に共通する普遍原理を見出すべく、数学の視点を導入。数学者と材料科学者がアンダーワンルーフで研究を行うことで大きな成功を収め、「予見に基づく材料科学」を確立させました。この数学－材料科学連携を基盤としつつ、研究所のさらなる進化と発展を目指して、2024年からは「3フィールド×3トップ」戦略をスタートさせております。これは、量子/スピン、バイオ/ソフト、エネルギーの3つを重点研究分野に据え(3フィールド)、各分野において、トップサイエンス、トップフュージョン、トップイノベーションの3つのトップレベルにおけるフェーズ(3トップ)で研究

In Top Science, we pursue world-leading cutting-edge scientific principles. Top Fusion aims to create innovative scientific principles by combining cutting-edge scientific principles across disciplines. In Top Innovation, we aim to address the challenges facing society by putting the innovative scientific principles generated through our research to practical use through start-ups and collaborations between industry and academia. From basic research to fusion research and social implementation, AIMR brings together the fruits of all the research produced at the institute and will continue to make steady progress toward creating materials that truly contribute to society.

AIMResearch introduces particularly noteworthy papers from among the numerous research projects carried out under this strategy at AIMR, and looks at subsequent developments and other aspects of the research from a different perspective to the papers themselves. I hope you will enjoy this opportunity to experience some of the world’s top-level research and look forward to hearing your opinions.

展開を行う戦略です。トップサイエンスでは、学理における世界最先端を追求します。トップフュージョンでは、その最先端の学理を分野横断的に融合させることにより、革新的な学理の創出を目指します。トップイノベーションでは、生み出された革新的学理をスタートアップ並びに産学連携に結実させることで、社会課題の解決を目指します。基礎研究から融合研究、そして社会実装へと、AIMRから生み出されるすべての研究の果実を結集し、真に社会に貢献する材料創製を実現していくことを目指して、AIMRはこれからも着実な歩みを進めて参ります。

AIMResearchでは、このような戦略の下AIMRで行われた数多くの研究のなかから注目すべき論文を取り上げ、その後の進展等を、論文とは違った切り口でご紹介しております。ぜひ、世界トップレベルの研究の一端に触れていただき、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其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/>



Thermal biomass upgrading:

Synthesizing new multifunctional catalysts

電極触媒:

海洋・畜産廃棄物から
新たな多機能触媒を開発

27 February 2023

Corresponding Researcher

Hiroshi Yabu

藪 浩

Junior Principal Investigator

ジュニア主任研究者



A strategy that aims for rare metal-free catalysis and global resource-circulation

Thermal biomass upgrading is a potent strategy towards synthesizing rare metal-free, multifunctional catalysts for reactions such as the oxygen evolution reaction (OER) and the oxygen reduction reaction (ORR).

One relevant example is a 2022 article by Yabu *et al.* from AIMR, who synthesized a rare metal-free electrocatalyst capable of simultaneous OER/ORR catalyses¹. The strength of this work combined the selection of pig blood biomass and sea-pineapple cellulose-nanofibers starting materials known to produce desired functional structures (i.e., Fe complexes and N- and P-doped carbon fibers) with the detection of these structures following pyrolysis. Complementary OER/ORR performance tests confirmed the success of this approach.

The strategy of the 2022 article is further illustrated by the follow-up work from the same group². Adding vitamin B12 as a third starting material, Yabu *et al.* introduced Co-complex structures to the final product, synthesizing a trifunctional electrocatalyst that also catalyzes the hydrogen evolution reaction in addition to OER and ORR.

"Currently, we are testing our multifunctional catalysts as high-performance zinc-air secondary-battery materials," says Yabu. "Ultimately, we believe this biomass upgrading approach will help replace rare-metal electrocatalysts such as carbon-supported Pt, contributing to the realization of global resource- and energy-circulations."

レアメタルフリー触媒の合成と地球資源の循環を目指した研究戦略

ある種のバイオマスを焼成して得られる炭素は、酸素発生反応 (OER) や酸素還元反応 (ORR) に利用することができる、レアメタルを必要としない多機能触媒として大きな可能性を秘めている。

2022年にAIMRの藪准教授らの研究グループが発表した論文は、その好例である。本論文では、OER/ORRの両方に活性を有するレアメタルフリー電極触媒の合成に成功したことを報告している¹。この研究では、ホヤ由来のセルロース・ナノファイバーやブタの乾燥血粉などの廃棄バイオマスを出発材料として選び、これらを混合・焼成することで、熱分解により鉄、窒素、リンなどの元素をドーピングした炭素の作製に成功した。作製した炭素材料は実際に優れたORR/OER性能を示し、有望な電極触媒であることが示唆された。

藪准教授らは、このアプローチをさらに発展させた研究もすでに発表している²。研究では、第3の出発物質としてビタミンB12を加え、最終生成物にコバルト錯体を導入した。これにより、ORRとOER性能の向上に加え、水素発生反応も触媒する3つの機能を有する電極触媒を合成した。

藪准教授は、「現在、この多機能触媒を高性能な空気亜鉛二次電池の材料としてテストしているところです。最終的には、この廃棄バイオマス由来の触媒が、炭素担持白金などのレアメタル電極触媒の代替となり、地球規模の資源・エネルギー循環の実現に貢献できると考えています」と今後の進展を語っている。

Highlight Article

1. Yabu H., Ishibashi K., Singh Grewal M., Matsuo Y., Shoji N. and Ito K. Bifunctional rare metal-free electrocatalysts synthesized entirely from biomass resources. *Science and Technology of Advanced Materials* 23, 31-40 (2022).

- Reference | 2. Ishibashi K. *et al.* *Adv. Energy Sustainability Res.* 3, 2200107 (2022).

website >>>





Amorphous materials:

Towards understanding the glass-transition phenomenon

非晶質材料:

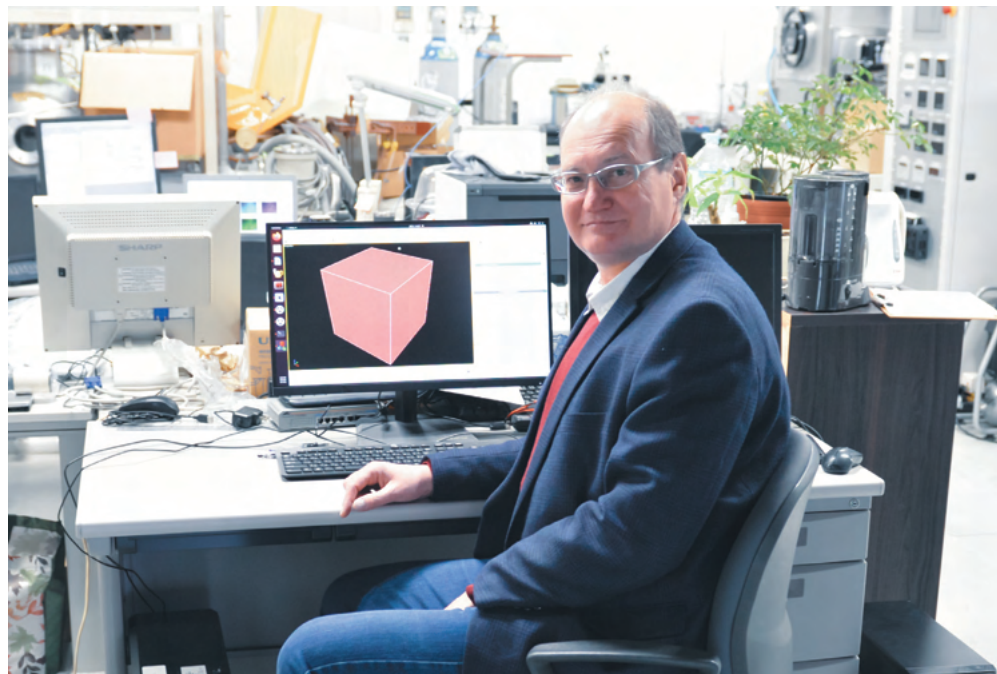
ガラス転移現象解明への挑戦

27 March 2023

Corresponding Researcher

Dmitri Louzguine

Principal Investigator
主任研究者



Visualizing the structural changes of a fundamental process

Amorphous/glassy materials have superior mechanical, chemical, biological, and magnetic properties because of their unique structures and lack of long-range order. However, these unique structural features also make the formative processes of amorphous materials (e.g., glass-transition, structural changes in a liquid upon supercooling, etc.) difficult to understand.

Recent works on liquid-to-glass transitions have made tremendous progress, such as the 2022 article by Louzguine and Ojovan¹. This paper combined molecular dynamics simulation, theoretical calculation, and X-ray diffraction to relate the structural changes of cooling Cu melts in terms of configurons (broken Cu–Cu bonds). This strategy was able to depict the reverse transition of Cu from glass to the supercooled liquid state on heating as the onset of configuron percolation clusters.

Since the 2022 article, the authors have expanded this approach to investigate the structural changes of metallic glass-forming liquids in general, focusing on understanding liquid fragility (non-Arrhenius temperature dependence of the liquid viscosity)². Current research explains the liquid fragility of glass-forming materials using the structural changes in liquids upon supercooling.

“How exactly do liquids undergo glass transition is still a subject of intense research interest in condensed matter physics,” says Prof. Louzguine. “A breakthrough that can visualize this process will also bring us closer to understanding other effects, such as liquid fragility, making the fabrication of amorphous materials with tailored properties possible.”

形成過程における構造変化を可視化するための研究戦略

非晶質材料やガラス材料はユニークな構造を形成しており、原子配列が長距離の規則性を持たないことから、優れた機械的、化学的、生物学的、磁気的特性を有している。一方で、このような構造上の特徴は、ガラス転移や過冷却に伴う液体の構造変化など、非晶質材料の形成過程に対する理解を難しくする要因でもある。

2022年の論文以降、Louzguine教授らは液体のフラジリティ（液体粘度の非アレニウス温度依存性）の解明に焦点を当て、この手法を一般的な金属ガラス形成液体の構造変化にまで拡張した²。現在は、過冷却時の液体の構造変化を用いて、ガラス形成液体のフラジリティを説明する研究に取り組んでいる。

2022年にAIMRのLouzguine教授とインベリアル・カレッジ・ロンドンのOjovan客員教授が発表した論文に代表されるように、近年、液体のガラス転移に関する研究は非常に大きな進歩を遂げている¹。本論文では、コンフィギュロン（切断されたCu–Cu結合）の観点から分子動力学シミュレーション、理論計算、X線回折を組み合わせることで、冷却時のCu熔融体の構造変化を説明している。この新たな研究アプローチにより、加熱時のCuのガラス状態から過冷却液体への逆転移の際、コンフィギュロンの浸透が起ることが明らかになった。

一連の研究を主導しているLouzguine教授は「物性物理学において、液体がどのようにしてガラス転移を引き起こすのかは、いまだに強い関心を集めている研究課題の1つです。このプロセスを可視化できるブレークスルーが実現できれば、液体のフラジリティなど他の現象に対する理解も容易になり、特性を制御した非晶質材料の作製が可能となります」と、今後の進展を語っている。

Highlight Article

1. Ojovan M.I. and Louzguine-Luzgin D.V. On structural rearrangements during the vitrification of molten copper. *Materials* **15**, 1313 (2022).

- Reference** | 2. Louzguine-Luzgin, D.V. *Materials* **15**, 7285 (2022).



Complex hydride electrolytes:

A platform towards divalent metal-ion batteries

錯体水素化物:

二価金属イオン電池実現の 鍵を握る固体電解質

24 April 2023

Corresponding Researcher

Kazuaki Kisu

木須 一彰

Assistant Professor (Institute for Materials Research, Tohoku University)

助教(東北大学金属材料研究所)



From demonstrating Ca^{2+} conduction to implementing Zn^{2+} and Mg^{2+} conductions

To address the ever-increasing demand for portable energy, scientists have been exploring alternative battery chemistries that can both surpass the energy density of lithium-ion (Li^+) batteries, and use abundant, environment-friendly materials for battery production. One such strategy focuses on isolating solid-state electrolytes (SSEs) that are highly conductive to divalent ions such as Ca^{2+} , Zn^{2+} , and Mg^{2+} .

One pioneering example is a 2021 article by Kisu, Orimo *et al.* from AIMR, who designed a SSE using the closo-type complex hydride system¹. Here, the authors demonstrated a new monocarborane counterion-based electrolyte that conducts Ca^{2+} ions without harmful byproducts (e.g., CaF_2), opening a new path towards studying divalent-ion conduction.

