

E - I M R

先端エネルギー材料
理工共創研究センター

Collaborative Research Center on Energy Materials

令和2年度 研究成果報告書

2020 Report on Research Activities

はじめに

先端エネルギー材料理工共創研究センター(E-IMR)は、前身である低炭素社会基盤材料融合研究センター(LC-IMR)を発展的に改組して平成27年4月に発足致しました。

クリーンで経済的な持続的社會を実現するためには、エネルギー変換や物質輸送において高い効率や性能を示す先端材料の開発が不可欠です。本センターでは、理学と工学とを融合した「理工共創」の研究を強力に推進することにより、スピン、電子、イオン、ホール、フォトン等の多様なキャリアを原子レベルで制御した先端エネルギー材料を創成します。理工共創研究のため、理学系及び工学系研究者が新たな研究部門を構成していることも特徴です。このような取り組みにより、エネルギー材料分野での研究フロンティアを開拓して世界最高水準の材料研究を推進するとともに、異分野融合に関する高度な研究能力を持つ若手人材の育成にも努めます。

具体的な研究部とそれぞれの研究ターゲットは以下の通りです。

- 1) スピンエネルギー材料研究部門では、新概念の変換機能を持つエネルギー材料の実現を目指して、スピン流を介したエネルギー変換に関する学理を追求し、変換効率が高く経済性・耐久性にも優れたエネルギー材料の創成に取組み、将来の創エネ・省エネ社會の構築に貢献します。
- 2) イオンエネルギー材料研究部門では、ハイパフォーマンスな全固体二次電池や多機能型二次電池の実現に向けて、イオン輸送と化学エネルギー変換における学理を追求して新規な固体電解質と電極材料の開発に取り組み、新しい電池がもたらす快適な社會の構築に貢献します。
- 3) 光エネルギー材料研究部門では、より多くの電気エネルギーを得ることのできる低コスト・高効率太陽電池の実現を目指して、Si多結晶の融液成長や薄膜成長に関する新しい学理と結晶成長技術の確立を理工共創で取組み、太陽の光エネルギーを最大限に利用する創エネ社會の発展に貢献します。
- 4) 材料プロセス・社会実装研究部門では、本センターの研究成果である先端エネルギー材料が広く社會に実装されていくことを目指し、高い性能と品質を持ち経済性に優れた材料を製造する材料プロセス研究と、エネルギー材料の性能評価手法の開発、材料・デバイスの性能実証に取り組み、先端エネルギー材料を基盤とした新しいエネルギーシステムの構築に貢献します。

令和2年度は、本センター内の共通装置の購入支援制度を新たに導入し、また、38歳以下の若手研究者による理工共創研究を促進する助成制度を引き続き実施するとともに、学内外の大学・研究機関とも連携して、先端エネルギー材料の理工共創研究を強力に推進しました。今後も、「高効率エネルギー変換・高速輸送現象の実現に向けた新しい学理の構築」、「社会実装を目指した材料創成の指導原理の確立」、そして「理工共創研究による新しい研究能力を持った人材の育成」を目標として取り組んで参ります。本センターの活動にご期待ください。

令和 3(2021)年 10月

先端エネルギー材料理工共創研究センター
センター長 市坪 哲

目次

1. 概要	3
2. 研究成果報告	7
2-1. スピンエネルギー材料研究部	8
2-2. イオンエネルギー材料研究部	15
2-3. 光エネルギー材料研究部	22
2-4. 材料プロセス・社会実装研究部	28
3. 令和2(2020)年度エネルギー材料萌芽研究助成成果概要	34
3-1. 低エネルギー気体分離を実現する多孔性分子磁石骨格の創製	35
3-2. 高炭素マルテンサイト鋼の低温焼戻し挙動におよぼす合金元素添加の影響解明 ...	36
4. 新聞発表等.....	37
4-1. プレスリリース	38
4-2. 新聞等掲載状況.....	39
5. 外部研究資金	41
5-1. 科学研究費補助金	42
5-2. 科学研究費補助金以外の外部資金.....	43
6. 知的財産権.....	45
6-1. 特許リスト	46
7. 各種受賞・表彰.....	48
7-1. 受賞リスト	49
8. 主催した会議・研究会・ワークショップ.....	51
8-1. 先端エネルギー材料理工共創研究センター 2020 年度ワークショップ	52
9. 職員及び運営委員名簿	55
令和2(2020)年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター名簿	56
令和2(2020)年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター運営委員会委員	57

1. 概要

**持続的実現のための
原子レベルでの複合キャリア制御による
先端エネルギー材料の創成**

クリーンで経済的な持続的実現するためには、エネルギー変換や物質輸送において高い効率や性能を実現する先端材料の開発が不可欠です。本センターでは、理学と工学とを融合した「理工共創」の研究を強力に推進することにより、スピン、電子、イオン、ホール、フォトン等の多様なキャリアを原子レベルで制御した先端エネルギー材料を創成します。理工共創研究のため、理学系および工学系研究者が新たな研究部門を構成していることも特徴です。このような取り組みにより、エネルギー材料分野での研究フロンティアを開拓して世界最高水準の材料研究を推進するとともに、異分野融合に関する高度な研究能力をもつ若手人材の育成にも努めます。



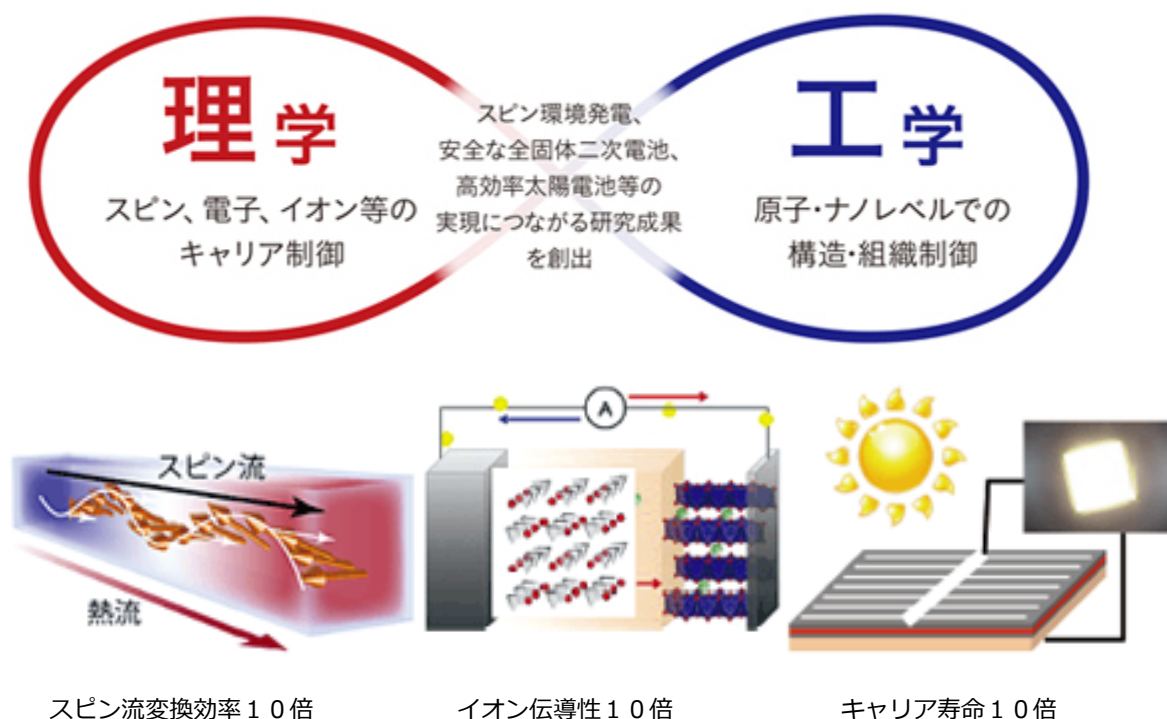
センター長 市坪 哲



- ・高効率エネルギー変換・高速輸送現象の実現に向けた新しい学理の構築
- ・社会実装を目指した材料創成の指導原理の確立
- ・理工共創研究による新しい研究能力を持った人材の育成

原子レベルでの複合キャリア制御

エネルギー変換や物質移動において高い効率や性能を実現するために、スピン、電子、イオン、ホール、フォトンなどの多様なキャリアを複合的に取り扱い原子レベルで制御する。



実施体制



2020.6.1現在

スピンエネルギー材料研究部

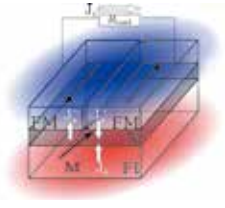
スピン流をエネルギー変換や発電技術に展開する

21世紀に入り、私たちの生活で馴染みのある熱や音波、振動、光等が持つエネルギーから磁気の流れ(スピン流)を生み出し、それを利用して電流を得るといふ、全く新しいエネルギー変換の原理が発見されています。この新しい原理に基づいたエネルギー変換技術が実用的なものになると、私たちは熱や光などのエネルギーをこれまで以上に電力として有効利用することができるようになります。その技術を実用的なものにするためには、新しい原理に基づいたエネルギー変換を高い効率で行うことのできるエネルギー材料の開発が必要となります。さらに、その新しいエネルギー材料には経済性や耐久性も求められます。

スピンエネルギー材料研究部門では、新概念の変換機能を持つエネルギー材料の実現を目指して、スピン流を介したエネルギー変換に関する学理を追求し、変換効率が高く経済性・耐久性にも優れたエネルギー材料の創成に取り組み、将来の創エネ・省エネ社会の構築に貢献します。



熱とスピンの相互作用を研究するスピン・カロリトロコエスの理論研究に取り組みます。



熱流からスピン流を生成して、電流を得るための材料とデバイスの研究の開発に取り組みます。

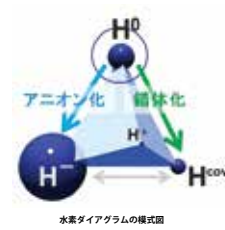
共に創る

イオンエネルギー材料研究部

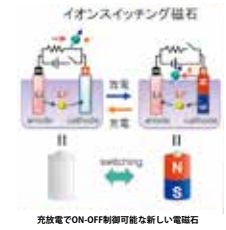
高速イオン伝導材料を利用して近未来型二次電池を創成する

私たちの暮らしの中では、充電して利用する二次電池(蓄電池)が多く使われています。もし、二次電池の充電容量が増え、1回の充電で利用できる時間が長くなり、そして今までの電池にはない機能を持つと、私たちの生活はこれまで以上に快適なものになると期待できます。そのような高い充電性能を持つ電池のひとつが全固体二次電池であり、電池自身に新しい機能を付け加えた近未来型とも言える電池が多機能型二次電池です。これらの優れた全固体二次電池を開発するには全く新しいコンセプトと材料が必要であり、また、多機能型二次電池の実現には充・放電の電池特性と協奏して光や磁場などに応答する新しい材料の開発が求められます。

イオンエネルギー材料研究部門では、ハイパフォーマンスな全固体二次電池や多機能型二次電池の実現に向けて、イオン輸送と化学エネルギー変換における学理を追求して新規な固体電解質と電極材料の開発に取り組み、新しい電池がもたらす快適な社会の構築に貢献します。



水素ダイアグラムの模式図
水素の結合自由度に注目して、多様なイオンの高速伝導の研究に取り組みます。



充放電でON-OFF制御可能な新しい電磁石
スピンやイオンの性質を利用して、二次電池に新しい機能を付加するための研究に取り組みます。

光エネルギー材料研究部

太陽の光エネルギーをより経済的に大量に利用する

太陽光発電に使われるシリコン(Si)多結晶型太陽電池は、Si単結晶型に比べて経済的に製造できますが、光を電気に変換する効率が低いという課題があります。そのエネルギー変換効率を向上できれば、太陽エネルギーの利用が増すばかりではなく、社会への普及が進むことによって市場の拡大と価格の低下が期待され、さらに社会に広く普及するという好循環が生まれる可能性があります。そのためにも高いエネルギー変換効率を実現可能な高品質なSi多結晶を作り出すことが必要です。さらに、高品質化が実現すれば、この基板上にSiとは異なる光エネルギーを利用する別の材料を結晶成長させた新しい太陽電池の創出も可能となります。

光エネルギー材料研究部門では、より多くの電気エネルギーを得ることのできる低コスト・高効率太陽電池の実現を目指して、Si多結晶の融液成長や薄膜成長に関する新しい学理と結晶成長技術の確立を理工共創で取り組み、太陽の光エネルギーを最大限に利用する創エネ社会の発展に貢献します。



品質の優れたシリコン結晶を効率的に成長させるための研究に取り組みます。



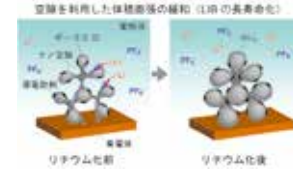
太陽電池用Si多結晶インゴット

材料プロセス・社会実装研究部

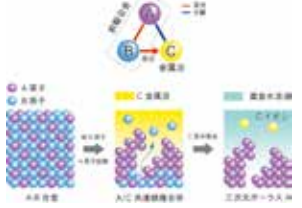
先端エネルギー材料の速やかな社会実装に挑戦する

最新の材料研究で得られる先端技術シーズが社会の中に広がるためには、実用化に向けた多くの課題を乗り越えることが必要になります。エネルギー材料として効率的にエネルギーを生み出したり蓄えたりすることができることや、その導入や維持に係る経済性や安心して利用できる安全性にも優れていることが求められます。これらの要求を満たすエネルギー材料を製造するための材料プロセスを確立するとともに、性能や経済性を評価する研究も重要となります。

材料プロセス・社会実装研究部門では、本センターの研究成果である先端エネルギー材料が広く社会に実装されていくことを目指し、高い性能と品質を持ち経済性に優れた材料を製造する材料プロセス研究と、エネルギー材料の性能評価手法の開発、材料・デバイスの性能実証に取り組み、先端エネルギー材料を基盤とした新しいエネルギーシステムの構築に貢献します。



材料の特性を理解し、問題点があればその解決に向けた研究を行います。



解決方法を実現するための新しい材料作成方法を確立します。

国際共同研究部

エネルギー材料研究の国際共創力を強化する

海外の優秀なエネルギー材料研究者を客員教授として招聘し、新たな研究フロンティアの開拓や成果の社会実装化に向けた国際共同研究に取り組みます。

2. 研究成果報告

2-1. スピンエネルギー材料研究部

構成員 教授：高梨 弘毅, Gerrit Ernst-Wilhelm Bauer (兼)
委嘱教授：水口 将輝 (2020年4月まで准教授)
助教：伊藤 啓太 (兼)
学術研究員：Himanshu Sharma (2020年8月まで)

【2020(令和2)年度の成果概要】

・フェロニクス創始

Bauer グループでは、強誘電性絶縁体における熱流と電気双極子の結合に関する基本理論を、拡散伝導系およびバリスティック伝導系について構築した。強磁性体中のスピン流との類推で、強誘電体中の電気双極子流の存在が予想される。したがって、電気双極子ゼーベック効果や電気双極子ペルチェ効果の存在も示唆され、それらが実質的な性能指数となり得る。マグノンとの類推で、強誘電体の基本励起を「フェロン」と名付け、将来的には新分野の「フェロニクス」を構築する。

・強磁性窒化物における異常ネルンスト効果の研究

高梨グループでは水口グループと共同で SrTiO₃(STO)(001)基板上に分子線エピタキシー(MBE)法により Fe₄N 薄膜をエピタキシャル成長し、異常ネルンスト効果(ANE)の熱勾配(∇T)方位依存性を測定し、その起源を調べた。

