

Presentation ID	氏名	所属 Lab.	タイトル title
P01	謝 玉麟	金属組織制御学研究部門 古原・宮本研	Fe-35Ni-X (X=Cr,V) MEA合金の低温窒化における強化挙動の高効率調査
P02	Murakami Yuta	金属物性論研究部門 野村研	取り下げる
P03	新美 快斗	耐環境材料学研究部門 秋山研	1 GPa 級温間圧延SUS304の水素脆化特性
P04	Dion Troy	磁性材料学研究部門 関研	Ultrastrong magnon-magnon coupling and chiral spin-texture control in a dipolar 3D multilayered artificial spin-vortex ice
P05	宮岸 太一	原子力材料工学研究部門 笠田研	酸化物セラミックスの照射誘起粘性流動の機構解明
P06	JI KE	錯体物性化学研究部門 宮坂研	Magnetostructural Correlations in Charge Transfer Ionic Chains Derived from Assembly of Paddlewheel Diruthenium(II, II) Complexes and 7,7,8,8-Tetracyano-p-quinodimethane Derivatives
P07	Song Ruirui	先端エネルギー材料理工共創研究センター E-IMR	Temperature-dependent Formation of Nanoporous Fe7Mo6 Intermetallic Compounds in Liquid Metal Dealloying
P08	関田 さやか	金属組織制御学研究部門 古原・宮本研	窒化鋼における表面硬さ分布のデータ駆動型予測モデル構築
P09	佐藤 圭晃	低温電子物性学研究部門 佐々木研	ベンゼンスルホン酸塩を用いた新規有機伝導体の結晶構造と物性
P10	苗代橋 吟京	量子ビーム金属物理学研究部門 藤田研	圧力誘起超伝導を示す反強磁性体CeNiGe3の単結晶構造解析
P11	Hou Xueyao	磁性材料学研究部門 関研	Indirect Exchange Coupling for Perpendicularly Magnetized CoFeB layers through W Interlayer
P12	Yang Hui	加工プロセス工学研究部門 山中研	Spark plasma sintering of recycled zirconia ceramics: densification, microstructure, and mechanical properties
P13	高 子墨	原子力材料工学研究部門 笠田研	Mechanical properties and Microstructure of Gas-atomized CuYzr-WO3 towards the Overcoming of Trade-off between Strength and Conductivity
P14	LEE Sumin	原子力材料工学研究部門 笠田研	Analysis of Local Deformation Mechanisms in Reduced-Activation Ferritic/Martensitic Steels Irradiated with Protons under Nanoindentation
P15	Chen Hsiao-Yi	金属物性論研究部門 野村研	First-principle approach to spin excitation in noncollinear magnetic systems
P16	Liu Yuhan	錯体物性化学研究部門 宮坂研	Novel One-Dimensional Donor-Acceptor Metal-Organic Frameworks with Molecular Insertion for the Electronic State Modulation
P17	SAU Kartik	水素機能材料工学研究部門 折茂研	Unlocking the secrets of ideal fast ion conductors for all-solid-state batteries
P18	LIU QINGXIN	錯体物性化学研究部門 宮坂研	Enhanced Magnetic Coupling Driven by Intercalated Cation-stabilized Delocalization of [Ru2 II,II] Electrons
P19	高橋 歩美	低温電子物性学研究部門 佐々木研	有機伝導体κ-(BEDT-TTF)2Cu(NCS)2のFFLO相に対するエックス線照射効果
P20	滝川 敦之	複合機能材料学研究部門 熊谷研	機械学習を用いた高誘電体の探索
P21	Yu Huameng	磁性材料学研究部門 関研	Magnetoelastic properties of epitaxial Fe4-xCoxN films
P22	藤崎 弘岳	低温電子物性学研究部門 佐々木研	鉄系超伝導体 FeTe0.85Se0.15のラマン散乱
P23	卞 篤	非平衡物質工学研究部門 加藤研	金属浴湯脱成分法を用いたナノポーラス炭化ケイ素の作製
P24	Arrasyid Ervin	量子ビーム金属物理学研究部門 藤田研	Ab Initio Study and Transport Properties of Nickel Calchogenide
P25	伊藤 千紗	錯体物性化学研究部門 宮坂研	レドックス活性な錯体分子を用いた機能性ソフトマテリアル材料の系統的構築
P26	Furukawa Tetsuya	低温電子物性学研究部門 佐々木研	有機強相間トポジカル絶縁体α-(BETS)2I3の電気伝導特性
P27	服部 和希	金属物性論研究部門 野村研	熱電材料Mg3Sb2の第一原理計算による格子熱伝導率の解析
P28	石田 浩祐	量子機能物性学研究部門 小野瀬研	ヘリカル磁性体CrAsにおける応力-歪み曲線測定
P29	桑原 桂汰	金属物性論研究部門 野村研	ワニエ函数に基づくコヒーレントポテンシャル近似の実装と磁性合金への適用
P30	三室 楽人	新素材共同研究開発センター	Co基ホイスラー合金の電子状態と異方性磁気抵抗効果
P31	藤原 千隼	先端結晶工学研究部門 吉川研	0次元型ヨウ化物の構造制御による蛍光寿命高速化
P32	森 仁志	金属物性論研究部門 野村研	Wannier函数と中間表現基底を用いた超伝導状態の効率的な理論計算
P33	浦野 雄介	先端結晶工学研究部門 吉川研	BNCTのためのアルカリ土類金属元素共添加Ti:Cs3Cu2I5結晶とリアルタイムガンマ線モニタの開発
P34	Chen Likun	新素材共同研究開発センター	Enhancement of magnetotraction in melt-spun ribbons by rare earth elements doping and cooling rates controlling
P35	Nuryadin Muhammad Khalish	低温電子物性学研究部門 佐々木研	Infrared optical studies on Mott-Hubbard band with disorder induced by X-ray irradiation in a (BEDT-TTF)2Cu[N(CN)2]2
P36	Park Minha	原子力材料工学研究部門 笠田研	Effects of neutron irradiation on hardness and electrical resistivity of tungsten and tungsten alloy after neutron irradiation in BR2
P37	杉浦 葵理	低温電子物性学研究部門 佐々木研	層状有機超伝導体κ-(BEDT-TTF)2Cu(NCS)2の超伝導ゆらぎ相における抵抗ノイズ測定
P38	Hansen Marc	東北大大学研究推進・支援機構 リサーチ・マネジメントセンター	材料系学術雑誌の変遷と現状 : メタデータと指標による考察

Fe-35Ni-X (X=Cr, V) MEA 合金の低温窒化における強化挙動の高効率調査

High-throughput investigation of the strengthening behavior in low-temperature nitriding layer of Fe-35Ni-X (X=Cr, V) MEAs

東北大金研¹, 物材機構² 謝玉麟¹, 宮本吾郎¹, 古原忠¹, 大村孝仁²

Keywords : spinodal decomposition, nanostructure, nitriding

【緒言】我々は、これまで侵入型元素を活用した新規ハイエントロピー合金創製を目指し、強窒化物生成元素 X を添加した Fe-35Ni-X fcc 合金を低温窒化して得られた高 N 濃度の表面窒化層の構造や特性を調査してきた[1,2].その結果、X-N 間の引力型相互作用が強いほどスピノーダル分解による微細 X-N クラスターが発達し、より顕著な硬化が起こることを見出している.しかし、X-N クラスタリングと強化挙動の関係はまだ不明である.本研究では、拡散対法で得た X 元素の濃度勾配を持つ Fe-35Ni-X fcc 合金に窒化処理を施すことで生成した X,N の二次元濃度勾配を持つ表面硬化層について、ナノインデンテーションを用いた局所力学解析を行い、低温窒化層における強化挙動を網羅的に解明することを目的とする.

【方法】 Fe-35Ni と Fe-35Ni-30X (X=Cr, V) 合金の拡散接合により X 濃度が 0 から 30at%まで変化する 800μm 以上の濃度勾配を作製した.X 濃度勾配を含む面に対して 400°C, 96h のプラズマ窒化処理を行った.断面窒化組織に対して、ナノインデンテーション試験を行い、圧痕周囲の塑性流動による表面高さ変化を測定することで降伏強度を逆解析した[3].また、Thermo-calc-2022a (TCFE12 database) を用いてスピノーダル分解における濃度変調を評価した.

【結果】 Fig.1 に 400°C96h 窒化した Fe-35Ni-Cr 拡散試料の Cr サイト分率 (y_{Cr}) とナノインデンテーション測定で評価した降伏強度 σ_y 及び対応する N のサイト分率 y_N (カラーバー参照) をそれぞれ示す.未窒化層 (図中の黒プロット) は、Cr 添加量によらず約 300MPa の降伏強度 (σ_0) を示す.窒化層では y_{Cr} が高いほど y_N が上昇し、 σ_y は y_{Cr} に対して上に凸の濃度依存性を持って増加する.Cr-N クラスタリングによる強化量 σ_{SD} を、Kato らのスピノーダル強化理論[4]に基づき、以下の式で評価した.

$$\sigma_{SD} = AM(|\eta|Y/\sqrt{6} + 0.793\xi b/\lambda)$$

各パラメータ、A (濃度変調の振幅), η (ミスフィットひずみ), ξ (剛性率変化), λ (波長) の濃度依存性はナノ組織解析と熱力学計算により決定した.Fig. 1 では、未窒化層の降伏強度 (σ_0) と変調組織による強化量 (σ_{SD}) の和は、Cr 量增加に伴う強化を定性的に再現できている.一方、低 N 領域で提唱された固溶強化 (σ_{N-ss}) を外挿して加えて σ_y を評価すると、高 y_{Cr} 領域では実測値を大きく上回り、高 N 濃度領域における固溶強化の過大評価が課題である.

【文献】 [1] Xie et al., Scripta Mater., 213(2022), 114637. [2] Xie et al., ICAS2022, S1S10.

[3] Goto et al., J. Alloys Comp., 910(2022), 164868. [4] Kato et al., Acta Metall., 28 (1980), 285.

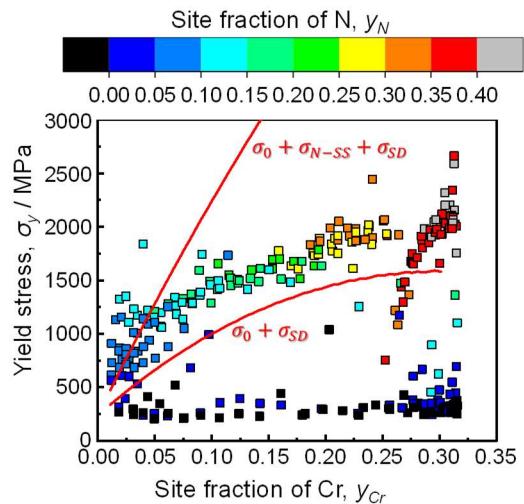


Fig.1 Comparison of local yield stress between measurement and theoretical calculation in Fe-35Ni-Cr diffusion couple nitrided at 400°C for 96h. σ_0 : matrix strength, σ_{N-ss} : solid solution hardening of N, σ_{SD} :strengthening by spinodally modulated structures.

1 GPa 級温間圧延 SUS304 の水素脆化特性

新美快斗, 小山元道, ハルヨ ステファヌス¹, 柿沼洋, 味戸沙耶, 秋山英二
耐環境材料学研究部門, 日本原子力研究開発機構 J-PARC センター¹

Hydrogen embrittlement properties of 1 GPa-grade warm-rolled SUS304

K. Shinmi, M. Koyama, S. Harjo¹, H. Kakinuma, S. Ajito, E. Akiyama
Environmentally Robust Materials Research Laboratory,
J-PARC Center, Japan Atomic Energy Agency¹

Keywords : 水素脆化, 高強度鋼

1. 緒言

100 Pa 程度の高圧水素環境では引張強度 1 GPa の材料で著しい水素脆化が発現することが知られ、1 GPa 以上の引張強度を有する耐水素鋼の開発が希求されている。耐水素性を有する材料としてオーステナイト系ステンレスが知られるが、この鋼種は一般的に降伏強度が低く、またオーステナイト系鋼としては安価な SUS304 は変形誘起マルテンサイト変態に起因して例外的に水素脆化を起こし易い。本研究では、低コストな SUS304 に温間圧延をすることで、強度レベルを 1 GPa に上昇させ、その水素脆化特性の評価を行うことを目的とした。比較として冷間圧延材も評価した。

2. 実験方法

供試材には溶体化処理済みの SUS304 を使用した。未圧延材、40% 温間圧延材、80% 温間圧延材、40% 冷間圧延材、60% 冷間圧延材の 5 種類の試験片を用意し、水素未チャージ材、水素チャージ材の両方に対し引張試験を行った。水素チャージは電解研磨後の試験片を水素ガス環境に暴露し、ガス圧 100 MPa、200 °C で 114 時間保持することで試料中に水素を導入した。引張試験は室温の大気中でひずみ速度は 10^{-4} s⁻¹ で行った。加えて、水素未チャージ材は別途、張試験中に中性子回折を行いマルテンサイト分率の変化を計測した。

3. 結果のまとめ

本研究では、SUS304 の冷間圧延材と温間圧延材の水素脆化特性と関連する組織発達について調査し、得られた結果を以下にまとめる。

- (1) 80% 温間圧延材は 1 GPa の強度を有し、水素影響下において未圧延材と同等の伸びを示した。すなわち、80% 温間圧延 SUS304 は未圧延材にくらべ水素環境に強い、高強度鋼である。
- (2) 80% 温間圧延材においては粒界だけではなく粒内もマルテンサイトの核生成サイトとなっている様子が見られた。また、温間圧延によりマルテンサイト領域の大角粒界の密度が上昇した（マルテンサイトの微細化が起こった。）。
- (3) 中性子回折実験により、未圧延材にくらべ圧延材は α' マルテンサイト分率のひずみあたりの増加率が高いことが示された。温間圧延材と冷間圧延材の α' マルテンサイト量の差は、初期 α' マルテンサイト量に由来しており、ひずみあたりの α' マルテンサイト増加量にはほとんど差がなかった。

謝辞 本研究は MEXT Program: Data Creation and Utilization Type Material Research and Development Project (JPMXP1122684766) の助成を受けて遂行されました。

Ultrastrong magnon-magnon coupling and chiral spin-texture control in a dipolar 3D multilayered artificial spin-vortex ice

T. Dion^{1,2}, K. D. Stenning^{3,4,5}, A. Vanstone³, H. H. Holder³, R. Sultana⁶, G. Alatteili⁷, V. Martinez⁷, M. T. Kaffash⁶, T. Kimura², R. F. Oulton³, W. R. Branford^{3,5}, H. Kurebayashi^{4,8,9}, E. Iacocca⁷, M. B. Jungfleisch⁶ & Jack Gartside^{3,5}

CSIS, Tohoku University¹, Solid State Physics Laboratory, Kyushu University², Blackett Laboratory, Imperial College London³, LCN, UCL⁴, LCN, Imperial College London⁵, Department of Physics and Astronomy, University of Delaware⁶, Center for Magnetism and Magnetic Nanostructures, University of Colorado Colorado Springs⁷, Department of Electronic and Electrical Engineering, UCL⁸, AIMR, Tohoku University⁹

Artificial spin ice (ASI) is an array of nanomagnets arranged in various geometries. Due to ASI's large number of reconfigurable states it has evolved from a system for investigating fundamental physics such as magnetic frustration and residual zero-point entropy to a platform for next generation computing technologies such as physical reservoir computing [1] and magnonic computing [2]. Strong magnon-magnon coupling is sought after for potential use in microwave filtering and quantum computation, however, conventional ASI has relatively weak coupling making it unsuitable for these applications.

In this talk I will introduce a layered ASI system that exhibits ultra-strong dipolar mediated coupling which also maintains magnetic state reconfigurability [3]. Vortex state control is also demonstrated via our simple shadow deposition method. Frequency combing [4] resulting from vortex-macrospin coupling will also be presented.

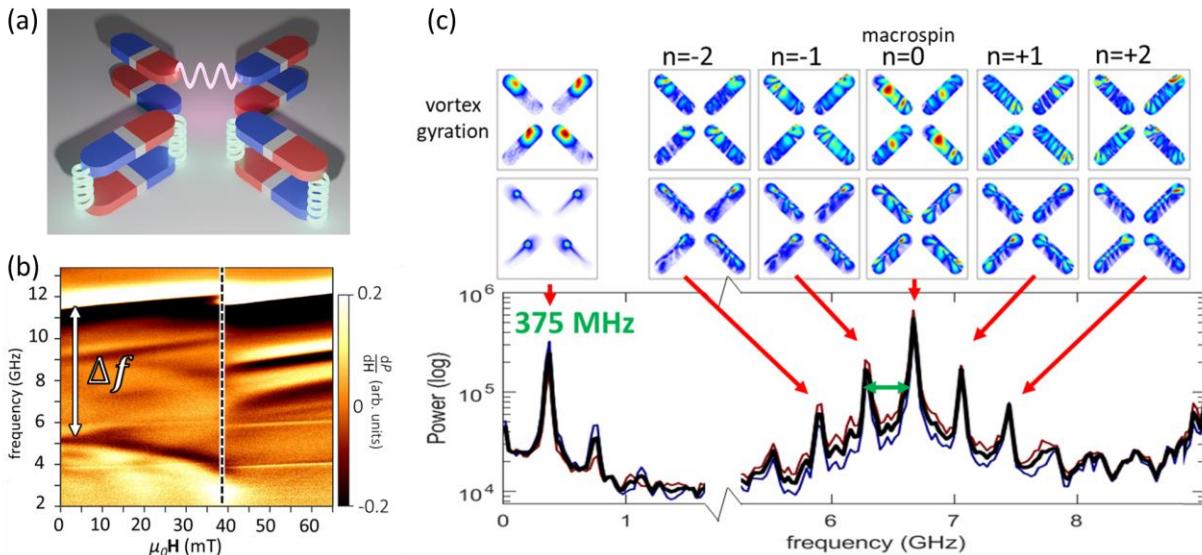


Figure 1(a) Schematic of 3D ASI showing weak (pink) and strong (green) coupling. (b) Spin-wave dynamics show ultrastrong coupling. (c) Simulation of frequency comb effect caused by vortex gyration mode coupling to macrospin texture in neighboring magnet.

