

CAMT Newsletter

2021年5月31日 No.23

目次

1. アニュアルレポート発行のお知らせ	1
2. 「JSOL次世代CAE共同研究講座」開設のご紹介	1
3. シンポジウム・研究会等のお知らせ	2
4. 新論文のご紹介	2

1. アニュアルレポート発行のお知らせ

アトミックデザイン研究センターの2020年度の研究成果報告として、アニュアルレポートを発行しました。
[こちら](#) (9.5MB) をご覧ください。

2. 「JSOL次世代CAE共同研究講座」開設のご紹介

大阪大学大学院工学研究科と株式会社JSOLは、大阪大学吹田キャンパス センテラス棟 CT-403に「JSOL次世代CAE共同研究講座」を2021年4月1日に開設しました。この共同研究講座では、大阪大学大学院工学研究科の澁谷陽二教授の研究室が保有するマイクロピラーを用いた材料試験技術と種々のスケールで材料の変形や強度を捉えるマルチスケール解析技術、および(株)JSOLの保有する解析プログラミング技術と40年を超えるCAE解析経験を融合し、Virtual Materials Testing(仮想材料試験)の実現に向けた研究開発を進めます。

共同研究講座名：JSOL次世代CAE共同研究講座

研究目的：Virtual Materials Testing(仮想材料試験)実現のための要素技術の確立とソリューション化

設立場所：大阪大学吹田キャンパス センテラス棟 CT-403

設置期間：2021年4月1日から2024年3月31日

問い合わせ先：

平島 禎(特任教授, t_hirashima@jrl.eng.osaka-u.ac.jp)

渋谷陽二(メンター教員, sibutani@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。



工学研究科附属

**アトミックデザイン
研究センター**
Center for Atomic and Molecular Technologies

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

TEL:06-6879-7917

FAX:06-6879-7916

E-mail: info@camt.eng.osaka-u.ac.jp

<http://www.camt.eng.osaka-u.ac.jp>



大阪大学工学部/大学院工学研究科
School/Graduate School of Engineering, Osaka University

3. シンポジウム・研究会等のお知らせ



PiAI Seminar Series

機械学習を含むデータ駆動科学とAIのプラズマ科学への応用に関するWEBセミナーです。

日時：2021年4月19日(月) から 2021年7月12日(月) 全7回

主催：Satoshi Hamaguchi (Osaka University), Sadruddin Benkadda (Aix-Marseille University)

詳細は、[こちら](#)をご覧ください。

2021年4月19日(月)

"Computational methods to construct an accurate and complete atomic model of complex multiple charged ion of heavy elements"

2021年5月17日(月)

"Plasma diagnostics and heating control with generative adversarial networks"

2021年5月31日(月)

"Parametric Validation of the Reservoir-Computing-Based Machine Learning Algorithm Applied to Lorenz System Reconstructed Dynamics"

2021年6月7日(月)

"Toward Data-driven Brain Science"

2021年6月14日(月)

TBA

2021年7月5日(月)

TBA

2021年7月12日(月)

TBA

4. 新論文のご紹介



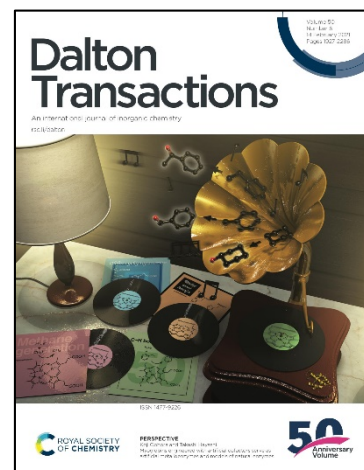
Myoglobins engineered with artificial cofactors serve as artificial metalloenzymes and models of natural enzymes

Koji Oohora, and **Takashi Hayashi**

Dalton Trans., 50, 1940-1949 (2021)

★ 雑誌表紙でハイライト紹介されました。

本論文は、低環境負荷の高機能型物質変換触媒を指向した人工金属酵素および複雑な構造と作用機序を有する天然酵素の機能モデルの開発について、ヘムタンパク質のヘム（金属錯体）を人工金属錯体と入れ替える独自の手法で達成した最近の研究をまとめた総説です。特に、炭素-水素結合の水酸化やスチレンのシクロプロパン化に触媒作用を示す人工金属酵素、メチオニン合成酵素やメタン発生酵素等の天然酵素の機能モデルについて報告しています。