1 cm 四方の STO(001)基板上に MBE 法により膜厚 27 nm の Fe₄N 薄膜をエピタキシャル成長した。基板温度 400 °C において、Fe は電子線蒸着銃、N は高周波プラズマガンにより同時供給した。続けて、Fe₄N 薄膜上に 2 nm の Al キャップ薄膜を MBE 装置と連結したスパッタ装置で成膜した。Al 薄膜は大気暴露後に自然酸化により Al-O へと変化した。 ∇T の方向を [110] と [100] で変えて熱電測定を行うために、オリフラが [110] の STO 基板上(試料 A) と [100] の STO 基板上(試料 B) に、Fe₄N 薄膜を同条件で成膜した。構造は Cu-K α 線源の X 線回折法(XRD)で評価し、膜厚は X 線反射率法で測定した。XRD 測定の後、試料を ANE、ゼーベック効果(SE)、異常ホール効果(AHE)の測定のために、フォトリソグラフィとイオンミリングを用いて図 1 のようなホールバー形状に微細加工した。ゼーベック電圧(V_{SE})およびネルンスト電圧(V_{ANE})端子間の距離はそれぞれ、5.0 mm、2.2 mm とした。その次に、オンチップ温度計をリフトオフで形成した。オンチップ温度計の構造は Cr(10 nm)/Pt(150 nm)であり、幅 20 μ m の細線である。最後に、電極パット Cr(10 nm)/Au(200 nm)をリフトオフで形成した。作製した試料を手製のホルダーにサーマルグリスで接着し、ヒーターによりホールバーの長手面内方向に ∇T を印加しながら、物理特性評価システム(PPMS)の外部制御オプションを用いて熱電測定を実施した。環境温度は 310 K に設定し、-3 ~ 3 T の外部磁場を膜面直方向に印加し、 V_{SE} および V_{ANE} をナノボルトメーターで測定した。温度差 ΔT は、熱電測定時にヒーター側およびヒートシンク側のオンチップ温度計の電気抵抗をロックインアンプにより同時測定することで見積もった。2 つのオンチップ温度計の温度差を見積もるために、熱電測定とは別に PPMS を用いてヒーター側およびヒートシンク側のオンチップ温度計の電気抵抗の温度依存性を 300-350 K の範囲で測定した。試料 A および試料 B の AHE も熱電測定とは別に、310 K において -3 ~ 3 T の外部磁場を膜面直方向に印加して PPMS で測定した。

表 1 に試料 A および試料 B のゼーベック熱電能(S_{SE})、異常ネルンスト熱電能(S_{ANE})、縦抵抗率(ρ_{xx})、横抵抗率(ρ_{xy})、異常ホール角($\tan\theta_{AHE}$)、横ペルチェ係数(α_{xy})をまとめた。 S_{ANE} の大きさが ∇T の方位によって変わり、異方性が生じている。測定で得られた、 S_{SE} 、 S_{ANE} 、 ρ_{xx} 、 $\tan\theta_{AHE}$ を理論式に代入することで、試料 A および試料 B の α_{xy} を計算した結果、それぞれ 1.5 A/(m·K) と 0.9 A/(m·K) となった。理論計算で予想された 2.4 A/(m·K) の半分程度であった

が、これら値は $\text{Fe}_{1-x}\text{Ga}_x$ や $\text{Co}_2\text{MnAl}_{1-x}\text{Si}_x$ といった、ANE 材料として有望な材料と同程度の大きな値である。表 1 より、 $\nabla T // \text{Fe}_4\text{N}[\text{110}]$ の際の α_{xy} が、 $\nabla T // \text{Fe}_4\text{N}[\text{100}]$ の際の値よりも大きい。したがって、 α_{xy} の ∇T 方位に対する異方性が、 Fe_4N における S_{ANE} の異方性に寄与していることが示唆されたが、両試料の S_{ANE} の差が比較的小さいため、より詳細な検討が必要と考えている。

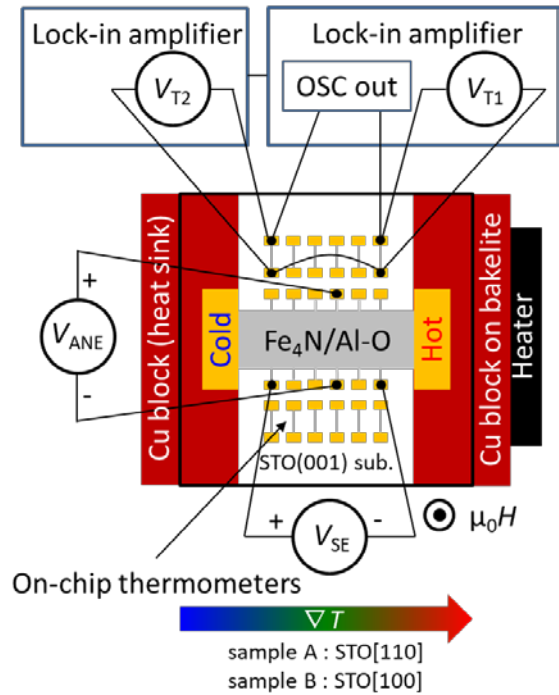


表 1 試料の S_{SE} 、 S_{ANE} 、 ρ_{xx} 、 ρ_{xy} 、 θ_{AHE} 、 α_{xy}

	試料A $\nabla T // [\text{110}]$	試料B $\nabla T // [\text{100}]$
$S_{\text{SE}} [\mu\text{V}/\text{K}]$	-17	-19
$S_{\text{ANE}} [\mu\text{V}/\text{K}]$	2.5 ± 0.1	2.1 ± 0.1
$\rho_{xx} [\mu\Omega \cdot \text{m}]$	0.96	1.0
$\rho_{xy} [\mu\Omega \cdot \text{m}]$	-0.064	-0.065
$\theta_{\text{AHE}} (= -\rho_{xy}/\rho_{xx})$	0.067	0.065
$\alpha_{xy} [\text{A} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{m}^{-1}]$	1.5	0.9

図 1 異常ネルンスト効果の測定セットアップ

・ Ni/Pt 人工格子における異常ネルンスト効果の増強

高梨グループでは、Ni/Pt 人工格子の異常ネルンスト効果の研究も行った。Ni/Pt 人工格子は、スパッタ法を用いて STO(001)基板上に作製し、Pt 層厚を 1 nm に固定し、Ni 層厚 (t) を 1.5~4 nm の範囲で変化させた。2 ≤ t ≤ 4 nm で S_{ANE} は bulk Ni の値を上回る 1 μV/K 以上の値を示した。また、 α_{xy} は $t = 4$ nm で 4.8 A/(m·K) という大きな値を示し、多層構造化が異常ネルンスト効果の増強に有効であることがわかった。

【今後の計画】

Bauer グループでは、強誘電性絶縁体におけるフェロニクスの研究を推進し、スピントロニクス物理の探求を継続する。

高梨グループでは、 Fe_4N 薄膜における ANE の異方性の起源について、より詳細な検討を行う。加えて、 Fe_4N における ANE の増強も試みる。 S_{ANE} をより増大させる有望な方法として、上記の Ni/Pt 人工格子のように、非磁性体材料との多層構造化が考えられる。そこで、 Fe_4N についても適切な非磁性体材料との多層構造化により、 S_{ANE} の増大が見込める。この他にもフェルミ準位 (E_{F}) 制御による S_{ANE} の増大にも取り組む。フルホイスター合金の $\text{Co}_2\text{MnAl}_{1-x}\text{Si}_x$ において、Al を Si で置換することで E_{F} の位置を制御し、最大の S_{ANE} が得られる組成比 x が見出されていることから、リジットバンドモデルが適用できる窒化物混晶材料でも、Fe を Co 等により置換して E_{F} 位置をチューニングすることで、 S_{ANE} の増強が期待される。

【論文リスト】

1. Gerrit E. W. Bauer, Ryo Iguchi, Ken-ichi Uchida, Theory of Transport in Ferroelectric Capacitors, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 187603(1-4) (2021)
2. T. Seki, Y. Sakuraba, K. Masuda, A. Miura, M. Tsujikawa, K. Uchida, T. Kubota, Y. Miura, M. Shirai, K. Takanashi, Enhancement of the anomalous Nernst effect in Ni/Pt superlattices, *Phys. Rev. B* **103**, L020402 (1-7) (2021)
3. Mehrdad Elyasi, Yaroslav M. Blanter, Gerrit E. W. Bauer, Resources of nonlinear cavity magnonics for quantum information, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 5 (2020)
4. An, K., Litvinenko, A. N., Kohno, R., Fuad, A. A., Naletov, V. V., Vila, L., Ebels, U., de Loubens, G., Hurdequint, H., Beaulieu, N., Ben Youssef, J., Vukadinovic, N., Bauer, G. E. W., Slavin, A. N., Tiberkevich, V. S., Klein, O., Coherent long-range transfer of angular momentum between magnon Kittel modes by phonons, *Physical Review B*, **101**, 060407(R) (1-6), (2020)
5. Tao Yu, Xiang Zhang, Sanchar Sharma, Yaroslav M. Blanter, Gerrit E. W. Bauer, Chiral coupling of magnons in waveguides, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 9 (2020)
6. Fran Simic, Sanchar Sharma, Yaroslav M. Blanter, Gerrit E. W. Bauer, Coherent pumping of high-momentum magnons by light, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 10 (2020)
7. Andreas Ruckriegel, Simon Streib, Gerrit E. W. Bauer, Rembert A. Duine, Angular momentum conservation and phonon spin in magnetic insulators, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 10 (2020)
8. Tao Yu, Yu-Xiang Zhang, Sanchar Sharma, Xiang Mang, Yaroslav M. Blanter, Gerrit E. W. Bauer, Magnon Accumulation in Chirally Coupled Magnets, *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, **124**, 10, 107202 (1-6) (2020)
9. Tao Yu, Gerrit E. W. Bauer, Noncontact Spin Pumping by Microwave Evanescent Fields, *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, **124**, 23 (2020)
10. Tao Yu, Hanchen Wang, Michael A. Sentef, Haiming Yu, Gerrit E. W. Bauer, Magnon trap by chiral spin pumping, *PHYSICAL REVIEW B*, **102**, 5, (2020)
11. Weichao Yu, Tao Yu, Gerrit E. W. Bauer, Circulating cavity magnon polaritons, *PHYSICAL REVIEW B*, **102**, 6 (2020)
12. Xiang Zhang, Gerrit E. W. Bauer, Tao Yu, Unidirectional Pumping of Phonons by Magnetization Dynamics, *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, **125**, 7 (2020)
13. Alejandro O. Leon, Gerrit E. W. Bauer, Voltage- and temperature-dependent rare-earth dopant contribution to the interfacial magnetic anisotropy, *JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER*, **32**, 40 (2020)
14. K. Yamamoto, W. Yu, T. Yu, J. Puebla, M. Xu, S. Maekawa, and G.E.W. Bauer, Non-reciprocal Pumping of Surface Acoustic Waves by Spin Wave Resonance, *J. Phys. Soc. Jap.*, **89**, 113702 (1-5) (2020)
15. Bertelli, J. J. Carmiggelt, T. Yu, B. G. Simon, C. C. Pothoven, G.E. W. Bauer, Y. M. Blanter, J. Aarts, T. van der Sar, Magnetic resonance imaging of spin-wave transport and interference in a magnetic insulator, *Science Advances*, **6**, 46, eabd3556 (2020)
16. Hanchen Wang, Jilei Chen, Tao Yu, Chuanpu Liu, Chenyang Guo, Song Liu, Ka Shen, Hao Jia, Tao Liu, Jianyu Zhang, Marco A. Cabero Z, Qiuming Song, Sa Tu, Mingzhong Wu, Xiufeng Han, Ke Xia, Dapeng Yu, Gerrit E. W. Bauer and Haiming Yu, Nonreciprocal coherent coupling of nanomagnets by exchange spin waves, *Nano Research*, s12274-020-3251-5 (1-6) (2020)

17. Takahide Kubota, Yohei Kota, Keita Ito, Rie Y. Umetsu, Mingling Sun, Masaki Mizuguchi, Koki Takanashi, Perpendicular magnetic anisotropy of (001)-textured poly-crystalline MnAlGe films, *AIP ADVANCES*, **10**, 1, 015122(1-5) (2020)
18. E Jackson, Y Wu, W Frost, J-Y Kim, M Samiepour, K Elphick, M Sun, T Kubota, K Takanashi, T Ichinose, S Mizukami, A Hirohata, Non-destructive imaging for quality assurance of magnetoresistive random-access memory junctions, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **53**, 1, 014004(1-11) (2020)
19. Mingling Sun, Takahide Kubota, Keita Ito, Shigeki Takahashi, Yoshiyuki Hirayama, Yoshiaki Sonobe, Koki Takanashi, Epitaxially grown Cu₂Sb-type MnGaGe films with large perpendicular magnetic anisotropy, *Applied Physics Letters*, **116**, 6, 062402(1-4) (2020)
20. Asuka Miura, Ryo Iguchi, Takeshi Seki, Koki Takanashi, Ken-ichi Uchida, Spin-mediated charge-to-heat current conversion phenomena in ferromagnetic binary alloys, *PHYSICAL REVIEW MATERIALS*, **4**, 3, 034409(1-13) (2020)
21. Kohei Yamamoto, Souliman El Moussaoui, Yasuyuki Hirata, Susumu Yamamoto, Yuya Kubota, Shigeki Owada, Makina Yabashi, Takeshi Seki, Koki Takanashi, Iwao Matsuda, Hiroki Wadati, Element-selectively tracking ultrafast demagnetization process in Co/Pt multilayer thin films by the resonant magneto-optical Kerr effect, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, **116**, 17 (2020)
22. T. Seki, M. Tsujikawa, K. Ito, K. Uchida, H. Kurebayashi, M. Shirai, K. Takanashi, Perpendicularly magnetized Ni/Pt (001) epitaxial superlattice, *PHYSICAL REVIEW MATERIALS*, **4**, 6 (2020)
23. Keita Ito, Masahiro Hayashida, Hiroto Masuda, Takahiro Nishio, Sho Goto, Hiroaki Kura, Tomoyuki Koganezawa, Masaki Mizuguchi, Yusuke Shimada, Toyohiko J. Konno, Hideto Yanagihara, Koki Takanashi, Epitaxial L1₀-FeNi films with high degree of order and large uniaxial magnetic anisotropy fabricated by denitriding FeNiN films, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, **116**, 24 (2020)
24. Hiroto Masuda, Takeshi Seki, Yong-Chang Lau, Takahide Kubota, Koki Takanashi, Interlayer exchange coupling and spin Hall effect through an Ir-doped Cu nonmagnetic layer, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 22 (2020)
25. Santanu Pan, Takeshi Seki, Koki Takanashi, Anjan Barman, Ultrafast demagnetization mechanism in half-metallic Heusler alloy thin films controlled by the Fermi level, *PHYSICAL REVIEW B*, **101**, 22 (2020)
26. Asuka Miura, Keisuke Masuda, Takamasa Hirai, Ryo Iguchi, Takeshi Seki, Yoshio Miura, Hiroki Tsuchiura, Koki Takanashi, Ken-ichi Uchida, High-temperature dependence of anomalous Etingshausen effect in SmCo₅-type permanent magnets, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, **117**, 8 (2020)
27. Hiroto Masuda, Rajkumar Modak, Takeshi Seki, Ken-ichi Uchida, Yong-Chang Lau, Yuya Sakuraba, Ryo Iguchi, Koki Takanashi, Large spin-Hall effect in non-equilibrium binary copper alloys beyond the solubility limit, *COMMUNICATIONS MATERIALS*, **1**, 1 (2020)
28. P. Sheng, T. Fujita, M. Mizuguchi, Anomalous Nernst effect in Co_x(MgO)_{1-x} granular thin films, *Applied Physics Letters*, **116**, 142403, (2020)
29. S. Entani, K. V. Larionov, Z. I. Popov, M. Takizawa, M. Mizuguchi, H. Watanabe, S. Li, H. Naramoto, P. B. Sorokin, S. Sakai, Non-chemical fluorination of