1. J. C. Gartside, **T. Dion**, et al., *Nat. Nanotechnol.* **17**, 460–469, (2022)
2. B. Flebus et al., *J. Phys. Condens. Matter*, **36**, 363501, (2024)
3. T. Dion, et al., *Nat. Comms.*, **15**, 4077, (2024)
4. K. Schultheiss, et al., *PRL*, **122**, 097202, (2019)
5. Z. Wang, et al., *PRL*, **127**, 037202, (2021)

酸化物セラミックスの照射誘起粘性流動の機構解明

宮岸太一¹, 近藤創介¹, 萩野靖之¹, 余浩¹, 朴玟河¹, 長谷川晃¹, 笠田竜太¹
原子力材料工学部門¹

Elucidation of the Mechanism of Irradiation-Induced Viscous Flow in Oxide Ceramics

Taichi Miyagishi¹, Sosuke Kondo¹, Yasuyuki Ogino¹, Hao Yu¹,
Minha Park¹, Akira Hasegawa¹, Ryuta Kasada¹
Department of Nuclear Materials Engineering¹,

Keywords : Viscous Flow, Irradiation Effects, Oxide Ceramics

Elucidating the mechanism of irradiation-induced viscous flow in mullite ($3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$) ceramics is a critical step toward the development of radiation-tolerant materials capable of self-healing and strength retention in extreme environments. In radiation-rich systems such as nuclear reactors or fusion devices, ceramic materials often suffer from radiation damage that compromises their structural integrity. However, some oxide ceramics, including mullite, have shown promising behavior under irradiation, potentially owing to irradiation-induced microstructural evolution that can mitigate crack propagation.

Our previous study demonstrated that a double-layer coating system, consisting of an alumina (Al_2O_3) topcoat and a mullite bond coat applied on a silicon carbide (SiC) substrate, maintained its interfacial strength even after ion irradiation. This result was unexpected, as irradiation typically deteriorates the bonding at interfaces. A plausible explanation for this behavior is that irradiation may have induced viscous flow in the mullite layer, enabling it to fill microcracks or defects at the interface and thereby enhancing or maintaining mechanical integrity. Nevertheless, the detailed mechanism of such irradiation-induced flow remains unclear.

To investigate this hypothesis, the present study aims to systematically evaluate the extent and mechanism of irradiation-induced viscous flow in mullite. High-purity polycrystalline mullite (99.1%) was selected as the model material. Controlled microcracks were introduced into the specimens prior to irradiation by applying micro-Vickers indentations. Two different indentation loads—0.98 N and 4.8 N—were used to generate cracks with varying opening widths, thereby enabling a comparative analysis of the effect of crack size on closure behavior.

Subsequently, the specimens were subjected to proton irradiation at an energy of 2 MeV at room temperature, up to a damage dose of 0.2 displacements per atom (dpa). This dose is significantly below the reported amorphization threshold of 0.35 dpa for mullite at ambient temperature, ensuring that the crystalline structure remains largely intact while still experiencing notable displacement damage.

Post-irradiation characterization was carried out using laser scanning microscopy, which revealed partial to substantial closure of microcracks, particularly those formed under lower indentation loads. Notably, cracks with widths smaller than approximately 0.5 μm exhibited significant closure. This observation suggests that irradiation-induced atomic mobility may promote viscous flow in regions under residual stress, enabling the material to heal small-scale surface or subsurface cracks. The driving force for this flow is likely the combination of irradiation-enhanced diffusion and stress gradients, with the system favoring configurations of lower surface energy through crack closure.

This study provides experimental evidence supporting the occurrence of irradiation-induced viscous flow in mullite, and further quantitative analysis—including stress field modeling and advanced microscopy—is underway to more precisely characterize the flow behavior and elucidate the governing mechanisms at the atomic scale.

Magnetostructural Correlations in Charge Transfer Ionic Chains Derived from Assembly of Paddlewheel Diruthenium(II, II) Complexes and 7,7,8,8-Tetracyano-p-quinodimethane Derivatives

K. JI, W. Kosaka, H. Miyasaka
Division of Solid-State Metal-Complex Chemistry

Keywords : Metal–Organic Frameworks, ionic chains, magnetostructural correlations

The 1:1 assembly of an electron donor (D) and an electron acceptor (A) results in a D^+A^- charge transfer ion set, contingent upon the intrinsic HOMO and LUMO energy levels and the packing structure. When these form charge-transfer one-dimensional (1d) chains, crystallization often proves challenging, thereby complicating the systematic understanding of the correlation among their structure, charge state, and magnetism. Notably, there have been only a few instances of ionic 1d chains formed by charge transfer between a paddlewheel diruthenium(II,II) complex ($[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]$) and a N,N' -dicyanoquinodiimine (DCNQI) or 7,7,8,8-tetracyano-*p*-quinodimethane (TCNQ) derivative. In this study, we report two types of D^+A^- ionic chains, $[\{\text{Ru}_2(5-\text{X}-2-\text{OHArCO}_2)_4\}(\text{TCNQF}_2)] \cdot n(\text{solv})$ ($5-\text{X}-2-\text{OHArCO}_2^-$) = 5-halogeno-2-hydroxybenzoate; TCNQF_2 = 2,5-difluorotetracyanoquinodimethane; $\text{X} = \text{Br}$, $n(\text{solv}) = (\text{anisole})(p\text{-xylene})$, **1**; $\text{X} = \text{Cl}$, $n(\text{solv}) = 2(\text{anisole})$, **2**), which provide an alternating spin chain composed of $S = 3/2$ for $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{III}}]^+$ and $S = 1/2$ TCNQF_2^- . Strong antiferromagnetic coupling with $J \approx -100$ K was observed between the two spin units in both compounds, forming ferrimagnetic chains. The correlation between the structure and exchange coupling of a series of $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{III}}]^+-\text{DCNQI}^-/\text{TCNQ}^-$ ion chains was investigated. The findings of this study suggest that the Ru–N distance may be the most significant factor influencing the magnitude of the exchange interaction.

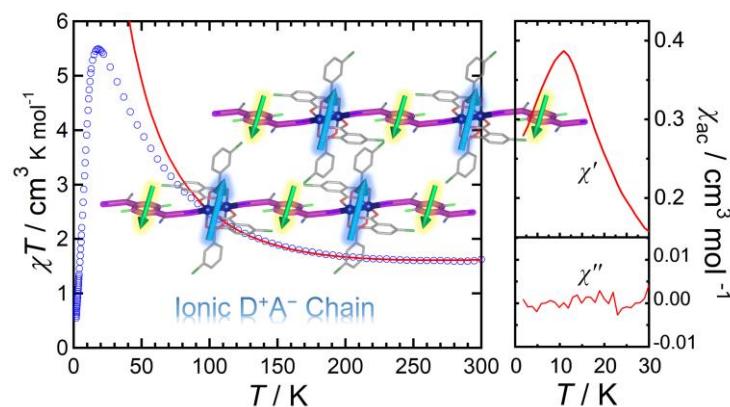


Fig.1 Two one-dimensional ionic chains were synthesized through electron transfer reactions between D to A. In addition to the strong antiferromagnetic coupling between D and A within the chain (left: temperature dependence of χ^T), interchain antiferromagnetic interactions were also observed at low temperatures (right: ac susceptibilities)

Temperature-dependent Formation of Nanoporous Fe₇Mo₆ Intermetallic Compounds in Liquid Metal Dealloying

R. Song¹, P. Geslin², T. Wada¹, H. Kato¹

Institute for Materials Research, Tohoku University¹, INSA Lyon, CNRS, Universite Claude Bernard Lyon 1, MATEIS, UMR5510, 69621 Villeurbanne, France ²

Keywords : Liquid Metal Dealloying, Nanoporous Intermetallic Compounds, Temperature Dependence

The liquid metal dealloying strategy has been widely used in fabrication of porous metal/alloy and heterogeneous composite for various applications, such as batteries, catalysts, and hydrogen storage. The high-temperature liquid metal dealloying enables fabricating not only the similar phase from precursor alloy, but also chemically ordered intermetallic compounds^[1] by phase evolution concurrent with dealloying. The microstructure and phase transformation are crucible to tailor the further functionality of these materials. Recently, the effect of phase transformation in ligaments were explored in electrochemical dealloying process through engineering remained composition of ligaments^[2] or further annealing the obtained ligaments^[3] to adjust the final phase components of porous materials. While, both engineering remained composition of ligaments and heat treatment at high temperature can be achieved by one step liquid metal dealloying. Furthermore, different from the annealing of ligament sized in several nanometer to hundreds nanometer, the phase transformation can happen along the reaction front since the beginning of liquid metal dealloying. Here, we investigate the temperature-dependent formation of nanoporous Fe₇Mo₆ intermetallic compounds during liquid metal dealloying, which shows light on precisely tailoring the microstructure for functional design.

References

- [1] Song, R., Han, J., Okugawa, M., Belosludov, R., Wada, T., Jiang, J., ... & Kato, H. (2022). *Nature communications*, 13(1), 5157.
- [2] Zeng, Y., Gaskey, B., Benn, E., McCue, I., Greenidge, G., Livi, K., ... & Elebacher, J. (2019). *Acta Materialia*, 171, 8-17.
- [3] Liu, M., & Weissmüller, J. (2022). *Acta Materialia*, 241, 118419.

窒化鋼における表面硬さ分布のデータ駆動型予測モデル構築

関田さやか, 宮本吾郎, 古原忠

金属組織制御学研究部門

Data-Driven Modeling of Surface Hardness Distribution in Nitrided Steel

S. Sekida, G. Miyamoto, T. Furuhara

Microstructure Design of Structural Metallic Materials

Keywords : nitriding, surface hardening, machine learning,

カーボンニュートラルに向け、電気自動車や風力発電の減速機に用いられる歯車の長寿命化が求められている。歯車を長寿命化するため疲労強度を向上させるには表面硬化処理が有効であり、表面硬化処理の一つとして表面から窒素を吸収、拡散させる窒化処理が広く利用されている。窒化処理材に付与される硬さ分布は処理条件（窒化温度、時間）や添加元素によって複雑に変化する。疲労強度は表面硬さに加えて内部の硬さ分布形状に依存するため、窒化材の効率的な処理条件・合金設計には硬さ分布予測モデル構築が重要である。そこで我々のグループでは、データ駆動型モデリングによる窒化材の硬さ分布予測モデル構築に取り組んできた^{1,2)}。

【データセットとモデルの概要】これまでの実験で蓄積した硬さ分布データと、論文データのマイニングを組み合わせ、合金組成もしくは窒化条件が異なる881条件のデータセットを構築した。このデータセットを用いて、合金組成と窒化温度・時間と治金パラメータ（拡散距離や硬化層厚さ）を組み合わせ、硬さ分布を予測する深層学習モデルを構築した。

深層学習モデルで計算した硬さ分布と実験値の比較の一例をFig. 1(a)に示す。種々の温度で窒化した試料の硬さ分布が再現されていることが分かる。本モデルの精度を確認するため、未学習の実験値(Fig. 1(b))³⁾と計算値(Fig. 1(c))を比較した。これを見ると、V, Cr 添加による硬化やC添加量増大による軟化が定量的に予測できていることから、データ科学的手法は窒化材の硬さ分布予測にも有用であることが分かる。

本研究は、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業JPMXP1122684766の助成を受けたものです。

【参考文献】 1) 宮本吾郎ら, 第173回日本金属学会秋期講演大会, 概要集

2) G. Miyamoto et al., CAMP-ISIJ, 37 (2024), 239. 3) 小林ら, 自技会論文集, 45(2014), 1153

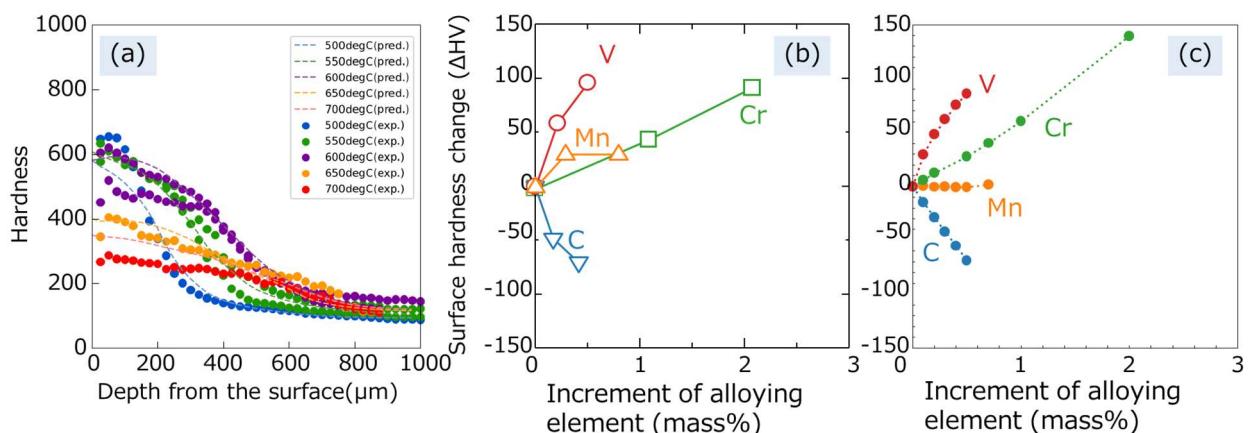


Fig. 1 (a)種々の温度で16h 窒化したFe-1Cr材の硬さ分布、窒化材の表面硬さの添加元素依存性
(b)実測値³⁾、(c)計算結果（基本組成はFe-0.1C-0.15Si-0.55Mn-1.25Cr-0.17V, 窒化条件：853K, 2h）

ベンゼンスルホン酸塩を用いた新規有機伝導体の結晶構造と物性

佐藤圭晃¹, 米山直樹¹

低温電子物性学研究部門, 山梨大学¹

Crystal structure and physical properties of a new organic conductor containing benzenesulfonate

Y. Sato¹, N. Yoneyama¹

Tohoku University, University of Yamanashi¹

Keywords : organic conductor, TTF, benzenesulfonate

有機伝導体はドナー分子と対アニオン分子が交互に積層した構造を有し、高い電気伝導性を示す。中でも代表的なドナー分子である BEDT-TTF(以下 ET)を母体として多くの有機伝導体が合成され、多様な結晶構造と強相関電子物性が発現する。対アニオンには通常無機の閉殻アニオンを用いることが多いが、有機分子アニオンを用いた全有機伝導体がいくつか報告されている。対アニオンに芳香族スルホン酸塩を用いた場合、 δ -(ET)₂(C₇H₇SO₃) [1]、 θ -(ET)(C₇H₇SO₃)·3H₂O [2]等、組成比の異なる多形が得られ、さらに有機アニオンへの化学修飾により構造の変化と物性の制御が可能になる。そこで本研究では TTF 骨格を有するドナー分子を用い、対アニオンとしてベンゼンスルホン酸アニオン(C₆H₅SO₃⁻ : BsO⁻)とその誘導体を組み合わせた全有機伝導体の合成を目的とした。単結晶育成は H 型ガラスセルを用いて電気化学的酸化還元法によって行った。ドナー分子は分子末端構造が ET と異なるものを 3 種類、対アニオンは 4 種類用いた。本発表では良質結晶が得られた、TTF と BsO(図 1)を用いた塩についての結果を述べる。

育成の結果、0.5-1.0 mm の黒色板状単結晶が得られ、単結晶 X 線構造解析の結果から新規化合物である(TTF)BsO と決定することができた。図 2 に(TTF)BsO の結晶構造を示す。单斜晶系で空間群は $P2_1/c$ 、格子定数は $a = 9.8692(9)$ 、 $b = 21.361(2)$ 、 $c = 14.2570(14)$ Å、 $\beta = 109.121(11)$ °、 $V = 2839.8(5)$ Å³、 $Z = 8$ 、 $R = 9.36$ %である。結晶学的に独立な TTF 分子は単位胞に 2 個含まれる。TTF 分子は c 軸方向に一次元的積層カラムを形成し、カラム内で TTF は強い二量体を形成している。TTF 積層カラムは平板状のアニオン分子に周囲を囲まれた構造をしている(図 2)。この化合物はバンド計算ではバンド絶縁体となるが、実際には電気抵抗率の温度依存性(図 3)が極めて弱く、室温から 230 K までは金属的挙動を示した。

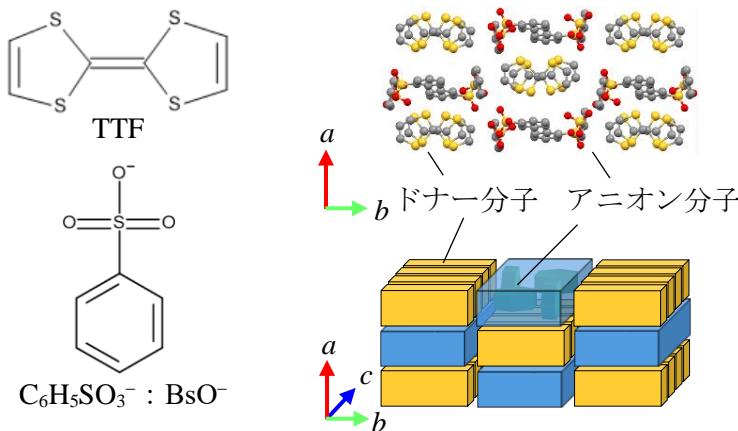


図 1 ドナー分子、アニオン分子

図 2 (TTF)BsO の結晶構造

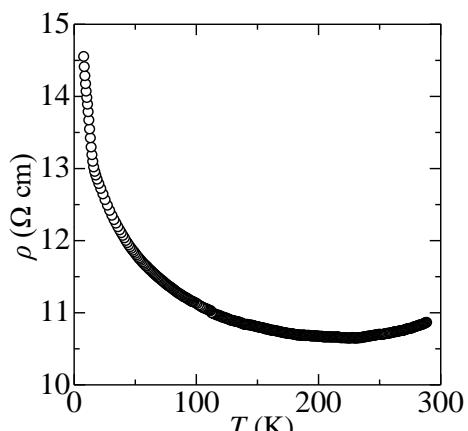


図 3 電気抵抗率の温度依存性

[1] D. Chasseau, et al., *Synth Met*, **24**, 117-125, 1988.