CAMT Newsletter No.22でご紹介した論文が、当該雑誌 Hot Papers に選定され、雑誌内裏表紙でハイライト紹介されました。

Electrochemical Polymerization Provides a Function-Integrated System for Water Oxidation

Hikaru Iwami, Masaya Okamura, Mio Kondo, and **Shigeyuki Masaoka**

Angew.Chem. Int. Ed. 2021, 60,5965–5969

水の4電子酸化による酸素発生反応は、人工光合成反応開発の上で極めて重要です。天然の光合成系では、触媒活性中心と電荷伝達サイトが協奏的に機能することで高効率な酸素発生反応が達成されています。今回我々は、天然の光合成系に倣い、活性中心と電荷伝達サイトとを電解重合により戦略的に導入した新規触媒材料の開発を行いました。この触媒材料は既存の人工触媒と比較して良好な活性を示し、その触媒能の発現に当たっては、活性中心と電荷伝達サイトとが複合化されていることが極めて重要であることも明らかになりました。本研究は、高活性な酸素発生触媒を開発するための新たな戦略を提唱するものです。



Visualization of thermal transport within and between carbon nanotubes

Hiromu Hamasaki, Seiiya Takimoto, **Kaori Hirahara**

Nano Lett. vol. 21, 7, 3134-3138 (2021).

★ Nanowerk.com の Nanotechnology Spotlights に紹介記事が掲載されました。

カーボンナノチューブ (CNT) は、構造に由来して優れた熱伝導特性を有する一方で、配向膜などの凝集体では隣接CNT間での電動特性も特性を支配する主要因子といえます。しかしながら、マクロな試料での特性計測では、複雑な凝集構造の界面での熱伝達を束状構造 (バンドル) 1本における熱伝達を電子顕微鏡観察によって可視化しました。金ナノ粒子の融解・蒸発を温度マーカーとして活用することにより、CNTの一部を局所的に温めたときどのように高温域が広がっていくかを直感的に捉えることができ、バンドルに沿った方向 (1本1本のCNTが熱を伝えやすい方向) とバンドルを横切る方向 (複数のCNT間の界面を介して熱が伝わる方向) での熱伝導率の比を、実験により明らかにできました。



Synthesis of relatively small-diameter tungsten ditelluride nanowires from solution-grown tungsten oxide nanowires

Yohei Yomogida, Mai Nagano, Hiromu Hamasaki, **Kaori Hirahara**, Yasumitsu Miyata, Kazuhiro Yanagi

Jpn. J. App. Phys., vol. 60, SCCD02 (2021).

★ 当雑誌の注目論文 (Spotlights 2021) に選定されました。

二テルル化タングステン (WTe_2) は、そのトポロジカルな物性から、バッテリーなどの応用に期待されている層状物質ですが、東京都立大の蓬田先生らにより、ナノワイヤ状 WTe_2 を安定に合成する方法が見いだされ、その構造評価に関する共同研究成果がJJAP誌に掲載されました。合成されたナノワイヤの直径は15-50nmと従来の合成法より細めであり、かつ、合成条件を制御することによりナノチューブ状構造も作り分けられることが明らかになりました。



Interface atom mobility and charge transfer effects on CuO and Cu₂O formation on Cu₃Pd(111) and Cu₃Pt(111)

Yasutaka Tsuda, Jessiel Siaron Gueriba, Takamasa Makino, **Wilson Agerico Diño**, Akitaka Yoshigoe, Michio Okada

Scientific Reports Volume 11, Article Number 3906, pp. 1-8 (2021)

Corrosion is the gradual destruction of materials (usually metals) by electrochemical reaction with oxidants such as oxygen and sulfates. Thus, it is imperative to elucidate the elementary processes involved. Alloying mitigates corrosion. How? We found that alloying results in the formation of subsurface oxide layers that suppress oxygen diffusion further into the bulk. We also found that we could control the types of oxide layers formed by using hyperthermal oxygen molecular beams (traveling at ca. 10,000 kph). We expect that these results could be utilized for corrosion mitigation, development of corrosion resistant materials and inexpensive catalysts.