- hexagonal boron nitride by high-energy ion irradiation, *Nanotechnology*, (2020)
30. R. Kobayashi, Y. Mitsui, R. Y. Umetsu, M. Mizuguchi, and K. Koyama, Synthesis of Ferromagnetic τ -Mn-Al-C by Reactive Sintering, *MATERIALS TRANSACTIONS*, (2020)
 31. Ryota Kobayashi, Akio Takaki, Yoshifuru Mitsui, Rie Y. Umetsu, Kohki Takahashi, Masaki Mizuguchi, Keiichi Koyama, Dual Acceleration of ε - τ Transformation in Mn-Al Induced by Zn-Addition and In-Magnetic-Field Annealing, *MATERIALS TRANSACTIONS*, (2020)
 32. Keita Ito, Yoko Yasutomi, Siyuan Zhu, Munisa Nurmamat, Masaki Tahara, Kaoru Toko, Ryota Akiyama, Yukiharu Takeda, Yuji Saitoh, Tamio Oguchi, Akio Kimura, Takashi Suemasu, Manipulation of saturation magnetization and perpendicular magnetic anisotropy in epitaxial $\text{Co}_x\text{Mn}_{4-x}\text{N}$ films with ferrimagnetic compensation, *Phys. Rev. B*, **101**, 10, 104401(1-8) (2020)
 33. Haruka Mitarai, Taro Komori, Taku Hirose, Keita Ito, Sambit Ghosh, Syuta Honda, Kaoru Toko, Laurent Vila, Jean-Philippe Attané, Kenta Amemiya, Takashi Suemasu, Magnetic compensation at two different composition ratios in rare-earth-free $\text{Mn}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ ferrimagnetic films, *Phys. Rev. Materials*, **4**, 9, 094401(1-7) (2020)

【国内会議】

1. Gerrit E. W. Bauer, Strong-coupling phenomena in spintronics, 第44回日本磁気学会学術講演会, オンライン, 20201216
2. 高梨弘毅, 磁性材料とスピントロニクス, 第90回東北大学金属材料研究所夏期講習会, オンライン, 20200804
3. 高梨弘毅, 金属人工格子ルネサンス, 第139回金属材料研究所講演会, オンライン, 20201127
4. 高梨弘毅, 金属人工格子からスピントロニクスへ、そしてまた金属人工格子へ, 第44回日本磁気学会学術講演会, オンライン, 20201215
5. 高梨弘毅, スピントロニクス入門, 第68回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210316
6. Takahide Kubota, Keita Ito, Rie Umetsu, Masaki Mizuguchi, Koki Takanashi, Layer thickness and underlayer dependence of perpendicular magnetic anisotropy in Cu_2Sb -type (Mn-Cr)AlGe films, 第81回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 20200908-20200911
7. Haruka Mitarai, Taro Komori, Taku Hirose, Keita Ito, Kaoru Toko, Kenta Amemiya, Takashi Suemasu, Magnetic compensations in $\text{Mn}_{4-x}\text{Co}_x\text{N}$ epitaxial films proved by X-ray magnetic circular dichroism, 第81回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 20200908-20200911
8. 伊藤啓太, 林田誠弘, 市村匠, 西尾隆宏, 後藤翔, 藏裕彰, 小金澤智之, 水口将輝, 嶋田雄介, 今野豊彦, 柳原英人, 高梨弘毅, 脱窒素法による高規則度・高磁気異方性 L_{10} -FeNi 薄膜の作製, 日本金属学会 2020 年秋期(第 167 回)講演大会, オンライン, 20200915-20200918
9. Keita Ito, Masahiro Hayashida, Takahiro Nishio, Sho Goto, Hiroaki Kura, Tomoyuki Koganezawa, Masaki Mizuguchi, Yusuke Shimada, Toyohiko J. Konno, Hideto Yanagihara, Koki Takanashi, L_{10} -FeNi films with a large degree of order and uniaxial magnetic anisotropy fabricated by denitriding epitaxial

- FeNiN films, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 20200908-20200911
10. Sho Goto, Eiji Watanabe, Yoshiaki Hayashi, Takahiro Nishio, Hiroaki Kura, Takashi Suemasu, Hideto Yanagihara, Eiji Kita, Takashi Honda, Keita Ito, Yusuke Shimada, Masahito Tsujikawa, Masaki Mizuguchi, Masafumi Shirai, Toyohiko J. Konno, Koki Takanashi, Enhancement of magnetic anisotropy of $L1_0$ -FeNi nanoparticles and the related compounds for realization of rare-earth free magnet, 第 44 回日本磁気学会学術講演会, オンライン, 20201214-20201217
 11. Jian Wang, Yong Chang Lau, Weinan Zhou, Takeshi Seki, Yuya Sakuraba, Takahide Kubota, Keita Ito, Koki Takanashi, Enhancement of the anomalous Nernst effect in polycrystalline Co_2MnGa/AlN multilayers, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210316-20210319
 12. Takahide Kubota, Keita Ito, Rie Y. Umetsu, Koki Takanashi, Perpendicular magnetic anisotropy in Cu_2Sb -type (Mn-Cr)AlGe films: Mg-interface layer effect, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210316-20210319
 13. Mitsuhiro Matsuki, Takahide Kubota, Yohei Kota, Keita Ito, Koki Takanashi, Tetragonal strain and perpendicular magnetic anisotropy in $Mn_{2-\delta}CoGa_{1+\delta}$ thin films, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210316-20210319
 14. 松木充弘, 窪田崇秀, 小田洋平, 伊藤啓太, 高梨弘毅, ホイスラー合金 $Mn_{2-\delta}CoGa_{1+\delta}$ 薄膜の歪誘起垂直磁気異方性, 日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
 15. 伊藤啓太, 末益崇, 高梨弘毅, 放射光を用いた FeNi 窒化物薄膜および $L1_0$ -FeNi 規則合金薄膜の評価, 2020 年度 SPRUC ナノスピントロニクス研究会, オンライン, 20210326

【国際会議】

1. Gerrit E. W. Bauer, Transport of the order parameter in electric insulators, Tohoku Quantum Alliance x OIST Quantum Meeting, オンライン, 20201125
2. Takahide Kubota, Daichi Takano, Keita Ito, Koki Takanashi, Perpendicular magnetic anisotropy and crystal structure of $Mn_{2-\delta}CoGa_{1+\delta}$ inverse Heusler alloy films, IEEE International Magnetism Conference 2020, オンライン, 20200504-20200508
3. Yong Chang Lau, Zhenchao Wen, Keita Ito, Junichi Ieda, Tomohiro Taniguchi, Tomoko Sasaki, Takeshi Seki, Koki Takanashi, Origin of field-like torque enhancement with decreasing Co thickness in X/Co/Y (X, Y = Pt, Pd) metallic trilayers, IEEE International Magnetism Conference 2020, オンライン, 20200504-20200508
4. Keita Ito, Masahiro Hayashida, Takumi, Ichimura, Takahiro Nishio, Sho Goto, Hiroaki Kura, Tomoyuki Koganezawa, Masaki Mizuguchi, Yusuke Shimada, Toyohiko J. Konno, Hideto Yanagihara, Koki Takanashi, Epitaxial $L1_0$ -FeNi Films with a High Degree of Order and Uniaxial Magnetic Anisotropy Fabricated by a Denitriding Method, The 4th Symposium for the Core Research Cluster for Materials Science and the 3rd Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science, オンライン, 20201116-20201118
5. Takahide Kubota, Keita Ito, Rie Y. Umetsu, Masaki Mizuguchi, Koki Takanashi, Perpendicular magnetic anisotropy in Cu_2Sb -type (Mn-Cr)AlGe films: Layer

- thickness and adjacent layer dependence, 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, オンライン, 20201102-20201106
6. Keita Ito, Masahiro Hayashida, Hiroto Masuda, Takahiro Nishio, Sho Goto, Hiroaki Kura, Tomoyuki Koganezawa, Masaki Mizuguchi, Yusuke Shimada, Toyohiko J. Konno, Hideto Yanagihara, Koki Takanashi, High degree of order and uniaxial magnetic anisotropy of $L1_0$ -FeNi films fabricated by denitriding epitaxial FeNiN films, 65th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, オンライン, 20201102-20201106

2-2. イオンエネルギー材料研究部

構成員 教授：市坪 哲（兼），宮坂 等（兼），折茂 慎一（兼）
助 教：金 相侖（兼）
特任助教：李 弘毅（兼）

【2020(令和2)年度の成果概要】

1. リチウム蓄電池用圧延 Al 箔負極の開発（市坪・李グループ）

エネルギー・環境問題の解決に向け、高性能な蓄電デバイスの大規模運用は必要不可欠である。リチウム蓄電池に関して、現在の負極は炭素系材料が主流であるが、電池のさらなる高容量化のために、炭素系材料に比べて3~10倍のエネルギーを蓄えられるSi、SnやAlなどの合金系材料の実用化が期待されている。しかし、これらの材料は、多くのLi⁺イオンを取り込み大きなエネルギーを蓄えられる反面、充放電時に2~4倍も膨張収縮するため内部の電極構造が崩れやすく、実用化の課題となっていた。

本研究グループは住友化学株式会社と共同検討を行い、高純度アルミニウム箔の硬さを最適化することにより、一方向に合金成長させることを実現し、その結果、課題であった充放電時の体積膨縮に起因する構造劣化を回避できることを見いだした。これにより、圧延Al箔を負極として使用可能となり、従来の炭素系負極材料に比べ、電池製造のプロセスを大幅に簡素化できることから、製造工程における環境負荷の低減につながるとともに、高容量化や軽量化、低価格化なども期待できる。

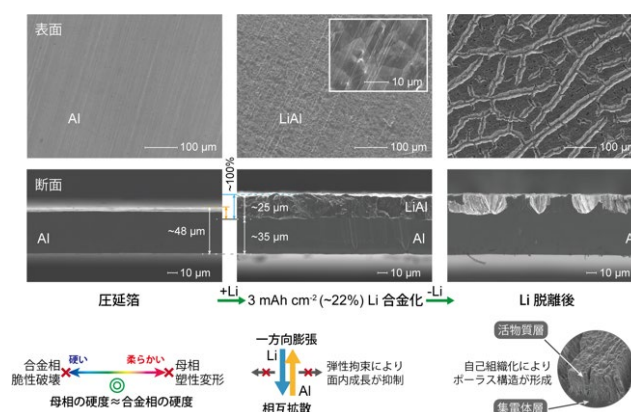


図1. 圧延 Al 箔の硬度の最適化により、充放電過程での体積変化による構造劣化が回避される。(Nat. Commun. 2020, 11,1584)

2. 室温で CO₂ を感知する Co(II) 錯体（宮坂グループ）

現代の社会的な環境・エネルギー問題の一つに、二酸化炭素 (CO₂) の存在がある。一方で、CO₂ は比較的不活性であるため、“CO₂ を感知してその情報を自ら発信する材料” はほとんど知られていない。我々は、熊本大学の速水真也教授のグループとの共同研究により、CO₂ を選択的に吸着してその状態をスピン状態として発信する孤立系 Co(II) 単核錯体を見出した。この CO₂ 吸着は、Co(II) の低スピン状態を安定化し、CO₂ 分圧により高スピン-低スピン変換の転移温度を変化させる。室温では、CO₂ 吸着によりほぼ高スピン状態と低スピン状態をスイッチすることが可能である。

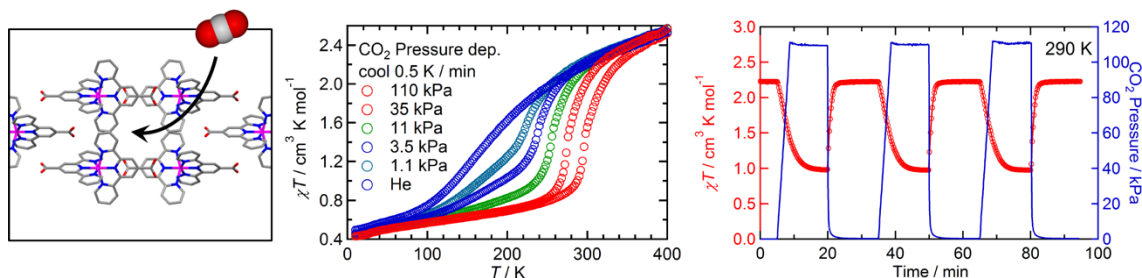


図2. 多孔性の孤立系 Co(II)単核錯体の構造、各 CO₂圧力下での磁化変化、及び 290 K における CO₂ 吸脱着（吸引および大気圧変化）によるスピン状態変化。

3. 錯体水素化物の超リチウムイオン伝導体の開発（折茂、金）

全固体二次電池の固体電解質への応用を目指し、錯体水素化物の新たなイオン伝導体の探索研究に取り組んだ。2020年度は、籠状クラスター型錯イオンを有するクロソ系錯体水素化物を主な研究対象とし、錯イオン[CB₉H₁₀]⁻と[B₁₂H₁₂]²⁻を有する錯体水素化物の固溶領域、固溶と構造相転移間の関係を調査するとともに、得られた試料のイオン伝導特性を評価した。その結果、[CB₉H₁₀]⁻の一部を[B₁₂H₁₂]²⁻に置換することで、Li(CB₉H₁₀)の無秩序化が促進され、それに伴って高速リチウムイオン伝導が誘起されることを明らかにした。また、合成した錯体水素化物リチウムイオン伝導体を固体電解質に実装した全固体二次電池を作製し、1時間で充電/放電可能な電流密度（1C）条件下での電池動作を実現した（図3）。また、2020年度「エネルギー材料センター研究基盤整備加速支援」により購入した高性能電気化学測定システムを用いて、充放電反応機構の解析にも取り組んでいる。

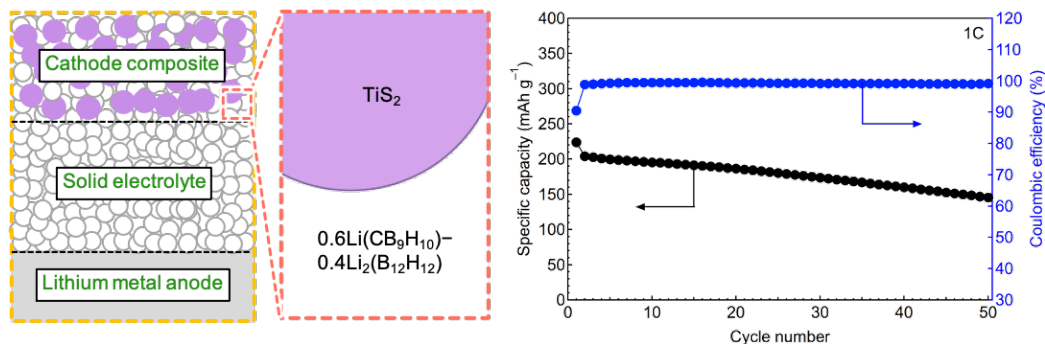


図3. 錯体水素化物リチウムイオン伝導体 0.6Li(CB₉H₁₀)-0.4Li₂(B₁₂H₁₂)を固体電解質に用いた全固体電池 Li-TiS₂全固体電池（左）の容量とクーロン効率のサイクル特性（右）。

【今後の計画】

- 圧延箔タイプの合金負極を Mg 蓄電池やデュアルカチオン電池へ適用する。
- 析出形態制御により dendrite free の金属負極を開発する。
- 高いエネルギー密度とサイクル寿命を有する酸化物正極材料を探索する。
- 環境・エネルギー問題に対峙する一課題として「ガス分子吸着と反応、物性制御」に焦点を当て、特に、CO₂ 選択的吸着と物性制御、CO₂ 電極分解反応、H₂ 吸着・吸蔵について重点的に研究を行う。
- 他の様々なクラスター型錯イオンを有する錯体水素化物において、錯イオンの共存化効果を調査。
- 錯イオンの原子置換による新構造の錯体水素化物の合成。