[2] CHEN, Hong-Yu, et al., *Acta Chimica Sinica*, **62**, 1217-1221, 2004.

圧力誘起超伝導を示す反強磁性体 CeNiGe_3 の単結晶構造解析

苗代橋吟京, 池田陽一, 橋本勇輝, 藤田全基
量子ビーム金属物理学研究部門

Single-Crystal Structure Analysis of Antiferromagnet CeNiGe_3 Exhibiting Pressure-Induced Superconductivity

O. Nawashirobashi, Y. Ikeda, Y. Hashimoto, and M. Fujita
Quantum Beam Materials Physics Laboratory

Keywords : 重い電子系, 中性子回折, 格子非整合反強磁性

CeNiGe_3 は、図 1 のような温度-圧力相図を呈し、加圧によって少なくとも 2つ以上の磁性相 (IC-AFM-I 相, AFM-II 相) の存在が報告されている。また、2つの超伝導相 SC-I 相と SC-II 相が圧力下において存在し、SC-I 相は AFM-I 相内部で生じ、AFM-II 相の発現とともに消失する[1]。他方、高圧側の SC-II 相は AFM-II 相が消失する圧力近傍で生じ、重い電子超伝導の特徴を持つ[2]。また一部の実験からは、非整合反強磁性相 (IC-AFM-I 相) の他にも、整合反強磁性相 (C-AFM-I 相) の存在が指摘されている[3]。SC-I 相の発現と消失は、反強磁性相の磁気状態と密接に関係していると考えられるため、圧力下反強磁性相の磁性状態を明らかにすることは、 CeNiGe_3 が示す温度-圧力相図の理解を深める上で重要である。IC-AFM-I 相については、当初、粉末中性子回折実験により、磁気伝搬ベクトルが $\mathbf{k}_1 = (1, 0, 0)$ の整合反強磁性と、 $\mathbf{k}_2 = (0.41, 0, 1/2)$ の非整合反強磁性が共存していると提案されていた[4]。しかし、図 2 に示すように、その後の単結晶中性子回折実験により、整合反強磁性は存在せず、 $\mathbf{k}_2 = (0.41, 0, 1/2)$ の非整合反強磁性が本質的に重要であることが明らかにされた[6]。

本研究では、常圧下における非整合反強磁性状態を明らかにするために、 $\mathbf{k}_2 = (0.41, 0, 1/2)$ の磁気伝搬波数ベクトルの下で許される磁気構造を規約表現解析により調べ、取り得る磁気構造の中から、実験結果を再現する尤もらしい構造を決定することを試みた。

講演会では磁気構造解析の結果について示し、その磁気状態の妥当性と起源について議論する。また、並行して進めている偏極中性子散乱実験に向けた中性子スピントルフィルター構築の進捗状況についても報告する。

- [1] Y. Ikeda *et al.*, JPS Conf. Proc. 3, 015044(2014). [2] H. Kotegawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 75, 044713 (2006). [3] A. Harada *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 103710 (2008). [4] L. Durivault *et al.*, Appl. Phys. A 74, s677 (2002); L. Durivault *et al.*, J. Phys. Condens. Matter 15, 77 (2003). [5] S. Kitagawa *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 89, 063702 (2020). [6] Y. Ikeda *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 84, 123701 (2015).

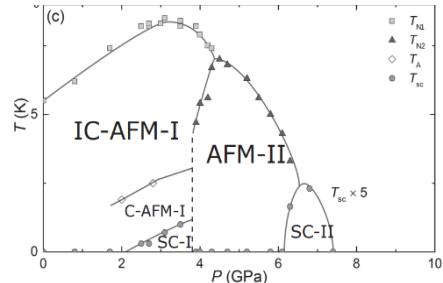


図 1 : CeNiGe_3 の温度-圧力相図 [5]

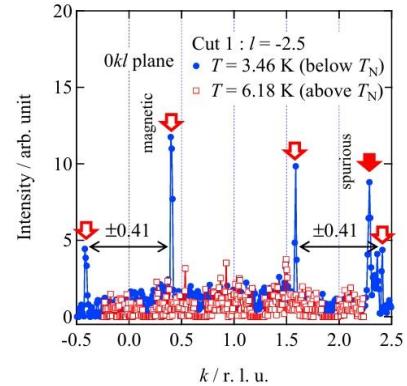


図 2 : $[0, k, -2.5]$ 方向における中性子回折強度の k 依存性 [6]

Indirect Exchange Coupling for Perpendicularly Magnetized CoFeB layers through W Interlayer

X. Hou¹, K. Ito¹, V. K. Kushwaha¹, T. Yamazaki¹, S. Sakamoto^{1,2} and T. Seki^{1,2,3}

Magnetic Materials Lab., IMR, Tohoku Univ.¹, CSIS, Tohoku Univ.², SRIS, Tohoku Univ.³

Keywords : Indirect exchange coupling, Perpendicular anisotropy, CoFeB, W

The exchange interaction between ferromagnetic layers separated by a nonmagnetic layer, which is called the interlayer exchange coupling (IEC), leads to the antiparallel alignment of magnetization vectors for the adjacent ferromagnetic layers. The artificial antiferromagnetic spin structure is well known as a synthetic antiferromagnet (SyAF). The SyAFs have recently attracted renewed interest as a subject in the field of antiferromagnetic spintronics. Antiferromagnetic spintronics exploits the characteristics of antiferromagnet: low magnetic susceptibility, lack of stray magnetic field, and high frequency dynamics coming from the antiferromagnetic resonance. These features allow us to develop next-generation spintronic devices with high storage density and fast operation speed.

Among materials combinations for studying antiferromagnetic spintronics, previous studies reported that Ta is a candidate material for the interlayer showing both the IEC and spin-orbit torque (SOT) [1]. In the SyAF structure consisting of MgO/CoFeB/Ta/CoFeB/MgO, the Ta interlayer plays the roles of IEC and the generation of SOT originating from the spin Hall effect. Considering that W exhibits a higher spin Hall angle (-0.3) than Ta (-0.15) [2], one may expect that a SyAF with the W interlayer is more promising for improving the device performance. Nevertheless, there are very limited works on antiferromagnetic coupling through the W layer [3-5], and the comprehensive study focusing on the IEC with W has not been carried out yet.

This work reports a systematic study on the IEC for the sandwich structure of two perpendicularly magnetized CoFeB layers separated by the W interlayer. We fabricated the stack of Ta(20)/MgO(15)/CoFeB(18)/W(t_w)/CoFeB(18)/MgO(15)/Ta(15) (in angstrom) on thermally oxidized Si substrates by employing the ultrahigh vacuum magnetron sputtering system at room temperature. The t_w was varied in the range from 0 to 40 Å. The post-annealing was performed for all the samples at 340°C for 1 hour with vacuum pressure less than 5×10^{-5} Pa. The magnetization was measured using the vibrating sample magnetometry system, and the magnetic domain structures were observed exploiting the Kerr microscopy. The CoFeB layers with $t_w = 6\text{-}30$ Å exhibited perpendicular magnetization. In addition, antiferromagnetic coupling was obtained for $t_w = 6\text{-}26$ Å, leading to the negligible remanent magnetization in the out-of-plane magnetization curves. Interestingly, clear spin-flip behavior was observed in stacks with $t_w = 12\text{-}20$ Å, indicating that the well-defined perpendicular antiferromagnetic configuration can be achieved at a relatively thick W interlayer. This study not only deepens the understanding of IEC coupling through W, but more importantly, gives a new route for designing the W-based spintronics devices.

Reference

- [1] G.Y. Shi *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 104435 (2017).
- [2] C. F. Pai *et al.*, Appl. Phys. Lett. **101**, 122404 (2012)
- [3] S. S. P. Parkin, Phys. Rev. Lett. **67**, 3598 (1991).
- [4] J.-H. Kim *et al.*, Sci. Rep. **5**, 16903 (2015).
- [5] T. Zhang *et al.*, Phys. Rev. B **109**, 054406 (2024).

Spark plasma sintering of recycled zirconia ceramics: densification, microstructure, and mechanical properties

H. Yang¹, G. Hong¹, K. Yamanaka

Graduate School of Dentistry, Tohoku University, Sendai, Japan¹,

Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai, Japan

Keywords: Zirconia ceramic; Recycling; Spark plasma sintering

Statement of problem. Substantial dental zirconia waste is generated during the computer-aided design/manufacturing milling process, but effective methods for recycling it into dense ceramics remain limited.

Purpose. This study aimed to investigate the densification behavior, microstructure, and mechanical properties of recycled zirconia fabricated by spark plasma sintering (SPS).

Materials and methods. Recycled zirconia powder (initial RZP) was prepared from dental zirconia residual blocks and further treated by ball milling for 1 h and 6 h. Various RZPs (initial RZP, RZP-BM 1 h, and RZP-BM 6 h) and a commercial zirconia powder (CZP) were consolidated individually using SPS at 1200–1400 °C. Powder properties were characterized, and the SPS-sintered bodies were evaluated for microstructure, grain size, density, Vickers microhardness, fracture toughness, and biaxial flexural strength.

Results. Ball milling effectively refined the morphology and particle size of initial RZP, resulting in improved powder packing density, highest in RZP-BM, followed by CZP. At SPS 1200 °C, both initial RZP and CZP samples exhibited residual pores, while RZP-BM samples showed the finest grain size and highest mechanical strength. As the SPS temperature increased, a Hall–Petch relationship was observed in RZP-BM samples. Initial RZP and CZP samples required 1300 °C for adequate densification. As the temperature increased to 1400 °C, their strength and Vickers microhardness decreased due to grain growth. Notably, abnormal grain growth was observed in the initial RZP samples at 1400 °C.

Conclusion. Dental zirconia waste, after refinement by ball milling, can be successfully recycled into dense ceramics using SPS at relatively low temperatures, with mechanical strength surpassing that of commercial zirconia ceramics.

Mechanical properties and Microstructure of Gas-atomized CuYZr-WO₃ towards the Overcoming of Trade-off between Strength and Conductivity

Z. Gao^{1,2}, D. Geng¹, H. Yu¹, K. Inoue¹, Y. Ogino¹, S. Kondo¹, R. Kasada¹

IMR, Tohoku University¹, Graduate School of Engineering, Tohoku University²

Keywords : ODS-Cu, complex oxide, thermal diffusivity

【Introduction】

Cu alloys are good candidates for heat sink materials in fusion reactors due to their excellent thermal conductivity. Cu-Y₂O₃-Zr type oxide dispersion strengthened (ODS) Cu alloys fabricated by mechanical alloying (MA) have achieved great mechanical properties by the formation of complex oxides such as Y₂Zr₂O₇ and yttria-stabilized zirconia (YSZ). However, the coarsening of powders in MA process due to the high ductility of Cu is a critical issue towards their mass-production. In this research, WO₃ was chosen as a carbon-free process control agents (PCA) as well as an excess oxygen supplement in the MA process of ODS-Cu powders, aiming at obtaining fine MA powders and overcoming the trade-off between mechanical properties and thermal conductivity in Cu alloys.

【Experimental】

Gas-atomized CuYZr and WO₃ powders were MAed by water-cooling ball milling machine at a rotation speed of 500 rpm in Argon atmosphere. The MAed powder was filtered by the mesh of 500 μm and then sintered at 880 °C with a load of 50 MPa by spark plasma sintering (SPS). X-ray diffraction experiment was performed by Ultima IV SG (Rigaku) for both MAed powder and as-sintered sample. Vickers hardness test and thermal diffusivity test were conducted by HMV-G21 (Shimadzu) and LFA-467 HyperFlash (Netzsch), respectively. Oxide morphology was evaluated by transmission electron microscope (TEM) on Titan3TM 60-300 double corrector (FEI) at 300 kV. Elemental distribution of MAed powder and as-sintered sample were investigated by atom probe technology (APT) on LEAP-4000XHR (CAMECA) in Oarai Center.

【Results and Discussion】

The WO₃ addition significantly refined the size of MAed ODS Cu powders to an average size of 270 μm and increased the production rate of the MAed powders to nearly 100%. As for X-ray diffraction results, the WO₃ peaks disappeared in the MAed powders and existed as pure tungsten peak and Y-Zr oxide peak in the as-sintered samples. The as-sintered CuYZr-2.44WO₃ sample achieved the Vickers hardness of 274.4 HV0.1 and thermal diffusivity of 70.2 mm²s⁻¹ at room temperature. TEM observations revealed that the nanosized Y-Zr complex oxides are Y₂Zr₂O₇, along with fine pure tungsten particles, dispersed inside the grains and pinned on the grain boundaries. APT results indicated that WO₃ decomposed in MA process and dispersed in Cu matrix as pure tungsten. Oxygen generated from the decomposition of WO₃ reacted with Y/Zr to form most of the Y-Zr composite oxides with a Y/Zr ratio of 1:1 during the SPS sintering, indicating the preferential formation of Y₂Zr₂O₇. In addition, Zr-rich YSZ particles were found, and their occurrence is associated with larger-sized Y₂O₃ particles and Y enrichment at the interface between the oxide particles and the Cu matrix.

Analysis of Local Deformation Mechanisms in Reduced-Activation Ferritic/Martensitic Steels Irradiated with Protons under Nanoindentation

Sumin Lee, Diancheng Geng, Yuma Furukawa, Sanghoon Noh¹, Yasuyuki Ogino,
Sosuke Kondo, Minha Park, Hao Yu, Ryuta Kasada*

Materials Science and Engineering, Pukyong National University,
Busan, Republic of Korea¹

Keywords : Local deformation, FM steel, nanoindentation

Reduced-activation ferritic/martensitic steels (RAFMS) have been strategically developed as promising structural materials for nuclear fusion reactors, primarily due to their exceptional resistance to radiation-induced damage. This resistance is largely attributed to the high defect absorption capacity inherent in their tempered martensitic microstructure, which is characterized by a refined lath morphology, elevated dislocation density, sub-grain structures, and uniformly dispersed nanoscale precipitates. While these complex and hierarchical microstructural attributes contribute positively to the material's mechanical strength and thermal stability, they simultaneously render the material susceptible to strain localization, which may promote premature brittle fracture under both irradiated and unirradiated conditions.

Despite extensive research, the underlying mechanisms governing localized deformation in RAFMS remain insufficiently understood, particularly due to the added complexity introduced by irradiation-induced microstructural evolution. Our group's preliminary investigations have revealed that the formation of slip bands and surface pile-up near nanoindentation imprints may serve as indicators of localized plasticity within the lath martensite matrix of RAFMS. Building upon these insights, the present study aims to systematically analyze the development of slip bands and pile-up features induced by nanoindentation in a 2 MeV proton-irradiated RAFMS, with up to 0.2 dpa. In the irradiated specimen, nanoindentation experiments revealed the emergence of pronounced slip bands surrounding the indent regions. To elucidate the underlying deformation mechanisms at the microscale, three-dimensional electron backscatter diffraction (3D-EBSD) and Schmid factor analysis was conducted, providing detailed crystallographic insights. The results demonstrated that pile-up preferentially develops along certain slip directions, a phenomenon that is likely correlated with the applied temperature conditions. These findings are expected to enhance the understanding of localized deformation behaviors in irradiated RAFMS, which is essential for constructing reliable irradiation embrittlement models.

First-principle approach to spin excitation in noncolinear magnetic systemH.-Y. Chen, Y. Nomura

Institute of Material Research, Tohoku University

Keywords : First-principle calculation, Magnon, Noncollinear Magnet

Magnetic materials with complex non-collinear spin textures have garnered considerable interest due to their potential in energy-efficient spintronic applications. In these systems, spin-wave (magnon) excitations serve as key mediators for manipulating spin structures—such as skyrmions and spin spirals—for information processing. Conventional magnon theories are typically formulated within the Heisenberg model, which assumes localized magnetic moments and is well-suited for rare-earth and insulating systems. However, in many transition metal compounds, where magnetism arises primarily from itinerant d-electrons, this localized-spin approximation becomes inadequate. A more accurate and predictive description requires a treatment that incorporates the dispersive nature of the underlying electronic states.

In this work, we present an ab initio framework for simulating spin-waves in noncolinear magnetic systems. This method computes the magnetic excitation directly from the electronic wave functions obtained via density functional theory, thereby capturing the itinerant and spatially extended nature of magnetic electrons. The resulting dynamical spin susceptibility provides direct access to the magnon spectrum, enabling comparison with experimental measurements. We apply this formalism to the spin-spiral state of LiCu₂O₂, a prototypical frustrated magnet. Analysis of the susceptibility spectrum reveals an intrinsic instability of the collinear ferromagnetic configuration toward the formation of a noncollinear spin spiral. Notably, the computed periodicity of the spin modulation agrees with experimental observations. Building upon the noncollinear ground state, we further extract the magnon dispersion, demonstrating the applicability of our approach to complex spin textures in real materials.

Overall, our work establishes a first-principles scheme with predictive capability for investigating the properties of noncollinear magnetic materials. By directly connecting electronic structure calculations to spin-wave dynamics, this approach bridges the gap between simplified theoretical models and experimental observations, offering deeper insight into the magnetic excitations of systems with complex spin textures.

Novel One-Dimensional Donor-Acceptor Metal-Organic Frameworks with Molecular Insertion for the Electronic State Modulation

Y. Liu, W. Kosaka, H. Miyasaka

Division of Solid-State Metal-Complex Chemistry

Keywords: donor/acceptor metal-organic frameworks, one-dimensional, electronic state modulation

Electron-conjugated charge-transfer (CT) metal-organic frameworks (MOFs) composed of electron donor (D) and electron acceptor (A) sites, which we call D/A-MOFs, are expected to be potentially favorable magnetic materials because of the tunable electron transfer (ET) between the D and A components. One-dimensional (1D) DA chains are considered excellent materials with modulable electronic states, not only because the stable D^+A^- ionic states could always lead to an effective magnetic moment, but also because of their simple structures. However, the construction of DA chains with tunable electronic states remains challenging, and only a few examples have been reported.