Since then, Kisu, Orimo *et al.* have made significant progress, notably in promoting of Zn^{2+} and Mg^{2+} conductions using a neutral-molecule addition approach. Recently, the authors have shown that in the $\text{MB}_{12}\text{H}_{12} \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($n = 0-12$ and $M = \text{Zn}, \text{Mg}$) complex hydride system, the inclusion of water molecules into the crystal structure promotes divalent-ion conductivities compared to the anhydrous crystal².

“By using the neutral-molecule addition approach to tailor closo-type complex hydride systems, we have demonstrated that the conduction of many divalent metal ions by SSEs is possible,” says Kisu. “With Ca^{2+} , Zn^{2+} , and Mg^{2+} conductions, we have developed a complex-hydride platform that will accelerate all-solid-state divalent metal-ion battery research.”

Ca^{2+} 伝導の実証から Zn^{2+} 、 Mg^{2+} 伝導への展開

蓄電デバイスなどの持ち運び可能なエネルギーの需要が高まるなか、研究者たちはリチウムイオン(Li^+)電池に代わる次世代電池の開発に注力している。リチウムイオン電池よりも大きなエネルギー密度を有することはもちろん、電池を構成する材料として、資源が豊富で、環境に優しいことが求められている。これらを満たす材料として、近年特に注目されているのが、 Ca^{2+} 、 Zn^{2+} 、 Mg^{2+} などの二価の金属イオンを組み込んだ固体電解質(SSEs)である。

AIMRの木須助教、折茂教授らの研究グループは、クロソ型錯体水素化物を用いたSSEsに関する研究に焦点を当て、研究を進めてきた。2021年、本研究グループは、二価金属イオン電池の先駆けとなる論文を発表した¹。この論文では、モノカルボランを対イオンとする電解質が、伝導を阻害する CaF_2 などの物質を発生させることなく(フッ素フリー)、 Ca^{2+} イオンを効率よく伝導できることを報告している。本研究成果は、二価金属イオン伝導の研究に新たな道を拓いた。

その後、同研究グループは、中性分子の添加が、 Zn^{2+} や Mg^{2+} の伝導性向上に有効であることを解明するなど、二価金属イオン伝導の発展に大きく貢献してきた。最近の研究では、 $\text{MB}_{12}\text{H}_{12} \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ($n = 0-12$ and $M = \text{Zn}, \text{Mg}$) 錯体水素化物において、結晶構造中に水分子を取り込むと、無水結晶に比べて、二価金属イオン伝導が促進されることを明らかにした²。

研究を主導してきた木須助教は、「中性分子を添加する方法でクロソ型錯体水素化物を合成することにより、SSEsで多くの二価金属イオン伝導が可能であることを実証しました。また、 Ca^{2+} 、 Zn^{2+} 、 Mg^{2+} の伝導性を確立していくことで、錯体水素化物系イオン伝導体の合成におけるプラットフォームを発展させることができます。この成果によって、全固体二価金属イオン電池の実現に向けた研究開発が大きく前進することが期待されます」と語っている。

Highlight Article

1. Kisu K., Kim S., Shinohara T., Zhao K., Züttel A. and Orimo S. Monocarborane cluster as a stable fluorine-free calcium battery electrolyte. *Scientific Reports* 11, 7563 (2021).

- Reference | 2. Kisu K. *et al.* *J. Mater. Chem. A* 10, 24877 (2022).

Quantum computing:

Towards the spectroscopic observation of Majorana fermions

量子コンピューティング:

幻の粒子「マヨラナ粒子」の
分光学的観測を目指して

29 May 2023

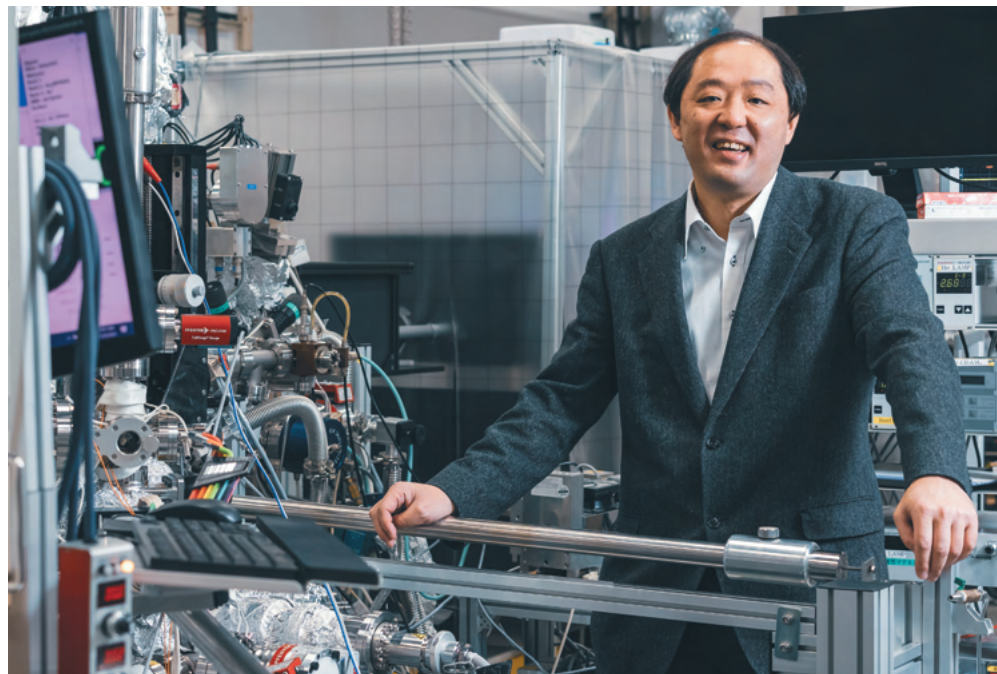
Corresponding Researcher

Takafumi Sato

佐藤 宇史

Principal Investigator

主任研究者



website >>>



Using topological proximity effect to fabricate topological superconductors

One strategy towards quantum computing focuses on the isolation of topological superconductors (TSCs) that can host Majorana fermions. Such an experimental realization would enable the use of the Majorana fermions' exotic properties for creating topologically protected qubits that are resistant to small errors and perturbations.

However, current approaches for fabricating TSC samples mostly rely on the superconducting proximity effect (SPE), which must expose the induced properties of the adjacent material by complex depositions of thin layers. These constraints produce structural inhomogeneities that hinder the observation of Majorana fermions by local spectroscopies.

In a 2020 article, Sato and coworkers from AIMR directly addressed this sample fabrication problem by inducing topological properties in a regular

superconductor using the topological proximity effect—instead of inducing superconductivity in a non-superconducting material using SPE¹.

With this new approach, the AIMR team fabricated a Pb(111)/TlBiSe₂ sample by straightforward deposition of Pb on TlBiSe₂, and detected the substrate-hosted superconductivity on the Pb surface using angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES).

“Our experiment has demonstrated that heterojunctions between topological insulators and regular superconductors can be useful for making new TSCs,” says Sato. “In the future, we will combine this approach with the higher energy and spatial resolutions of the next-generation synchrotron ‘NanoTerasu’ (currently under construction at Tohoku University) to aim for the first ARPES observation of TSC-hosted Majorana fermions.”

トポロジカル近接効果を利用したトポロジカル超伝導体の作製

量子コンピューターの実現に向けた道筋の一つとして、マヨラナ粒子を有するトポロジカル超伝導体(TSCs)の単結晶作製が重要視されている。マヨラナ粒子を実験的に観測できれば、そのエキゾチックな性質を利用して、小さなエラーや摂動に強く、トポロジカルに保護された量子ビットを作製することが可能となる。

しかしながら現在のTSCの作製方法のほとんどは、超伝導体がトポロジカル絶縁体の界面を超伝導化する「超伝導近接効果(SPE)」を利用している。この方法では、薄膜を複雑に積み上げることで誘発された隣接材料の特性が変化する場合がある。このため構造的な不均一性が生じて局所分光法によるマヨラナ粒子の観測が困難となる。

AIMRの佐藤教授らは2020年、SPEの代わりに超伝導体にトポロジカル特性を付加する「トポロジカル近接効果」を利用することで、TSC作製における課題を解決するための糸口を与えたと発表した¹。

研究チームはこの新たなアプローチにより、トポロジカル絶縁体であるTlBiSe₂上にPbを蒸着してPb(111)/TlBiSe₂を作製し、角度分解光電子分光(ARPES)によってPb表面上でのトポロジカル表面状態における超伝導を検出することに成功した。

研究を主導してきた佐藤教授は、「今回の実験により、トポロジカル絶縁体と超伝導体との異種材料接合によって普通の超伝導体をトポロジカル超伝導体化することが、新たなTSCを作製するのに有用なアプローチ方法であることが実証されました。将来的にはこの研究手法に、高エネルギー・高空間分解能を有する次世代放射光施設『ナノテラス』(現在、東北大学新青葉山キャンパスで建設中)を組み合わせて、TSCに存在すると言われるマヨラナ粒子の観測を目指したいと考えています」と語っている。

Highlight Article

1. Trang C.X., Shimamura N., Nakayama K., Souma S., Sugawara K., Watanabe I., Yamauchi K., Oguchi T., Segawa K., Takahashi T., Ando Y. and Sato T. Conversion of a conventional superconductor into a topological superconductor by topological proximity effect. *Nature Communications* 11, 159 (2020).

Single-atom catalysis:

Scouting the paths of Hg^0 oxidation

単原子触媒:

Hg^0 を Hg^{2+} へ

迅速かつ持続的に酸化

12 June 2023

Corresponding Researcher

Hao Li

Junior Principal Investigator
ジュニア主任研究者



website >>>



Theory assisting experiments determines promising catalysts

The single-atom catalysis (SAC) approach aims to minimize the complexities of heterogeneous catalysts by reducing the size of the active metal surface particles down to the atomic level. Recent advances in SAC have demonstrated increased catalytic activity, selectivity, and cost-effectiveness compared to traditional nanoparticle catalysts, promising a wide range of industrial and environmental applications.

However, SAC research often run into one of two types of obstacles: on one hand, experimental discoveries of effective catalysts are time-consuming, because they rely on trial and error; and on the other hand, theoretical simulations of realistic competing reactions require prohibitive computing resources.

In a 2022 article, Li and coworkers from AIMR demonstrated a way to address the first obstacle type

for the SAC oxidation of Hg^0 by O_2 ¹. By comparing the calculated reaction kinetics and thermodynamics, as well as properties such as the Bader charges, d-band centers, and electronegativities of the 3d-metal SACs (Sc to Zn), the authors determined that the Fe-based SAC is most efficient for Hg^0 oxidation—confirming recent experimental results.

“By integrating theoretical calculations and modeling of the 3d metals, we not only have identified the activity trends of the SAC oxidation of Hg^0 by O_2 , but we have also provided the first comprehensive catalyst-design guidelines for this reaction,” says Li. “In the future, we will focus on designing the optimal Fe-based SAC with maximum Hg^0 -oxidation activity, selectivity, and cost-effectiveness.”

理論と実験を組み合わせて、優れた触媒の探索を効率化

単原子触媒 (SAC) とは、活性金属表面を構成する粒子を単一原子レベルまで小さくすることで、利用効率を最大化したものである。近年、従来のナノ粒子触媒よりも、触媒活性、選択性、コストパフォーマンスの面で優れたSACが開発され、産業界や環境分野での応用が期待されている。

しかしながら有望なSACを探索する際に、2つの大きな課題に直面する。1つ目は、ある程度実験的にトライアンドエラーを積み重ねる必要があること、2つ目は、競争反応のシミュレーションに膨大な計算資源が必要となることである。これらの課題がSAC研究の進展を妨げる要因となっている。

AIMRのLi准教授らは2022年、 O_2 による Hg^0 の酸化反応を駆動する10種類の3d遷移金属SAC (Sc~Zn) を設計し、律速段階の

エネルギー障壁を計算する手法を提案した¹。彼らは、3d遷移金属SAC (Sc~Zn) のバーダー電荷、dバンド中心、電気陰性度などの性質に加え、反応速度や熱力学を比較した詳細な理論解析を行い、Feを主成分としたSACが Hg^0 の酸化反応に最も効率的であることを見出した。これは、近年報告された実験結果とも一致する。

研究を主導してきたLi准教授は、「理論計算と3d遷移金属のモデリングにより、 O_2 による Hg^0 酸化の活性傾向を明らかにしただけでなく、この反応においては初となる有効な触媒設計の指針を提供することができました。今後はFeを主成分とし、 Hg^0 酸化活性、選択性、コストパフォーマンスを最大化するSACの設計と開発に注力していきます」と語っている。

Highlight Article

1. Yang W., Chen X., Feng Y., Wang F., Gao Z., Liu Y., Ding X. and Li H., Understanding trends in the mercury oxidation activity of single-atom catalysts. *Environmental Science Nano* 9, 2041 (2022).