Synthesis, characterization, and evaluation of xanthene derivative as highly effective, nontoxic corrosion inhibitor for mild steel immersed in 1 M HCl solution

Nadia Arrousse, Rajae Salim, Abdelfattah Abdellaoui, Fadou El Hajjaji, Belkheir Hammouti, El Houssine Mabrouk, **Wilson Agerico Diño**, Mustapha Taleb

Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers Volume 120, pp. 344-359 (2021)

Corrosion is essentially an electrochemical process involving the oxidation of a metal (anodic reaction). Charge neutrality conditions require consumption of the liberated electrons by some reduction (cathodic) reactions. Corrosion could be mitigated by introducing inhibitors at one of the elementary reaction steps, e.g., transport of species in solution, adsorption of species on the surface of solid phases and transfer of electronic load. In addition, the inhibitors need to be non-toxic, stable at relevant temperatures, effective even in very small amounts/low concentrations, and inexpensive. Experimental and theoretical evidence suggests that synthesized xanthene-derived inhibitors meet all the above-mentioned requirements. Experimenting with mild steel immersed in 1 M HCl solution, we found that the synthesized xanthene derivatives function as mixed (cathodic and anodic) type inhibitors, displace water molecules from mild steel, and form heterogeneous films on the mild steel surface to protect against corrosion.



Molecular dynamic simulation approach to understand the physical and proton transport properties of chitosan/sulfonated Poly(Vinyl alcohol) composite membranes

Chun Yik Wong, Wai Yin Wong, Lijun Liu, **Yoji Shibutani**, Kee Shyuan Loh

Polymer, Vol. 217, 123458 (Jan 2021)

燃料電池の高効率化には、高分子複合材料の開発が不可欠です。本論文では、新たに開発されたバイオマス資源のキトサンとスルホン化ポリスチレンの複合材料における材料特性、水素拡散特性など電池の開発に不可欠な物理的・機械特性を、分子動力学シミュレーションにより予測した内容です。単体の材料に比較した結果、水素拡散の特性を向上させる一方、異方性の弾性定数から評価したヤング率に基づく高剛性を維持していることが確認されました。

 Phase field model of single Shckley stacking fault expansion in 4H-SiC PiN diode

Akira Kano, Akihiro Goryu, Mitsuaki Kato, Chiharu Ota, Aoi Okada, Johji Nishino Kenji Hirohata, Yoji Shibutani

Jpn. J. App. Phys., vol. 60, 024004 (2021).

本論文は、パワーデバイスの開発に不可欠なSiCの欠陥力学に関わる新たなマルチフィジクス解析プラットフォームの内容です。通電によりショックレーの部分転位の運動に伴う積層欠陥の拡大が半導体特性の劣化を導きますが、その予測は一般に困難です。ここでは、温度、通電電流、外部負荷応力といった複雑な外部環境の下で複数の物理にまたがる欠陥の運動を、フェーズフィールド法により解析するスキームを開発しました。デバイスシミュレータとの連動による実環境での特性予測が可能になりました。

 Temperature Dependence of Hydrogen Solubility and Diffusivity in Hydrogen Permeable Membrane of Pd-Cu Alloy with B2-Type Crystal Structure

H. Yukawa, S. Watanabe, A. Suzuki, Y. Matsumoto, H. Araki, M. Mizuno, K. Sugita and W. Higemoto

Defect and Diffusion Forum 407 (2021) 31-40

B2構造を有するPd-53%Cu合金薄膜の水素溶解度と水素拡散性について調べました。その結果、室温に冷却後、水素流量は4~5日かけて減少することがわかりました。圧力-組成-等温線図(P-C-T線図)測定とその場X線回折測定を行った結果、低温における水素透過性の低下は水素の拡散における易動度の低下によることがわかりました。また、陽電子寿命測定の結果、空孔濃度は低く、過剰なCu原子はPdサイトを置換しており、Cu原子が局所的にBCC構造を形成していることがわかりました。Cu原子の拡散性と局所構造が水素の拡散性の低下を理解する鍵になっていると考えられます。