Herein, for the first time, we synthesized novel DA chains by inserting π -conjugated molecules (Z) into the interchain space between components A. We focused on a D/A combination of a paddlewheel type diruthenium(II,II) complex ($[Ru_2^{II,II}]$) as D and N,N' -dicyanoquinonediimine derivatives (DCNQIR') as A, and decamethylmetallocene ($[MCp^*_2]$, M = Fe, Co, and Cr) as π -conjugated molecule Z for the insertion, by considering spatial configuration, energy level, as well as the redox between $[MCp^*_2]$ and DCNQIR', which successfully provided three novel Z[DA]-type chains $[FeCp^*_2][\{Ru_2(2,4,6-F_3ArCO_2)_4\}(DMDCNQI)] \bullet p$ -xylene $\bullet 2$ (DCM) (**1**; $2,4,6-F_3ArCO_2^-$ = 2,4,6-trifluorobenzoate; DMDCNQI = 2,5-dimethyl- N,N' -dicyanoquinonediimine; DCM = dichloromethane); $[FeCp^*_2][\{Ru_2(2,4,6-F_3ArCO_2)_4\}(DOMDCNQI)] \bullet 6$ (DCM) (**2**; DOMDCNQI = 2,5-dimethoxy- N,N' -dicyanoquinonediimine); $[FeCp^*_2][\{Ru_2(2,3,5,6-F_4ArCO_2)_4\}(DOMDCNQI)] \bullet 2$ (DCM) (**3**; $2,3,5,6-F_4ArCO_2^-$ = 2,3,5,6-tetrafluorobenzoate).

Single-crystal XRD revealed the DA chain feature of the compounds (Fig. 1a-c). The electronic states of $[Ru_2]$, DCNQIR', and $[FeCp^*_2]$ were determined from the local bond lengths as $[Ru_2^{II,II}]$, DCNQIR'' $^-$, and $[FeCp^*_2]^+$, respectively, for all compounds (Fig. 1d). These results indicate the occurrence of ET from $[FeCp^*_2]$ to DCNQIR', and the charge distribution is represented as

$[FeCp^*_2]^+[(Ru_2^{II,II})$
(DCNQIR'' $^-$)], that is, $Z^+[DA^-]$. Such paramagnetic 1D chains with the electronic states of $[Ru_2^{II,II}]$ ($S = 1$) and DCNQIR'' $^-$ ($S = 1/2$), as well as $[FeCp^*_2]^+$ ($S = 1/2$), were realized for the first time, demonstrating the effectiveness of the molecular insertion strategy.

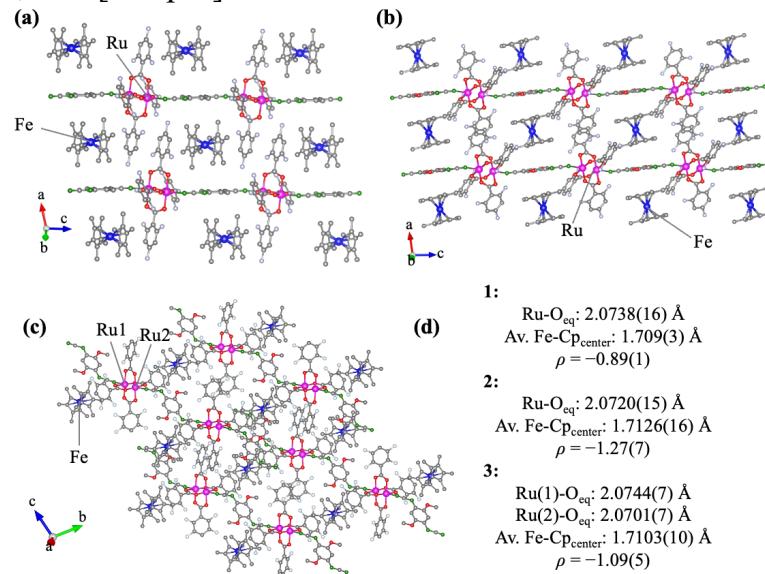


Fig 1. Crystal structures of (a) **1**, (b) **2**, and (c) **3**. (d) The local bond lengths of the compounds to determine the electronic state.

Unlocking the secrets of ideal fast ion conductors for all-solid-state batteries

Kartik Sau^{1, 2*}, Shigeyuki Takagi³, Tamio Ikeshoji², Kazuaki Kisu^{3,4}, Ryuhei Sato Egon Campos dos Santos¹, Hao Li¹, Rana Mohtadi⁵ & Shin-ichi Orimo^{1, 3}

¹Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR), Tohoku University, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan.

²Mathematics for Advanced Materials Open Innovation Laboratory (MathAM-OIL), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), c/o Advanced Institute for Materials Research (WPI- AIMR), Tohoku University, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan.

³Institute for Materials Research (IMR), Tohoku University, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan.

⁴College of Engineering, Shibaura Institute of Technology, Tokyo 108-8548, Japan.

⁵Materials Research Department, Toyota Research Institute of North America, 555 Woodridge Avenue, Ann Arbor, MI, USA.

e-mail: kartik.sau.d2@tohoku.ac.jp;

Keywords : All-solid-state batteries, fast ion conduction, ion transport mechanism

All-solid-state batteries (ASSBs) are promising alternatives to conventional lithium-ion batteries. ASSBs consist of solid-fast-ion-conducting electrolytes and electrodes that offer improved energy density, battery safety, specific power, and fast-charging capability. Despite decades of intensive research, only a few have high ionic conductivity at ambient temperature. Developing fast ion-conducting materials requires both synthesis of high-conducting materials and a fundamental understanding of ion transport mechanisms. However, this is challenging due to wide variations of the ionic conductivity, even within the same class of materials, indicating the strong influence of structural modifications on ion transport. Here we selected three material classes, namely layered oxides, polyhedral connections, and cluster anion types, as promising fast ion conductors. Emphasis is placed on the inherent challenges and the role of the framework structure on mobile ion conduction. We elucidate strategies to address these challenges by leveraging theoretical frameworks and insights from materials science.

Enhanced Magnetic Coupling Driven by Intercalated Cation-stabilized Delocalization of $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]$ Electrons

Q.-X. Liu¹, W. Kosaka¹, H. Miyasaka¹

Division of Solid-State Metal-Complex Chemistry, IMR¹

Keywords : magnetic coupling, radical linker, cation intercalation

Compared with the traditional inorganic magnets, the molecular-based magnets hold great promise for the next generation of innovative magnetic materials due to their high chemical tunability. Over the last decades, various approaches have been developed to construct molecule-based magnets showing strong magnetic coupling. For example, radical ligands and paramagnetic metal ions/clusters with high spin values have become one of the most promising building blocks. However, will high-spin building blocks lead to stronger magnetic interactions?

Herein, we tried to offer an opposite answer using a pair of isostructural layered magnets, $(\text{NMQ})[\{\text{Ru}_2(2,4,6-\text{F}_3\text{ArCO}_2)_4\}_2(\text{TCNQ})] \cdot 2\text{DCM} \cdot 2\text{DCE}$ (**1-NMQ**, $\text{NMQ}^+ = N$ -Methylquinolinium cation; $2,4,6-\text{F}_3\text{ArhCO}_2^- = 2,4,6$ -trifluorobenzoate, $\text{TCNQ} = 7,7,8,8$ -tetracyanoquinodimethane; $\text{DCM} = \text{dichloromethane}$; $\text{DCE} = 1,2$ -dichloroethane) and $[\{\text{Ru}_2(2,4,6-\text{F}_3\text{ArCO}_2)_4\}_2(\text{TCNQ})] \cdot 2(p\text{-xylene}) \cdot 2\text{DCM}$ (**1-pxy**) (Fig. 1a).^[1] Both compounds were synthesized by the slow liquid diffusion using $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}(2,4,6-\text{F}_3\text{ArCO}_2)_4(\text{THF})_2]$ units and $\text{NMQ}^+ \text{-TCNQ}^-$ or TCNQ^0 as the building blocks. SCXRD analysis and IR spectra revealed $\text{TCNQ}^\cdot-$ radicals ($S = 1/2$) in two compounds. Detailed structural examinations indicate **1-NMQ** contains only $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]^0$ ($S = 1$) species, whereas **1-pxy** contains both $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{III}}]^+$ ($S = 3/2$) and $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]^0$. The plausible total spin state $\langle S_T \rangle$ is 3/2 for **1-NMQ** and 2 for **1-pxy**, resulting from the antiferromagnetic interaction between $\text{TCNQ}^\cdot-$ and $[\text{Ru}_2]$ (J_{intra}). The interlayer dipole interaction (J_{LL}) is expected to be weaker in **1-NMQ** than **1-pxy**, though they have identical interlayer coordination environment. Nevertheless, ac susceptibility measurement revealed **1-NMQ** has a higher T_c of 104 K compared to **1-pxy** ($T_c = 91$ K) (Fig. 1b).^[1] Roughly speaking, T_c is proportional to the product of $|J_{\text{intra}}|$ and S . Even though **1-pxy** has a larger S due to the presence of $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{III}}]^+$ with $S = 3/2$, higher T_c of **1-NMQ** means that $|J_{\text{intra}}|$ for **1-NMQ** is large enough to overcome the disadvantage in S , which is attributed to more effective orbital overlap of $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]^0$ and $\text{TCNQ}^\cdot-$, compared to that between $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{III}}]^+$ and $\text{TCNQ}^\cdot-$ due to more electron delocalization in the reduced form of $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]^0$ (Fig. 1c). This study highlights the positive role of cation in stabilizing the $[\text{Ru}_2^{\text{II},\text{II}}]^0$ unit, enhancing the effective magnetic coupling.

[1] W. Kosaka, H. Fukunaga and H. Miyasaka, *Inorg. Chem.* **2015**, *54*, 10001-10006.

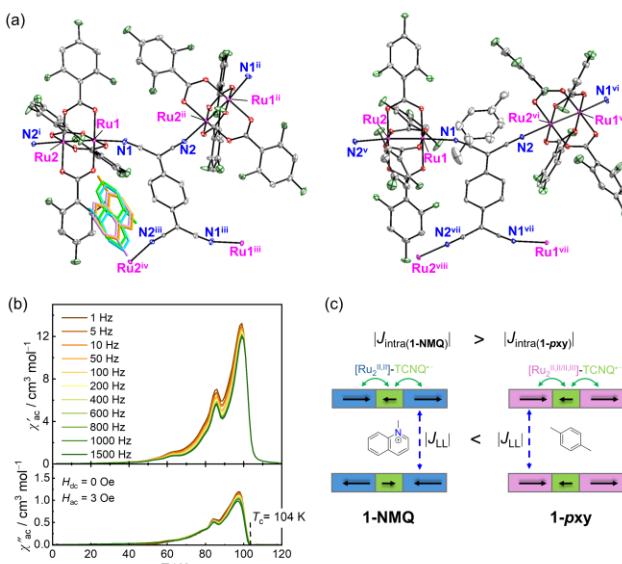


Fig. 1 (a) Formula units of **1-NMQ** (left) and **1-pxy** (right). (b) Temperature dependence of the ac magnetic susceptibilities χ' and χ'' of **1-NMQ** at zero dc field and 3 Oe oscillating field. (c) Magnetic interactions in the present layered magnets.

有機伝導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂のFFLO相に対するエックス線照射効果

高橋歩美, 杉浦栄理, 今城周作¹, 金道浩一¹, 佐々木孝彦

低温電子物性部門, 東大物性研¹

X-ray irradiation effect on the FFLO phase in organic superconductor

κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂

A. Takahashi, S. Sugiura, S. Imajo, K. Kindo, T. Sasaki

Keywords: FFLO, organic superconductor, disorder effect

一般に超伝導状態は、磁場中では常磁性対破壊効果と軌道対破壊効果によって破壊される。しかし、強磁場中でも超伝導が安定化できる機構として、Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov(FFLO)状態の存在が知られている。基本となる超伝導理論のBCS理論では電子は重心運動量 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ のクーパー対を組むが、FFLO状態では $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$ のクーパー対を組むことで秩序変数が実空間中で振動し、常磁性対破壊効果による臨界磁場(パウリリミット, H_P)を超えて超伝導状態が維持される。FFLO状態の発現には軌道対破壊効果の抑制と電子の散乱の抑制が必要である。このうち軌道対破壊効果の影響は臨界磁場の磁場方位依存性から調べられてきたが、乱れの効果の影響は未だ明らかになっていない。そこで本研究では、電子系の乱れがFFLO相へ与える影響を系統的に明らかにすることを目的とし、磁場での電気抵抗を測定した。

実験では4K以下、20T以上の面平行磁場中でFFLO相の存在が示されている層状有機超伝導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂(κ -NCS, $T_c^{0h} \sim 11$ K, $H_P^{0h} \sim 25$ T)[1]にエックス線を照射し、乱れを導入した。未照射の κ -NCS試料はクリーンリミットであることが先行研究から明らかにされている。[2]本研究の未照射試料における電気抵抗測定でも、先行研究を再現する高い臨界磁場と、FFLO相に特徴的な磁束ダイナミクスに起因する抵抗の振動が観測された。一方、エックス線を照射した試料では、強磁場下での超伝導相は抑制されていることがわかる(図1)。このとき、平均自由行程 l がコヒーレンス長 ξ 程度まで短くなりクリーンリミット条件が壊れていることが分かった。(図2)

[1] J. Wosnitza Ann. Phys. (Berlin) **530**, 1700282 (2018).

[2] M. V. Kartsovnik *et al.*, Phys. Rev. Lett. **77**, 2530 (1996).

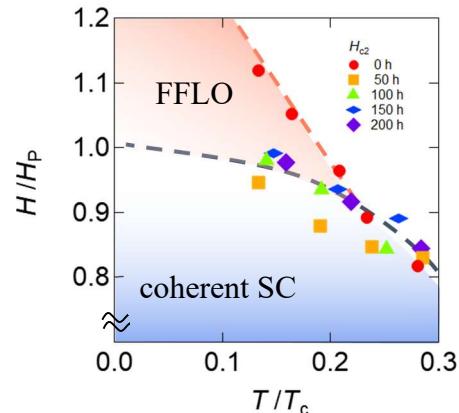


図1 κ -NCSの照射時間別 H - T 相図

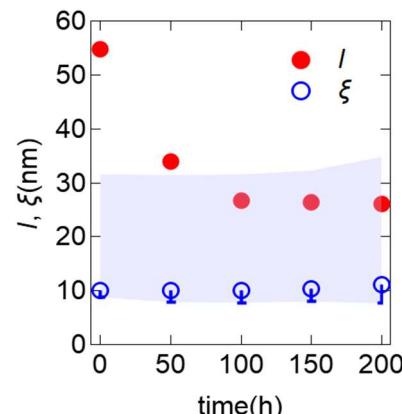


図2 照射による平均自由行程 l (赤丸)、コヒーレンス長 ξ (青丸)の変化

機械学習を用いた高誘電体の探索

滝川敦之, 清原慎, 熊谷悠¹

複合機能材料学研究部, 東北大 高等研究機構¹

Discovery of high-k materials using machine learning

A. Takigawa, S. Kiyohara, Y. Kumagai¹

Institute of Materials Research, Tohoku University¹

Keywords : 高誘電体, 機械学習, スクリーニング

【緒言】電子デバイスの性能向上において、高誘電体材料の探索は非常に重要である。高誘電体には、高い誘電率(ϵ)と大きなバンドギャップ(E_g)の両立が求められる。誘電率は電子系誘電率(ϵ_{ele})と格子系誘電率(ϵ_{ion})の2つの成分に分けられ、特に ϵ_{ion} が高誘電体性能に大きく寄与する。しかし、 ϵ_{ion} はボルン有効電荷(Z^*)とフォノンに依存し、直接予測は難しいことが報告されている[1]。そこで本研究では、 Z^* とフォノンを別々のモデルで予測し、理論式に基づいて ϵ_{ion} を間接的に推定する新手法を提案する。

【手法】まず、酸化物 928 について、第一原理計算を用いて、各物質の結晶構造、 ϵ_{ion} , Z^* , E_g を収集した。次に、既存モデル[2, 3]を参考にして、 ϵ_{ion} と Z^* を予測する独自の ML モデルを構築した。フォノンについては、原子間力から算出可能であるため、学習済み ML ポテンシャル SevenNet[3]を用いて原子間力を予測し、Phonopy[4]を利用してガンマ点におけるフォノンを算出した。これら的情報を基に、ボルン有効電荷とフォノンに関する式[5]を適用し、 ϵ_{ion} を計算した。モデルの性能評価には 5-fold クロスバリデーションを採用した。最後に、提案手法を用いて Materials Project[6]に掲載される約 8 万件の誘電率未計算物質を対象にスクリーニングを実施した。なお、バンドギャップは Materials Project に掲載される値を用いた。

【結果】従来手法(ϵ_{ion} を直接予測)では決定係数が $R^2 = 0.57$ であったのに対し、提案手法では $R^2 = 0.85$ を達成した。さらに、構築した予測モデルを用いてバーチャルスクリーニングを実施し、 $\epsilon_{ion} * E_g$ を高誘電体の性能指標として上位 50 件を選定した。これらを第一原理計算により再評価したところ、学習データを上回る高性能な材料を多数発見することに成功した。

- [1] A. Takahashi et al., Phys. Rev. Materials 4, 103801 (2020).
- [2] S. Batzner et al., Nature Communications 13, 2453 (2022).
- [3] Y. Park et al., J. Chem. Theory Comput. 20, 11 (2024).
- [4] A. Togo et al., J. Phys. Condens. Matter 35, 353001 (2023).
- [5] A. Maradudin et al., Solid State Physics: Advances in Research and Applications, Suppl. 3, Chap. 4.
- [6] A. Jain et al., APL Mater. 1, 011002 (2013).