Organic semiconductors:

Towards a new dynamic understanding

有機半導体:

新たな分子ダイナミクスの
解明に向けた挑戦

26 June 2023

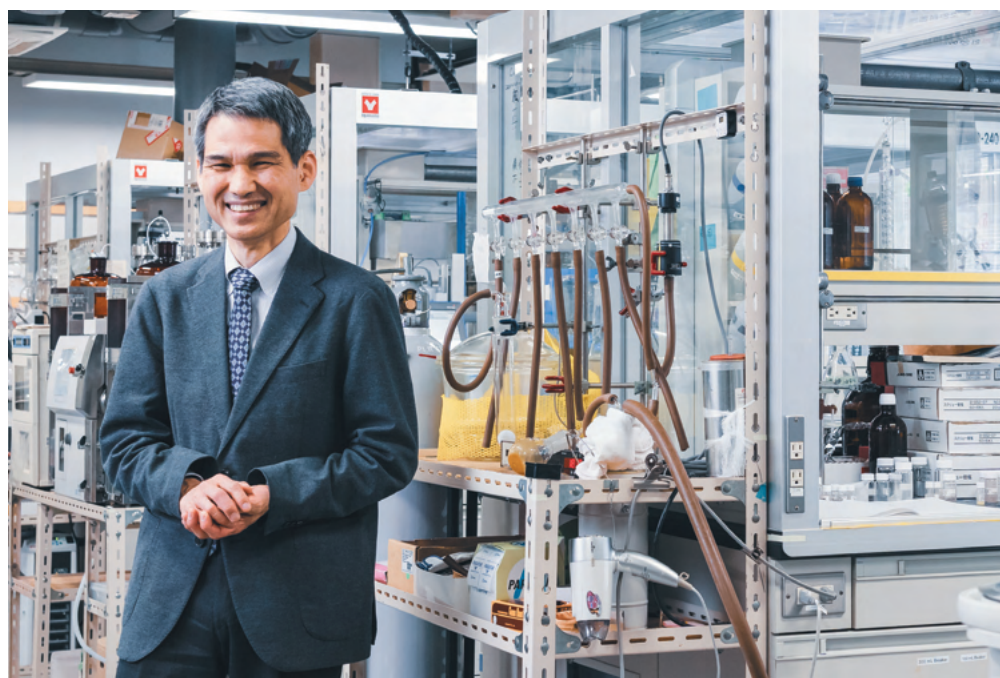
Corresponding Researcher

Kazuo Takimiya

瀧宮 和男

Principal Investigator

主任研究者



Molecular dynamic disorder may help future organic semiconductor design

A new trend in organic semiconductor (OSC) research is challenging the old assumption that charge transfers occur within static molecular lattices.

Recent studies have shown that, even at low temperatures, many OSCs exhibit a high degree of molecular motion. This type of dynamic disorder can locally affect charge transfers, and globally affect the materials electronic properties, questioning how high-performance OSCs should be designed.

A 2022 article by Takimiya *et al.* from AIMR exemplified this trend. By measuring the carrier mobilities using single-crystal field-effect transistors (SC-FETs), and by simulating the dynamic disorders using the band-like model of two dinaphthothienothiophene (DNTT) regioisomers, the authors found

that the transport properties of OSCs are correlated with their susceptibilities to molecular motions¹.

"Using traditional approaches—such as thin-film FETs and the static hopping model—we could not distinguish the two DNTTs either in carrier mobilities, or in dynamic disorders," says Takimiya. "Our results not only support the new dynamic picture, but also suggest the use of dynamic-disorder simulations as a complementary tool for isolating and designing the next high-performance OSCs."

The AIMR team is now developing a crystal-structure simulation method that can interrogate solid-state properties such as the dynamic disorder using only on the molecular structure of a target OSC.

次世代の有機半導体設計の鍵を握る分子動力学の乱れ

有機半導体 (OSC) 研究においては、従来から常識とされてきた「静的な結晶格子中で電荷移動が生じる」という定説を覆す新たな知見が徐々に浸透している。

近年の研究の進展により、OSCの多くは低温であっても結晶中で高度な分子運動を行っていることが明らかとなっている。この分子の動的な乱れ(ダイナミック・ディスオーダー)は局所的な電荷移動や全体の電子特性に影響する可能性が示唆されている。そのため、この詳細を解明することが高性能なOSCを開発する上での課題の1つであった。

2022年、AIMRの瀧宮教授らは、ダイナミック・ディスオーダーが物質の電子構造に大きく影響することを実証した。本研究グループは、ジナフトチエノチオフェン(DNTT)の2つの位置異性体を対象とし、単結晶電界効果トランジスタ(SC-FET)を用いたキャリア移動度の測定とバンドライクモデルを用いた分子動力

学(MD)シミュレーションを行った。その結果、OSCの電荷輸送特性は分子運動に対する感受性と相関することを見出した¹。

研究を主導した瀧宮教授は、「薄膜FETや静的ホッピングモデルといった従来のアプローチでは、キャリア移動度の面でも、ダイナミック・ディスオーダーの面でも、DNTTの2つの位置異性体を区別することはできませんでした。今回の結果は、明らかになりつつある分子ダイナミクスの新たな性質の存在を裏付けるだけでなく、次世代の高性能なOSCを設計するための補完的なツールとして、MDシミュレーションが有用であることを示唆しています」と、コメントしている。

現在、瀧宮教授の研究チームはターゲットとなるOSCの分子構造のみを用いて、ダイナミック・ディスオーダーなどの固体物性を解析できる結晶構造シミュレーションの開発に取り組んでいる。

Highlight Article

1. Takimiya K., Bulgarevich K., Horiuchi S., Sato A. and Kawabata K. Bandlike versus temperature-independent carrier transport in isomeric diphenyldinaphtho[2,3-b:2',3'-f]thieno[3,2-b]thiophenes. *ACS Mater. Lett.* 4, 675-81 (2022).

Magnetic insulators:

Investigating the stochasticity of the magnon parametron

磁性絶縁体:

『マグノンパラメトロン』の
確率論的性質を探る

10 July 2023

Corresponding Researcher

Mehrdad Elyasi

Assistant Professor

助教



— Towards the development of magnetic systems in unconventional computing architectures

Researchers in the field of magnetism and spintronics are actively investigating the physics of magnetic structures to uncover their potential applications in unconventional computing paradigms.

To this end, one area of investigation is the behavior of “magnon parametrons,” where parametrically pumped magnons in magnetic disks exhibit Ising spin-like characteristics¹. A 2022 article by Elyasi, Bauer *et al.* from the AIMR explores the theory of this behavior, emphasizing the importance of thermal and quantum statistics².

“The controlled stochastic switching observed in the magnon parametron makes it a promising candidate for probabilistic bit operations; further-

more, at low temperatures, quantum effects are predicted to come into play,” says Elyasi. “By understanding the underlying physics of this particular device, the authors are one step closer to the development and implementation of magnetic systems in unconventional computing architectures.”

The team is now finalizing a joint experimental/theoretical article that explores a new strategy to overcome magnetic damping, an important stumbling block for quantum applications of features such as magnon parametrons.

— 次世代のコンピューティング・アーキテクチャにおける 磁気システム開発への挑戦

磁性・スピントロニクス分野では、新たなコンピューティング・パラダイムの創出を目指し、物質の磁気構造やその特性に関する研究が盛んに行われている。

なかでも近年注目を集めているのが、マグノンパラメトロンという粒子だ。この粒子は磁気ディスク中のマグノンがパラメトリックポンピングによって励起されることで生成し、イジングスピンの性質を示すという特徴を持つ¹。2022年、AIMRのElyasi助教、Bauer教授らの研究チームは、統計熱力学と量子統計の観点からマグノンパラメトロンの性質の起源を明らかにした論文を発表した²。

本研究を主導したElyasi助教は、「マグノンパラメトロンで見られる確率的スイッチングを制御できれば、確率ビット(Pビット)

の有力候補の1つとなります。また、低温では量子効果が働くと予測されています。この特殊なデバイスの原理を深く理解することで、次世代のコンピューティング・アーキテクチャにおける磁気システムの開発と実装にまた一歩近づくことができます」と研究の意義を語っている。

マグノンパラメトロンの持つ量子論的な特性を応用する際に障害となるのが磁気制動だ。研究チームは現在、この課題の解決に向けた新たな戦略を探るため実験と理論の両方からアプローチしており、近く論文として発表する予定である。

Highlight Article

2. Elyasi M., Saitoh E. and Bauer G.E.W. Stochasticity of the magnon parametron. *Physical Review B* 105, 054403 (2022).

Reference

1. Makiuchi T. *et al.* *Appl. Phys. Lett.* 118, 022402 (2021).

website >>>





Inverse design:

A patchy-particle system that can reproduce desired two-dimensional structures

逆設計:

目的の二次元構造を再現する
パッチ粒子系を開発

24 July 2023

Corresponding Researcher

Natsuhiko Yoshinaga

義永 那津人

Associate Professor

准教授

Corresponding Researcher

Uyen Tu Lieu

Specially Appointed

Assistant Professor

特任助教



Elucidating self-assembly in reverse

Materials discovery and optimization increasingly involve “inverse design.” Using computational models, simulations, and machine learning algorithms, this approach works backwards—starting from the target properties—to determine the model that can reproduce the optimal atomic or molecular structure of a material.

Combined with the conventional forward methods, inverse design is expected both to accelerate discoveries, and to provide a clearer understanding of the property/structure relationship of materials.

A 2022 article by Lieu and Yoshinaga from AIMR illustrates the current progress in inverse design by formulating a patchy-particle system that can reproduce two-dimensional self-assembled structures, such as the kagome lattice or the dodecag-

onal quasicrystals¹. Using a relative entropy-based machine-learning algorithm, the authors were able to determine the patches necessary for obtaining the desired target structures.

“This system created by inverse design has enabled us to interrogate specific aspects of self-assembly, such as the kinetic path of the structural formation of quasicrystals²,” says Yoshinaga. “Our next step is to use this system to investigate the effects of dynamic processes such as temperature and pressure changes, or time-dependent flow and deformations.”

Currently, the team is using reinforcement learning to study the temperature control of the self-assembled quasicrystal structures.

自己組織化を逆から解き明かす

近年、新素材の発見や最適材料の選定に『逆設計』を利用する方法が注目されている。逆設計とは計算モデリング、シミュレーション、機械学習のアルゴリズムによる解析を行い、目的とする物性から最適な原子構造や分子構造を実現するモデルを逆算する方法だ。

逆設計を従来の手法と組み合わせることで、材料の早期発見につながると同時に、構造と物性の相関についてより理解が深まることが期待されている。

2022年、AIMRのLieu特任助教と義永准教授らの研究チームは、カゴメ格子や十二角形準結晶などの二次元の自己組織化構造を再現できるパッチ粒子系を開発した¹。このモデルでは相対エントロピーに基づく機械学習のアルゴリズムを用いており、目的とする構造に必要なパッチ粒子を決定することができる。

本研究を主導した義永准教授は、「今回、逆設計で開発したパッチ粒子系により、準結晶の構造形成における動力学的反応経路など、自己組織化の一部の側面について調べることができるようになりました²。これらの成果を活かして、今後は温度や圧力の変化、あるいは時間に依存した流動や変形といった動的過程の影響を明らかにしたいと考えています」と、今後の進展を語っている。

研究チームは現在、強化学習を用いて、自己組織化した準結晶の温度を制御する手法の確立に注力している。

Highlight Article

1. Lieu U.T. and Yoshinaga N. Inverse design of two-dimensional structure by self-assembly of patchy particles. *The Journal of Chemical Physics* **156**, 054901 (2022).

- Reference** | 2. Lieu U.T. and Yoshinaga N. *Soft Matter* **18**, 7497-7509 (2022).