 Identification of Burgers vectors of threading dislocations in freestanding GaN substrates via multiphoton-excitation photoluminescence mapping

M. Tsukakoshi, T Tanikawa, T Yamada, M Imanishi, Y Mori, M Uemukai, and R. Katayama

Applied Physics Express, Vol.14, pp.055504-1/4 (2021.04)

多光子励起フォトルミネッセンス法を用いて GaN 半導体中の貫通転位を非破壊観察し、その濃淡や三次元形状を指標として統計分類を行うことで、貫通刃状転位・貫通螺旋転位・貫通混合転位を非破壊で識別できることを解明しました。それぞれの転位について密度を算出したところ、従来手法のエッチピット法で算出された密度とよい一致を示すことがわかりました。この非破壊評価技術を用いることで、GaN 半導体の結晶欠陥の密度計数だけでなく、識別された情報を基にウエハ製造工程や薄膜成長工程を改良することで結晶を高品質化できます。

 Activation free energies for formation and dissociation of N-N, C-C, and C-H bonds in a Na-Ga melt

Takahiro Kawamura, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, Yoshitada Morikawa

Computational Materials Science 194 110366 - 110366 2021年6月

多結晶抑制のため、炭素を添加したNaフラックス法において、第一原理計算により原子結合エネルギーを算出しました。Na-Ga合金や金属ガリウムが触媒として原子結合エネルギーに影響を与えることがわかりました。



Monitoring of nonthermal plasma degradation of phthalates by ion mobility spectrometry

Ladislav Moravský, Bartosz Michalczuk, Jana Hrdá, **Satoshi Hamaguchi**, Štefan Matejčík

Plasma Processes and Polymers 2021年5月

Ion mobility spectrometry was used to monitor the degradation of phthalate vapors by corona discharge. Three different phthalates (dimethyl [DMP], diethyl [DEP], and dipropyl [DPP]) were examined in a corona discharge reactor (wire - to - cylinder geometry) at direct current positive polarity in ambient air. The relative removal efficiencies up to 96% and energetical degradation efficiencies of 229.27, 216.12, and 198.84 kJ mg⁻¹ were achieved for DMP, DEP, and DPP, respectively. Byproducts such as methanol, ethanol, and 1 - and 2 - propanol at extremely low densities were also detected. The identified degradation processes involved two steps: (i) An electron - impact dissociation of phthalates into alkoxy radicals and (ii) reactions of alkoxy radicals with water molecules to form alcohols.



Development of a Massively Parallelized Fluid-Based Plasma Simulation Code with a Finite-Volume Method on an Unstructured Grid

Kuan Lin Chen, Meng Fan Tseng, Ming Chung Lo, **Satoshi Hamaguchi**, Meng Hua Hu, Yun Ming Lee, **Jong Shinn Wu**

IEEE Transactions on Plasma Science 49(1) 104 - 119 2021年1月

A massively parallelized unstructured-grid plasma simulation code based on a multifluid plasma model has been developed and validated. The code uses a collocated cell-centered finite-volume method and is designed to simulate intermediate low-pressure and atmospheric-pressure (AP) plasma sources with complex machine geometries. One of the novel features of this code is that it is implemented in a highly flexible computational platform named ultrafast massively parallel processing (ultraMPP), which allows straightforward addition and integration of different partial differential equation (PDE) solvers in a self-consistent manner. As to the numerical methods, the Scharfetter-Gummel scheme is adopted to handle the drift-diffusion flux of electrons, whereas the Harten-Lax-van Leer (HLL)-type approximate Riemann solver is used to handle the convection terms of ion momentum equations. For discretization of the diffusion terms in an unstructured grid, the Taylor expansion is used to deal with the effects of nonorthogonality of the cells, and the cell-center gradient is calculated using a least-squares method. The simulation code with a local-field approximation (LFA) was validated for two cases of AP plasmas as well as a case of an argon capacitively coupled plasma generated in a Gaseous Electronic Conference (GEC) reference cell with local mean energy approximation (LMEA) at intermediate low pressure. The simulation results were found to be in good agreement with the previously published experimental and simulation data.