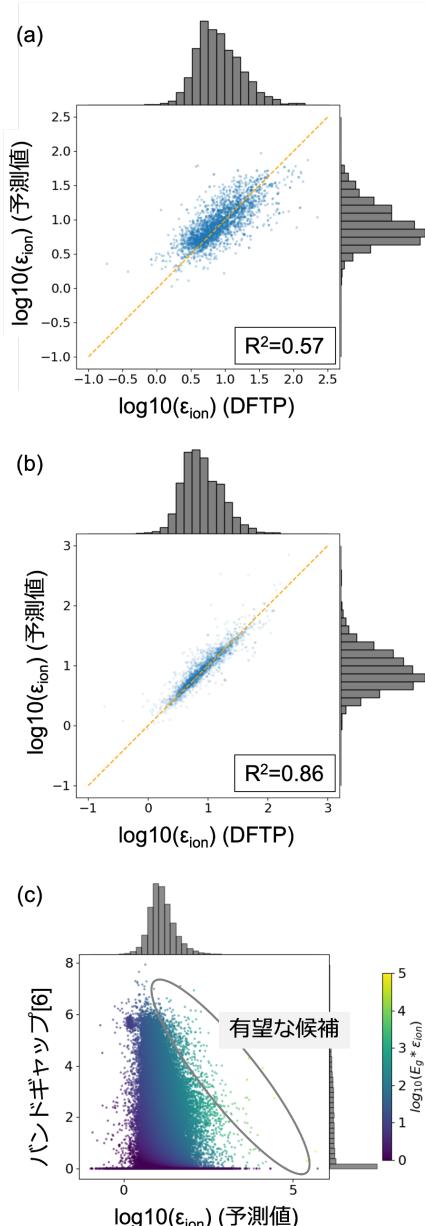


図 1. 予測とスクリーニングの結果

(a)従来手法, (b)提案手法での予測,

(c)スクリーニング

Magnetoelastic properties of epitaxial $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ films

Huameng Yu¹, Keita Ito¹, Yasushi Endo^{2,3}, Takeshi Seki^{1,3,4}

Magnetic Materials Lab., IMR, Tohoku Univ.¹, Grad. Sch. of Eng., Tohoku Univ.²,
CSIS, Tohoku Univ.³, SRIS, Tohoku Univ.⁴

Keywords : Ferromagnetic film, Nitride, Magnetostriction

【Introduction】 Magnetoelastic properties of materials directly relate to the capability for highly sensitive strain sensing of flexible spintronic devices [1]. Especially magnetostriction coefficient (λ) is an important parameter. Thus, the development of magnetic materials with high λ is necessary for realizing miniaturized flexible spintronic strain sensors. Fe_4N is a promising ferromagnetic material for spintronic applications [2]. Previous theoretical calculation [3] and experiments [4] revealed that Fe_4N showed relatively large λ . Moreover, by partially replacing Fe in Fe_4N with Co, tunable magnetoelastic properties were realized, in which the value of λ along the [100] direction (λ_{100}) was modulated in the wide range from -121 to +46 ppm [5]. However, λ in the [111] direction, λ_{111} , has not been evaluated for $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ compound yet, which is indispensable to estimate the saturation magnetostriction (λ_s). In this study, $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ films with different x were epitaxially grown on $\text{SrTiO}_3(001)$ substrates and the λ_{111} values were evaluated.

【Experiments】 The $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ ($x = 0, 0.2, 0.5, 0.9, 1.0, 1.4, 1.6$, and 2.2) films with the thicknesses of approximately 21 nm were grown on $\text{SrTiO}_3(001)$ substrates with the size of 10×20 mm by molecular beam epitaxy. For measuring λ_{111} , the longitudinal direction of the substrates was set to be the [110] direction [6]. During the film growth, Fe and Co atoms were supplied by electron beam guns at the substrate temperature of 400 °C ($x = 1.4, 1.6$ and 2.2) or 450 °C ($x = 0, 0.2, 0.5$, and 1.0). N atoms were supplied by a radio frequency plasma gun. The Fe/Co ratio was controlled by changing each deposition rate, and the x values were determined using an electron probe micro analyzer. The structure of the films was characterized by x-ray diffractions and reflection high-energy electron diffraction, and the magnetization curves were measured with a vibrating sample magnetometer at room temperature. The λ_{111} values were evaluated employing an optical cantilever method [6].

【Results】 The results of structural analysis indicate the epitaxial growth of all the $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ films. The long-range order of N atoms decreases with increasing amount of Co. The λ_{111} values were evaluated to be 50 ($x = 0$), 48 ($x = 0.2$), 65 ($x = 0.5$), 86 ($x = 0.9$), 83 ($x = 1.0$), 64 ($x = 1.4$), 69 ($x = 1.6$), and 42 ($x = 2.2$) ppm, and showed the maximum value at $x = 0.9$. It was found that relatively large λ values were obtained not only for λ_{100} but also for λ_{111} in the $\text{Fe}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ films. The value of λ_s for polycrystalline films were also calculated from the measured λ_{100} and λ_{111} values, and showed the nearly zero λ_s at $x = 0.24$, in which the sign reversal of λ_s occurs. The detailed composition dependence will be discussed in comparison to that for Fe-Co alloys.

【References】 [1] S. Ota *et al.*, Nat. Electron. **1**, 124 (2018). [2] K. Ito *et al.*, Nanotechnology **33**, 062001 (2022). [3] Y. Zhang *et al.*, Comput. Mater. Sci. **92**, 464 (2014). [4] Y. Maeda *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **585**, 170942 (2023). [5] K. Ito *et al.*, Commun. Mater. **6**, 53 (2025). [6] H. Ding *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **57**, 385002 (2024).

鉄系超伝導体 $\text{FeTe}_{0.85}\text{Se}_{0.15}$ のラマン散乱

藤崎弘岳^{1,2}, 小豆畑敬²

低温電子物性学研究部門¹, 弘前大学理工学部²

Raman scattering of superconductor $\text{FeTe}_{0.85}\text{Se}_{0.15}$

H. Fujisaki^{1,2}, T. Azuhata²

Low Temperature Condensed State Physics Division¹,

Faculty of Science and Technology, Hirosaki University²

Keywords : 超伝導, ラマン散乱

鉄系超伝導物質は銅酸化物超伝導体について超伝導転移温度が高いため注目を集めている。 $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ は組成 x を変化させることで超伝導以外にも、反強磁性相、コヒーレント・インコヒーレント状態など複雑な状態が出現するため超伝導性との関連も含め、精力的に研究されている [1]。 $\text{FeTe}_{0.85}\text{Se}_{0.15}$ においては、疑ギャップの形成や構造相転移があると報告 [2]もあるが正確には分かっていない。そこで、我々はラマン散乱分光の測定を行い、フォノンラマンスペクトルや電子ラマンスペクトルから、結晶構造や電子状態にどのような変化がみられるのかを調べた。

本研究で使用した $\text{FeTe}_{0.85}\text{Se}_{0.15}$ 単結晶は弘前大学の渡辺孝夫研究室にて Te アニール法で作製されたものを用いた。 $\text{FeTe}_{0.85}\text{Se}_{0.15}$ 結晶は正方晶 P4/nmm であり、ラマン活性なフォノンモードは、 A_{1g} 、 B_{1g} 、 E_g 、電子ラマン散乱は、 A_{1g} 、 B_{1g} 、 B_{2g} 、 E_g が活性となる。そこで、ラマン散乱は、XY、XX、AA、AB(A,B は X, Y 軸から 45° 傾けた軸)の偏光で行った。まず、ab 面で切り出された結晶の面内での軸を正確に決定するために、さまざまな偏光方向のレーザー光(532 nm)を垂直入射し、ラマン散乱を測定した。その偏光角度依存性を解析することで、結晶軸方向(水平から 24 度回転)を定めた。その後、試料を冷却し 300, 200, 70, 12 K の温度で、ラマン散乱スペクトルを測定した。

上記の温度でフォノンピークの面積強度、ピーク周波数位置、半値幅をフィッティングにより求めた。温度を下げると面積強度は減少し、ピーク位置は高エネルギー側へ移動し、半値幅は顕著な変化はしないということが分かった。低温でのピーク位置の高エネルギー側へのシフトの原因として格子収縮、振動の非調和性などが考えられる。面積強度の減少は電子とフォノンの相互作用が小さくなり、フォノンを生成する確率が減るためだと考えられる。全値半幅については、通常は低温になればフォノンの寿命が延びて小さく(ピークが鋭く)なるはずであるが、本実験結果では変化しなかった。このことからフォノン寿命を妨げる何らかの理由があると考えられる。構造相転移や疑ギャップによるスペクトルの顕著な変化は本実験では見られなかった。

電子状態の異方性を見るために、電子ラマン散乱の B_{1g} の BA 偏光から B_{2g} の YX 偏光のスペクトルを引き、その温度依存性を求めた。その結果、 250 cm^{-1} 以上ではほとんど差がないが、 250 cm^{-1} より低波数側での変化は大きいということがわかった。これは Γ -M 方向のフェルミ面を観測する B_{2g} 偏光が小さく、 Γ -X 方向のフェルミ面を観測する B_{1g} 偏光が強いということであり、 Γ 点付近のフェルミ面が円ではない可能性があるということが示唆される。

[1] Y. Mizuguchi and Y. Takano, J. Phys. Soc. Jpn., **79**, 102001 (2010)

[2] T. Watanabe et al., Modern Physics Letters B, **34**, 2040051 (2020).

金属溶湯脱成分法を用いたナノポーラス炭化ケイ素の作製

木 篠, 加藤秀実¹
非平衡物質工学研究部門¹

Bicontinuous Nanoporous Silicon Carbide Fabricated by Liquid Metal Dealloying

X. Bian, H. Kato¹
Non-Equilibrium Materials¹

Keywords : Dealloying, Bicontinuous, SiC

【背景】

シリコンカーバイド (SiC) は、触媒や二次電池を含む電気化学的応用において有望な基板材料とされており [1]、長期間の使用においても優れた構造的安定性を示す。しかし、反応速度を高めるために不可欠な高比表面積 SiC を製造する方法は、確立されていない。市販されている SiC 粉末の製造法としては、アッチエソン法やテンプレート法 [2] などがあるが、これらはいずれも 1400~2500°C を超える高温での合成、長時間の処理、複雑な手順を必要とする。さらに、こうして得られる SiC 粒子は化学的活性化が困難であり、実用的な応用を制限する要因となっている。本研究では、金属溶湯脱成分法 (LMD) [3-4] を用いて三次元ナノスケール共連続ナノポーラス構造を持つシリコンカーバイド (3Dnbp-SiC) を作製する。

【実験方法】

高周波溶解炉において、前駆体の合成および温度・時間・攪拌速度を制御条件として LMD を実施する。結晶構造や表面状態の観察は XRD、SEM/EDX や TEM で行う。窒素ガス吸着法でポアサイズ、分布や比表面積などを測定する。

【結果】

A-B (A=Si, C, and B=Mn) 前駆体として Mn₅SiC を選択し、金属溶湯 C (C=Bi) に浸漬しながら攪拌すると、Mn 原子のみが選択的に溶出し、残留した Si や炭素原子が固液界面にて高速拡散し、SiC 相によるナノポーラス体が自己組織化された。徐冷後、SiC と B-C の混合物を硝酸水溶液に浸漬して Mn-Bi 成分を除去し、SiC の共連続ナノポーラス体を得た (図 1)。作製した 3Dnbp-SiC はナノスケールの構造や高い比表面積を持つことが確認された。また、LMD 反応に及ぼす条件を明らかにした。

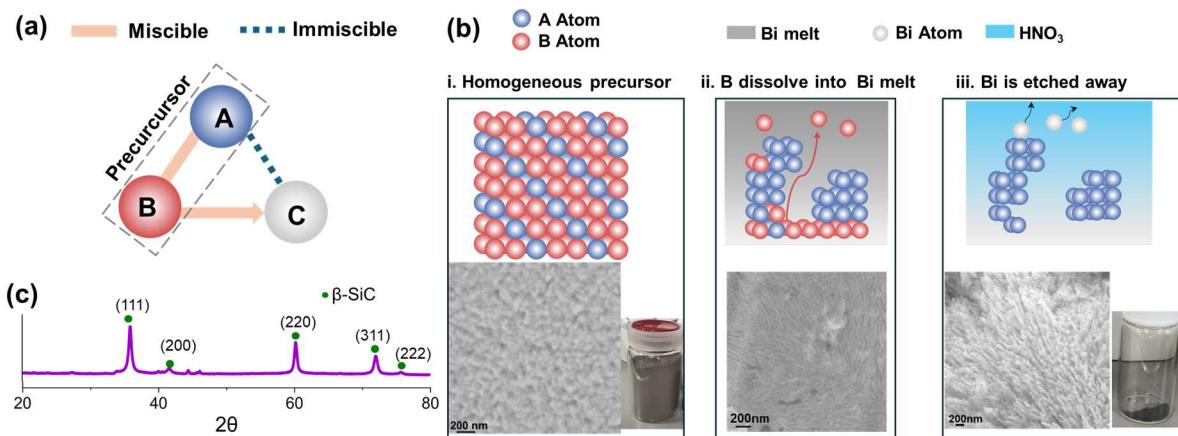


図 1. 3Dnbp-SiC の設計と作製プロセス。(a) 液体金属脱合金法 (LMD) の原理。(b) 作製プロセスおよび形態観察。(c) 3Dnbp-SiC の X 線回折パターン (XRD)。

- [1] Lipson, A. L.; Chattopadhyay, S.; Karmel, H. J.; Fister, T. T.; Emery, J. D.; Dravid, V. P.; Thackeray, M. M.; Fenter, P. A.; Bedzyk, M. J.; Hersam, M. C. *J. Phys. Chem. C* 2012, 116 (39), 20949–20957.
- [2] Shi, Y. F.; Meng, Y.; Chen, D. H.; Cheng, S. J.; Chen, P.; Yang, H. F.; Wan, Y.; Zhao, D. Y. *Adv. Funct. Mater.* 2006, 16 (4), 561–567.
- [3] Wada, T.; Ichitsubo, T.; Yubuta, K.; Segawa, H.; Yoshida, H.; Kato, H. *Nano Lett.* 2014, 14, 4505–4510.
- [4] S.-G. Yu, K. Yubuta, T. Wada, H. Kato, *Carbon* 96 (2016) 403e410.

Ab Initio Study and Transport Properties of Nickel Chalcogenide

Ervin Arrasyid^{1,2}, Edi Suprayoga³, Dedi⁴, Fiqhri Heda Murdaka⁵, Masaki Fujita^{1,2}

¹Department of Physics, Tohoku University

²Institute of Materials Research, Tohoku University

³Quantum Physics Laboratory, Indonesia Institute of Innovation and Research (BRIN)

⁴Electronic Research Center, Indonesia Institute of Innovation and Research (BRIN)

⁵Department of Physics, Bandung Institute of Technology

E-mail of the corresponding author: arrasyid.ervin.naufal.s5@dc.tohoku.ac.jp

Keywords: Topological semimetal, thermoelectric

Weyl semimetals (WSMs) are a class of topological materials characterized by band crossings near the Fermi level, known as Weyl nodes, which host quasiparticles analogous to Weyl fermions in high-energy physics [1]. These nodes occur in pairs of opposite chirality and are protected by topology. Unlike topological Dirac semimetals (TDSs), which feature four-fold degenerate Dirac nodes, WSMs exhibit two-fold degenerate Weyl nodes that arise when either time-reversal symmetry (TRS) or inversion symmetry is broken. Examples include non-centrosymmetric materials like TaAs and NbAs, as well as antiferromagnetic Heusler alloys such as GdPtBi under an external magnetic field [2–4]. ARPES has confirmed the existence of these chiral Weyl nodes on the surface of WSMs [5]. A hallmark of WSMs is the large anomalous Nernst effect (ANE), driven by Berry curvature near the Weyl nodes [6]. Additionally, WSMs exhibit negative magnetoresistance due to the chiral anomaly, leading to an increase in conductivity. This unique combination of topological and transport properties makes WSMs a promising platform for exploring novel quantum phenomena and potential applications in spintronics and thermoelectric. Recent high throughput computational studies suggest that nickel chalcogenide (Ni_3S_3 , Ni_3Se_3 , and Ni_3Te_3) as candidates of Weyl semimetal [7]. Our study aims to computationally calculate the thermoelectric transport of nickel chalcogenide as well as to study their electronic structure properties using Quantum Espresso and Wannier90, BoltzTrap2, as well as WannierTools as its postprocessing tool. The details of the study will be described in the poster presentation.

References

- [1] G. B. Halász and L. Balents, Time-reversal invariant realization of the Weyl semimetal phase, *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys* **85**, 035103 (2012).
- [2] C. Shekhar et al., Extremely large magnetoresistance and ultrahigh mobility in the topological Weyl semimetal candidate NbP, *Nature Physics* 2014 11:8 **11**, 645 (2015).
- [3] S. Y. Xu et al., Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide, *Nature Physics* 2015 11:9 **11**, 748 (2015).
- [4] M. Hirschberger, S. Kushwaha, Z. Wang, Q. Gibson, S. Liang, C. A. Belvin, B. A. Bernevig, R. J. Cava, and N. P. Ong, The chiral anomaly and thermopower of Weyl fermions in the half-Heusler GdPtBi, *Nature Materials* 2016 15:11 **15**, 1161 (2016).
- [5] S. Y. Xu et al., Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs, *Science* (1979) **349**, 613 (2015).
- [6] K. Kuroda et al., Evidence for magnetic Weyl fermions in a correlated metal, *Nature Materials* 2017 16:11 **16**, 1090 (2017).
- [7] D. Grassano, N. Marzari, and D. Campi, High-throughput screening of Weyl semimetals, *Phys Rev Mater* **8**, 024201 (2024).