Graphene mesosponge:

A step towards practical lithium-oxygen batteries

グラフェンメソスポンジ:

実用的なリチウム空気電池の実現に向けて

9 August 2023

Corresponding Researcher

Wei Yu

Specially Appointed Assistant Professor
特任助教



Elucidating a unique sequential catalytic mechanism

Lithium-oxygen batteries (LOBs) hold great potential as the next-generation energy-storage devices due to their high theoretical energy densities. However, unlocking their full capabilities relies on understanding how catalytic carbon cathodes effectively mitigate the issue of high overpotentials in LOBs.

To explore this, a 2023 article by Yu, Nishihara and co-workers from AIMR investigated the effects of the graphene basal-plane (topological) defects and of the loaded Ru nanoparticles on the oxygen reduction/evolution reaction at LOB carbon cathodes¹.

By synthesizing, characterizing, and monitoring the electrochemical performances of edge-site-free graphene mesosponge (GMS) cathodes with abundant defects and Ru loads, the team determined that while all GMS-based cathodes improved the discharge capacities compared to conventional carbon

cathodes, the presence of Ru enhanced the cathode cycling stability. Moreover, the detection of two charge plateaus suggested a sequential catalytic mechanism involving both features, effectively reducing overpotential.

“The demonstration of sequential mechanisms was a significant step in LOB research,” says Yu. “It prompted us to use GMS to further study the catalytic effects of topological defects independently², enabling us to confirm the two charge plateaus correspond to the decomposition of Li_2O_2 nanosheets by the topological defects, and the decomposition of Li_2O_2 toroids by the Ru nanoparticles.”

Future directions by the research team will focus on the design of free-standing and highly porous cathodes to realize practical high-performance LOBs.

連続触媒反応のメカニズムを解明

リチウム空気電池 (LOB) は理論上、高いエネルギー密度を持つため、次世代のエネルギー貯蔵デバイスとして大きな可能性を秘めている。一方で、LOB の能力を最大限に引き出すには、触媒となる炭素正極がLOB の高い過電圧を緩和するメカニズムを理解することが鍵となる。

このメカニズムを明らかにするため、2023年にAIMRのYu特任助教、西原教授らの研究チームは、グラフェンのペーサル面欠陥 (トポロジー欠陥) と、グラフェンに担持されたRuナノ粒子がLOB炭素正極での酸素還元・酸素発生反応に及ぼす影響を調べた¹。

研究チームは、エッジサイトを持たず、多くのトポロジー欠陥を有するRu担持グラフェンメソスポンジ (GMS) 正極を合成し、電気化学的性能の評価を行った。その結果、GMS正極では従来の炭素正極

よりも放電容量が向上し、担持されたRu粒子により正極のサイクル安定性が増すことが明らかとなった。また、GMSとRuによる連続的な触媒反応により、過電圧が効率よく低下することがわかった。

本研究を主導したYu特任助教は、「連続的な触媒反応機構を実証することは、LOB研究における重要なステップでした。今回、GMSを用いてトポロジー欠陥の触媒作用についてさらに詳しく調べることになりました²。その結果、2つのプラトー電位がトポロジー欠陥による Li_2O_2 ナノシートの分解とRuナノ粒子による Li_2O_2 環状体の分解に対応していることを明らかにできました」と、研究成果について語っている。

研究チームは今後、自立型の多孔質正極の設計に焦点を当て、実用的な高性能LOBの実現を目指した研究をさらに進めていく予定だ。

Highlight Article

1. Shen Z., Yu W., Aziz A., Chida K., Yoshii T. and Nishihara H. Sequential catalysis of defected-carbon and solid catalyst in $\text{Li}-\text{O}_2$ batteries. *Journal of Physical Chemistry C* 127, 6239–6247 (2023).

Reference | 2. Yu W. et al. *Adv. Sci.* 10, 2300268 (2023).

website >>>





Two-dimensional Chern insulators: Expanding perspectives towards graphene

2次元チャーン絶縁体:

グラフェン領域への新展開

28 August 2023

Corresponding Researcher

Tomoki Ozawa

小澤 知己

Junior Principal Investigator

ジュニア主任研究者



— Appreciation from the twisted bilayer graphene community inspires topological-insulator researchers

Sometimes it pays to find out who is reading your work; unexpected attention can often expand ideas to new directions.

In a 2021 article, Ozawa and Mera from AIMR explored the relationship between the topology and the quantum metric—two measures that capture very different aspects—of two-dimensional Chern insulators¹.

Using various Chern insulator models, the team found that the inequality relationship between the Chern number (topology) and the quantum volume (quantum metric) not only holds true, but it also approaches equality under certain conditions. Further, they determined that the condition for equality is related to the mathematical structure studied in the field of complex geometry called Kähler manifold². These results were expected to address researchers interested in characterizing two-dimensional topological insulators.

However, after publication, the team found that the article was often cited by researchers working on

the fractional quantum Hall (FQH) effect in twisted bilayer graphene (TBG).

“When we wrote the paper, we did not make the connection with the TBG system,” says Ozawa. “But seeing the interest from this specific community made us realize that the *condition for inequality becoming equality* might have direct implications on phenomena such as the TBG’s magic angle.”

In a follow-up article, the team related their results to the TBG system by introducing the concept of Kähler bands to describe topological insulators that satisfy the equality conditions, focusing on bands with constant curvatures that are conducive to FQH states.

“I am grateful for the unexpected appreciation from the TBG community,” says Ozawa. “It drew me into a new field, enabling me to expand my expertise to this day³.”

— ツイスト2層グラフェンとの予期せぬ出会いが拓いたトポロジカル絶縁体のフロンティア

自分の論文を誰が読んでいるのかを知ることが、良い結果につながることもある。予期せぬ注目を浴びることで、自身のアイデアが新たな方向へと広がることも多い。

2021年の論文で、AIMRの小澤准教授とMera助教（研究当時）は2次元チャーン絶縁体のトポロジーと量子計量という、まったく異なる側面をとらえる2つの性質の関係を明らかにした¹。

研究チームはさまざまなチャーン絶縁体モデルを用いて研究を進め、トポロジーと関係するチャーン数と量子計量の積分（研究チームはこの量を量子体積と呼んだ）の間にある不等式が成り立ち、また、特定の条件下では、その関係が等式に近づくことを発見した。さらにこの等式の成立条件が、ケーラー多様体と呼ばれる複素幾何学の分野で研究されている数学的構造と関連していることを突き止めた²。チームは当初、こうした結果は、2次元トポロジカル絶縁体の特徴を探る研究者たちの関心を引くだろうと予想した。

しかし発表後、彼らはこの論文がツイスト2層グラフェン（TBG）における分数量子ホール（FQH）効果の研究者たちによってたびたび引用されていることに気がついた。

研究を主導した小澤准教授は「私たちがこの論文を執筆したとき、TBG系との関連性については考えていませんでした。しかしながら、TBGコミュニティからの関心が強いことを知り、不等式が等式になる条件が、TBGのマジック・アングルに相当する状況に直接関係している可能性があることに気づきました」と、背景について語っている。

研究チームは続く論文で、等式の条件を満たすトポロジカル絶縁体を表すためにケーラーバンドという概念を導入した。そして、FQH状態に寄与するコンスタントな曲率を持つバンドに焦点を当てることで、TBG系に関連づけた結果を導き出した。

小澤准教授は「TBGコミュニティからの思いがけない評価のおかげで、新しい分野を開拓し、自身の専門性を広げることができたのです」と、予期せぬ出会いに感謝している³。

Highlight Article

1. Ozawa T. and Mera B. Relations between topology and the quantum metric for Chern insulators. *Physical Review B* **104**, 045103 (2021).

References

2. Mera B. and Ozawa T. *Phys. Rev. B* **104**, 045104 (2021).
3. Mera B. and Ozawa T. *arXiv*:2304.00866 (2023).



Numerical linear algebra:

New communication-hiding methods in high-performance computing

数値線形代数:

ハイパフォーマンス・コンピューティングにおける
新たな通信隠蔽技術

25 September 2023

Corresponding Researcher
Viet Q.H. Huynh

Assistant Professor
助教

Corresponding Researcher
Hiroshi Suito

水藤 寛
Principal Investigator
主任研究者



Towards an iterative method with low communication cost for solving large linear systems

Many scientific and engineering challenges—including structural analysis, image and signal processing, fluid dynamics, etc.—are addressed by solving linear equation systems $Ax = b$ (where A is a coefficient matrix that is often large and sparse, b is a known vector, and x is the unknown vector). These equations often require high-performance computing (HPC) systems to obtain accurate solutions within a reasonable time frame.

However, the increased computing power of HPCs is a double-edged sword: while the sheer number of processors offers the potential for solving complex problems more efficiently, it also introduces time-lags related to communication and synchronization.

In a 2023 article, Huynh and Suito from AIMR addressed this issue by proposing a new method based on two recent approaches: the pipelined

BiCGStab (p-BiCGStab) and the single-synchronized BiCGSafe (ssBiCGSafe)¹. The proposed method inherits advantageous characteristics from each approach, namely, hiding communication latency and utilizing only one global reduction phase per iteration, respectively. By merging these strengths, the proposed method offers enhanced benefits for application in HPC systems.

“Through numerical experiments, we have shown that our proposed method significantly improves both convergence behavior and execution time when compared to either the p-BiCGStab or ssBiCGSafe approaches,” says Suito. “In the future, I anticipate these results will contribute to the development of a more universal algorithm capable of addressing a wide range of complex scientific problems such as numerical simulations of large-scale fluid flow using supercomputers.”

大規模線形方程式を解くための通信コストの低い反復法の開発

構造解析、画像・信号処理、流体力学などの科学的・工学的課題の多くは、連立線形方程式 $Ax = b$ (A : 大次元で疎な係数行列、 b : 既知ベクトル、 x : 未知ベクトル) を解くことに帰着される。これらの方程式を短時間で正確に解くためには、ハイパフォーマンス・コンピューティング(HPC)システムが求められる。

しかしながら、HPCの演算能力の向上は重大なジレンマを孕んでいる。それは、プロセッサの数が多いほど、複雑な問題をより効率的に解決できる可能性が高まるが、通信や同期に関するタイムラグが発生しやすくなるということである。

この課題を解決すべく、AIMRのHuynh助教と水藤教授は、2023年の論文において、パイプラインBiCGStab法(p-BiCG-

Stab)と単同期BiCGSafe法(ssBiCGSafe)を組み合わせた新たな手法を提案した¹。この手法は、反復ごとに1回の大域的な縮約しか行わないことで通信遅延(レイテンシ)を隠蔽し、それぞれの手法のメリットを継承・融合することで、HPCシステムにおいて優れた性能を示すことができる。

研究チームは「従来のp-BiCGStabやssBiCGSafeによる手法と比較して、今回新たに開発した手法では、収束挙動と実行時間の両方が大幅に改善されることが数値計算により明らかとなりました。将来的には、スーパーコンピュータを使った大規模な流体の数値シミュレーションのような幅広く複雑な問題に対応できる、より普遍的なアルゴリズム開発に貢献するものと期待しています」と、成果についてコメントしている。

Highlight Article

1. Huynh V.Q.H. and Suito H. Communication-hiding pipelined BiCGSafe methods for solving large linear systems *Applied Mathematics and Computation* **449**, 127868 (2023).