【論文リスト】

1. Hongyi Li, Takitaro Yamaguchi, Shingo Matsumoto, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Circumventing huge volume strain in alloy anodes of lithium batteries, *Nature Communications*, **11**, 1584 (2020)
2. Jun Zhang, Wataru Kosaka, Yasutaka Kitagawa, Hitoshi Miyasaka, A metal-organic framework that exhibits CO₂-induced transitions between paramagnetism and ferrimagnetism, *Nature Chemistry*, **13**, 191-199 (2021)
3. Sangryun Kim, Kazuaki Kisu, Shin-ichi Orimo, Stabilization of Superionic-Conducting High-Temperature Phase of Li(CB₉H₁₀) via Solid Solution Formation with Li₂(B₁₂H₁₂), *Crystals*, **11**, 330 (2021)
4. Tomoya Kawaguchi, Kazuya Tokuda, Seiya Okada, Makina Yabashi, Tetsu Ichitsubo, Noboru Yamada, Eiichiro Matsubara, Direct observation of elastic softening immediately after femtosecond-laser excitation in a phase-change material, *Physical Review B*, **101**, 6 (2020)
5. L. Resch, M. Luckabauer, N. Helthuis, N. L. Okamoto, T. Ichitsubo, R. Enzinger, W. Sprengel, R. Wuerschum, Search for vacancies in concentrated solid-solution alloys with fcc crystal structure, *PHYSICAL REVIEW MATERIALS*, **4**, 6 (2020)
6. Kohei Shimokawa, Tetsu Ichitsubo, Spinel-rocksalt transition as a key cathode reaction toward high-energy-density magnesium rechargeable batteries, *CURRENT OPINION IN ELECTROCHEMISTRY*, **21**, 93-99 (2020)
7. Hiroshi Tanimura, Shinji Watanabe, Tetsu Ichitsubo, Nonthermal Dynamics of Dielectric Functions in a Resonantly Bonded Photoexcited Material, *ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS*, **30**, 31 (2020)
8. Yi Shuang, Shogo Hatayama, Hiroshi Tanimura, Daisuke Ando, Tetsu Ichitsubo, Yuji Sutou, Nitrogen doping-induced local structure change in a Cr₂Ge₂Te₆ inverse resistance phase-change material, *MATERIALS ADVANCES*, **1**, 7, 2426-2432 (2020)
9. Norihiko L. Okamoto, Shuhei Kasatani, Martin Luckabauer, Masakazu Tane, Tetsu Ichitsubo, Effects of solute oxygen on kinetics of diffusionless isothermal omega transformation in beta-titanium alloys, *SCRIPTA MATERIALIA*, **188**, 88-91 (2020)
10. Norihiko L. Okamoto, Shuhei Kasatani, Martin Luckabauer, Robert Enzinger, Satoshi Tsutsui, Masakazu Tane, Tetsu Ichitsubo, Evolution of microstructure and variations in mechanical properties accompanied with diffusionless isothermal omega transformation in beta-titanium alloys, *PHYSICAL REVIEW MATERIALS*, **4**, 12 (2020)
11. Jian Chen, Kouji Taniguchi, Yoshihiro Sekine, Hitoshi Miyasaka, Electrochemical development of magnetic long-range correlations with T_c=128 K in a tetraoxolene-bridged Fe-based framework, *JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS*, **494**, 165818 (2020)
12. Jian Chen, Yoshihiro Sekine, Atsushi Okazawa, Hiroyasu Sato, Wataru Kosaka, Hitoshi Miyasaka, Chameleonic layered metal-organic frameworks with variable charge-ordered states triggered by temperature and guest molecules, *CHEMICAL SCIENCE*, **11**, 14, 3610-3618 (2020)
13. Manabu Nakaya, Wataru Kosaka, Hitoshi Miyasaka, Yuki Komatsumaru, Shogo Kawaguchi, Kuniyoshi Sugimoto, Yingjie Zhang, Masaaki Nakamura, Leonard F.

- Lindoy, Shinya Hayami, CO₂-Induced Spin-State Switching at Room Temperature in a Monomeric Cobalt(II) Complex with the Porous Nature, *ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION*, **59**, 26, 10658-10665 (2020)
14. Yoshinobu Kamakura, Arata Hikawa, Hirofumi Yoshikawa, Wataru Kosaka, Hitoshi Miyasaka, Daisuke Tanaka, Coordination distortion induced water adsorption in hydrophobic flexible metal-organic frameworks, *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, **56**, 64, 9106-9109 (2020)
 15. Yoshihiro Sekine, Jian Chen, Naoki Eguchi, Hitoshi Miyasaka, Fine tuning of intra-lattice electron transfers through site doping in tetraoxolene-bridged iron honeycomb layers, *CHEMICAL COMMUNICATIONS*, **56**, 74, 10867-10870(2020)
 16. Chihiro Kachi-Terajima, Tasuku Eiba, Rikako Ishii, Hitoshi Miyasaka, Yuta Kodama, Toshiaki Saito, Spin Ice-like Magnetic Relaxation of a Two-dimensional Network based on Manganese(III) Salen-type Single-Molecule Magnets, *ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION*, **59**, 49, 22048-22053 (2020)
 17. Po-Jung Huang, Hitoshi Miyasaka, Canting angle dependence of single-chain magnet behaviour in chirality-introduced antiferromagnetic chains of acetate-bridged manganese(III) salen-type complexes, *DALTON TRANSACTIONS*, **49**, 46, 16970-16978 (2020)
 18. Hiroki Fukunaga, Wataru Kosaka, Honoka Nemoto, Kouji Taniguchi, Shogo Kawaguchi, Kuniyoshi Sugimoto, Hitoshi Miyasaka, Magnetic Correlation Engineering in Spin-Sandwiched Layered Magnetic Frameworks, *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*, **26**, 70, 16755-16766 (2020)
 19. S. Kim, K. Harada, N. Toyama, H. Oguchi, K. Kisu, S. Orimo, Room temperature operation of all-solid-state battery using a *closo*-type complex hydride solid electrolyte and a LiCoO₂ cathode by interfacial modification, *Journal of Energy Chemistry*, **43**, 47-51 (2020)
 20. Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Toyoto Sato, Shin-ichi Orimo, Pseudorotating hydride complexes with high hydrogen coordination: A class of rotatable polyanions in solid matter, *APPLIED PHYSICS LETTERS*, **116**, 17, 173901(1-5) (2020)
 21. Kazuaki Kisu, Sangryun Kim, Munehiro Inukai, Hiroyuki Oguchi, Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo, Magnesium borohydride ammonia borane as a magnesium ionic conductor, *ACS APPLIED ENERGY MATERIALS*, **3**, 4, 3174-3179 (2020)
 22. R. Skoryunov, O.A. Babanova, A. Soloninin, A. Skripov, S. Orimo, Nuclear magnetic resonance study of atomic motion in the mixed borohydride-amide Li₂(BH₄)(NH₂), *Journal of Alloys and Compounds*, **823**, 153821(1-7) (2020)
 23. Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo, New functionalities of hydride complexes with high hydrogen coordination, *JOURNAL OF THE PHYSICAL SOCIETY OF JAPAN*, **89**, 5, 051010(1-8) (2020)
 24. S. Kim, K. Kisu, S. Takagi, H. Oguchi, S. Orimo, Complex hydride solid electrolytes of the Li(CB₉H₁₀)-Li(CB₁₁H₁₂) quasi-binary system: Relationship between the solid solution and phase transition, and the electrochemical properties, *ACS Applied Energy Materials*, **3**, 5, 4831-4839 (2020)
 25. H. Saitoh, A. Machida, R. Iizuka-Oku, T. Hattori, A. Sano-Furukawa, K. Funakoshi, T. Sato, S. Orimo, K. Aoki, Crystal and magnetic structures of double hexagonal close-packed iron deuteride, *SCIENTIFIC REPORTS*, **10**, 1, 9934(1-8) (2020)

26. H. Saitoh, A. Machida, T. Hattori, A.S. Furukawa, K. Funakoshi, T. Sato, S. Orimo, K. Aoki, Neutron diffraction study on the deuterium composition of nickel deuteride at high temperatures and high pressures, *Physica B*, **587**, 412153(1-6) (2020)
27. M. Hirscher, V.A. Yartys, M. Baricco, J.M.B. von Colbe, D. Blanchard, R.C. Bowman, Jr., D.P. Broom, C.E. Buckley, F. Chang, P. Chen, Y.W. Cho, J.-C. Crivello, F. Cuevas, W.I.F. David, P.E. de Jongh, R.V. Denys, M. Dornheim, M. Felderhoff, Y. Filinchuk, G.E. Froudakis, D.M. Grant, E.M. Gray, B.C. Hauback, T. He, T.D. Humphries, T.R. Jensen, S. Kim, Y. Kojima, M. Latroche, H.-W. Li, M.V. Lototskyy, J.W. Makepeace, K.T. Møller, L. Naheed, P. Ngene, D. Noréus, M.M. Nygård, S. Orimo, M. Paskevicius, L. Pasquini, D.B. Ravnsbæk, M.V. Sofianos, T.J. Udovic, T. Vegge, G.S. Walker, C.J. Webb, C. Weidenthaler, C. Zlotea, Materials for hydrogen-based energy storage—past, recent progress and future outlook, *Journal of Alloys and Compounds*, **827**, 153548(1-39) (2020)
28. A. El Kharbachi, J. Wind, A. Ruud, A.B. Høgset, M.M. Nygård, J. Zhang, M.H. Sørby, S. Kim, F. Cuevas, S. Orimo, M. Fichtner, M. Latroche, H. Fjellvåg, B.C. Hauback, Pseudo-ternary LiBH₄ center dot LiCl center dot P₂S₅ system as structurally disordered bulk electrolyte for all-solid-state lithium batteries, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **22**, 25, 13872-13879 (2020)
29. M. Naito, S. Kodaira, R. Ogawara, K. Tobita, Y. Someya, T. Kusumoto, H. Kusano, H. Kitamura, M. Koike, Y. Uchihori, M. Yamanaka, R. Mikoshiba, T. Endo, N. Kiyono, Y. Hagiwara, H. Kodama, S. Matsuo, Y. Takami, T. Sato, S. Orimo, Investigation of shielding material properties for effective space radiation protection, *Life Sciences in Space Research*, **26**, 69-76 (2020)
30. R. Shimizu, Y. Sasahara, I. Hamada, H. Oguchi, S. Ogura, T. Shirasawa, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira, S. Orimo, K. Fukutani, T. Hitosugi, Polarity reversal of the charge carrier in tetragonal TiH_x (x=1.6-2.0) at low temperatures, *Physical Review Research*, **2**, 3, 033467(1-9) (2020)
31. M. Sakata, M. Einaga, D. Meng, T. Sato, S. Orimo, K. Shimizu, Superconductivity of lanthanum hydride synthesized using AlH₃ as a hydrogen source, *Superconductor Science & Technology*, **33**, 11, 114004(1-6) (2020)
32. H. Saitoh, M. Morimoto, T. Watanuki, T. Sato, S. Takagi, S. Orimo, Hydrogenation reaction of Co₃Ti alloy under high pressure and high temperature, *International Journal Of Hydrogen Energy*, **45**, 58, 33675-33680 (2020)
33. K. Kisu, S. Kim, R. Yoshida, H. Oguchi, N. Toyama, S. Orimo, Microstructural analyses of all-solid-state Li-S batteries using LiBH₄-based solid electrolyte for prolonged cycle performance, *Journal of Energy Chemistry*, **50**, 424-429(2020)
34. T. Sato, T. Mochizuki, K. Ikeda, T. Honda, T. Otomo, H. Sagayama, H. Yang, W. Luo, L. Lombardo, A. Züttel, S. Takagi, T. Kono, S. Orimo, Crystal structural investigations for understanding the hydrogen storage properties of YMgNi₄ based alloys, *ACS Omega*, **5**, 48, 31192-31198 (2020)
35. M.S. Grewal, K. Kisu, S. Orimo, H. Yabu, Photo-crosslinked polymer electrolytes containing solvate ionic liquids: An approach to achieve both good mechanical and electrochemical performances for rechargeable lithium ion batteries, *Chemistry Letters*, **49**, 12, 1465-1469 (2020)

36. Sangryun Kim, Next-generation Rechargeable Batteries Using Hydride Lithium Superionic Conductor, *Materia Japan*, **59**, 8, 429-433 (2020)
37. 李 弘毅, 山口 滝太郎, 松本 慎吾, 星河 浩介, 熊谷 俊昭, 岡本 範彦, 市坪 哲, Circumventing huge volume strain in alloy anodes of lithium batteries, *Nature Communications*, **11**, 1584 (2020)

【国内会議】

1. 市坪 哲, 蓄電池の基礎と応用: リチウムイオン電池から最近の研究まで, 第 90 回東北大学金属材料研究所夏期講習会, オンライン, 20200804
2. 佐藤龍平, 佐藤豊人, 吉川誠司, 本田孝志, 大友季哉, 折茂慎一, 常行真司, Li(CB₉H₁₀)系の Li 輸送機構に関する分子動力学計算, 第 3 回 ハイドロジェノミクス研究会, オンライン, 20200820-20200821
3. 吉川誠司, 佐藤龍平, 齋藤寛之, 折茂慎一, 常行真司, 高圧合成された Ca-Al-H 系新構造の理論予測, 第 3 回 ハイドロジェノミクス研究会, オンライン, 20200820-20200821
4. 佐藤豊人, 池田一貴, 本田孝志, 大友季哉, H. Yang, W. Luo, A. Züttel, 高木成幸, 河野龍興, 折茂慎一, マグネシウムを含む金属間化合物の水素吸蔵過程での結晶構造の解明, 日本金属学会 2020 年秋期(第 167 回)講演大会, オンライン, 20200916-20200918
5. 齋藤寛之, 野牛政伸, 綿貫徹, 町田晃彦, 高木成幸, 折茂慎一, Al₁₃Ru₄合金の高温高圧水素化反応, 日本金属学会 2020 年秋期(第 167 回)講演大会, オンライン, 20200916-20200918
6. 内海伶那, 森本勝太, 齋藤寛之, 綿貫徹, 佐藤豊人, 高木成幸, 折茂慎一, Fe-Mo 合金の高温高圧水素化反応と bcc 相の回収, 日本金属学会 2020 年秋期(第 167 回)講演大会, オンライン, 20200916-20200918
7. 齋藤寛之, 野牛政伸, 町田晃彦, 綿貫徹, 佐藤豊人, 高木成幸, 折茂慎一, Al-Co 合金水素化物の高温高圧合成, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
8. 内海伶那, 森本勝太, 齋藤寛之, 綿貫徹, 佐藤豊人, 高木成幸, 折茂慎一, Fe-Mo 合金の高温高圧水素化反応の組成依存性, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
9. 高木成幸, 折茂 慎一, Li₅MoH₁₁における錯イオンの擬回転とリチウムイオン輸送, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
10. 金相侖, 木須一彰, 高木成幸, 折茂 慎一, Li(CB₉H₁₀)-Li(CB₁₁H₁₂)系錯体水素化物の合成と電気化学特性, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
11. 木須一彰, 金相侖, 犬飼宗弘, 大口裕之, 高木成幸, 折茂 慎一, 錯体水素化物マグネシウムイオン伝導体 Mg(BH₄)₂(NH₃BH₃)₂の電気化学特性, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319
12. 金相侖, 木須一彰, 松浦豊, 野口敬太, 野上玄器, 折茂慎一, Li(CB₉H₁₀)-Li(CB₁₁H₁₂)系固体電解質の合成, 水分安定性, 電気化学特性, 第 61 回電池討論会, オンライン, 20201118-20201120
13. 金相侖, 木須一彰, 高木成幸, 折茂慎一, Li(CB₉H₁₀)-Li(CB₁₁H₁₂)系錯体水素化物の合成と電気化学特性, 日本金属学会 2021 年春季(第 168 回)講演大会, オンライン, 20210316-20210319