レドックス活性な錯体分子を用いた機能性ソフトマテリアル材料の系統的構築

伊藤千紗, 芳野 遼, 高坂 亘, 宮坂 等
錯体物性化学研究部門

Systematic Construction of functional soft-materials using redox-active complexes

C. Itoh, H. Yoshino, W. Kosaka, H. Miyasaka
Solid-State Metal-Complex Chemistry

Keywords : Soft-material, Porous material, Catalysis

水車型ルテニウム二核錯体 ($[\text{Ru}_2]$) は優れたレドックス特性を有する機能性分子であり、近年 $[\text{Ru}_2]$ の軸位サイト (配位不飽和部位; OMS) が触媒活性な反応場として機能することが明らかになり注目されている^[1]。しかし、OMS を反応場として保持した状態で規則的に $[\text{Ru}_2]$ を配列させた多孔性格子の開発は合成上困難であり、これまで報告例は皆無であった。そこで、ホルミル基 (-CH=O) を有した新規 $[\text{Ru}_2]$ 錯体 ($[\text{Ru}_2]\text{-CHO}$) にアミン分子を反応させる「後置的な分子修飾法」(図 1)を開発し^[2]、酸化還元活性な $[\text{Ru}_2]$ 錯体が共有結合で架橋された多次元イミン架橋型機能性材料 ($[\text{Ru}_2]\text{-MCOF}$) の合成・触媒機能の発現に成功している^[3]。本研究では、これまでの知見を応用し、レドックス活性な多孔性錯体ソフトマテリアルへの材料展開・触媒能の向上に取り組んだ。

$[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-CHO}$ にトリアミン分子を後置的に修飾することでレドックス活性なアモルファスゲル ($[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-gel}$) の合成に成功し、さらに超臨界 CO_2 处理を行うことで粉末状態のエアロゲル ($[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-agel}$) が得られた(図 2 (a))。 $[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-agel}$ の触媒試験を行ったところ、二酸化炭素光還元触媒として機能することを確認し、さらに先行研究の $[\text{Ru}_2]\text{-MCOF}$ よりも優れた構造安定性を有することを見出したため、現在詳細な触媒活性評価に取り組んでいる。また、本研究で開発した錯体ソフトマテリアルの特徴は構造多様性であり、これまでに水車型二核錯体 ($[\text{M}_2]$) の中心金属や電子状態・架橋配位子を変更することで多種多様なゲル/エアロゲルの開発に成功している(図 2 (a)-(d))。本成果により、 CO_2 還元反応だけに留まらず、水の可視光分解やアンモニア酸化触媒など、様々な触媒展開が可能となった。また、本研究で確立したゲル合成手法は $[\text{Ru}_2]\text{-MCOF}$ よりも簡便であり、サイズの異なるアミン分子の適用や、雛形錯体 ($[\text{M}_2]\text{-CHO}$) の固溶化(図 2 (c))も可能であることがこれまでの実験から明らかになっている(図 2 (d))。当日は、これらの構造・吸着・触媒特性について詳細に発表する。

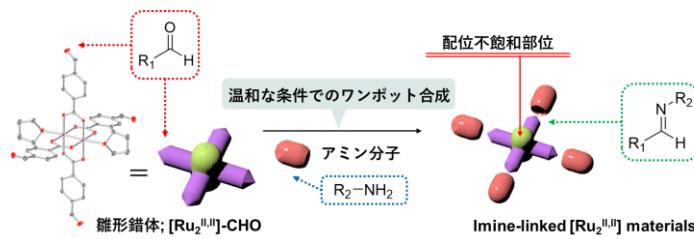


図 1 $[\text{Ru}_2]\text{-CHO}$ を用いた後置的な分子修飾法の概念図。

$[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-CHO}$ にトリアミン分子を後置的に修飾することでレドックス活性なアモルファスゲル ($[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-gel}$) の合成に成功し、さらに超臨界 CO_2 处理を行うことで粉末状態のエアロゲル ($[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-agel}$) が得られた(図 2 (a))。 $[\text{Ru}_2^{\text{II,II}}]\text{-agel}$ の触媒試験を行ったところ、二酸化炭素光還元触媒として機能することを確認し、さらに先行研究の $[\text{Ru}_2]\text{-MCOF}$ よりも優れた構造安定性を有することを見出したため、現在詳細な触媒活性評価に取り組んでいる。また、本研究で開発した錯体ソフトマテリアルの特徴は構造多様性であり、これまでに水車型二核錯体 ($[\text{M}_2]$) の中心金属や電子状態・架橋配位子を変更することで多種多様なゲル/エアロゲルの開発に成功している(図 2 (a)-(d))。本成果により、 CO_2 還元反応だけに留まらず、水の可視光分解やアンモニア酸化触媒など、様々な触媒展開が可能となった。また、本研究で確立したゲル合成手法は $[\text{Ru}_2]\text{-MCOF}$ よりも簡便であり、サイズの異なるアミン分子の適用や、雛形錯体 ($[\text{M}_2]\text{-CHO}$) の固溶化(図 2 (c))も可能であることがこれまでの実験から明らかになっている(図 2 (d))。当日は、これらの構造・吸着・触媒特性について詳細に発表する。

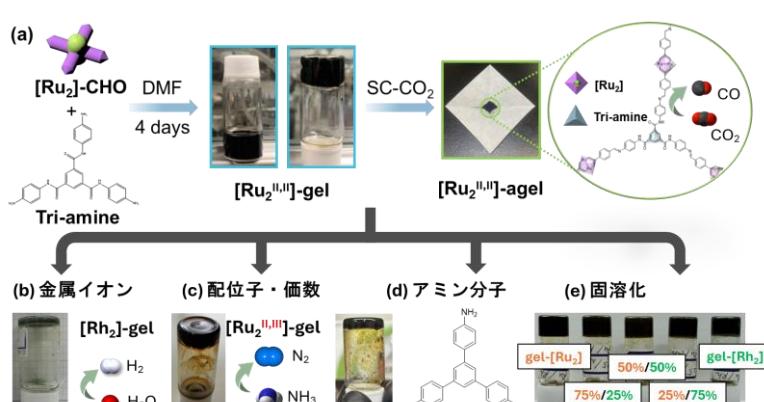


図 2 (a) $[\text{Ru}_2]\text{-gel/agel}$ の合成。(b)-(e) $[\text{M}_2]\text{-gel/agel}$ ($\text{M}=\text{Ru}, \text{Rh}$) の材料・触媒機能展開の概要図。

[1] J. F. Berry *et al.*, *Nat. Chem.*, 2021, 13, 1221.

[2] C. Itoh *et al.*, *Dalton Trans.*, 2024, 53, 444-448.

[3] C. Itoh *et al.*, *ChemSusChem*, 2024, 17, e202400885.

有機強相関トポロジカル絶縁体 α -(BETS)₂I₃の電気伝導特性

古川哲也, 西川哲也, 井口敏, 加藤拓洋¹, 小林拓矢¹, 谷口弘三¹, 佐々木孝彦
東北大学金属材料研究所, 埼玉大院理¹

Electric transport properties of organic correlation-induced topological insulator α -(BETS)₂I₃

T. Furukawa, T. Nishikawa, S. Iguchi, T. Kato, T. Kobayashi, H. Taniguchi¹, T. Sasaki

Institute for Material Research, Tohoku University

Graduate School of Science and Engineering, Saitama University¹

Keywords : Topological insulator, Organic conductor, Electric transport

層状有機伝導体 α -(ET)₂I₃は強い電子相関とバルク物性を評価可能な点から強相関擬二次元ディラック電子系の舞台として精力的に研究されてきた。最近 ET 分子の硫黄原子をセレン原子で置換した BETS 分子を用いた類縁物質 α -(BETS)₂I₃において、常圧でディラック電子系が生じ、さらに Se 原子のスピン軌道相互作用によりトポロジカル絶縁体相が生じる可能性が提案された[1]。また表面電気抵抗および磁気抵抗効果の実験から 35 K 以下の低温で強相関効果に由来する三次元トポロジカル絶縁体相が実現しているという報告もされた [2]。ただし、その絶縁化がどのような秩序化によって生じているか、二次元トポロジカル絶縁体相は存在するかなどの点については不明なままである。

本研究では α -(BETS)₂I₃の単結晶を用いて二次元伝導面に平行な試料表面及びエッジ部分に端子を付けて電気抵抗測定を行うことで、50 K 以下の絶縁相において二次元トポロジカル絶縁体相に由来するエッジ伝導が検出されるかを調べた。試料の上端、下端、および試料表面の電気抵抗は 35 K 程度まで低温へ向かってほぼ単調増加し、それらの大きさはほぼ一致した（図 1）。これは、この温度域では二次元エッジ状態に起因する伝導チャネルが明確に形成されていないことを示唆し、50 K での絶縁化が金属から強相関二次元トポロジカル相への転移とは言い切れないことを意味する。一方で、35 K 以下では表面端子から求めた抵抗値だけ明確に低温への増大が抑制され、10 K 以下では金属的な温度依存性を示した。これは先行研究の三次元トポロジカル絶縁体相の発現を支持する結果である。この三次元トポロジカル絶縁相において対称性の低下があるかを調べるために、さらに非相反電気抵抗測定を予備的実験として行った。その結果約 15 K 以下で、磁場に比例する非相反抵抗効果が観測された。これまでの X 線構造解析[1]や NMR[1]からは 30 K 以下の対称性についての知見は無かったため、この結果によってこの系が低温で反転対称性を持たない可能性が示唆された。

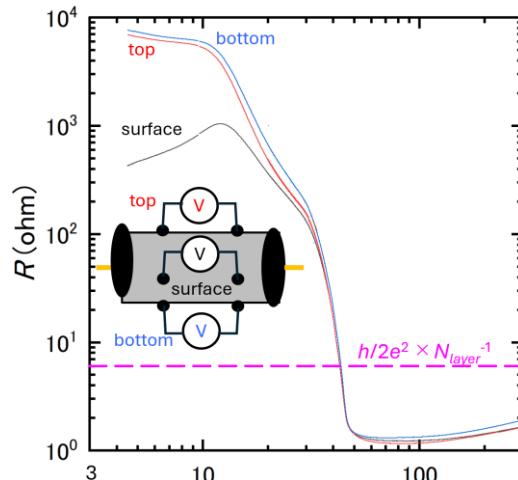


図 1 α -(BETS)₂I₃の電気抵抗の温度依存性

[1] S. Kitou et al., *PRB* **103**, 035135 (2021)

[2] T. Nomoto et al., *nature commun.* **14**, 2130 (2023)

熱電材料 Mg_3Sb_2 の第一原理計算による格子熱伝導率の解析

服部和希, 森仁志, 野村悠祐
金属物性論研究部門

First-principles analysis of lattice thermal conductivity in Mg_3Sb_2

K. Hattori, H. Mori, Y. Nomura

Theory of Solid State Physics Research Laboratory

Keywords : Thermoelectrics, First-principles calculations, Lattice thermal conductivity

【緒言】 热電材料は近年、エネルギー変換技術として注目され、その格子熱伝導率 (LTC) の低減が熱電性能向上の鍵とされる。 Mg_3Sb_2 (MMS) は高い電子輸送特性と低いLTCを併せ持ち、有望な材料として研究されている^[1]。この低いLTCの起源を正確に評価するには、原子の振動（フォノン）とその散乱過程に関する詳細な解析が不可欠である。本研究では、第一原理計算によりMMSのフォノン状態とその散乱機構を定量的に評価し、LTCが低い要因を明らかにした。また、元素置換による LTCの変化を調べるため、同一構造を持つ $CaMg_2Sb_2$ (CMS) の解析も行なった。

【方法】 まず、第一原理計算パッケージ Quantum ESPRESSO^[2]を用いて、MMS および CMS における各原子をわずかに変位させた際に生じる原子間力を計算した。次に、ALAMODE^[3]を用い、得られた力のデータに対して Lasso 回帰を適用し、二次から六次までの原子間力定数を求めた。さらに、二次から四次の原子間力定数を用いて、フォノンの固有状態、温度依存のフォノン周波数シフト、フォノン-フォノン散乱を考慮した LTC の解析を行った。

【結果と考察】 図 1(a)は、MMS および CMS の LTC の計算結果を示している。MMS の LTC は CMS よりも低く、計算結果は実験値^{[1][4]}と整合している。図 1(b) は、MMS と CMS のフォノンの寿命を示しており、MMS ではフォノンの寿命が CMS の約 3 分の 1 であることが分かった。本発表では、フォノン寿命が短くなる要因について、より詳細な理論解析の結果を議論する。

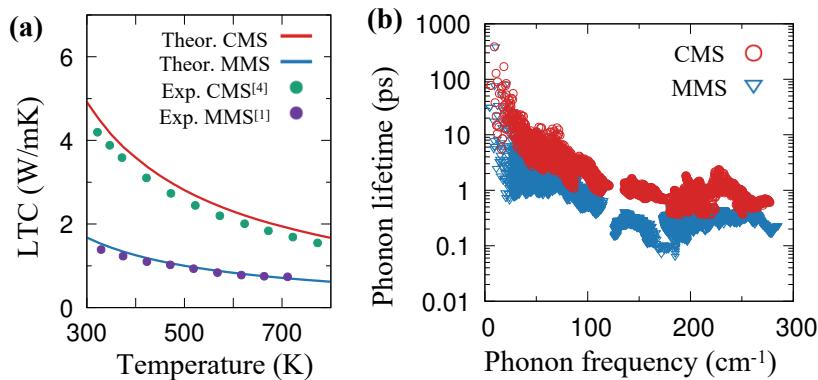


図 1 MMS および CMS の (a) 格子熱伝導率の計算結果と実験値^{[1][4]}、(b) フォノンの寿命

- [1] H. Tamaki, *et al.*, Adv. Mater. **28**, 10182 (2016).
- [2] P. Giannozzi, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **29**, 465901 (2017).
- [3] T. Tadano and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. B **92**, 054301 (2015).
- [4] Xin Shi, *et al.*, Adv. Elect. Mater. **8**, 2200742 (2022).

ヘリカル磁性体 CrAs における応力—歪み曲線測定

石田浩祐, 濑戸春平, 小手川恒¹, 新居陽一, Clifford W. Hicks², 小野瀬佳文

量子機能物性学研究部門, 神戸大院理¹, University of Birmingham²

Stress-strain curves measurements of helimagnet CrAs

Kousuke Ishida, Shumpei Seto, Hisashi Kotegawa¹, Yoichi Nii,

Clifford W. Hicks², and Yoshinori Onose

Quantum Functional Materials Physics, Kobe University¹, University of Birmingham²

Keywords : 応力—歪み曲線, ヘリカル磁性体、超弾性

CrAsは、270 K付近におけるヘリカル磁気秩序への一次相転移に伴い、結晶が *b* 軸方向に伸びて *a* 軸及び *c* 軸方向に縮み、結晶全体の体積が約 2 %膨張する。この極めて大きな体積膨張を伴う磁気転移は静水圧を加えて圧縮すると急速に抑制され、0.7 GPa という比較的小さな圧力で消失することが知られている[1]。また、ヘリカル磁気秩序が消失する圧力近傍で超伝導相が出現することも明らかとなっており、Cr 系物質で現れる数少ない超伝導として大きな注目を集めている。しかしながら、このような結晶が一方向に伸びるヘリカル磁気転移に対しては、その方向に一軸応力を加える方が静水圧よりも顕著な圧力効果が期待できる。そこで本研究では、応力—歪み曲線の精密測定から CrAs 単結晶における *b* 軸方向の一軸応力効果を調べた。

測定にあたっては、最近発表者が所属研究グループで立ち上げた積層型圧電アクチュエータを動力源とする一軸応力精密制御装置を用いた。本装置には試料に加わる応力と変位を読み取るためのキャパシタンスセンサーが取り付けられている。高精度キャパシタンスブリッジを用いることで、試料に加わった力およびそれによって生じた試料の変位をそれぞれ mN および nm 以下の分解能で測定することが可能となっている[2]。また、Xe プラズマをソース源とした集束イオンビーム加工装置を用いて試料をくびれ状に加工することで、1 mm サイズの単結晶試料に対してもより大きく均一な一軸応力を加えることができる[3]。圧電アクチュエータに印加する電圧によって試料に加わる応力を精密に制御でき、極低温・強磁場といった複合的な極限環境下でその場で応力および歪みを制御する精緻な実験が可能となっている。金研のテクニカルセンター及び ARIM 事業班の共同利用を活用することで、この一連の測定手法を確立することに成功した。

CrAs における測定の結果、常圧下におけるヘリカル磁気転移温度より低温で *b* 軸方向に一軸応力を加えていくと、超弾性と呼ばれる極めて非線形な応力—歪み曲線を観測した。これはまずヘリカル磁気秩序状態において弾性的応答を示した後、常磁性状態との二相共存状態に移行し、試料全体には変位が生じるが圧力がかからない状態を経て、最終的には試料全体が常磁性状態へと転移し、再び弾性的応答が現れるという挙動に対応すると考えられる。さらに応力—歪み曲線からヘリカル磁気秩序相が消失する *b* 軸方向一軸応力の大きさを見積もったところ、約 0.2 GPa で消失することが明らかとなり、等方的圧力よりも実際に顕著な効果となることが明らかとなった。

[1] H. Kotegawa et al., Phys. Rev. Lett. 114, 117002 (2015).

[2] M. E. Barber et al., Rev. Sci. Instrum. 90, 023904 (2019).

[3] Hilary M. L. Noad, Kousuke Ishida et al., Science 382, 447 (2023).

ワニエ関数に基づくコヒーレントポテンシャル近似の実装と磁性合金への適用

桑原格汰, 野村悠祐
金属物性論研究部門

Implementation of Coherent Potential Approximation based on Wannier Functions and Application to Magnetic Alloys

S. Kuwabara, Y. Nomura
Theory of Solid State Physics Research Laboratory

Keywords : Wannier Functions, Coherent Potential Approximation, Spectral Functions

ステンレスやジュラルミンなど、合金は不規則な原子配置に基づく特異な物性を持つことから実社会で広く利用されている。しかし、不規則性が故に合金の計算は容易ではなくその物性の発現機構には未解明な点が多い。

合金計算手法の一つとして、第一原理計算にコヒーレントポテンシャル近似(Coherent Potential Approximation,以下 CPA)と呼ばれる手法を組み込むことが提案されているが、実用的な計算手法はほとんど存在しなかった。しかし、近年汎用性の高いワニエ基底と組み合わせたワニエ CPA 法が開発され(1)、本手法を用いた合金物性の原理説明が求められている。

本研究では磁性合金 $\text{Fe}_x\text{A}_{1-x}$ ($\text{A} = \text{V}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}$)に対しワニエ CPA 法を用いた第一原理計算を行った。まず、本手法の有効性評価として物理量である磁気モーメントを導出し、実験結果及び仮想結晶近似(Virtual Crystal Approximation,以下 VCA)法と比較した(図 1)。VCA 法は強磁性-常磁性合金における磁性特性の再現精度が低い一方、ワニエ CPA 法は実験結果を精度良く再現する。この差は両手法における合金の扱い方の違いに基づくと考えられる。

VCA 法は合金の母体元素を混合した架空元素を考え、この元素を周期的に配置して合金を表現する。すなわち、合金は一様な電子構造を持つこととなり、物質内を伝搬する電子は合金の不規則性に由来する散乱を考慮しない。そのため、散乱による電子状態の偏りやそれに起因した磁気特性の変化を十分に表現できず、実験結果の再現精度が低くなったと考えられる。

一方でワニエ CPA 法は合金の不規則性を反映した動的な平均場(自己エネルギー)を導入し、これを合金の母体元素が持つポテンシャルの混ぜ合わせから求める。これには、合金内の伝搬電子が様々なポテンシャルからの影響を受けて伝搬する描像が組み込まれている。よって、散乱効果による電子状態の偏極や磁気特性の変遷を正確に捉えることができ、実験結果の再現精度が高くなったのだと考えられる。

このようにワニエ CPA 法の有効性を確認したのち、物理量であるスペクトル関数の比較を行った。最後に、ワニエ CPA 法を拡張し単位格子に複数の同一原子がある物質への適用を可能にした。そして、強磁性金属合金に適用することで実物質における物理的評価を行った。本講演ではこれらの解析結果について報告する。

(1) N. Ito *et al.*, Phys. Rev. B **105**, 125136 (2022).