Layered borides:

New insights from rhombohedral boron monosulfide

層状ホウ化物:

菱面体硫化ホウ素の
物性解明に資する手法を開発

23 October 2023

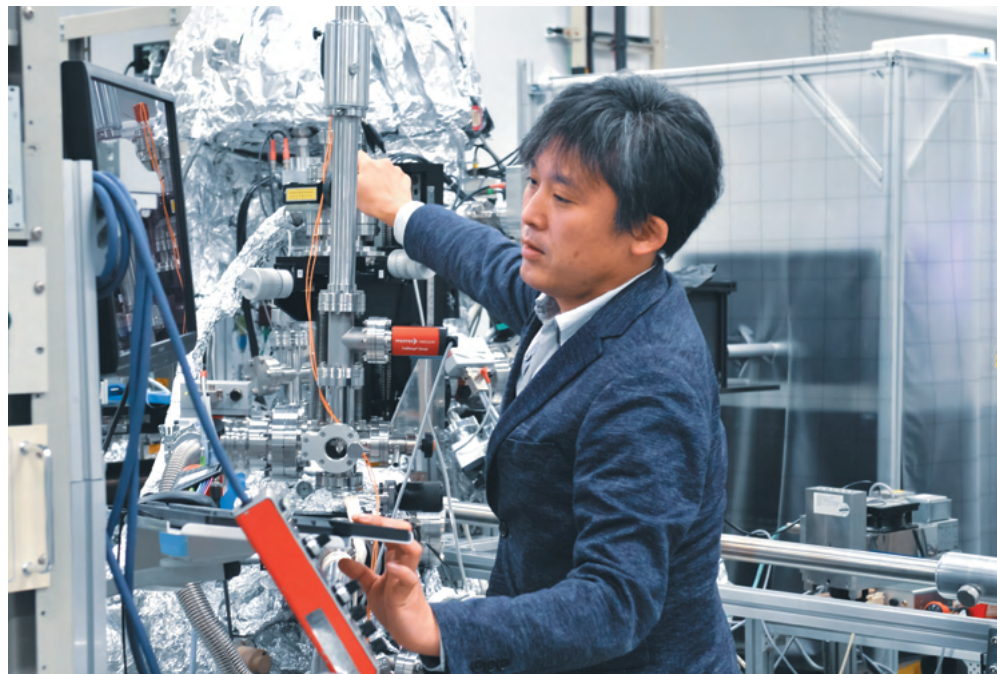
Corresponding Researcher

Katsuaki Sugawara

菅原 克明

Associate Professor

准教授



Exploring the challenges of studying materials with small or powdered crystals

Studying materials with small or powdered crystals has long been a challenge in materials science.

One such example is the layered rhombohedral boron monosulfide (r-BS), whose two-dimensional BS single layers are predicted to exhibit properties such as high hydrogen storage, efficient photocatalysis, and high- T_c superconductivity. However, current fabrication methods can only produce r-BS in the powder single crystal form, making spectroscopic investigations difficult—even for advanced techniques such as microfocused angle-resolved photo-emission spectroscopy (μ -ARPES).

“Technically, the small size of the r-BS grains ($< 30 \mu\text{m}$) is not a problem for μ -ARPES measurements,” says Katsuaki Sugawara, a member of an ARPES research team at AIMR. “The challenge lies in how to reliably select and expose the ideal grain sample to the microfocused beam.”

In a 2023 article¹, the AIMR team achieved just this by first dispersing r-BS powder onto a Au substrate before cleaving the sample in the ultrahigh-vacuum instrument chamber. The team then used optical microscopy and scanning μ -PES to locate and select the ideal r-BS powder crystals for local ARPES measurements, respectively.

“Our sample-preparation methodology enabled us to make the first high-quality ARPES observation of the r-BS electronic structure; our results show that r-BS may be a semiconductor with a substantial bandgap ($> 0.5 \text{ eV}$) and a valence-electron effective mass larger than that of h-BN,” highlights Sugawara.

“As we move on, we will expand this methodology to investigate the band structure and fermiology of a wide variety of powder crystals that have yet to be experimentally probed.”

微小な粉状結晶の性質を探る

微小な粉状結晶の電子構造の解明は、材料科学における長年の課題であった。

微小な粉状結晶の一例として、層状構造を有する菱面体硫化ホウ素 (r-BS) が挙げられる。r-BSの単層構造である硫化ホウ素 (BS) シートは、高い水素貯蔵能、効率的な光触媒、高温超伝導などの優れた物性を示すことが期待されている。しかしながら現在の製造方法では、r-BSを微小な粉状結晶でしか得ることができないため、マイクロ集光角度分解光電子分光法 (μ -ARPES) のような高度な技術を用いても、その電子物性を解明することは困難であった。

AIMRの菅原克明准教授は、「r-BS粒子は30 μm 未満と非常に小さな粉状試料ですが、 μ -ARPES測定において、サイズそのものは技術的な障害ではありません。課題は、マイクロ集光ビームによるARPES測定に適した理想的な清浄な結晶表面をもつ粒試料を、いかにして作製・選定するかでした」と話す。

2023年、研究チームは、試料を劈開する前に超高真空装置チャンパー内で金 (Au) 基板上にr-BS粉末を分散させた後テープで劈開することで、この課題をクリアした¹。作製した試料を光学顕微鏡と走査型 μ -ARPESで観察することで、清浄な粉末結晶の位置を特定し、その電子状態の解明に成功した。

菅原准教授は、「今回見出した試料準備手法によって、高分解能の μ -ARPESでのr-BSの電子構造解析に初めて成功しました。その結果、r-BSが0.5eVよりも大きなバンドギャップを持ち、h-BNよりも大きな価電子有効質量を持つ半導体である可能性が示唆されました。今後、この手法をさらに発展させ、まだ実験的に検証されていないさまざまな粉末結晶のバンド構造とフェルミオロジーを明らかにしていきたいです」と、研究の成果や今後の展開についてコメントしている。

Highlight Article

1. Sugawara K., Kusaka H., Kawakami T., Yanagizawa K., Homma A., Souma S., Nakayama K., Miyakawa M., Taniguchi T., Kitamura M., Horiba K., Kumigashira H., Takashi T., Orimo S., Toyoda M., Saito S., Kondo T. and Sato T. Direct imaging of band structure for powdered rhombohedral boron monosulfide by microfocused ARPES *Nano Letters* **23**, 1673-1679 (2023).



Spintronics:

A magnetic tunnel junction design with a MnGa(001) electrode

スピントロニクス:

マンガンガリウムを用いた
磁気トンネル接合

13 November 2023

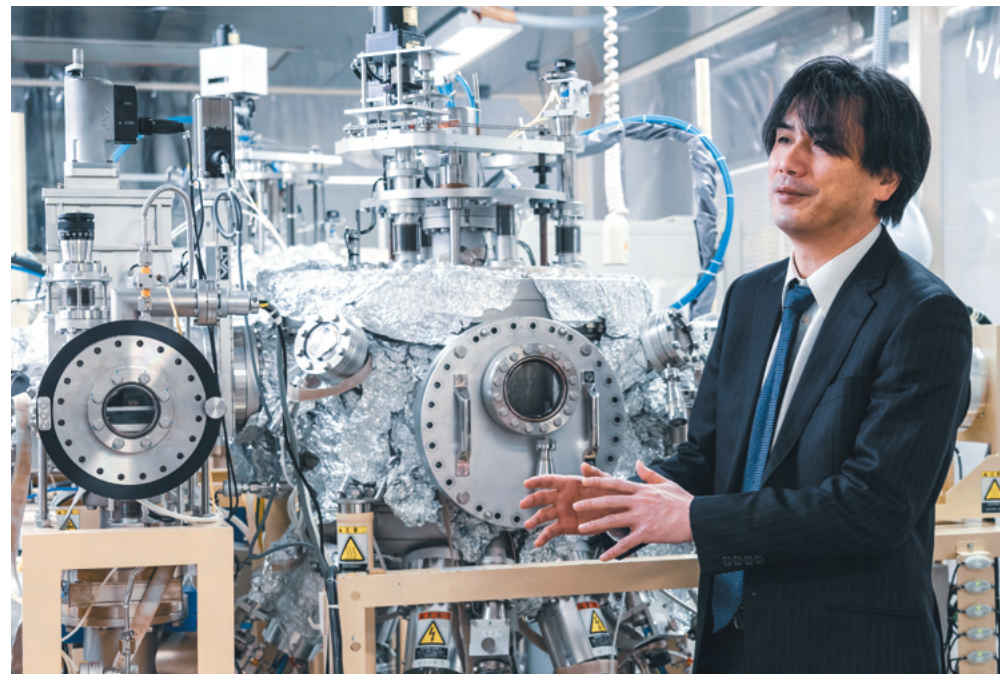
Corresponding Researcher

Shigemi Mizukami

水上 成美

Principal Investigator

主任研究者



Harnessing the large perpendicular magnetic anisotropy of tetragonal ordered Mn-alloy thin films

In the quest for improved perpendicular magnetic tunnel junction (*p*-MTJ) devices for novel spintronic memory applications, scientists have been exploring novel materials and designs, blending theoretical predictions, spintronics principles, and iterative fabrication and characterization processes.

In their 2023 article, Suzuki and Mizukami from AIMR showcased progress using a tetragonal MnGa(001) ordered alloy thin film, aiming both to surpass the high tunnel magnetoresistance ratios (TMR) of established MgO barrier and FeCoB electrode-based *p*-MTJs, and to gain fresh insights for magnetic-device design¹.

“Ordered Mn-alloy thin films, such as MnGa(001), are known to exhibit large perpendicular magnetic anisotropy (PMA) and low Gilbert damping², and are predicted to yield high TMR *p*-MTJ devices³,” says Mizukami, the principal investigator. “Leveraging our experience in *p*-MTJ design⁴, we fabricated *p*-MTJs with a thin CoMn interlayer between the

MgO barrier and the MnGa electrode, and a Mg ultrathin film between CoMn and MnGa.”

Combining magnetoresistance measurements with advanced structural-analysis techniques, including high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy and energy-dispersive X-ray spectroscopy, the team observed a maximum enhanced TMR (> 100%) in the *p*-MTJs at the Mg thickness range of 0.4–0.5 nm, and the annealing temperature of 260 °C.

The team also observed a temperature-induced Mg migration away from the CoMn/MnGa interface which could correlate with TMR deterioration. These results suggest the presence of a Mg interlayer may help preserve the epitaxial growth of CoMn and MnGa, enhancing coherent tunneling.

Future directions will use the insights gained from MnGa(001) and Mg ultrathin films to explore the PMA of more intricate alloys, such as CoMnFe⁵.

巨大な垂直磁気異方性を示す正方晶マンガン系規則合金薄膜の応用

次世代の大容量スピントロニクスメモリの実現を目指し、垂直磁化磁気トンネル接合 (*p*-MTJ)の開発が進んでいる。研究者らは、理論予測に基づく素子設計とその実験検証を進めつつ、優れた性能を示す材料や素子構造を追求している。

2023年、AIMRの鈴木助教(現AIMR客員研究員)と水上教授は、正方晶MnGa(001)規則合金薄膜、ならびにMgO障壁層とFeCoB電極からなる*p*-MTJで、従来の特性を上回る高いトンネル磁気抵抗効果(TMR)を示す素子の開発に成功した¹。新たな*p*-MTJ設計の指針となる成果である。

水上教授は、「MnGaのようなMn系規則合金薄膜は、大きな垂直磁気異方性と小さな磁気緩和定数を示すことが知られています²。そのため、高いTMR効果を示す*p*-MTJの実証が望まれていました³。今回、我々のこれまでの研究から得られた知見を活かし⁴、MgO障壁層とMnGa電極の間にCoMn界面層やMg超薄膜層を取り入れ

た新しい*p*-MTJを開発しました」と、研究成果についてコメントしている。

研究チームは、開発した*p*-MTJの磁気抵抗評価を進め、260°Cの熱処理を施したときにTMR比が100%を超えることを明らかにした。Mg超薄膜層の存在により、CoMnとMnGaのエピタキシャル成長が維持され、結果としてコヒーレントトンネル効果が促進されると考えられている。また、高角度散乱暗視野走査透過電子顕微鏡(HAADF-STEM)や、エネルギー分散型X線分光法(EDX)等の高度な解析技術を用いて素子を詳細に分析し、熱処理温度が増大するにつれてMg超薄膜層がCoMn/MnGa界面から拡散する様子が観察され、それがTMR効果を劣化させる可能性が示唆された。

今後は、これらの研究から得られた知見を活かし、CoMnFe界面層のようなより複雑な合金を含む素子について研究を進め、さらに優れた*p*-MTJの開発に注力する⁵。

Highlight Article

1. Suzuki K.Z. and Mizukami S. Tunnel magnetoresistance exceeding 100% in magnetic tunnel junctions using Mn-based tetragonal alloy electrodes with perpendicular magnetic anisotropy *API Advances* **13**, 035225 (2023).

References

2. Mizukami S. et al. *Scr. Mater.* **118**, 70-74 (2016).
3. Miura Y. and Shirai M. *IEEE Trans. Magn.* **50**, 1400504 (2014).
4. Suzuki K.Z. et al. *Appl. Phys. Lett.* **118**, 172412 (2021).
5. Ichinose T. et al. *J. Alloys Compd.* **960**, 170750 (2023).