14. 大政義典, 金相侖, 折茂慎一, 秋葉宙, 山室修, 水素クラスター物質 $\text{Li}(\text{C}_9\text{H}_{10})$ および $0.7\text{Li}(\text{C}_9\text{H}_{10})-0.3\text{Li}(\text{C}_{11}\text{H}_{12})$ におけるクラスター秩序化過程, 第3回 ハイドロジェノミクス研究会, オンライン, 20200821

【国際会議】

1. Tetsu Ichitsubo, Towards development of rechargeable storage batteries using Mg cations, 3rd International Symposium on Magnesium Batteries, オンライン, 20200908-20200909
2. Sangryun Kim, Complex hydride lithium superionic conductors for all-solid-state lithium-metal batteries, European Materials Research Society (E-MRS) 2020 Fall Meeting, 202009
3. S. Orimo, Advanced hydride research for energy device application, MSM-AIMR Joint Online Workshop 2020, オンライン, 20200824-20200828

2-3. 光エネルギー材料研究部

構成員 教授：藤原 航三
准教授：木口 賢紀 (兼), 岡本 範彦 (兼)
助教：前田健作 (兼)

【2020(令和2)年度の成果概要】

1. Si の融液成長メカニズムの基礎研究

太陽電池用 Si 多結晶インゴットの組織制御法を開発するためには、一方向凝固過程で多結晶組織がどのように形成されるのかを基礎的に理解する必要がある。Si 多結晶インゴット中には、しばしば、局所的に高密度な双晶粒界 (multiple-twin boundaries) が存在しているが、このようなマルチプルな双晶粒界の形成メカニズムは不明であった。本研究では、一方向凝固過程において、結晶粒界から連続的に双晶界面が形成される様子を観察することに成功した。

図1は、Si 結晶の一方向成長過程において、固液界面の結晶粒界部から連続的に双晶界面が発生する様子を観察した結果である。結晶の中央部に観察される結晶粒界 (大角粒界) は、結晶成長に伴いジグザグ状に発展しており、粒界の発展方向が周期的に変化していることがわかる。この大角粒界の発展方向が変化する周期に合わせて双晶界面が形成されている。固液界面の大角粒界部では、溝が形成されており、この溝部分では局所的な温度揺らぎにより、溝を形成しているファセット面の成長速度にも揺らぎが生じている。ファセット面の成長速度が増加する際に双晶界面が形成されることが明らかとなった。

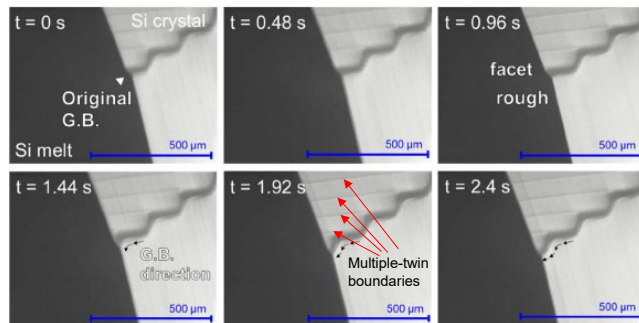


図1 一方向凝固過程において、連続的に双晶粒界が発生する様子。

2. 周期双晶構造を有する酸化物バルク結晶の成長技術開発

紫外線レーザーは、医療分野、半導体リソグラフィ、殺菌デバイスなど多くの分野でその利用が期待されている。半導体リソグラフィにおいては、解像度の向上のために波長 200nm 以下の光源開発が行われており、安全性に優れた全固体レーザーの実用化が期待されている。本研究では、優れた光学特性を有する四ホウ酸リチウム

(LB4) に周期双晶構造を導入することにより、疑似位相整合を利用した波長変換素子として利用することを試みた。

図2(a)は、独自に開発した結晶成長技術を用いて作製した、周期双晶構造を有する LB4 バルク結晶である。周期的に双晶界面を導入することにより、非線形光学定数の符号を周期

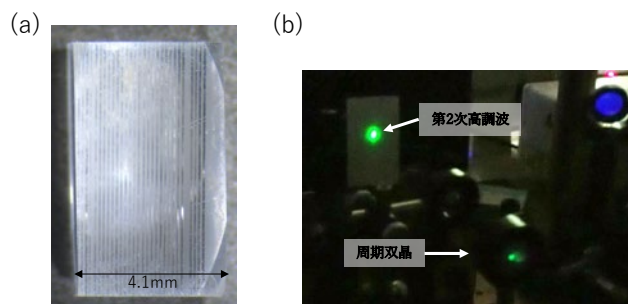


図2 (a)周期双晶構造を有する LB4 バルク結晶。(b)本結晶の波長変換機能の実証。

反転させている。図 2(b)は本結晶を波長変換素子として用いた結果である。Nd:YAG レーザ (波長 1064nm) を本結晶に照射することにより、第二次高調波である波長 532nm の緑色の光を目視できる強度で得られた。周期双晶間隔の微細化により、紫外・深紫外光用の素子への発展が期待される。

【今後の計画】

Si 多結晶の融液成長メカニズムに関する研究：引き続き、固液界面における結晶欠陥ダイナミクスの基礎的理解に注力する。

太陽電池用 Si バルク多結晶の成長技術開発：結晶欠陥の少ない Si バルク多結晶インゴットの成長技術開発を行う。

周期双晶構造を有する酸化物バルク結晶の成長技術開発：微細な周期双晶構造を有する LB4 結晶の成長技術開発を行う。

【論文リスト】

1. Keiji Shiga, Kensaku Maeda, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Effect of twin boundary formation on the growth rate of the GaSb{111} plane, *ACTA MATERIALIA*, **185**, 453-460 (2020)
2. Victor Lau, Kensaku Maeda, Kozo Fujiwara, Chung wen Lan, In situ observation of the solidification interface and grain boundary development of two silicon seeds with simultaneous measurement of temperature profile and undercooling, *Journal of Crystal Growth*, **532** (2020)
3. A. S. Alagar Nedunchezian, D. Sidharth, R. Rajkumar, N. Yalini Devi, K. Maeda, M. Arivanandhan, K. Fujiwara, G. Anbalaganb, R. Jayavel, Enhancing the thermoelectric power factor of nanostructured ZnCo₂O₄ by Bi substitution, *RSC Advances*, **10**, 18769-18775 (2020)
4. Kuan-Kan Hu, Kensaku Maeda, Keiji Shiga, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, In situ observation of multiple parallel (1 1 1) twin boundary formation from step-like grain boundary during Si solidification, *Appl. Phys. Express*, **13**, 105501 (2020)
5. H. Uchida, M. Okura, Y. Ito, T. Shiraishi, T. Kiguchi, T.J. Konno, H. Funakubo, Rapid processing of (K,Na)NbO₃ thick films by microwave-assisted hydrothermal deposition, *Jpn. J. Appl. Phys.*, (2020)
6. Takanori KIGUCHI, Takumi SHIMIZU, Takahisa SHIRAISHI, Toyohiko J. KONNO, Epitaxial growth mechanism of Pb(Zr,Ti)O₃ thin films on SrTiO₃ by chemical solution deposition via self-organized seed layer, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, **128**, 8, 501-511 (2020)
7. Takumi SHIMIZU, Takanori KIGUCHI, Takahisa SHIRAISHI, Toyohiko J. KONNO, Interface reaction between PbTiO₃ epitaxial thin films and La-doped SrTiO₃ (001) substrates through edge dislocations induced by 90° domain formation, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, **128**, 8, 492-500 (2020)
8. Y. Hamasaki, T. Katayama, S. Yasui, T. Shiraishi, A. Akama, T. Kiguchi, T. Taniyama, M. Itoh, Switchable third ScFeO₃ polar ferromagnet with YMnO₃-type structure, *Journal of Materials Chemistry C*, **8**, 4447-4452 (2020)
9. Hiroki Matsuo, Yuji Noguchi, Masaru Miyayama, Takanori Kiguchi, Toyohiko J. Konno, Enhanced photovoltaic effects in ferroelectric solid solution thin films with nanodomains, *Appl. Phys. Lett.*, **116**, 132901(1-4) (2020)

10. X. -F Gu, T. Furuhashi, T. Kiguchi, T. J. Konno, L. Chen, P. Yang, Strain self-accommodation during growth of long-period stacking ordered (LPSO) structures in Mg-Zn-Gd alloy, *Scripta Materialia*, **185**, 25-29 (2020)
11. Badari Narayana Rao, Shintaro Yasui, Yefei Han, Yosuke Hamasaki, Tsukasa Katayama, Takahisa Shiraishi, Takanori Kiguchi, Mitsuru Itoh, Redox-Based Multilevel Resistive Switching in AlFeO₃ Thin-Film Heterostructures, *ACS Applied Electronic Materials*, **2**, 4, 1065-1073 (2020)
12. In-Tae Bae, Shintaro Yasui, Tomohiro Ichinose, Mitsuru Itoh, Takahisa Shiraishi, Takanori Kiguchi, Hiroshi Naganuma, Growth mechanism and domain structure study on epitaxial BiFeO₃ film grown on (La_{0.3}Sr_{0.7})(Al_{0.65}Ta_{0.35})O₃, *Journal of Applied Physics*, **127**, 24, 245303 (2020)
13. Takahisa Shiraishi, Yuta Muto, Yoshiharu Ito, Takanori Kiguchi, Kazuhisa Sato, Masahiko Nishijima, Hidehiro Yasuda, Hiroshi Funakubo, Toyohiko J. Konno, Structural and electrical characterization of hydrothermally deposited piezoelectric (K,Na)(Nb,Ta)O₃ thick films, *JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE*, **55**, 21, 8829-8842 (2020)
14. Tomohiro Yamaguchi, Hiroki Nagai, Takanori Kiguchi, Nao Wakabayashi, Takuto Igawa, Toshimi Hitora, Takeyoshi Onuma, Tohru Honda, Mitsunobu Sato, Epitaxial mist chemical vapor deposition growth and characterization of Cu₃N films on (0001) α -Al₂O₃ substrates, *Applied Physics Express*, **13**, 7, 75505 (2020)
15. Tomohiro Yamaguchi, Subaru Takahashi, Takanori Kiguchi, Atsushi Sekiguchi, Kentaro Kaneko, Shizuo Fujita, Hiroki Nagai, Mitsunobu Sato, Takeyoshi Onuma, Tohru Honda, Impact of hydrochloric acid on the epitaxial growth of In₂O₃ films on (0001) α -Al₂O₃ substrates by mist CVD, *Applied Physics Express*, **13**, 7, 75504 (2020)
16. Kazuki Okamoto, Tomoaki Yamada, Kentaro Nakamura, Hidenori Takana, Osami Sakata, Mick Phillips, Takanori Kiguchi, Masahito Yoshino, Hiroshi Funakubo, Takanori Nagasaki, Enhanced intrinsic piezoelectric response in (001)-epitaxial single *c*-domain Pb(Zr,Ti)O₃ nanorods, *Applied Physics Letters*, **117**, 4, 42905 (2020)
17. T. Shiraishi, S. Suzuki, T. Kiguchi, T. J. Konno, Energy storage properties of epitaxially grown *x*CaZrO₃-(1-*x*)NaNbO₃ thin films prepared with chemical solution deposition method, *Journal of Applied Physics*, **128**, 4, 44102 (2020)
18. Hiroshi Uchida, Masaki Okura, Yoshiharu Ito, Takahisa Shiraishi, Takanori Kiguchi, Toyohiko J. Konno, Hiroshi Funakubo, Rapid deposition of (K,Na)NbO₃ thick films using microwave-assisted hydrothermal technique, *Japanese Journal of Applied Physics*, **59**, SP, SPPB02 (2020)
19. Yoshiharu ITO, Akinori TATEYAMA, Yoshiko NAKAMURA, Takao SHIMIZU, Minoru KUROSAWA, Hiroshi UCHIDA, Takahisa SHIRAIISHI, Takanori KIGUCHI, Toyohiko J. KONNO, Mutsuo ISHIKAWA, Nobuhiro KUMADA, Hiroshi FUNAKUBO, High yield preparation of (100)*c*-oriented (K,Na)NbO₃ thick films by hydrothermal method using amorphous niobium source, *Journal of the Ceramic Society of Japan*, **128**, 8, 512-517 (2020)
20. Akinori Tateyama, Yoshiharu Ito, Yoshiko Nakamura, Takao Shimizu, Yuichiro Orino, Minoru Kurosawa, Hiroshi Uchida, Takahisa Shiraishi, Takanori Kiguchi, Toyohiko J. Konno, Takeshi Yoshimura, Hiroshi Funakubo, Good piezoelectricity of self-polarized thick epitaxial (K,Na)NbO₃ films grown

- below the Curie temperature (240°C) using a hydrothermal method, *Applied Physics Letters*, **117**, 14, 142903 (2020)
21. L. Resch, M. Luckabauer, N. Helthuis, N. L. Okamoto, T. Ichitsubo, R. Enzinger, W. Sprengel, R. Würschum, Search for vacancies in concentrated solid-solution alloys with fcc crystal structure, *Physical Review Materials*, **4**, 060601(R) (1-5) (2020)
 22. Yukichika Hashizume, Masahiro Inomoto, Norihiko L. Okamoto, Hiroshi Takebayashi, Haruyuki Inui, Micropillar compression deformation of single crystals of the intermetallic compound Γ -Fe₄Zn₉, *Acta Materialia*, **199**, 514-522 (2020)
 23. Norihiko L. Okamoto, Shuhei Kasatani, Martin Luckabauer, Masakazu Tane, Tetsu Ichitsubo, Effects of solute oxygen on kinetics of diffusionless isothermal omega transformation in beta-titanium alloys, *SCRIPTA MATERIALIA*, **188**, 88-91 (2020)
 24. Hongyi Li, Takitaro Yamaguchi, Shingo Matsumoto, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Circumventing huge volume strain in alloy anodes of lithium batteries, *Nature Communications*, **11**, 1, 1584 (2020)
 25. Norihiko L. Okamoto, Shuhei Kasatani, Martin Luckabauer, Robert Enzinger, Satoshi Tsutsui, Masakazu Tane, Tetsu Ichitsubo, Evolution of microstructure and variations in mechanical properties accompanied with diffusionless isothermal omega transformation in beta-titanium alloys, *PHYSICAL REVIEW MATERIALS*, **4**, 12, 123603 (2020)
 26. Junpei T. Okada, Patrick H.L. Sit, Ryo Ishikawa, Takehiko Ishikawa, Jinfan Chen, Koji S. Nakayama, Kensaku Maeda, Yoshihiko Yokoyama, Yuki Watanabe, Paul François Paradis, Yasuhiro Watanabe, Susumu Nanao, Yuichi Ikuhara, Kaoru Kimura, Satoshi Uda, Phase relation between supercooled liquid and amorphous silicon, *Applied Physics Letters*, **116**, 9, (2020)
 27. 前田健作, 融液成長におけるマクロな成長界面形状変化の直接観察, *日本結晶成長学会誌*, **47**, 44290, 1-5(2020)