(2) T. Mashimo *et al.*, Phys. Rev. B **66**, 132407 (2002).

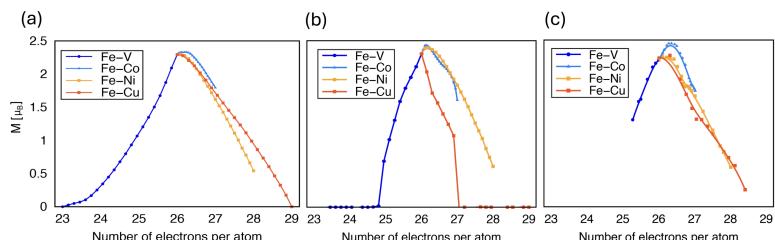


Fig. 1 (a) 組成割合 x に対する磁気モーメントの変化 (ワニエ CPA 法) (b) VCA 法における同結果 (c) 実験における同結果(引用元: (2))

Co 基ホイスラー合金の電子状態と異方性磁気抵抗効果

三室楽人, 田中貴大, 古門聰士¹, 窪田崇秀², 梅津理恵
新素材共同研究開発センター, 静岡大学大学院総合科学技術研究科¹,
先端スピントロニクス医療応用工学共同研究講座²

Electronic structure and anisotropic magnetoresistance in Co-based Heusler alloys

G. Mimuro, T. Tanaka, S. Kokado¹, T. Kubota², R.Y. Umetsu

Cooperative Research and Development Center for Advanced Materials, Graduate School of Integrated Science and Technology Department of Science, Shizuoka University¹, Advanced Spintronics Medical Engineering².

Keywords : Half-metal, Transport property, Bulk single crystal

【背景】ハーフメタル型電子状態とは、フェルミ準位における電子のスピン分極率が 100%である状態を指す。ハーフメタル型電子状態を有する強磁性体は、負の異方性磁気抵抗(AMR: Anisotropic magnetoresistance)効果を示すことが理論的に示唆されている[1]。ハーフメタル強磁性体において AMR の結晶方位依存性を実験的に確かめることが求められる。本研究では、ハーフメタルの主な候補物質である Co 基ホイスラー合金 Co_2YZ (Y: 遷移元素, Z: 典型元素)のバルク単結晶を作製し、各結晶方位($\langle 100 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$)における AMR 等の輸送特性を系統的に調査した。

【実験方法】ブリッジマン法により Co_2MnZ (Z = Si, Ga, Ge, Sn)および Co_2FeSi 合金バルク単結晶を作製した。ラウエ回折実験により単結晶の結晶方位を確認後、 $\langle 100 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 方位を有する短冊状試料を作製し、四端子法により AMR 等の輸送特性を評価した。AMR 比は、印加磁場と印加電流の相対角を θ 、試料の電気抵抗率を ρ として次式により算出した。

$$(AMR \text{ 比}) [\%] = \frac{\rho(\theta) - \rho(90^\circ)}{\rho(90^\circ)} \times 100$$

【実験結果】図 1 に Co_2MnGe , Co_2FeSi および Co_2MnGa の 6K における AMR を示す。スピン分極率が 100%に近いとされている Co_2MnGe , Co_2MnSi および Co_2MnSn では、 $\langle 100 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ の全ての結晶方位において負の AMR が観測された。一方で、ハーフメタルとは分類されない Co_2FeSi や Co_2MnGa では、異なる振舞いが見られた。 Co_2FeSi では電流方向が $\langle 100 \rangle$ の場合に正の AMR が観測された。 Co_2MnGa では負の AMR が観測されたが、AMR の絶対値が一桁大きいなど、ハーフメタルと様相が異なっていた。

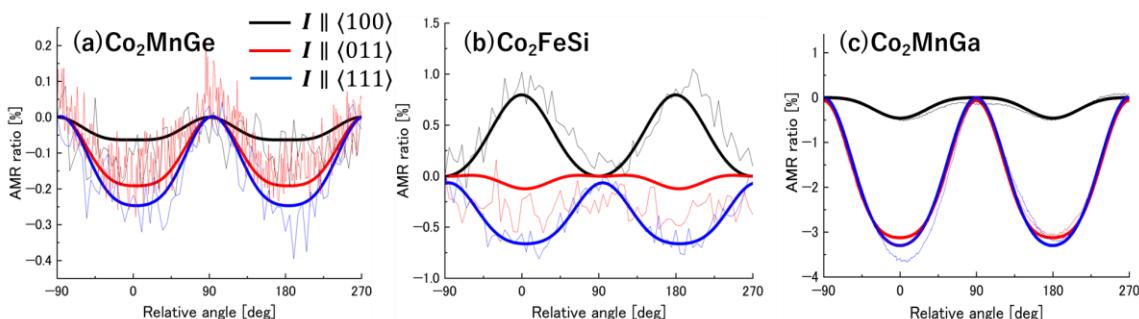


図 1. (a) Co_2MnGe , (b) Co_2FeSi , (c) Co_2MnGa バルク単結晶の 6K における AMR 比

[1] S. Kokado, M. Tsunoda, K. Harigaya, and A. Sakuma, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, 024705 (2012)

0次元型ヨウ化物の構造制御による蛍光寿命高速化

藤原千隼¹, 黒澤俊介^{1,2,3,4}, 山路晃広^{1,2}, 吉川彰^{1,2}

先端結晶工学研究部門¹, 東北大学 NICHe², 大阪大学 レーザー研³, 京都大学複合研⁴

Accelerating Decay Time by Controlling the Structure of Zero-Dimensional Iodides

C. Fujiwara¹, S. Kurosawa^{1,2,3,4}, A. Yamaji^{1,2}, A. Yoshikawa^{1,2}

Advanced Chrystal Engineering Research Laboratory of IMR Tohoku univ.¹, NICHe Tohoku univ.², Institute for Laser Engineering, Osaka Univ.³, Institute for Integrated Radiation and Nuclear Science, Kyoto Univ.⁴

Keywords : Zero Dimensional halide phosphor, scintillator, First principal calculation

0次元型ハロゲン化物蛍光体は高い発光効率などで様々な光学デバイスへの応用が期待されている[1-2]。これまで我々のグループでは0次元型ハロゲン化物蛍光体の1つであり空間的に孤立した $[HfI_6]^{2-}$ 八面体クラスターを有する Cs_2HfI_6 を開発し[1]、ガンマ線検出用のシンチレータ材料として高い発光量を有することが報告した。一方でシンチレータ材料としての応用には高速な蛍光寿命が求められるが、0次元型ハロゲン化物蛍光体は八面体や四面体のクラスターに局在化したキャリアと、それに伴う大きな励起子結合エネルギー E_b を有し、一般的に蛍光寿命が長くなる。 Cs_2HfI_6 において蛍光寿命の高速化するには、空間的に孤立した八面体 $[HfI_6]^{2-}$ クラスターの空間的な局在化の度合いを低下させ、キャリアの移動度の向上させることが有効であると考えられる。そこで本研究ではCsサイトをLiに置換した Li_2HfI_6 を選択し、Li置換に伴う結晶構造の変化と八面体クラスターの空間的構造変化、キャリアの移動度、励起子結合エネルギーの変化を評価し、蛍光寿命の高速化を試みた。

Li_2HfI_6 結晶を Bridgman-Stockbarger 法により育成した。合成した Li_2HfI_6 の発光機構を明らかにするために、自然科学研究機構分子科学研究所放射光施設 UVSOR, BL3B ビームラインにおいて、フォトルミネッセンス特性の温度依存性を測定した。さらに、 Li_2HfI_6 の電子物性を明らかにするために、第一原理計算を行った[3]。

図1には Li_2HfI_6 と Cs_2HfI_6 のバンド構造を示した。図1からわかるように Li_2HfI_6 のバンド分散は価電子帯と伝導体のいずれにおいても大きくなっていることが確認された。これは結晶構造変化によるキャリアの有効質量の低下とキャリア移動度の向上を示唆しており、 $[HfI_6]^{2-}$ クラスターの励起子の空間的閉じ込め効果が低下すると想定される。実際に Li_2HfI_6 発光スペクトルの温度依存性を測定したところ、100 K程度で低エネルギーの STE 発光から高エネルギーの自由励起子発光への遷移が確認された。この結果から計算される励起子結合エネルギーは 17 meV であった。ガンマ線励起時の Li_2HfI_6 の蛍光プロファイルを測定したところ、1成分のエクスボンシャルでフィットでき、その蛍光寿命は 180 ns と Cs_2HfI_6 と比較して 1/10 に高速化することが分かった。本講演では詳細な Li_2HfI_6 の電子、光学、放射線特性を報告する。

【参考文献】

- [1] S. Kodama, *et al.*, *J. Alloys Compd.*, vol. 970, (2024) 172506.
- [2] S. Nagorny, “*Physics*, vol. 3, no. 2, (2021) pp. 320–351.
- [3] P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 29, (2017), p. 465901.

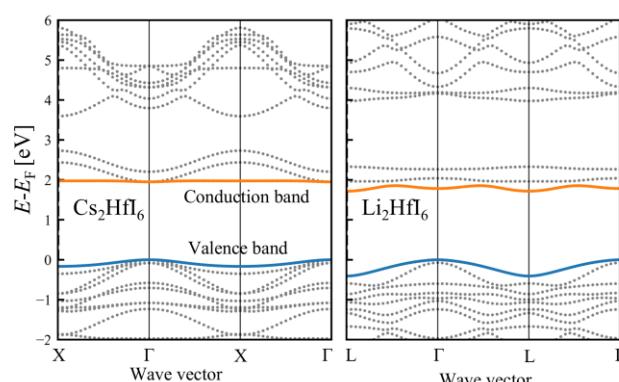


図1 Cs_2HfI_6 と Li_2HfI_6 のバンド分散

Wannier 関数と中間表現基底を用いた超伝導状態の効率的な理論計算

森仁志¹⁻³, 野本拓也^{4,5}, 有田亮太郎^{3,4}, Elena Roxana Margine²

東北大学金属材料研究所¹, Department of Physics, Applied Physics, and Astronomy,
Binghamton University-SUNY², 理化学研究所創発物性科学研究センター³, 東京大学
先端科学技術研究センター⁴, 東京都立大学理学研究科物理学専攻⁵

Efficient Calculations for Superconductors Using Wannier Functions and Intermediate Representation

H. Mori¹⁻³, T. Nomoto^{4,5}, R. Arita^{3,4}, E. R. Margine²

Institute for Materials Research, Tohoku University¹,

Department of Physics, Applied Physics, and Astronomy, Binghamton University-SUNY²,
RIKEN Center for Emergent Matter Science³,

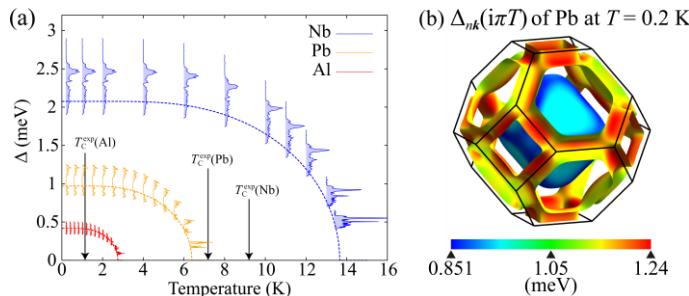
Research Center for Advanced Science and Technology⁴,

The University of Tokyo, Department of Physics, Tokyo Metropolitan University⁵

Keywords : Superconductors, Wannier functions, , Migdal-Eliashberg theory

Migdal-Eliashberg 理論に基づく定式化により、フォノン媒介型超伝導体のギャップ関数を第一原理的に計算することが原理的には可能である。しかし、実際に超伝導状態を精度よく記述するためには、二つの課題が存在する。一つは、運動量空間での非常に高密度なサンプリングが必要である点であり、これは Wannier 関数を用いたデータ補間によって克服されてきた[1]。もう一つは、特に低温において松原グリーン関数のデータ量が膨大になる点である。松原グリーン関数の必要なデータ数は、考慮するエネルギー階級に比例し、温度に反比例して増加する。ペアリング相互作用として支配的に働く電子-フォノン相互作用に加え、副次的に働くクーロン相互作用を正確に取り込むためには、クーロン相互作用に対応する高いエネルギー階級までのグリーン関数が必要となり、結果として 1K 以下の温度における超伝導状態の計算は、従来手法では実行がほぼ不可能であった。

本研究では、この第二の課題を解決するため、従来の Wannier 補間手法に中間表現 (intermediate representation, IR) 基底を組み合わせることで、低温でも高効率な計算を可能とする新たな計算手法を確立した[2]。この手法をニオブ、鉛、アルミニウムといった典型的なフォノン媒介型超伝導体に適用し、温度 0.2K における超伝導ギャップ関数の計算に成功した。特に鉛においては、2 ギャップ構造を有するギャップ関数が得られた。この 2 ギャップ構造は実験でも観測されていることから、本手法が実験結果とも整合する精度を持つことを示している。本発表では主に、新しい手法の特徴と、得られた超伝導ギャップ関数の計算結果について議論する。



図：(a) ニオブ、鉛、アルミニウムの超伝導ギャップ関数の温度依存性、(b) 鉛の超伝導ギャップ関数の波数依存性

[1] E. R. Margine and F. Giustino, Phys. Rev. B. **87**, 024505 (2013).

[2] H. Mori, T. Nomoto, R. Arita, and E. R. Margine, Phys. Rev. B. **110**, 064505 (2024).

BNCT のためのアルカリ土類金属元素共添加 Tl:Cs₃Cu₂I₅ 結晶と リアルタイムガンマ線モニタの開発

浦野雄介¹, 黒澤俊介^{1,2,3,4}, 山路晃広^{1,2}, 吉川彰^{1,2}

先端結晶工学研究部門¹, NICHe², 大阪大レーザー科学研究所³, RCNS⁴

Development of alkaline earth metal co-doped Tl:Cs₃Cu₂I₅ scintillator and realtime gamma-ray monitor for BNCT

Y. Urano¹, S. Kurosawa^{1,2,3}, A. Yamaji^{1,2}, A. Yoshikawa^{1,2}

Advanced Crystal Engineering Research Lab.¹, NICHe², Inst. of Laser Eng., Osaka Univ.³,
RCNS⁴

Keywords : Single crystal growth, Gamma-ray scintillator, Non-proportional response

【背景】 ホウ素中性子捕捉療法 (BNCT) の適用の可能性拡大に向けて、マウスなどの小動物に対するホウ素薬剤の薬物動態を空間的に評価する必要があり、マウス体内のホウ素濃度分布を二次元または三次元で、かつリアルタイムで可視化する検出器の開発が求められている。そこで、¹⁰B と熱中性子の核反応により発生する 478 keV の即発ガンマ線の利用が考案されている[1]。これまで、BNCT では治療中の熱中性子線量のリアルタイムモニターを目的として、有機材料のプラスチックシンチレータと光ファイバーを組み合わせた検出器が開発されており、その有効性が報告されている。そこでわれわれは、シンチレータにガンマ線の阻止能が高い無機材料を用いることで、即発ガンマ線の検出にも応用できるのではないかと考えた。

光ファイバー型検出器のシンチレータには、高い発光量 (60,000 光子/MeV 以上) をもち、エネルギー応答の非比例性 (Non-proportional response: NPR) が良く (最大で 3%以下)、吸湿性が低いことが求められる。本研究では、発光量が 90,000 光子/MeV 以上と高く、吸湿性が低い Tl⁺添加 Cs₃Cu₂I₅ (Tl:CCI) シンチレータに着目した。一方で、Tl:CCI の NPR はおよそ 6%であり、改善する必要がある。ここで、Tl:NaI シンチレータが Sr²⁺や Ca²⁺を共添加することにより NPR が大幅に改善されたと報告があり[2]、Sr²⁺ないしは Ca²⁺を共添加した Tl:Cs₃Cu₂I₅ (Tl,Sr:CCI, Tl,Ca:CCI) 結晶を育成し、NPR の改善を試みた。

【実験方法】 垂直ブリッジマン・ストックバーガー法により Tl,Sr:CCI および Tl,Ca:CCI 結晶を育成し、D8 DISCOVER (Bruker) を用いた粉末 X 線回折 (XRD) により結晶相を確認した。蛍光 PL の励起波長と発光波長は、分光蛍光光度計 (FP-8300, JASCO) を用いて測定した。発光量と NPR を評価するため、光電子増倍管 (R7600U-200, 浜松ホトニクス) を用いて、¹³⁷Cs などのガンマ線で励起された波高値スペクトルを測定した。

【結果】 Tl,Sr:CCI および Tl,Ca:CCI 結晶の育成に成功し、各結晶相は粉末 XRD 測定により確認した。Sr²⁺や Ca²⁺を添加した試料の発光スペクトルは Tl:CCI と変化はなかったが、NPR は Tl:CCI と比較して改善されていることがわかった。最後に、開発した新規シンチレータ結晶、光ファイバーおよび光電子増倍管からなる検出器を用いて、京都大学研究用原子炉 (KUR) の E-3 中性子導管 (1MW, 熱中性子束: 4.0 × 10⁵ n/cm²/s) にて、¹⁰B と熱中性子の核反応により発生する 478 keV の即発ガンマ線の測定を行った。本発表では、シンチレーション特性の詳細を示すとともに、KUR で行った実験の詳細について報告する。

[参考文献] [1] L. Stand *et al.*, "Crystal growth and scintillation properties of pure and Tl-doped Cs₃Cu₂I₅", Nucl. Inst. and Meth. A, 991, 164963, (2021). [2] K. Yang *et al.*, "Improving γ -ray energy resolution, non-proportionality, and decay time of NaI:Tl⁺ with Sr²⁺ and Ca²⁺ co-doping", J. Appl. Phys., 118, 213106, (2015).