Electrochemical catalysis:

Adapting a thermochemical process to the electrochemical realm

電気化学触媒:

熱化学的プロセスの
電気化学分野への適用

27 November 2023

Corresponding Researcher

Hao Li

Junior Principal Investigator
ジュニア主任研究者



Redesign of the direct epoxidation of propylene for sustainable organic synthesis

Electrochemical synthesis of organic chemicals is proving to be a powerful strategy for reducing greenhouse-gas emissions from traditional fossil fuel-driven chemical processes. This approach not only seeks to replace less efficient thermochemical methods but also offers opportunities to redesign catalytic reactions, leveraging unique strengths inherent to electrochemistry.

In a recent 2022 article, Li *et al.* from AIMR exemplified this by revisiting the synthesis of propylene oxide through direct epoxidation of propylene (DEP)—a process known for its low selectivity and high temperature demands¹.

“One key advantage of electrochemistry over thermochemical processes is its potential-dependent activation kinetics,” says Li, the first and corresponding author of the article. “We used this aspect to model individual reactions associated

with DEP to interrogate which catalyst surface features and reaction environments can both enhance selectivity and lower reaction temperatures.”

Combining density functional theory calculations, surface Pourbaix diagram analysis, scaling relation analysis, and microkinetic modeling on Ag, Au, Cu, PbO₂, PdO₂, PtO₂, and TiO₂ surfaces, the team determined that, in the presence of atomic oxygen provided by water activation, DEP is facile on weak-binding catalysts such as PtO₂.

“Our results suggest that more catalytic features could be finetuned to promote highly selective electrochemical DEP at room temperature,” concludes Li. “Currently, we are collaborating with experimentalists from the University of Sydney to realize the catalyst capable of replacing thermochemical DEP.”

プロピレン直接エポキシ化反応を再設計、サステナブルな有機化学合成手法の確立に一步前進

従来型の化石燃料に依存した有機化学合成法では温室効果ガスが大量に排出されることから、温室効果ガス排出削減の切り札として、有機電解合成法が注目を集めている。この手法は、低効率の熱化学的プロセスの代替として有望視されており、さらには、電気化学的な概念や手法をとり入れることで、新たな触媒反応のデザインにもつながると期待されている。

2022年、AIMRのLi准教授らは、選択性が低く、高温条件が必要なプロピレン直接エポキシ化反応 (DEP) において、電気化学的プロセスを利用した触媒反応を設計し、酸化プロピレンの新たな合成法を開発した¹。

Li准教授は、「熱化学的プロセスではなく電気化学的プロセスを活用するメリットは、電場の印加に依って反応が活性化される点です。これを念頭に置いて、私たちはDEPに関する各反応を

モデル化し、選択性を高め、低い温度でも反応が進むような触媒表面の特徴と反応環境について調べました」と語る。

研究チームは、Ag, Au, Cu, PbO₂, PdO₂, PtO₂, TiO₂表面を対象として、密度汎関数理論計算 (DFT計算)、表面ポールベダイアグラム (電位-pH図)、スケーリング解析、マイクロネティックモデリングを組み合わせた解析を行った。その結果、水の活性化によって生じる酸素原子の存在下では、PtO₂のような結合力が弱い触媒でDEPが容易に進行することを突き止めた。

「本研究結果は、さまざまな触媒機能を細かく調節することが、室温下における高選択的な電気化学的DEPの実現につながることを示唆しています。現在は、シドニー大学の実験系研究者と共同研究を行い、熱化学的DEPの代替となりうる触媒の開発に尽力しています」と、Li准教授は研究の進捗についてコメントしている。

Highlight Article

1. Li H., Abraham C.S., Anand M., Cao A. and Nørskov J.K. Opportunities and Challenges in Electrolytic Propylene Epoxidation *Journal of Physical Chemistry Letters* **13**, 2057-2063 (2022).



Ferroelectric materials:

Unveiling the “ferron” quasiparticle

強誘電体材料：

準粒子『フェロン』を解き明かす

11 December 2023

Corresponding Researcher

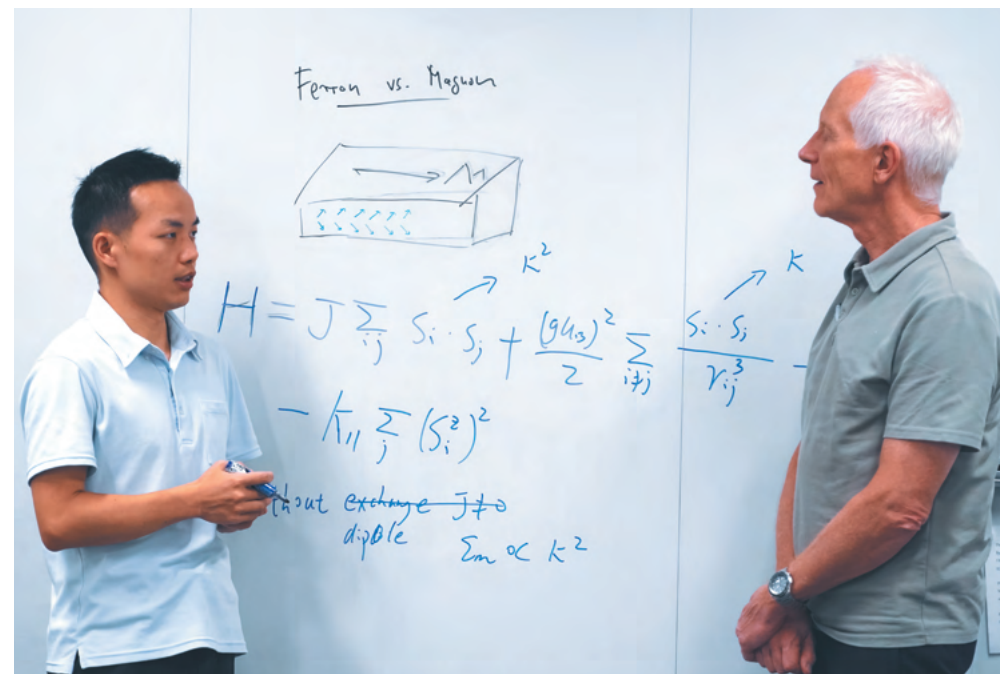
Ping Tang

Specially Appointed
Assistant Professor
特任助教

Corresponding Researcher

Gerrit Ernst-Wilhelm Bauer

Principal Investigator
主任研究者



— Insights into the dynamic transport of ferroelectric polarization

The unusual complexity of ferroelectric materials (FEMs) makes their fabrication, characterization, and modeling challenging. Unlike their magnetic counterparts, whose dynamic and transport properties whose physics are well understood through the magnon quasiparticles, FEMs and the corresponding “ferron” quasiparticle concept remain relatively unexplored.

“Theoretical work on the dynamics of FEMs often focuses on the harmonic regime of these materials,” explains Ping Tang, a member of an AIMR research team. “This practice neglects the non-linearity in the equations of motion unique to ferroelectric polarization, completely missing the ferron concept.”

In a 2022 article, Tang, Bauer et al. addressed this discrepancy by systematically including the anharmonicity in displacive FEMs to capture the elusive ferrons¹. Using the Landau-Ginzburg-Devonshire theory, the team calculated the static electric dipole carried by a ferron, analogous to the spin or magnetic moment carried by a magnon in magnetic materials.

Further, the identification of the ferron excitations that carry both heat and electric dipole currents opened the path to predicting FEM properties, including low-temperature pyroelectric and electrocaloric coefficients, the Peltier and Seebeck coefficients, field-dependent thermal conductivity, and ferron drag thermoelectricity in ferroelectric van der Waals heterostructures.

“Until recently, researchers have paid little attention to the dynamic transport properties of FEMs,” says Tang. “By producing the first descriptions of ferrons, we hope to kick-start the new field of ‘ferronics’ to close the gap with the magnetic materials’ head start.”

A future direction will involve collaboration with the National Institute for Materials Science in Tsukuba, aiming for further experimental observation of ferron excitations.

— 強誘電体分極の動的輸送現象の解明を目指して

強誘電体材料 (FEMs) はその複雑さゆえ、材料の作製、特性評価、モデリングが困難であると知られている。またマグノン準粒子に関する研究の進展により、動力学や輸送特性など、磁性材料の物理的性質に対する理解が深まっているが、FEMsやフェロン準粒子については未解明な部分が多く残されている。

AIMRのPing Tang特任助教は「FEMsの動力学に関する理論研究の多くは、調和領域に焦点を当てています。しかしながら、これらの手法では、強誘電体分極特有の運動方程式の非線形性が考慮されておらず、フェロンの概念が完全に抜け落ちてしまいます」と、現状の課題について説明する。

2022年、Tang特任助教、Bauer教授らの研究チームは、この課題の解決を目指して、変位型FEMsに対して系統的に非調和性を導入することで、まだ謎のヴェールに包まれたフェロンの本質に迫ろうと試みた¹。また、Landau-Ginzburg-Devonshire理論を用いて、フェロンが担う静的な電気双極子を定量化した。このパラメータは、磁性材料でいえば、マグノンが担うスピンや磁気モーメントに相当する。

さらに、熱と電気双極子の両方を輸送するフェロン励起が同定されたことにより、低温時の焦電係数や電気熱係数、ペルチェ係数やゼーベック係数、電界依存の熱伝導率、強誘電性ファンデルワールスヘテロ構造におけるフェロンドラグ熱電特性など、FEMsの特性を予測できる可能性が示唆された。

「FEMsの動的輸送特性は、最近までほとんど注目されていませんでした。これはフェロンの動的輸送特性に関する初の報告であり、今後は『フェロニクス』という新しい分野を開拓し、先行している磁性材料とのギャップを埋めていきたいと考えています」と、Tang特任助教はコメントしている。

今後は、茨城県つくば市に拠点を構える物質・材料研究機構 (NIMS) と協力し、フェロン励起のさらなる実験的観測を目指していく。

Highlight Article

1. Tang P., Iguchi R., Uchida K. and Bauer G.E.W. Excitations of the ferroelectric order *Physical Review B* **106**, L081105 (2022).



Perforated honeycomb thin films: A new approach to oil–water separation

ハニカム状多孔質膜：

油水分離の新たなアプローチ

25 December 2023

Corresponding Researcher

Hiroshi Yabu
藪 浩

Principal Investigator
主任研究者



Engineered lubrication for precise control and broadened adaptability

Controlled oil–water separation is critical to solving problems concerning environmental contamination, water resource management, and industrial liquid separation. To this end, one approach focuses on the isolation of extremely thin membranes as the filtering medium.

“In conventional oil–water separation media, thicker membranes usually improve separation, because the mechanism relies on the adhesion of one of the liquids to the membrane surfaces,” says Hiroshi Yabu, the principal investigator of an AIMR research team. “In this work, we ask whether a lubricated thin membrane can be engineered to stop either oil or water from diffusing through—achieving separation.”

In a 2022 article, Yabu’s team used the breath-figure technique to fabricate single-layer (~10 μm) honeycomb porous polymer films¹. Using ultraviolet-ozone treatment to change the surface compositions, the team was able to control the pore

size and wettability of the thin films, inducing lubrication by either oil or water. The team further demonstrated that these micron-thick films are capable of performing milliliter-scale gravimetric oil–water separation.

“While previous reports used the membrane surface property itself (e.g., superhydrophobicity) to separate oil from water, we use the surface property to control which liquid fills the membrane to let that liquid through,” explains Yabu. “This approach significantly broadens the adaptability of the separation process using external stimuli such as the ultraviolet-ozone treatment.”

Earlier work by the same group had suggested the possible use of the honeycomb membrane in gas–liquid separation² and in lithium-ion conductivity applications³. A future direction will use this technique to address PFAS (per- and polyfluoroalkyl substances) removal from water resources at large.