【国内会議】

1. 藤原航三, Si の固液界面現象に及ぼす結晶粒界の影響, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 20200908
2. 栗飯原 雅矢, 木口 賢紀, 白石 貴久, 今野 豊彦, 基板が PMN-PT エピタキシャル薄膜の結晶構造 に及ぼす影響, 日本顕微鏡学会第 76 回学術講演会, 紙上開催, 20200525
3. 白石 貴久, 木口 賢紀, 今野 豊彦, 熱処理によるアモルファス (Hf_{0.9}Ce_{0.1}) O₂ 薄膜の結晶相の変化, 日本顕微鏡学会第 76 回学術講演会, 紙上開催, 20200525
4. 大倉雅貴, 伊東良晴, 白石貴久, 木口賢紀, 今野豊彦, 舟窪 浩, 内田 寛, マイクロ波加熱式水熱合成プロセスによるニオブ酸カリウム基厚膜の高速堆積, 第 37 回強誘電体会議 (FMA37), 20200502
5. 横山晴香, 山口智広, 佐々木拓生, 大野颯一朗, 木口賢紀, 比留川大輝, 藤川誠司, 高橋正光, 尾沼猛儀, 本田徹, GaInN/GaN 成長時の格子緩和に対する Si アンチサーファクタントの効果, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 20200909
6. 大倉雅貴, 伊東良晴, 白石貴久, 木口賢紀, 今野豊彦, 舟窪 浩, 内田 寛, マイクロ波加熱式水熱プロセスにおけるニオブ酸カリウム基膜の堆積挙動の解析, 日本セ

- ラミックス協会電子材料部会第 40 回電子材料研究討論会, オンライン (つくば), 20201112
7. 大倉雅貴, 伊東良晴, 白石貴久, 木口賢紀, 今野豊彦, 舟窪 浩, 内田 寛, マイクロ波加熱式水熱合成によるニオブ酸カリウム膜堆積のプロセス低温化, 日本セラミックス協会電子材料部会第 40 回電子材料研究討論会, オンライン (つくば), 20201112
 8. 白石 貴久, 佐野 真太郎, 伊東 良晴, 舘山 明紀, 内田 寛, 木口 賢紀, 舟窪 浩, 今野 豊彦, 水熱法により作製した結晶構造および電気特性の評価, 日本セラミックス協会電子材料部会第 40 回電子材料研究討論会, オンライン (つくば), 20201112
 9. 宋俊東, 山田智明, 海老原洋平, 坂田修, 木口賢紀, 吉野正人, 長崎正雅, $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.4}\text{Ti}_{0.6})\text{O}_3/\text{Pb}(\text{Zr}_{0.6}\text{Ti}_{0.4})\text{O}_3$ 人工超格子膜の分極回転がもたらす圧電応答の増大, 日本セラミックス協会電子材料部会第 40 回電子材料研究討論会, オンライン (つくば), 20201112
 10. 栗飯原雅矢, 木口賢紀, 今野豊彦, PMN-PT エピタキシャル薄膜の結晶構造に及ぼす基板種の影響, 令和 2 年度 第 19 回 日本金属学会東北支部研究発表大会, オンライン (秋田大学), 20201120
 11. 佐野真太郎, 白石貴久, 木口賢紀, 今野豊彦, 水熱合成法を用いた Ta 置換 $(\text{K}, \text{Na})\text{NbO}_3$ 粉末の作製, 令和 2 年度 第 19 回 日本金属学会東北支部研究発表大会, オンライン (秋田大学), 20201120
 12. 栗飯原雅矢, 木口賢紀, 今野豊彦, PMN-PT エピタキシャル薄膜の結晶構造に及ぼす基板種の影響, 第 139 回金属材料研究所講演会, オンライン, 20201126
 13. 高橋 昂, 山口 智広, 木口 賢紀, 関口 敦, 金子 健太郎, 藤田 静雄, 永井 祐己, 佐藤 光史, 尾沼 猛儀, 本田 徹, Mist CVD 法における $(0001) \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板上 $\alpha\text{-In}_2\text{O}_3$ 成長に塩酸が与える影響, 応用物理学会 結晶工学分科会・電子材料若手交流会 (ISYSE) 主宰 第 3 回結晶工学×ISYSE 合同研究会, オンライン, 20201223
 14. 早川 優香, 大野 颯一郎, 山口 智広, 木口 賢紀, 高橋 昂, 横尾 浩和, 尾沼 猛儀, 本田 徹, TEM による Mist CVD 法 $(0001) \alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板上 $\alpha\text{-In}_2\text{O}_3$ の欠陥解析, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210316
 15. 横山晴香, 山口智広, 佐々木拓生, 大野颯一郎, 木口賢紀, 比留川大輝, 藤川誠司, 高橋正光, 尾沼猛儀, 本田徹, GaN 上 GaInN 膜成長初期の Si 層挿入数に対する格子緩和過程の変化, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210318
 16. 白石貴久, 木口賢紀, 今野豊彦, 舟窪浩, $0.1\text{CeO}_2\text{-}0.9\text{HfO}_2$ 膜の電気特性および圧電特性調査, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210319
 17. 白石貴久, 舟窪浩, 木口賢紀, 今野豊彦, 水熱合成 $(\text{K}, \text{Na}, \text{Li})\text{NbO}_3$ 厚膜における Li 置換効果, 日本セラミックス協会 2021 年年会, オンライン (大阪), 20210324
 18. 木口賢紀, 清水匠, 栗飯原雅矢, 白石貴久, 今野豊彦, 化学溶液堆積法による PZT 薄膜エピタキシャル成長における前駆状態の解析, 日本顕微鏡学会第 76 回学術講演会, 紙上開催, 20200525
 19. 木口賢紀, 栗飯原雅矢, 白石貴久, 今野豊彦, CSD 法により堆積した PZT 薄膜前駆状態の解析, 日本セラミックス協会電子材料部会第 40 回電子材料研究討論会, オンライン (つくば), 20201112
 20. 木口賢紀, 栗飯原雅矢, 渋谷直生, 白石貴久, 今野豊彦, CSD 法により堆積した PZT 薄膜のエピタキシャル成長における前駆体の構造, MRM Forum 2020, オンライン (横浜), 20201208
 21. 木口賢紀, 栗飯原雅矢, 渋谷直生, 白石貴久, 今野豊彦, STEM-EELS 法による CSD 法による $\text{Pb}(\text{Zr}, \text{Ti})\text{O}_3$ エピタキシャル成長メカニズムの解明, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会, オンライン, 20210319

22. 木口賢紀, 先端電子顕微鏡法を用いた強誘電体薄膜の材料組織解析, 日本セラミックス協会 2021 年年会, オンライン (大阪), 20210323

【国際会議】

1. Kozo Fujiwara, Morphology of Crystals in Melt Growth Processes, The 4th Symposium for The Core Research Cluster for Materials Science and the 3rd Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science, オンライン, 20201118
2. T. Yamaguchi, T. Sasaki, T. Kiguchi, S. Ohno, H. Hirukawa, T. Onuma, T. Honda, M. Takahashi, T. Araki, Y. Nanishi, In situ XRD RSM measurements in MBE growth of GaInN film with low-temperature GaInN buffer layer, International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN 2020), 20200800
3. S. Ohno, H. Hirukawa, R. Yoshida, T. Yamaguchi, T. Kiguchi, T. Araki, H. Hashimoto, T. Onuma, T. Honda, Formation and Annihilation of Stacking Faults in the growth of High Indium Content GaInN Film, International Workshop on Nitride Semiconductors (IWN 2020), 20200823
4. Tomohiro Yamaguchi, Oliver Bierwagen, Takanori Kiguchi, Yoshinao Kumagai, Mist CVD Growth of group III sesquioxide semiconductors, Virtual Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity, オンライン, 20210203-20210203
5. T. Yamaguchi, T. Nagata, S. Takahashi, T. Kiguchi, A. Sekiguchi, T. Onuma, T. Honda, K. Goto, Y. Kumagai, K. Kaneko, S. Fujita, Epitaxial mist chemical vapor deposition growth and characterization of α -In₂O₃ films on α -Al₂O₃ substrates, The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-8), オンライン, 20210302
6. T. Yamaguchi, T. Sasaki, T. Kiguchi, S. Ohno, H. Hirukawa, R. Yoshida, T. Onuma, T. Honda, M. Takahashi, T. Araki, Y. Nanishi, In situ XRD RSM measurements in MBE growth of GaInN film with low-temperature GaInN buffer layer, The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-8), オンライン, 20210302
7. Takanori Kiguchi, Yumiko Kodama, Yuichiro Hayasaka, Tomoyuki Tanikawa, Toyohiko J. Konno, Core structure of threading dislocations in GaN, The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (CGCT-8), オンライン, 20210301

2-4. 材料プロセス・社会実装研究部

構成員 教授：加藤 秀実（兼）， 特任教授：河野 龍興
 准教授：Rodion Vladimirovich Belosludov
 学術研究員：江口 和輝

【令和2年度の成果概要】

● 金属溶湯脱成分によるナノポーラス金属間化合物の開発と水素発生触媒への応用（加藤教授）

ナノポーラス材料は大きな比表面積、高い電気伝導率を有するバルク材料であり、電気化学デバイスの電極としての応用が期待される。Mo 基金属間化合物は、水素製造触媒として白金の代替品として有望視されてきたが、従来の脱成分技術では組成制御や結晶性の課題があり、ナノポーラス材料の開発は困難とされてきた。本研究では我々の独自技術である金属溶湯脱成分を用いて Mo 基金属間化合物(Co_7Mo_6 , Fe_7Mo_6)の開発とその水素発生触媒特性を明らかにすることを目的とした。Ni-(Mo, Fe, Co)前駆合金をMgに浸漬することで、ナノポーラス Co_7Mo_6 , Fe_7Mo_6 を得ることに成功した。得られたナノポーラス金属間化合物は数十ナノメートルの非常に微細なリガメントを有しており、金属間化合物の規則構造がポーラス構造粗大化の根本である表面拡散を抑制したと考えている。ナノポーラス Co_7Mo_6 は大きな比表面積によって、水素製造電気化学反応の触媒として優れた活性を発揮するとともに高い耐久性を有することが分かった。

● 再エネ出力変動に対応可能な水素製造システムモデルの開発（河野特任教授）

P2Gの中核である水電解水素製造技術に関し、再エネ出力変動に対応可能な水素製造システムモデルを確立すべく、水電解槽に求められる変動電力追従性能の評価を行った。

太陽光発電1MW、水電解槽1MW、蓄電池入出力1MWと設定し、水素 1Nm^3 製造時における CO_2 排出量 Z [$\text{kg-CO}_2/\text{Nm}^3\text{-H}_2$]が欧州 CeritifHy の低炭素水素の定義である $Z \leq 0.39$ を満たすよう再エネ水素製造モデルを構築した。

$$\text{CO}_2\text{フリー水素係数: } Z = \frac{\text{電解電力再エネ量}[\text{kWh}] \times \text{再エネ原単位}[\text{kg-CO}_2/\text{kWh}] + \text{電解電力系統量}[\text{kWh}] \times \text{系統原単位}[\text{kg-CO}_2/\text{kWh}]}{\text{電解電力量}[\text{kWh}] \times \text{水電解原単位}[\text{Nm}^3\text{-H}_2/\text{kWh}]}$$

上記制御において水電解槽への電力(kW)／電力量(kWh)の分配と水電解槽に要求される電力追従速度(kW/s)を変数とし、低炭素水素製造のためのアルゴリズム及び蓄電池容量(kWh)を最小化するアルゴリズムを開発した。図1では曇天時における太陽光発電と水電解追従特性について示している。曇天時では青線で示すように太陽光発電からの発電電力は変動が大きく、水電解槽へは赤線で示すような電力追従特性が求められる。なお変動が大きく電解槽での追従が不足する青線内の領域においては再エネからの電力を蓄電池へ分配することになる。

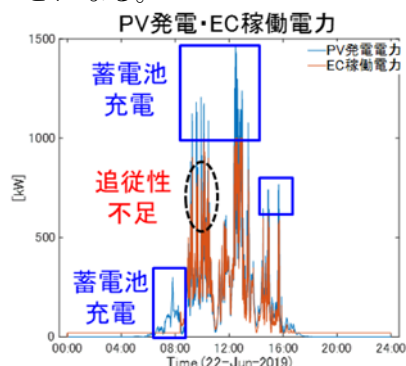


図1 再エネ変動と水電解追従特性

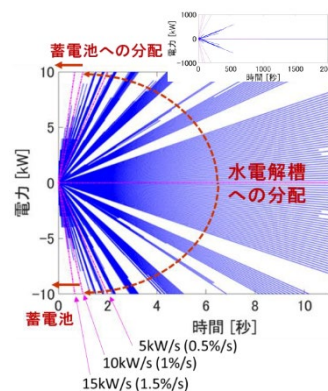


図2 変動における電力分配と電力追従特性

図2は再エネ変動における電力分配、水電解槽に求められる電力追従性能、蓄電池に求められる電力受入特性を表している。なお縦軸を電力(kW)、横軸を時間(s)とし、青線の長さは発生頻度を示している。再エネからの電力変動は青線の傾き(kW/s)で示されており、水電解は定格の0.1~5%/秒レベルの速度で追従させ、更に速い電力変動領域においては蓄電池へ分配するモデルを評価している。また水素製造量を増やすためには、蓄電池への電力分配/分配量をできる限り抑制する必要があり、 $Z \leq 0.39$ も実現するための蓄電池容量の最小化とシステムコスト評価も行っている。

● ナノポーラス材料の貯蔵分離物性関係の原子レベル解明 (Belosludov 准教授)

弱いゲスト-ホスト間の相互作用を含むクラスレートハイドレートの熱力学的物性算定を可能にするために独自の定式化を行った。 $C_3H_8^-$ 、 CH_4^- 、 CF_4^- 、 CO_2^- 、 Xe^- 、および N_2 -水和物の熱膨張特性を広い温度範囲で研究した。ハイドレート格子の熱膨張は、ケージ構造、ゲストのタイプとサイズ、および複数の占有を含むケージの占有に依存することを定量的に示した。格子力学計算結果により、ゲストとホストの相互作用のわずかな違いでさえ、水和物の構造特性、従ってその安定性に目に見える影響を与えることが明らかになった。ハイドレートの平衡状態を適切に説明するために、ゲストとの相互作用およびキャビティ内のゲストの動的挙動を詳細に考慮した計算を実施した。

実験グループと共同で、 $CH_4+HFC-245fa$ および $CH_4+HF0-1234ze$ (E) 2元系クラスレート水和物の相図と構造を研究した。計算結果によると、 $HFC-245fa$ および $HF0-1234ze$ (E) 分子は水フレームワークと水素結合を形成せず、静電およびvdW相互作用を介して相互作用する。2種のバイナリハイドレートシステムに対する計算相図は実験データと良い一致を示した。計算によると、 $HFC-245fa$ -水相互作用は、 $HFC-245fa$ 分子の2つの終端群にフッ素原子がより多く存在することにより、 $HF0-1234ze$ (E) の場合より強くなる。メタンの存在は $HFC-245fa$ - $HFC-245fa$ 相互作用を $HF0-1234ze$ (E) - $HF0-1234ze$ (E) よりも大幅に増大させる。 C_4H_{10} および2成分 $CH_4-C_4H_{10}$ 包接水和物の熱力学的特性を、ホスト格子中のゲスト分子の影響とゲスト-ホストおよびゲスト-ゲスト相互作用を考慮して計算した。ゲスト-ゲスト相互作用は、 $n-C_4H_{10}+CH_4$ および $iso-C_4H_{10}+CH_4$ の水和物では異なることが判明した。トランス- n -ブタン水和物は、線形トランス- n -ブタン分子と水フレームワークとの相互作用が弱く、ゲスト-ゲスト反発相互作用が寄与するため安定しない。イソ-ブタン水和物で最も強い相互作用が見られ、最も安定した水和物相を形成する。メタン添加により、熱力学的安定性の制御が可能となる。