Enhancement of magnetostriction in melt-spun ribbons by rare earth elements doping and cooling rates controlling

L. Chen^{1,2}, M. Sato³, R. Y. Umetsu¹

¹CRDAM, Institute for Materials Research, Tohoku University

²Graduate School of Engineering, Tohoku University

³Graduate School of Systems Science and Technology, Akita Prefectural University

Keywords : Fe-Ga, Magnetostriction, Melt-spun

【Introduction】

Fe-Ga has been considered as a candidate for giant magnetostrictive materials for its high magnetostriction and great mechanical properties. Because of the magnetoelastic anisotropy of Fe-Ga, the magnetostriction of the polycrystals are decreased from 440 to 50 ppm[1]. Therefore, for enhancing the magnetostriction, both rare earth elements doping and melt-spun have been considered as a method to be applied [2][3]. In this research, we investigated the magnetostriction for the series of Fe-Ga and the doping system to determine the correlation between the crystal orientation and the magnetostriction.

【Experiment methods】

High-frequency melting furnace was used for getting mother alloy of $(\text{Fe}_{81}\text{Ga}_{19})_{99}\text{Ce}_1$. The ribbon specimens were fabricated by melt-spinning at rotational speeds of 10.5, 21.0 and 31.5 m/s (1 k, 2 k and 3 krpm, respectively). Phase state was confirmed by X-ray diffraction (XRD) and the crystal orientation was investigated by Electron Backscatter Diffraction (EBSD). Magnetostriction of the ribbon specimens were evaluated by using strain gage.

【Conclusion】

Figure (1) shows EBSD mappings observed in the cross section for the fabricated ribbon samples by different rotation speeds of 1 k, 2 k and 3 krpm in 1% Ce doping. The 1 krpm sample shows the highest degree of $<100>$ orientations, however, other 2 krpm and 3 krpm samples do not show such a $<100>$ orientation. The magnetostriction of each sample is shown in figure 2. All the ribbon samples showed larger magnetostrictions than bulk samples, and 1 krpm sample indicates the highest value. It is shown that $<100>$ orientation can be controlled by optimizing the rotation speed and results in high magnetostriction.

【Reference】

[1] A. E. Clark, *et al.*, J. Appl. Phys., **93** (2003) 8621–8623.

[2] Y. He, *et al.*, Acta Mater., **109** (2016) 177-186

[3] Z. Q. Yao; J. Alloys Compd., **637**(2015)431-435.

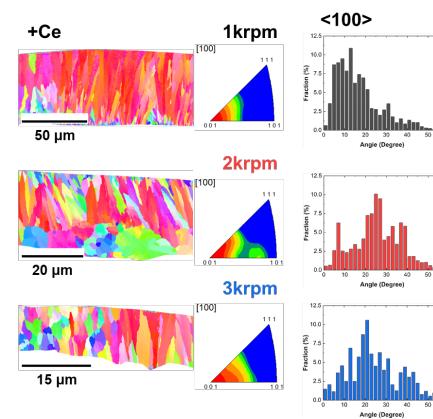


Figure 1. EBSD mappings, inverse polar figures and fraction of the grains whose derivative angle from $<100>$ orientation observed in the cross section for 1 at. % Ce doping sample fabricated by 1 k, 2 k and 3 krpm rotation speeds.

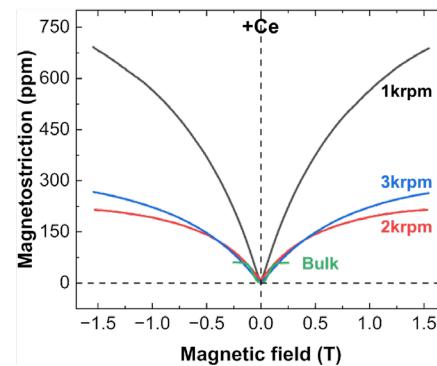


Figure 2, Magnetostriction evaluated in parallel direction to the applied magnetic fields with using strain gage in bulk and ribbon samples.

Infrared optical studies on Mott-Hubbard band with disorder induced by X-ray irradiation in a (BEDT-TTF)Cu[N(CN)₂]₂

M. K. Nuryadin, S. Iguchi, N. Yoneyama¹, T. Moriwaki², Y. Ikemoto² and T. Sasaki

Inst. for Materials Res., Tohoku Univ., ¹Univ. of Yamanashi, ²SPring-8, Japan
Synchrotron Radiation Research Institute, Japan

Keywords: Mott insulator, Q1D system, disordered system

The quasi-one-dimensional (Q1D) chain system is vulnerable to perturbative modifications, providing an excellent platform for studying the interplay between electron correlation, dimensionality, and disorder. X-ray irradiation in organic charge-transfer (CT) salts provides a controlled method for introducing disorder as a molecular defect and generating random potential modulation in the conducting donor layer, changing the electronic properties of organic CT salts [1]. (BEDT-TTF)Cu[N(CN)₂]₂ exhibits a Q1D zigzag chain structure arising from the 3D distorted diamond arrangement of BEDT-TTF molecules within the crystal structure. The system possesses an intrinsic half-filled band determined by the 1:1 ratio of BEDT-TTF⁺¹ donor molecules and Cu[N(CN)₂]₂⁻¹ anion molecules. Band structure calculations indicate nodal points along the c-axis from Q1D behavior, and anisotropic DC resistivity measurements show a Mott insulating state with a gap opening at the nodal [2]. Molecular defects and disorders occurred due to the modulated CN bond, as previously explored on a 2:1 donor-to-anion ratio CT salt [3, 4]. In this study, we provide new insight into the specific nature of molecular defects in 1:1 ratio-based CT salts. Unlike the 2:1 system, where the effective electronic band comes from strong dimerization of BEDT-TTF molecules, the 1:1 stoichiometry offers an electronic band that comes from bare BEDT-TTF molecules, allowing a more direct correlation between the introduced disorder and its effects on the local electronic structure and the Mott-Hubbard band. Polarized mid-infrared reflectivity measurements were used to detect charge excitation of the Hubbard band in the title compound (Fig. 1). The optical conductivity results show that the isotropic peak of the charge excitation spectrum P1 near the optical gap of 3300 cm⁻¹ or 0.4 eV disappears as the irradiation time increases. Moreover, the charge excitation peak of the Hubbard band around 5600 cm⁻¹ or 0.7 eV from bare BEDT-TTF molecules in a 1D system along the c-axis shows a broader peak with decrease in intensity over a longer irradiation time. Detailed temperature dependence of these findings will be discussed.

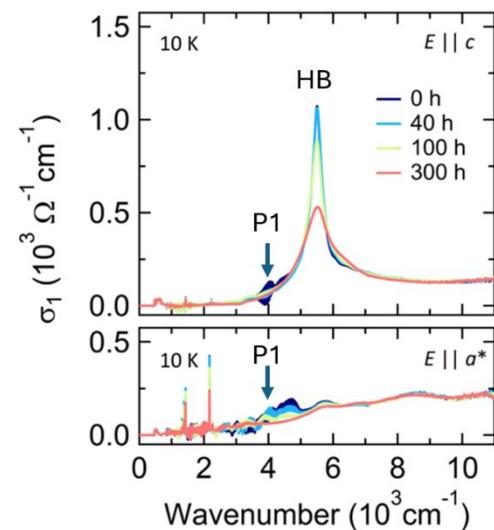


Fig 1. Irradiation effect on optical conductivity at 10 K. P1 is an isotropic spectrum related to transport properties. HB is a Hubbard band with anisotropic behavior

- [1] T. Sasaki, Crystals **2**, 374 (2012).
- [2] N. Yoneyama, *et al.*, J. Phys. Soc. Japan **91**, 113704 (2022).
- [3] L. Kang *et al.*, Phys. Rev. B **95**, 214106 (2017).
- [4] Artoni Kevin R. Ang *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, 010505 (2020)

Effects of neutron irradiation on hardness and electrical resistivity of tungsten and tungsten alloy after neutron irradiation in BR2

Minha Park, Kaito Mizuno, Shuhei Nogami¹, Akira Hasegawa, Ryuta Kasada
IMR Tohoku University, A.L.M.T. Corp.¹

Keywords : Tungsten, Neutron irradiation, W-Ta alloy

Recently, tungsten (W) materials are candidate used as plasma face materials and divertor due to high melting point, sputtering resistance, thermal conductivity and low tritium retention. However, the issues of W rolled materials for diverter include the suppression of recrystallization and the behavior of low-temperature embrittlement, and improvements are being attempted by methods such as dispersion strengthening (K bubbles or La₂O₃) or alloy addition (Re, Ta and etc.). Solid solution strengthening and an increase in recrystallization temperature at high temperatures have been reported for Ta addition, but there has been little data on irradiation.

The purpose of this study was to investigate the behavior of neutron irradiation hardening in the many types of materials of pure W, K-doped W, W-1, 3%Ta. Powder metallurgy and hot rolling followed by stress-relief heat treatment were conducted and supplied by A.L.M.T. Corp. 3mm diameter and 0.25mm thickness disk shape samples are prepared from the rolled plate. Neutron irradiation was conducted by LIBERTY-13 irradiation campaign in BR-2 reactor. The irradiation temperature was 290 °C (± 15 °C) and irradiation fluence was 5-8 E+23[neutron/m²](En > 1 MeV). Post-irradiation annealing was conducted at temperatures starting from 300 °C, increasing in 100 °C intervals.

After neutron irradiation, the hardness and electrical resistivity of most samples increased. A general reduction in electrical resistivity was observed beginning at annealing temperatures above 800 °C, with W-3%Ta consistently maintaining the highest resistivity values. Similarly, hardness began to decrease at annealing temperatures exceeding 800 °C, continuing to decline up to 1200 °C. Although pure W displayed the lowest hardness overall, W-3%Ta retained the highest hardness across all conditions.

**層状有機超伝導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ の
超伝導ゆらぎ領域における抵抗ノイズ測定**
杉浦栄理, 佐々木孝彦, Tim Thyzel^A, Jense Müller^A
 低温電子物性学研究部門, , Gouth Univ. Fruncflt^A

**Fluctuation spectroscopy in superconducting fluctuation regime
on layered organic superconductor κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂**

S. Sugiura, T. Sasaki, T. Thyzel^A, Jense Müller^A
 IMR, Gouth Univ. Fruncflt^A

Keywords : organics, superconductivity, fluctuation spectroscopy

高温超伝導体では伝導ノイズおよびホール素子アレーを用いた局所密度ノイズの精密な測定によって渦糸のピン止め状態から塑性フロー状態、さらにコヒーレントフロー状態へと至る渦糸ダイナミクスが観測され、その結果から集団としての渦糸の運動を理解することが盛んに行われてきた。銅酸化物高温超伝導体と並ぶ強相関電子系として知られる有機超伝導体でもノイズ測定が行われ、 $1/f$ ノイズとは分離したローレンツ型スペクトルの詳細な解析により、 T_c 近傍では超伝導クラスターが形成されることによって試料内がメゾスコピックに相分離した状態が実現している事が示唆されている。[1] 有機超伝導体では熱・輸送特性測定から渦糸固体(グラス)相が銅酸化物高温超伝導体とは異なる相図を持つことが知られているが、ノイズ測定を用いた渦糸状態の理解は銅酸化物超伝導体ほど進んでいない。そこで本研究では、層状有機伝導体 κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ (κ -NCS 塩 : $T_c = 10.2$ K, $H_{c2}^\perp = 6$ T, $H_{c2}^\parallel = 32$ T) の抵抗ノイズ測定を行った。図 1 に κ -NCS 塩のゼロ磁場下におけるノイズスペクトルの温度変化を示す。常伝導状態ではいわゆる $1/f$ ノイズが観測されるが、温度の低下とともに $T \lesssim 11$ K では両対数プロットにおけるスペクトルの傾きが大きくなり、ゼロ抵抗領域の直上 ($T \approx 10$ K) ではローレンツ型スペクトルに特徴的な $1/f^2$ の周波数依存性が観測された。この幕の変化が始まる温度は電気抵抗が僅かに変化し始める温度と一致しており、抵抗ノイズ測定が超伝導揺らぎの発達を極めて敏感に検出しているものと考えられる。講演ではこの結果について、類縁物質における実験結果とも比較しながら詳細に議論する予定である。

[1] J. Muller et al., Phys. Rev. Lett. 102, 047004 (2009).

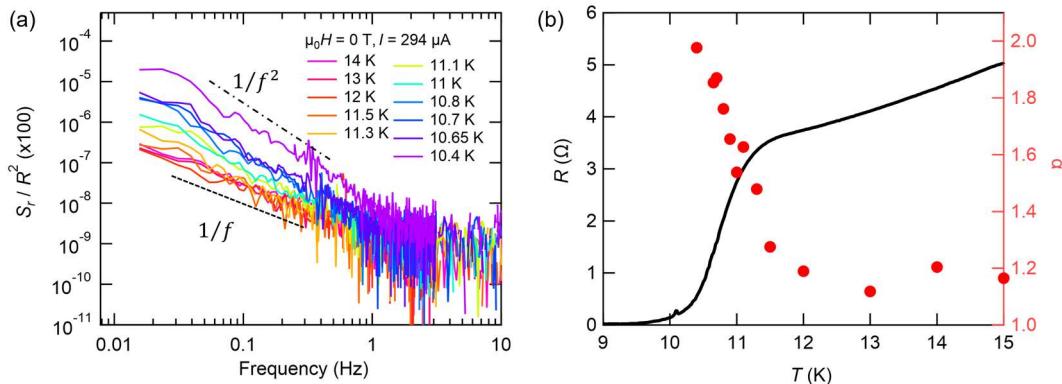


Figure 1: (a) 様々な温度におけるノイズの周波数依存性、および(b)電気抵抗とノイズにおける幕の温度依存性。

材料系学術雑誌の変遷と現状：メタデータと指標による考察

ハンゼン・マーク¹, 大石毅一郎²、宮本吾郎²
リサーチ・マネジメントセンター¹, 金属材料研究所²

Evolution and Present Landscape of Materials-Related Journals: A Metadata and Metrics Perspective

M. Hansen¹, K. Oishi², G. Miyamoto²

Research Management Center¹, Institute for Materials Research²

Keywords : journals, bibliometrics, paradigm shift

本発表では、エルゼビア社の抄録引用データベース Scopus を用いて、主要な国内外の材料科学関連ジャーナルのメタデータ（著者の所属情報等）および引用関係に基づく指標を分析し、当該ジャーナルの文献数等の変遷と現状を示す（図 1、2、3）。

さらに、研究評価に関連する最近の動向として、科学技術・学術政策研究所（NISTEP）の最新調査分析結果（図 4）に加え、研究評価改革を目指す有志連合「Coalition for Advancing Research Assessment (CoARA)」の活動、およびオープンイソフラーを推進する「Barcelona Declaration」についても紹介する。

現場の先生方の認識と課題について率直なご意見をお聞かせください。

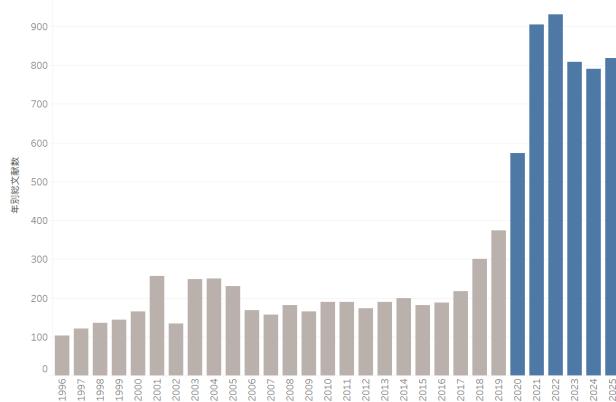


図 1 JMST の総文献数の推移

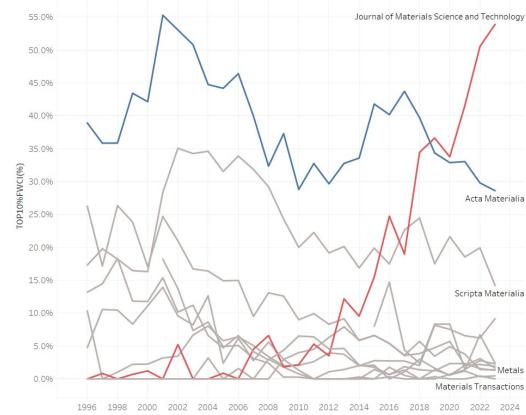


図 2 雜誌別トップ 10% 文献率の変遷

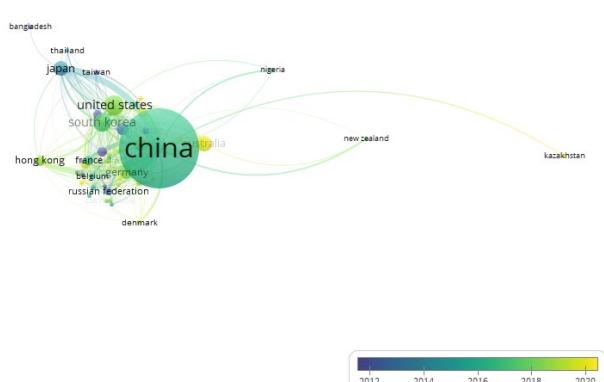


図 3 JMST の共著国ネットワーク図

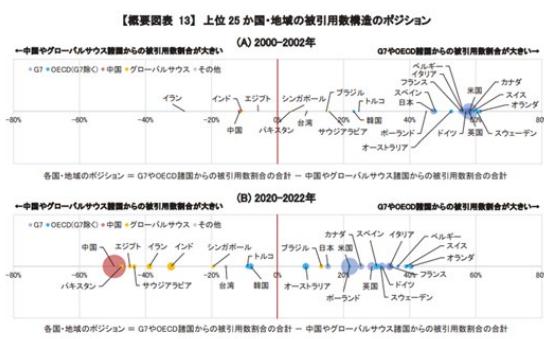


図 4 科学技術指標：被引用数構造の変化