精密な制御と幅広い適応性を実現する濡れ性の制御

環境汚染、水資源管理、工場廃水処理において、水と油を効率よく分離することは極めて重要である。これを実現するためのアプローチとして、ミクロンスケールの極めて薄い膜を用いて分離する方法が注目を集めている。

AIMRの藪教授は、「油水分離は、水と油いずれかの流体が膜表面に付着するというメカニズムに依拠しているので、従来の油水分離法では、膜が厚いほど分離能が向上するのが一般的でした。本研究では、多孔膜の濡れ性に着目し、油や水を多孔膜内に保持することで、油水分離を実現できる新たな潤滑薄膜の作製に取り組みました」と、研究について語っている。

2022年、藪教授の研究チームは、breath-figure法を用いて単層(~10μm)の高分子ハニカム状多孔質膜を作製した¹。また、紫外線オゾン処理を用いて表面組成を変化させることで、油および水に対する濡れ性を左右する膜の孔径と濡れ性を制御することに成功した。

さらに、わずか数ミクロンの厚みしかない膜で、mLスケールの油水分離が可能であることを実証した。

「これまでの報告では、超撥水性など膜の表面特性そのものを利用して、水から油を分離していました。一方、私たちの研究では、膜の表面特性を使ってどの液体が膜を充填するかを制御することで、その液体を通過できるように工夫しました。このアプローチの利点は、紫外線オゾン処理などにより、液体の濡れ性を制御することで水や油など、どのような液体を分離するか制御できることです」と、藪教授は説明している。

藪教授らは過去の研究で、気液分離やリチウムイオン伝導に高分子ハニカム状多孔質膜を応用できる可能性を見出していた^{2, 3}。今後は、水資源から有害なPFAS（パーフルオロアルキル化合物およびポリフルオロアルキル化合物）を除去する手法の開発を目指していく。

Highlight Article

1. Chen B., Wada T. and Yabu H. Amphiphilic perforated honeycomb films for gravimetric liquid separation *Advanced Materials Interfaces* **9**, 2101954 (2022).

References

2. Chen B. et al. *Langmuir* **36**, 6365–6369 (2020).
3. Grewal M.S. et al. *iScience* **25**, 104910 (2022).

Spintronics:

Entropy probes stochastic relaxation times of nanomagnets

スピントロニクス：

エントロピー解析により ナノ磁石の確率論的緩和時間を探る

22 January 2024

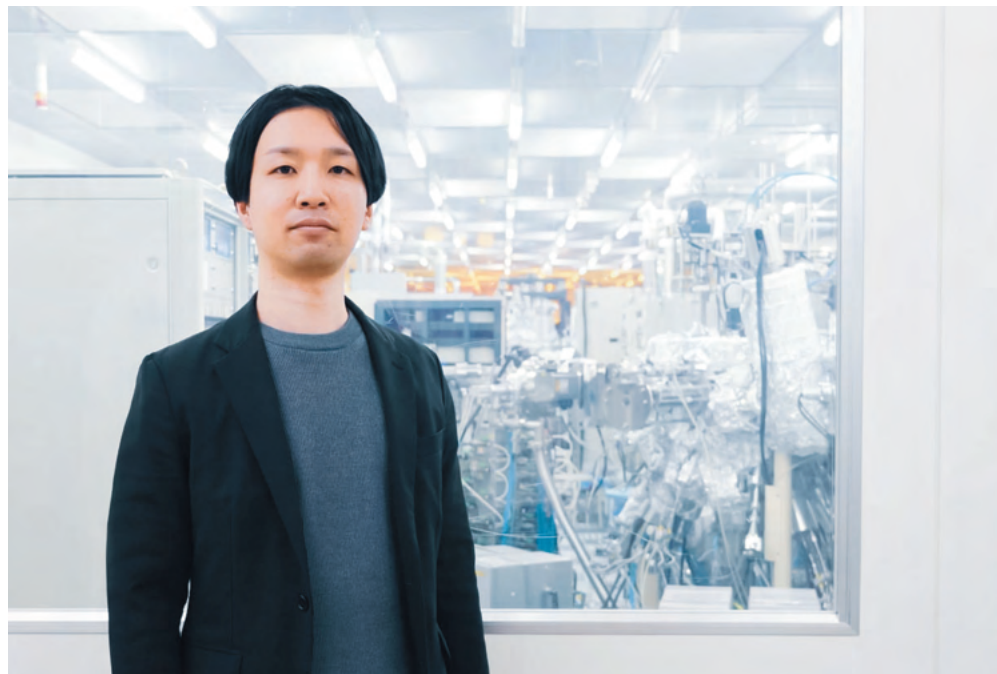
Corresponding Researcher

Shun Kanai

金井 駿

Associate Professor

准教授



Uncovering design guidelines for probabilistic computing devices

As neuromorphic applications such as machine learning and artificial intelligence continue to expand, progress in p-bit research^{1,2} promises to use probabilistic computing to meet their escalating energy and efficiency demands.

To this end, a recent approach that directly contributed to the p-bit hardware implementation focused on the switching volatility of stochastic magnetic tunnel junctions (MTJs). An example of this is a 2021 article by Kanai *et al.* from AIMR, who investigated which MTJ features control the relaxation time between the “1” and “0” states of stochastic nanomagnets³.

“Our idea was to model the stochasticity of magnetic systems using entropy,” explains Kanai. “At the time of this work, this method had never been used to study magnetization dynamics.”

Deriving a universal equation governing the entropy in magnetization dynamics, the research team discovered that the entropy rapidly increases in nanomagnets with an in-plane magnetic easy axis and larger magnitudes of perpendicular magnetic anisotropy, suggesting the in-plane easy axis to be conducive to shorter relaxation times.

These theoretical results later enabled the team to fabricate stochastic MTJs with relaxation times in the nanosecond range—100,000 time faster than the contemporaneous standard MTJs⁴.

“Our theoretical work on relaxation time did not only help us realize faster MTJs,” says Kanai. “It also provided design information on how to tailor the input-output properties and robustness against external magnetic fields of these devices^{5,6}.”

確率論的コンピューティングデバイスの設計指針

機械学習や人工知能など、コンピューティングの用途が多様化し続ける中、計算の高エネルギー効率化や高速化に対する需要がますます高まっている。この課題に対処するための手法として、確率論的コンピューティングの利用が期待されており、特に、スピントロニクスを用いた省エネルギーな確率論的コンピューティングハードウェアに関する研究開発が進んでいる^{1,2}。

確率論的コンピューティングハードウェアの実装に向けたスピントロニクスデバイスの最近の研究として、2021年にAIMRの金井准教授らの研究チームが報告した、確率的磁気トンネル接合 (s-MTJ) のビット情報保持時間に関する研究が挙げられる。確率論的コンピューティングにおいては、情報保持時間が短い程高速な計算が可能であり、本研究では、ナノ磁石のビット状態（「0」と「1」の状態）間の保持時間を短くするためのMTJの設計指針を明らかにした³。

金井准教授は、「私たちのアイデアは、エントロピーにより磁化ダイナミクスの確率論、特にその時間的な特徴量を定量化することでした。このアプローチは磁気システムの研究に適用されたことはありませんでした」と、研究の独創性について語る。

研究チームは、確率的磁化ダイナミクスのエントロピーを支配する普遍的な方程式を導出し、面内磁化容易かつ反磁場の大きいナノ磁石ではエントロピーが急速に増大することを見出した。これは、面内磁化容易の確率的MTJを用いることで情報保持時間を短縮可能である可能性を示している。

これらの理論的な成果に基づき、研究チームは数ナノ秒の情報保持時間を持つ確率的MTJデバイスを作製することに成功した。これは、同時期の標準的な確率的MTJと比較して、10万倍も高速であった⁴。

「情報保持時間に関する理論的研究により、高速な省エネルギー確率論的コンピューティングハードウェアの実現に一步近づきました。継続した研究により、これらのデバイスの出力特性や外部磁場に対する耐性を高めた設計指針を実験的に得ることに成功しました^{5,6}」と、金井准教授は一連の研究成果についてコメントしている。

Highlight Article

3. Kanai S., Hayakawa K., Ohno H. and Fukami S. Theory of relaxation time of stochastic nanomagnets *Physical Review B* **103**, 094423 (2021).

References

1. Camsari K.Y. *et al. Phys. Rev. X* **7**, 031014 (2017).
2. Borders W.A. *et al. Nature* **573**, 390–393 (2019).
3. Hayakawa K. *et al. Phys. Rev. Lett.* **126**, 117202 (2021).
4. Kobayashi K. *et al. Appl. Phys. Lett.* **119**, 132406(1)–(5) (2021).
5. Funatsu T. *et al. Nat. Commun.* **13**, 4079(1)–(8) (2022).

website >>>





Chiral optics:

Helical ribbons templates for chiral perovskite nanocrystal growth

キラル光学：

キラルペロブスカイトのナノ結晶成長のためのヘリカルリボン状テンプレート

26 February 2024

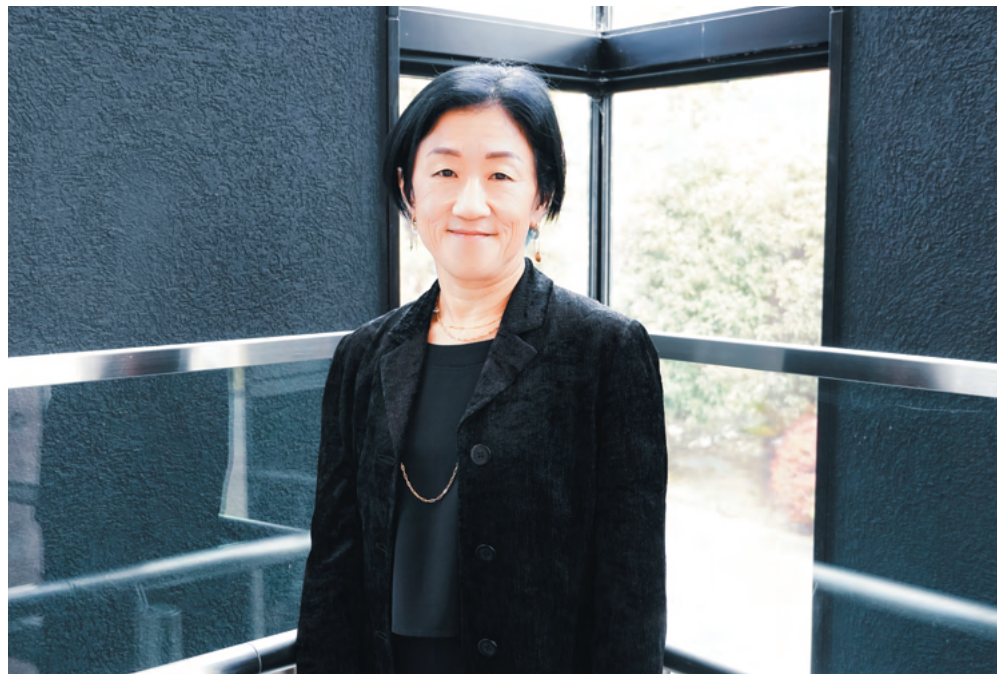
Corresponding Researcher

Reiko Oda

小田 玲子

Principal Investigator

主任研究者



Crystallization in helical nano-cage to create mesoscopic chiral objects with chiroptical properties

Chiral optics aims to understand and manipulate interactions between chiral light and chiral materials, with the goal of advancing applications in chiral sensing, optical communication, bioimaging, and drug development. Because chirality in light provides complementary information to that characterized by wavelength and intensity, one emerging strategy uses this approach to target mesoscopic chiral structures, as their size range within the visible light wavelength (10 nm to 1 μ m) promises enhanced chiral optical effects.

However, a major challenge to this strategy is the difficulty in fabricating mesoscopic structures with precise morphologies, because the scale of these objects lies just out of reach of the capabilities of both traditional bottom-up and top-down fabrication methods.

In a 2023 article, Oda and co-workers addressed this problem with a unique approach that utilizes the nanospace within self-assembled nanometric helical silica ribbons as templates for growing perovskite

nanocrystals (PNCs) by recrystallization methods¹.

Using supersaturated solutions of Cs⁺, Pb²⁺, and Br⁻ precursors, the resulting helical PNCs not only had precise chiral morphologies at nanometric level, but they also showed remarkable chiroptical properties, including strong circular dichroism and strong induced circularly polarized luminescence.

"Our work showed that mesoscopic helical PNCs with tailored chiral optical properties can be fabricated by combining established self-assembled templates with straightforward recrystallization methods without any chiral-ligand or chiral-molecule precursors," says Oda. "To the best of our knowledge, this is a feat that has never been demonstrated before."

A future direction will use this approach to fabricate 2D or 3D supra-object structures to target chiral-light chiral, including the exaltation/annulation of chiral optical signals.