【今後の計画】

- ナノポーラス金属間化合物の微細リガメントの起源を解明し、それに基づいてポーラス材の比表面積をさらに増大させる。また、 Co_7Mo_6 以外にも触媒として期待される Mo 基金属間化合物のナノポーラス化に挑戦し、水素発生触媒特性を向上させる。(加藤教授)
- ①電解槽側のリーク電流最小化とシステム側の蓄電池容量の最適化、②耐追従性の向上と値の明確化、③耐オーバーロード特性の向上と値の明確化について更なる細かなデータと考察も必要であり、最適モデルを構築していく。(河野特任教授)
- (1)各種 Si クラスレート構造の電子物性及び熱力学的特性を研究する。具体的内容としては、ゲスト原子及び Si フレームワークへのドーピングによる電子物性変化、及び Si クラスレートの安定性算定が含まれる。実験グループとの共同研究として実施する予定である。(2)クロロアルカンクラスレート水和物の原子構造、及びゲスト分布と温度圧力相図を研究する。実験グループとの共同研究として実施する予定である。(3)実験グループとの共同で、第一原理計算を用いたナノポーラス Mo 基合金の HER 反応を研究する。(Belosludov 准教授)

【論文リスト】

1. Soo Hyun Joo, Jae Wung Bae, Won Young Park, Yusuke Shimada, Takeshi Wada, Hyoung Seop Kim, Akira Takeuchi, Toyohiko J. Konno, Hidemi Kato, Ilya V. Okulov, Beating Thermal Coarsening in Nanoporous Materials via High-Entropy Design, *Advanced Materials*, **32**, 6, e1906160 (2020)
2. 河野龍興, 水素を利用する地産地消エネルギーシステム, *エネルギー・資源*, **41**, 1, 28-29 (2020)
3. Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Yulia Y. Bozhko, Kirill V. Gets, Oleg S. Subbotin, Yoshiyuki Kawazoe, Vladimir R. Belosludov, Lattice Dynamics Study of the Thermal Expansion of C_3H_8 -, CH_4 -, CF_4 -, CO_2 -, Xe -, and N_2 -Hydrates, *Energy & Fuels*, **34**, 10, 12771-12778 (2020)
4. Morgane Mokhtari, Christophe Le Burlot, Jannick Duchet-Rumeau, Eugénie Godet, Pierre Antoine Geslin, Sylvain Dancette, Takeshi Wada, Hidemi Kato, Eric Maire, Mechanical Properties of FeCr-Based Composite Materials Elaborated by Liquid Metal Dealloying towards Bioapplication, *Advanced Engineering Materials*, **22**, 12, 2000381 (2020)
5. A. A. Shtertser, D. K. Rybin, V. Yu Ulianitsky, W. Park, M. Datekyu, T. Wada, H. Kato, Characterization of nanoscale detonation carbon produced in a pulse gas-detonation device, *Diamond and Related Materials*, **101**, 107553 (2020)
6. Boris B. Bokhonov, Dina V. Dudina, Hidemi Kato, Takeshi Wada, Selective deposition of platinum hemispheres on the {100} facets of synthetic diamond, *Diamond and Related Materials*, **101**, 107620 (2020)
7. Vladislav Zadorozhnyy, Sergey V. Ketov, Takeshi Wada, Stefan Wurster, Vignesh Nayak, Dmitri V. Louzguine-Luzgin, Juergen Eckert, Hidemi Kato, Novel alpha plus beta Type Ti-Fe-Cu Alloys Containing Sn with Pertinent Mechanical Properties, *METALS*, **10**, 1 (2020)
8. Masakuni Ozawa, Atsuhiko Masuda, Maki Nakamura, Masatomo Hattori, Hidemi Kato, Shin-ichi Yamamura, Soot-combustion catalyst of Pd/ZrO₂ composites prepared from Zr₆₅Pd₃₅ amorphous alloy by oxidation treatment, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, **59**, 0, inpress (2020)
9. Soo Hyun Joo, Hidemi Kato, Transformation mechanisms and governing orientation relationships through selective dissolution of Ni via liquid metal dealloying from (FeCo)_xNi_{100-x} precursors, *Materials and Design*, **185**, 108271 (2020)
10. Y. Lu, J. Yamada, R. Miyata, H. Kato, K. Yoshimi, High-temperature mechanical behavior of B2-ordered Ti-Mo-Al alloys, *Intermetallics*, **117**, (2020)
11. Soo Hyun Joo, Kunio Yubuta, Hidemi Kato, Ordering kinetics of nanoporous FeCo during liquid metal dealloying and the development of nanofacets, *Scripta Materialia*, **177**, 38-43 (2020)
12. R. V. Belosludov, A. I. Oreshkin, S. I. Oreshkin, D. A. Muzychenko, H. Kato, D. V. Louzguine-Luzgin, The atomic structure of a bulk metallic glass resolved by scanning tunneling microscopy and ab-initio molecular dynamics simulation, *Journal of Alloys and Compounds*, **816**, (2020)
13. Chika Kamezawa, Tomokazu Numano, Yoshihiko Kawabata, Hiroyasu Kanetaka, Maiko Furuya, Kotone Yokota, Hidemi Kato, Akio Yoneyama, Kazuyuki Hyodo, Wataru Yashiro, X-ray elastography by visualizing propagating shear waves, *Applied Physics Express*, **13**, 4, 42004 (2020)

14. Morgane Mokhtari, Takeshi Wada, Christophe Le Bourlot, Jannick Duchet-Rumeau, Hidemi Kato, Eric Maire, Nicolas Mary, Corrosion resistance of porous ferritic stainless steel produced by liquid metal dealloying of Incoloy 800, *Corrosion Science*, **166**, (2020)
15. Adit Sharma, Alexey Kopylov, Mikhail Zadorozhnyy, Andrei Stepashkin, Vera Kudelkina, Jun Qiang Wang, Sergey Ketov, Margarita Churyukanova, Dmitri Louzguine-Luzgin, Baran Sarac, Jürgen Eckert, Sergey Kaloshkin, Vladislav Zadorozhnyy, Hidemi Kato, Mg-based metallic glass-polymer composites: Investigation of structure, thermal properties, and biocompatibility, *Metals*, **10**, 7, 1-14 (2020)
16. Y. Lu, M. Watanabe, R. Miyata, J. Nakamura, J. Yamada, H. Kato, K. Yoshimi, Microstructures and mechanical properties of TiC-particulate-reinforced Ti-Mo-Al intermetallic matrix composites, *Materials Science and Engineering A*, **790**, 139523 (2020)
17. Ilya Vladimirovich Okulov, Soo-Hyun Joo, Artem Vladimirovich Okulov, Alexey Sergeevich Volegov, Bérengère Luthringer, Regine Willumeit-Römer, Laichang Zhang, Lutz Mädler, Jürgen Eckert, Hidemi Kato, Surface Functionalization of Biomedical Ti-6Al-7Nb Alloy by Liquid Metal Dealloying., *Nanomaterials (Basel, Switzerland)*, **10**, 8 (2020)
18. Soo Hyun Joo, Hidemi Kato, Effect of dealloying rate on transformation behavior during liquid metal dealloying, *Journal of Alloys and Compounds*, **831**, (2020)
19. Won Young Park, Takeshi Wada, Soo Hyun Joo, Jiuhui Han, Hidemi Kato, Novel hierarchical nanoporous graphene nanoplatelets with excellent rate capabilities produced via self-templating liquid metal dealloying, *Materials Today Communications*, **24**, (2020)
20. Wataru Yashiro, Xiaoyu Liang, Wolfgang Voegeli, Takeshi Wada, Hidemi Kato, Kentaro Kajiwara, Fabrication of multi-blade crystals for hard-X-ray multi-beam imaging system, *JAPANESE JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, **59**, 9, (2020)
21. Hai Long Yi, Daixiu Wei, Yingchen Wang, Liqiang Wang, Ming Yang Fang, Kang Yang, Hidemi Kato, Hot deformation and dynamic recrystallization behavior of CoCrNi and (CoCrNi)₉₄Ti₃Al₃ medium entropy alloys, *Metals*, **10**, 10, 1-14 (2020)
22. Artem Vladimirovich Okulov, Soo Hyun Joo, Hyoung Seop Kim, Hidemi Kato, Ilya Vladimirovich Okulov, Nanoporous high-entropy alloy by liquid metal dealloying, *Metals*, **10**, 10, 1-7 (2020)
23. Y. Q. Zeng, J. S. Yu, Y. Tian, A. Hirata, T. Fujita, X. H. Zhang, N. Nishiyama, H. Kato, J. Q. Jiang, A. Inoue, M. W. Chen, Improving glass forming ability of off-eutectic metallic glass formers by manipulating primary crystallization reactions, *Acta Materialia*, **200**, 710-719 (2020)
24. Yeon Beom Jeong, Hee Ra Jo, Hae Jin Park, Hidemi Kato, Ki Buem Kim, Mechanical properties and microstructural change in (Cu-Fe) immiscible metal matrix composite: Effect of Mg on secondary phase separation, *JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY-JMR&T*, **9**, 6, 15989-15995 (2020)
25. Aléthéa Liens, Benoît Ter-Ovanessian, Nicolas Courtois, Damien Fabregue, Takeshi Wada, Hidemi Kato, Jérôme Chevalier, Effect of alloying elements on the microstructure and corrosion behavior of TiZr-based bulk metallic glasses, *Corrosion Science*, **177**, (2020)

26. Toyoto Sato, Tomohiro Mochizuki, Kazutaka Ikeda, Takashi Honda, Toshiya Otomo, Hajime Sagayama, Heena Yang, Wen Luo, Loris Lombardo, Andreas Züttel, Shigeyuki Takagi, Tatsuoki Kono, Shin-ichi Orimo, Crystal Structural Investigations for Understanding the Hydrogen Storage Properties of YMgNi₄-Based Alloys, *ACS Omega*, **5**, 48, 31192–31198 (2020)
27. K. V. Gets, V. R. Belosludov, R. K. Zhdanov, Yu. Yu. Bozhko, R. V. Belosludov, O. S. Subbotin, N. Marashov, and Y. Kawazoe, Transformation of hydrogen bond network during the CO₂ clathrate hydrate dissociation, *Applied Surface Science*, **499**, 143644(1–7) (2020)
28. Haruhiko Morito, Syouta Shibano, Takahiro Yamada, Takuji Ikeda, Masami Terauchi, Rodion V. Belosludov, Hisanori Yamane, Synthesis and electrical conductivity of Na₃B₂₀, *Solid State Sciences*, **102**, 106166(1–5) (2020)
29. Igor Dmitruk, Rodion V. Belosludov, Andriy Dmytruk, Yasuto Noda, Yuri Barnakov, Yeon-Su Park, Atsuo Kasuya, Experimental and Computational Studies of the Structure of CdSe Magic-Size Clusters, *The Journal of Physical Chemistry A*, **124**, 17, 3398–3406 (2020)
30. D. V. Louzguine-Luzgin, K. Georgarakis, J. Andrieux, L. Hennem, T. Morishita, K. Nishio and R. Belosludov, An atomistic study of the structural changes in a Zr-Cu-Ni-Al glass-forming liquid on vitrification monitored in-situ by X-ray diffraction and molecular dynamics simulation, *Intermetallics*, **122**, 106795(1–8) (2020)
31. Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Kirill V. Gets, Yulia Yu. Bozhko, Vladimir R. Belosludov, Y. Kawazoe, Role of Methane as a Second Guest Component in Thermodynamic Stability and Isomer Selectivity of Butane Clathrate Hydrates, *The Journal of Physical Chemistry C*, **124**, 34, 18474–18481 (2020)
32. Masamichi Kodera, Tomoyuki Matsueda, Rodion V. Belosludov, Ravil K. Zhdanov, Vladimir R. Belosludov, Satoshi Takeya, Saman Alavi, Ryo Ohmura, Physical Properties and Characterization of the Binary Clathrate Hydrate with Methane + 1,1,1,3,3-Pentafluoropropane (HFC-245fa) + Water, *The Journal of Physical Chemistry C*, **124**, 38, 20736–20745 (2020)
33. Vladimir Belosludov, Kirill Gets, Ravil Zhdanov, Valery Malinovsky, Yulia Bozhko, Rodion Belosludov, Nikolay Surovtsev, Oleg Subbotin, Yoshiyuki Kawazoe, The nano-structural inhomogeneity of dynamic hydrogen bond network of TIP4P/2005 water, *Scientific Reports*, **10**, 1, 106795(1–13) (2020)

【国内会議】

1. 加藤秀実, ハイエントロピー効果に基づく新材料と新機能の探査, 日本金属学会 2020 年秋期(第 167 回)講演大会, オンライン, 20200915–20200918
2. 加藤秀実, 金属液体中での脱成分現象を利用したポラス炭素薄膜の作製とその特性, 化学系学協会東北大会, オンライン, 20200927
3. 加藤秀実, 脱成分法を用いたチタンの共連続ポラスおよび複合材料化, 日本鉄鋼協会 令和 2 年度チタンフォーラム第 1 回研究発表会、良好な地球環境を継続的に維持するためのチタンとその合金の開発 ～ チタン系ハイエントロピー合金の現状と展望 ～, オンライン, 20210129
4. 河野龍興, アフターコロナのグリーンリカバリー ～2050 年温室ガス実質ゼロへ～, 令和 2 年度 低炭素水素の利活用拡大に向けた自治体連絡会議, オンライン, 20201130

5. 河野龍興, 防災対応自立型再エネ水素エネルギーシステムの開発, 第 40 回水素エネルギー協会大会, ハイブリッド (東京), 20201203

【国際会議】

1. Tatsuoki KONO, Hydrogen energy system by using renewable energies, French-Japanese Workshop on Hydrogen 2020, オンライン, 20201013
2. Rodion V. Belosludov, Theoretical study on functional defects and dopants in carbon-based nanomaterials, 21st International Union of Materials Research Societies- International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2020) & MRS-Thailand 2021, オンライン, 20210225

3. 令和2(2020)年度エネルギー材料 萌芽研究助成成果概要

3-1. 実施課題名：低エネルギー気体分離を実現する多孔性分子磁石骨格の創製

構成員 高坂 亘 (金属材料研究所錯体物性化学研究部門・助教)
佐藤 豊人 (金属材料研究所水素機能材料工学研究部門・助教)

1. 目的

金属有機複合骨格 (Metal-Organic Framework, MOF) などの名前で知られる分子性多孔性材料は、様々なホスト・ゲスト相互作用や、構造の柔軟性に基づく「分子ふるい効果」を設計できるのが最大の利点である。そこで我々は、ガス分離・精製を実現する材料として、柔軟な構造・電子・スピン状態を有する「多孔性分子磁石骨格」を新たに提案する。我々の研究グループではこれまでに、多くの多孔性分子磁石を合成し、その磁気・電気物性について検討してきた。一方でこれらの源である「骨格の電荷状態やスピンの自由度」は、選択的ガス吸着能・分離能を誘起する駆動力としても働くと期待され、また大きな内部磁場の効果も期待される。そこで本研究では、これらの多孔性分子磁石骨格の混合ガス吸着能・ガス分離能について検討することを目的とする。さらに、本材料がガス吸着に伴い、磁性や伝導性を大きく変化させる点を活かし、ガス分離の状況を磁気・電気信号としてモニター可能なシステムの提案に繋げることを目指す。

2. 主要成果の概要

2020 年度には、混合ガス流通下における磁気物性測定系を構築し、多孔性分子磁石の磁気物性が混合ガスの成分比に応じて変化することを明らかにした。さらに、吸着ガスの組成分析系 (脱着ガス捕集系およびガス分析系) の整備を行った。