Characterization of descriptors in machine learning for data-based sputtering yield prediction

Hiori Kino, **Kazumasa Ikuse**, Hieu Chi Dam, **Satoshi Hamaguchi**

Physics of Plasmas 28(1) 2021年1月

Sputtering of a single-element material surface by monatomic ion impact is one of the simplest and most fundamental phenomena of plasma-surface interaction. Despite its seemingly simple and well-defined nature, its collision cascade dynamics is so complex that no widely applicable formula of the sputtering yield has ever been derived analytically from the first principles. When the first-principles approach to a complex problem fails to unveil its nature, a data-driven approach, or machine learning, may be used to transform the problem into a tractable model. In this study, regression models of sputtering yields of such systems were constructed based on publicly available data derived from a large number of past experiments. The analysis has also identified the descriptors (i.e., physical variables characterizing the surface and incident ion species) on which the sputtering phenomena depend most strongly and presented quantitative evaluation on how sensitively the regression models depend on each descriptor or group of descriptors. Information obtained in this study can facilitate an understanding of the fundamental workings of the sputtering phenomena in the absence of rigorous analytical theory.



Characterization of Benzo[a]naphtho[2,3-f]pentalene: Interrelation between Open-shell and Antiaromatic Characters Governed by Mode of the Quinoidal Subunit and Molecular Symmetry

Akihito Konishi, Koki Horii, Haruna Iwasa, Yui Okada, Ryohei Kishi, Masayoshi Nakano, Makoto Yasuda

Chemistry - An Asian Journal 2021年4月

反芳香族性と開殻性は“よく似た性質”と定性的に理解されてきましたが、その起源については理解が進んでいませんでした。今回の報告では、同じ構造を含む一連の化合物を合成し、両性質を比較評価することで、その系統的な理解を試みました。その結果、反芳香族性には分子の対称性が重要な因子である一方、開殻性にはキノイド構造の形式が大きな影響をおよぼすことを見出しました。この知見は有機エレクトロニクス材料の設計指針へ発展できるもので、引き続き関連化合物の研究を実施しています。

アズレン、ペンタレン、ヘプタレン骨格を含む π 拡張非交互炭化水素類の合成と性質

小西 彬仁, 安田 誠

有機合成化学協会誌 79(3) 224 - 233 2021年3月

非交互炭化水素は古くから知られる分子群ですが、最近合成法の進展により再び脚光を浴びています。本解説では、我々が最近実施してきたアズレン、ペンタレン、ヘプタレン骨格を含む分子に焦点を当て、その合成と性質を解説しました。



Mechanism and Origins of Regiochemical Control in Rh(III)-Catalyzed Oxidative C-H Alkenylation and Coupling Sequence of Unprotected 1-Naphtylamines with α,β -Unsaturated Esters

K. Yamazaki, S. Rej, **Y. Ano**, and N. Chatani

Organometallics, 40(9), 1371-1378 (2021).

われわれの研究グループで開発した、ロジウム触媒と α,β -不飽和エステルによる1-ナフチルアミンのペリ位選択的アルケニル化／酸化のアミノ化反応の反応機構に関する理論化学計算を実施しました。本触媒系では、アミノ基近傍の炭素－水素結合のうち、ペリ位の炭素－結合の切断が速度論的に有利であることが明らかになりました。また、本論文では酸化のアミノ化段階が水素結合を介した β －水素脱離を経る機構を新たに提案しています。



Iridium(III)-catalyzed Branch-Selective C-H Alkenylation of Aniline Derivatives with Alkenes

S. M. Khake, K. Yamazaki, **Y. Ano**, and N. Chatani

ACS Catal., 11(9), 5463-5471 (2021).

本研究ではイリジウム触媒を用いた芳香族アミン類のオルト位選択的アルキル化反応を開発しました。本反応の特徴は、アルキル化剤としてケイ素置換基またはアルキル基を有する末端アルケンを用いると、分岐型生成物が選択的に得られる点です。この生成物の選択性は、イリジウム触媒の配位子とアルケン上の置換基の間の立体反発によりもたらされることを理論化学計算によって明らかにしています。