らせん状のナノケージ内での結晶化で、メソスコピックなキラル光学特性を持つ物質を創製

キラル光学は、キラルな光とキラルな物質との相互作用を理解し、コントロールを目指す分野で、キラルなセンシング、光通信、バイオイメージング、医薬品開発への応用を主眼としている。光におけるキラリティは、波長や強度などだけでは得られない情報を提供する。そのため、近年、キラル光学効果の向上を目指し、可視光波長を含む範囲内(10nm~1 μ m)にあるメソスコピックキラル構造をターゲットとするアプローチが台頭しつつある。

しかし精密なメソスコピック構造を正確かつ再現性高く作製することの難しさが、このアプローチの大きな課題となっている。というのも、メソスコピック構造は、ボトムアップで作製するには大きく、トップダウンで作成するには小さすぎるため、従来の手法が適用できないのだ。

2023年、小田博士らは、再結晶法によってペロブスカイトナノ結晶(PNC)を成長させるための鋳型として、自己組織化によって得られたナノサイズのらせん状シリカリボン構造内のナノ空間を利用するという独自のアプローチによって、この問題を解決した¹。

Cs⁺、Pb²⁺、Br⁻の前駆体の過飽和溶液を用いて得られたらせん状PNCは、ナノメートルレベルで正確なキラル形態を持つだけでなく、強い円偏光二色性や強い誘導円偏光発光などの顕著なキラル光学特性を示した。

「今回の研究では、キラル配位子やキラル分子前駆体を用いることなく、これまでに確立された自己組織化を利用した鋳型作製手法と簡単な再結晶法を組み合わせることによって、キラル光学特性を持つメソスコピックらせん状PNCを作製できることを示しました。この手法は非常に汎用性があり、今回のPNCだけでなくいろいろな物質のキラル結晶化に使うことが出来、非常に将来性を期待できます。私たちの知る限り、これはこれまでに実証されたことのない成果です」と小田博士は本研究の意義について語っている。

今後はこのアプローチを用いて、キラル光信号の増強／打消しを含む、キラル光キラルをターゲットとする2次元または3次元の超物体構造作製を進めていく予定だ。

Highlight Article

1. Liu P., Battie Y., Kimura T., Okazaki Y., Pranee P., Wang H., Pouget E., Nlate S., Sagawa T. and Oda R. Chiral perovskite nanocrystal growth inside helical hollow silica nanoribbons *Nano Letters* 23, 3174 (2023).



Shape memory alloys:

Unlocking the potential of an ultra-light biocompatible alloy

形状記憶合金：

生体適合性を有する
超軽量合金の可能性を拓く

11 March 2024

Corresponding Researcher

Yuji Sutou

須藤 祐司

Principal Investigator

主任研究者

Corresponding Researcher

Daisuke Ando

安藤 大輔

Associate Professor (Graduate School of Engineering, Tohoku University)

准教授(東北大学大学院工学研究科)



Cyclic heat treatment probes abnormal grain growth to enhance Mg–Sc superelasticity

The quest for the next shape memory alloys (SMAs) for transformative applications in aerospace and medicine requires a departure from conventional alloys based on heavy metals such as Ni, Fe, Co, and Cu. To this end, Mg–Sc alloys, with extremely low densities and inherent biocompatibility, promise to be the ideal candidates—provided that a mechanism conducive to shape memory can be demonstrated in Mg-based alloys.

In a recent article, an AIMR team led by Yuji Sutou and Daisuke Ando addressed this problem by focusing on the effects of abnormal grain growth on the superelasticity of polycrystalline Mg–Sc alloys¹.

“Grain enlargement is a known approach to improving superelasticity in conventional Cu- and Fe-based SMAs,” says Sutou. “Here, we use cyclic heat treatment (CHT) to investigate the mechanism of the

abnormal grain growth in Mg–Sc alloys—aiming to improve the alloys’ superelasticity.”

The analysis of each stage of the CHT revealed that a lower holding temperature, longer solution heat treatment time, and slower heating rates resulted in more effective grain growth, larger and more uniform grains, and sharper subgrains, respectively, improving Mg–Sc superelasticity.

“The understanding of how CHT controls Mg–Sc grain enlargement is an important step towards isolating the ultra-light biocompatible SMA,” explains Sutou. “It gave us the ability to use the composition and microstructure to control Mg–Sc properties such as high strength and larger elongation²—all relevant to the design of future SMAs and related materials.”

サイクル熱処理の異常粒成長への影響を検討、Mg–Sc合金の超弾性特性の向上に成功

形状記憶合金(SMA)は航空宇宙分野や医療分野で注目される新素材だが、それら分野での更なる応用展開を実現するには、Ni、Fe、Co、Cuなどの重金属をベースとする従来とは異なる新しい合金系の登場が待ち望まれている。Mg–Sc合金は、極めて密度が低く生体適合性を持つことから、有望な新しいSMA素材として期待されている。しかし応用に向けては、Mgベース合金における形状記憶メカニズムの精査が必須である。

須藤教授と安藤准教授が率いるAIMRの研究チームは、多結晶Mg–Sc合金の超弾性に及ぼす結晶粒サイズの影響に注目して研究に取り組み、2023年にその成果を発表した¹。

須藤教授は、「結晶粒の粗大化は、従来のCuやFeをベースとしたSMAの超弾性を改善するアプローチとして知られています。Mg–Sc合金の超弾性特性を向上させることを目標に、本研究では、サイクル

熱処理(CHT)を用いて異常粒成長のメカニズムについて精査しました」と、研究について語っている。

さまざまな条件でCHTを施したMg–Sc結晶粒を解析した結果、保持温度が低いほどより効率的に粒成長すること、溶体化処理時間が長いほど大きく均一な粒が得られること、加熱速度が遅いほどよりシャープなサブグレインを得られることが明らかになり、このような条件でCHTを施すことでMg–Sc超弾性が改善することが示された。

「CHTがMg–Sc結晶粒の粗大化に与える影響を理解することは、生体適合性をもつ超軽量SMAを開発するための重要な一歩です。私たちはこれまでの研究から、合金の組成と微細構造を利用して、Mg–Sc合金の強度や延性を制御できることを示しました²。次世代の革新的なSMAや関連材料を設計する際、こうした特性の制御は重要な課題です」と、須藤教授は本研究の意義について述べている。

Highlight Article

1. Yamagishi K., Onyam K., Ogawa Y., Ando D. and Sutou Y. Abnormal grain growth through cyclic heat treatment in a Mg–Sc alloy *Journal of Alloys and Compounds* **938**, 168415 (2023).

Reference

2. Yamagishi K. et al. *J. Alloys Compd.* **931**, 167507 (2023).

Igniting scientific sparks:

How public imagination drives research breakthroughs

科学を社会へ：

研究の思わぬ展開を切り拓いたのは 人々のイマジネーション

25 March 2024

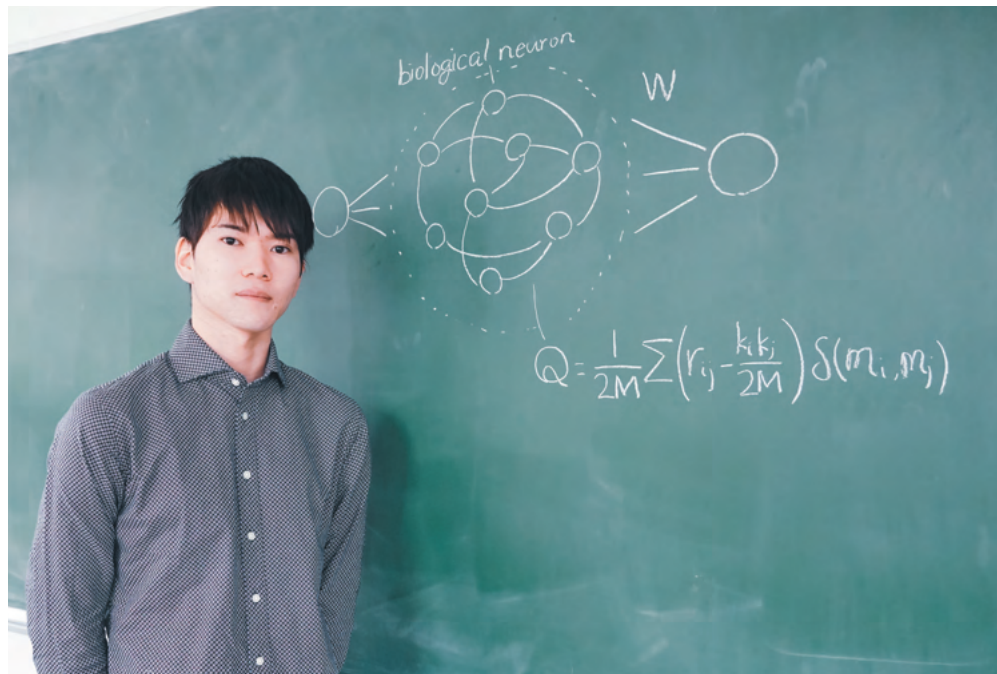
Corresponding Researcher

Takuma Sumi

住 拓磨

Assistant Professor

助教



The impact of public engagement on biological neuronal networks and reservoir computing research

In cutting-edge research, capturing the general audience's imagination can lead to unexpected exposure and collaborations.

In a 2023 article, Sumi *et al.* from AIMR combined optogenetics, calcium imaging techniques, and reservoir computing modeling to investigate how the functional modularity of biological neuronal networks (BNNs) influenced their information processing capabilities—demonstrating that, when integrated into reservoir computing frameworks, BNNs can identify commonalities and patterns in diverse inputs, acting as general filters¹.

Having received initial responses within the research community, the AIMR team followed up with a press release² that triggered an unexpectedly enthusiastic reaction from the general public.

"In describing how we designed, grew, tested, and modeled our BNNs using everyday language and compelling figures, our press release resonated

with the public, providing a futuristic image of the science we are doing," says Sumi.

The response to the paper continued to grow, leading to an invitation for the researchers to appear on the Japanese science-documentary TV program *Galileo X*.

"When we wrote the press release, we did not expect to appear on television," says Sumi. "In retrospect, the recent spread of technologies that mimic human behavior such as ChatGPT must have helped attract the interest in biomimetic computation."

The increase in visibility further shaped the next steps of this research. A future direction involves a new collaboration with the Chiba lab at AIMR, aiming to elucidate the link between neuronal dynamics and functionality within the reservoir computing framework.

生物学的ニューラルネットワークとリザーバーコンピューティング研究におけるパブリックエンゲージメントの重要性

最先端の研究成果はときに人々の想像をかきたて、思いがけないメディア露出や共同研究につながることもある。

2023年、AIMRの住助教らは、光遺伝学、カルシウムイメージング、リザーバーコンピューティングのモデリングを組み合わせ、生物学的ニューラルネットワーク(BNN)のモジュール(機能のまとまり)が情報処理能力にどのような影響を及ぼすかについて調べた論文を発表した。この論文では、BNNをリザーバーコンピューティングの枠組みに基づいて解析を行い、BNNは多様な入力の共通点やパターンを識別できること、計算性を向上させるための汎化フィルターとして機能することを実証した¹。

AIMRの研究チームは、研究コミュニティ内での反響の大きさを受け、本論文のプレスリリースを発表したところ²、予想をはるかに越える大きな反響を呼んだ。

「プレスリリースでは、どのようにBNNを設計し、成長させ、テストし、モデル化したかを、図も併用しつつ、できるだけ平易な言葉で解説しました。それが功を奏して、プレスリリースは多くの人々の心に

響き、未来的な研究として好意的に受け止められました」と住助教は振り返る。

その後、この論文への反響はさらに大きくなり、科学ドキュメンタリー番組『ガリレオX』でも本研究が取り上げられた。

住助教は「プレスリリースを準備しているときは、テレビに取り上げられることには思っていませんでした。今にして思えば、ChatGPTのような人間の行動を模倣する技術の台頭が、バイオメタリック・コンピューティングへの関心の高まりにつながったのではないのでしょうか」と、思いがけぬ反響の大きさについて語っている。

研究が話題になったことで、AIMRの千葉研究室(数学連携グループ)との共同研究など、新たな展開にもつながった。今後はこうした共同研究などを通じて、リザーバーコンピューティングの枠組みの中で、神経細胞のダイナミクスと機能性の関連性を解明することを目指すという。

Highlight Article

1. Sumi T., Yamamoto H., Katori Y., Ito K., Moriya S., Konno T., Sato S. and Hirano-Iwata A. Biological neurons act as generalization filters in reservoir computing *Proceedings of the National Academy of Sciences* 120, e2217008120 (2023).

Reference | 2. Yamamoto H. (2023, June 29th). Artificially cultured brains improve processing of time series data [Press Release].

website >>>



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.

© 2023–2024 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