- 化合物 1 の 1 の純ガス下における等温吸着線より、1 は O_2 に対して選択的なガス吸着特性を示すことが分かった。従って、 N_2/O_2 混合ガスを当初の分離ターゲットに定めた。 N_2/O_2 混合ガス下、120 K にて吸着平衡に到達させたのち測定された磁化温度曲線 (外部磁場 100 Oe) では、既報通り、1 は N_2 下では 90 K でフェリ磁性相、 O_2 下では 98 K で反強磁性相へと転移する。50% N_2 下での挙動は純 O_2 下での挙動に等しく、 O_2 が選択的に吸着されていることを示唆する。 N_2 割合の増加につれ、磁気挙動はフェリ磁性の特徴を強く示すようになるが、90% N_2 下においても、吸着 O_2 に特徴的な低温部での磁化の増大が観測された (図 2)。
- 吸着ガスの組成分析を行うため、クライオスタットとガスクロマトグラフィーを組み合わせた測定系を立ち上げた。 N_2/O_2 ガスは、その構成成分のどちらも空気中に多量に存在するため、漏れ込みの極めて少ないガス捕集系が必要であり、現在測定系の改良を行っている。また、ガス下ラマン測定についても、温度制御とガス導入可能な測定系を構築した。一方で、照射レーザーの波長によっては吸着ガスのラマン散乱が検出されないという問題が新たに発覚しており、現在検討を進めている。

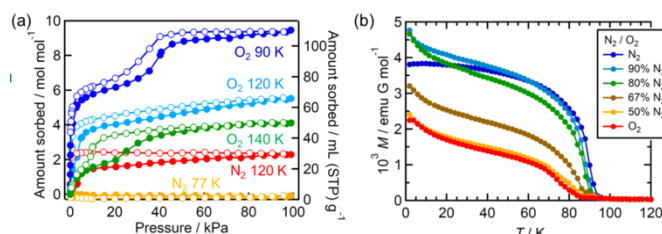


図 2. (a) 化合物 1 の純ガス下における吸着等温線 (● 吸着過程, ○ 脱着過程)
(b) N_2/O_2 混合ガス下における磁化-温度曲線 (外部磁場 100 Oe)

3. 成果公表状況

高坂亘、佐藤豊人、低エネルギー気体分離を実現する多孔性分子磁石骨格の創製、第 140 回 東北大学金属材料研究所講演会、2021 年 5 月 26 日

3-2. 実施課題名：高炭素マルテンサイト鋼の低温焼戻し挙動におよぼす合金元素添加の影響解明

構成員 張 咏杰 (金属材料研究所金属組織制御学研究部門・助教)
魏 代修 (金属材料研究所学際・国際的高度人材育成ライフイノベーション
マテリアル創製共同研究プロジェクト・特任助教)

1. 目的

本研究の目的は、高炭素鋼を研究対象として、マルテンサイトの低温焼戻し時に起こる反応を理解し、鉄鋼材料に欠かせない合金元素添加の影響を解明することである。また、その知見を活用して実用のマルテンサイト鋼の特性改善と省エネルギー効果に繋ぐ。

本研究では三次元アトムプローブ (3DAP) も併用して溶質原子の動きによる化学組成の変化を評価する。マルテンサイトの焼戻しは古い研究テーマではあるが、近年実用鋼として需要の増加につれて国内外で再び注目が集まっている。合金添加の影響について単発的な研究が多いが、本研究では複数の元素を系統的に調査することで、統一的な理解を目指す。

2. 主要成果の概要

- 各合金の低温焼戻しにおける組織変化および物性変化を、10°C/min の連続昇温で調査した。合金元素が添加されていないベース材 (Fe-0.8mass%C) では、焼戻し第一段階の終了時に相当する 200°C まで加熱した時、3DAP 測定で得られた C の原子マップでは線状の濃化領域が見られた。TEM の制限視野電子回折図形には、準安定な η/ϵ 炭化物に対応する回折スポットが観察され、その暗視野像より η/ϵ 炭化物粒子が転位線上に析出していることが確認された。
- ベース材を焼戻し第二・第三段階に相当する 270°C まで加熱した後、セメンタイトの析出が TEM 観察で確認された。示差走査熱量測定 DSC や熱膨張測定で得られた、各合金元素 (Mn, Si, Cr, Al) を 2at% で添加した合金の連続昇温時の発熱曲線と熱膨張係数曲線では、各反応の kinetics を表すピーク温度がよく一致していることが確認された。第一段階の準安定炭化物析出について、各合金元素の遅延効果の大きさは $Si < Cr = Mn < Al$ の順になっており、合金元素の原子サイズによるひずみの効果で反応の律速過程である C の拡散が遅延されることが原因である。また、第二・第三段階の残留オーステナイトの分解とセメンタイトの析出に対する遅延効果の大きさは $Mn = Cr < Al < Si$ であり、オーステナイトとセメンタイトの安定性におよぼす合金元素の影響の相乗効果によるものであることが明らかとなった。

4. 新聞発表等

4-1. プレスリリース

【スピンエネルギー材料研究部】

1. コバルトと酸化マグネシウムからなる グラニューラー材料で熱電変換効率が変わ化 熱電変換デバイスの高効率化実現へ道筋
2020年 4月27日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20200427_01web_cobalt.pdf
2. 巨大なスピンホール効果を示す非平衡銅合金を発見 ～低消費電力スピノービトロニクス素子へ道～
2020年10月15日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20201013_02web_spin.pdf
3. カゴメ格子の極薄ナノ結晶でも安定な強磁性 磁性ワイル半金属の起源解明に前進
2021年 2月19日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-_press20210217_01web_kagome.pdf

【イオンエネルギー材料研究部】

1. 二酸化炭素を吸着してスピン状態を変える 金属錯体の合成に成功！ ー新たな金属錯体型ガスセンサーの開発へ期待ー
2020年 4月16日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20200416_02web_CO2.pdf
2. 多数の水素からなるクラスターの“擬回転”を利用した 室温超イオン伝導の新たな発見原理を確立
2020年 4月22日
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20200423_01_H3.pdf
3. 東北大学と住友化学、アルミニウム負極の課題であった 充放電時の劣化の回避につながる新しい機構を解明 ～リチウムイオン二次電池の高性能化につながる新しい負極の実現へ～
2020年 4月27日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20200427_02web2_TUSC.pdf
4. 光励起された半導体の非熱的過程の寿命観測に成功 超高速作動光メモリの原理解明に期待
2020年 6月 8日
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20200604_01web_hikari.pdf

5. 二酸化炭素の吸脱着による磁石のON-OFF制御に成功“二酸化炭素磁気センサーへ道筋”
2020年12月 1日
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv_press20201201_01web_mof.pdf
6. 【世界初】高性能マグネシウム蓄電池の正極開発に道 安全・安価・高エネルギー密度の次世代蓄電池の実現に向け大きく前進
2021年 1月19日
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv_press20210118_01web_mag.pdf
7. 結晶のキラリティ制御で向きが反転する光電流を発見 光スピントロニクスへの応用に期待
2021年 3月24日
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv_press20210324_01web_chira.pdf

【光エネルギー材料研究部】

1. 高電圧処理不要で高い性能を示す圧電体膜の低温作製に成功 —高性能の圧力・加速度センサーや、振動発電の実現に期待—
2020年 10月 7日
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv_press20201002_02web_denatu.pdf

4-2. 新聞等掲載状況

(2021年8月31日調べ)

【スピンエネルギー材料研究部】

1. 日刊工業新聞 2020年10月15日 銅イリジウム合金に巨大スピンホール効果 東北大など発見

【イオンエネルギー材料研究部】

1. 日刊産業新聞 2020年 4月27日 東北大、住化LIB負極劣化回避へ
2. 株式新聞 2020年 4月27日 住友化学、東北大学とリチウムイオン二次電池の高容量化に向けた研究で新しい機構を解明
3. 日刊工業新聞 2020年 4月28日 リチウム電池の劣化を抑える 東北大学と住化、アルミ負極を開発
4. 化学工業日報 2020年 4月28日 住友化学負極材参入へ 高純度アルミ箔で一体型
5. 日刊鉄鋼新聞 2020年 4月28日 リチウム電池の負極材、住友化学と東北大学が新機構発見。高純度アルミ箔で高性能化
6. 財政新聞 2020年 4月28日 最適な硬さのアルミニウム箔でリチウムイオン電池を高性能化 東北大など
7. 電波新聞 2020年 5月 1日 東北大金材研と住友化学がアルミ負極で充放電時の劣化を回避する機構解明

- | | | | |
|-----|---------|-------------|--------------------------------------|
| 8. | 日刊自動車新聞 | 2020年 5月13日 | 東北大学と住友化学、アルミ負極材課題解決へ LIB高性能化に寄与 |
| 9. | 日本経済新聞 | 2020年 6月 2日 | 住友化学、負極材に参入 |
| 10. | 河北新報 | 2020年 6月10日 | 若手研究者11人表彰 インコス財団 |
| 11. | 電波新聞 | 2020年 6月18日 | 【新技術】東北大金材研が光励起されたデバイスの非熱的過程の寿命観測に成功 |
| 12. | 電波新聞 | 2021年 1月22日 | 東北大学金材研などMg蓄電池高性能化実現へ 新規正極材料、開発に道 |
| 13. | 日刊自動車新聞 | 2021年 1月25日 | 東北大研究グループ、Mg蓄電池高性能化へ新たな指針 |

【材料プロセス・社会実装研究部】

- | | | | |
|----|--------------|-------------|---------------------------------------|
| 1. | エネルギーレビュー | 2020年 7月20日 | 随筆:アフターコロナのグリーンリカバリー |
| 2. | りらく | 2020年 9月号 | あたらしい生活、あたらしいエネルギー！
宮城に水素社会がやって来た！ |
| 3. | みちの | 2021年 3月 8日 | 「水素エネルギーシステム」によって新しい社会のあり方を描きたい。 |
| 4. | BS日テレ 深層NEWS | 2021年 3月18日 | 脱炭素の“切り札”水素 水素争奪戦と覇権行方 |

5. 外部研究資金

5-1. 科学研究費補助金

【スピンエネルギー材料研究部】

高梨 弘毅 金属人工格子ルネサンス	基盤研究 (S)	期間：201806-202303	代表者
BAUER, Gerrit E.-W. Magnon Chemistry	基盤研究 (A)	期間：201904-202303	代表者
水口 将輝 ナノ超構造体を基盤とした革新的なナノスピнкаロリトロニクス機能の創出	基盤研究 (A)	期間：201704-202103	代表者
水口 将輝 スピнкаロリトロニクスを基軸とした高効率テラヘルツ波発生機能の開拓	その他	期間：201902-202101	代表者

【イオンエネルギー材料研究部】

市坪 哲 リチウムイオンと多価イオンが奏でるデュアルイオン蓄電池に向けた新学理の構築	基盤研究 (S)	期間：201806-202303	代表者
市坪 哲 フェムト秒レーザー励起による相転移歪を有する結晶間の超高速相変化機構の確立	挑戦的研究 (萌芽)	期間：202007-202203	代表者
宮坂 等 環境応答型多孔性磁石を用いた多重情報変換システムの創製	基盤研究 (A)	期間：202004-202403	代表者
宮坂 等 光と物質の一体的量子動力学が生み出す新しい光誘起協同現象物質開拓への挑戦	特別推進研究	期間：201804-202303	分担者
折茂 慎一 高密度水素による超機能材料の合成	新学術領域研究	期間：201806-202303	代表者
折茂 慎一 ハイドロジェノミクスの研究推進	新学術領域研究	期間：201806-202303	代表者
金 相侖 錯イオンの機能性に基づく水素化物固体電解質の新規物性開拓	若手研究	期間：201904-202103	代表者
李 弘毅 Li-Mgデュアルカチオン電池の高性能化に向けた正極材料の物質設計	研究活動スタート支援	期間：202009-202203	代表者

【光エネルギー材料研究部】

木口 賢紀 構造傾斜領域の創出によるリラクサー薄膜のドメインエンジニアリング	基盤研究 (B)	期間：201904-202203	代表者
木口 賢紀 窒化物および酸化物半導体の局所電子状態・光学特性に及ぼす弾性場の影響	新学術領域研究	期間：201904-202103	代表者
岡本 範彦 局在フォノンエネルギー準位と熱輸送特性の相関理解に基づく熱伝導制御デバイスの創出	基盤研究 (B)	期間：202004-202303	代表者

前田 健作 基盤研究(C) 期間：202004-202303 代表者
半導体シリコンの粒界性格を制御した結晶成長過程の直接観察

【材料プロセス・社会実装研究部】

加藤 秀実 新学術領域研究 期間：201807-202303 代表者
ハイエントロピー効果に基づく新材料創製と新機能創出

加藤 秀実 特別研究員奨励費 期間：201811-202010 代表者
Mg-希土類結晶および非晶質合金の作製とその力学特性調査

河野 龍興 基盤研究(C) 期間：201904-202203 代表者
積層型超格子構造を有するLaMgNi系合金における水素吸蔵特性の解明

5-2. 科学研究費補助金以外の外部資金

【スピンエネルギー材料研究部】

高梨 弘毅 その他受託研究費 期間：201210-202202 分担者
ネオジム焼結磁石を超える新規高性能磁石の開発

高梨 弘毅 その他受託研究費 期間：202004-202203 代表者
インドー日本 スピントロニクスにおける界面現象研究会

水口 将輝 JST戦略的創造研究推進事業(CREST) 期間：201510-202103 代表者
ナノ超空間を利用した熱・スピン・電界交差相関による高効率エネルギー変換材料の創製

【イオンエネルギー材料研究部】

市坪 哲 JST戦略的創造研究推進事業(ALCA) 期間：201110- 代表者
高エネルギー密度を有する革新的マグネシウムイオン蓄電池の開発

折茂 慎一 その他受託研究費 期間：201805-202103 分担者
再生可能エネルギー活用のための新規水素貯蔵合金の開発とその実用化を目指した設計指針の構築

金 相倫 その他寄附金 期間：202004-202103 代表者
水素化物超リチウムイオン伝導材料の開発と次世代エネルギーデバイスへの応用

【光エネルギー材料研究部】

藤原 航三 その他寄附金 期間：202004-202103 代表者
超低線量・高解像度半導体X線画像受線素子の開発

木口 賢紀 JST研究成果最適展開支援プログラム 期間：201612-202103 分担者
非鉛圧電配向体の焼結しない低温作製法の確立-IoTセンサーおよびエネルギーハーベスター応用に向けて

木口 賢紀 その他寄附金 期間：201904-202203 代表者
ハイエントロピー効果により分極ゆらぎを増強した新奇リラクサー材料の創製

木口 賢紀 その他寄附金 期間：201906-202007 代表者
配置のエントロピーにより構造・分極ゆらぎを増強したリラクサー材料創出の新アプローチの構築

木口 賢紀 その他寄附金 期間：201911-202010 代表者
応力誘起相制御によるジルコニア基超薄膜の直方晶相安定化と強誘電性の発現

木口 賢紀 その他寄附金 期間：201904-202203 代表者
ハイエントロピー効果により分極ゆらぎを増強した新奇リラクサー材料の創製

木口 賢紀 その他寄附金 期間：202004-202103 代表者
多元系リラクサーの創製による電気熱量効果の増強による超小型冷凍システムへの展開

木口 賢紀 その他寄附金 期間：202004-202203 代表者
強誘電体の組成相境界における分極ゆらぎを利用した電気熱量効果の発現

木口 賢紀 その他寄附金 期間：202102-202207 代表者
強靭性とセンシング機能を持った膜構造によるスマート構造材料の創製

岡本 範彦 ST戦略的創造研究推進事業(さきがけ) 期間：201810-202203 代表者
電気化学的インターカレーション反応を利用した熱スイッチングデバイスの創出

岡本 範彦 その他寄附金 期間：202004-202303 代表者
摩擦面処理不要の高力ボルト摩擦接合を可能とする溶融亜鉛めっき皮膜構造の最適設計

【材料プロセス・社会実装研究部】

河野 龍興 NEDO水素利用等先導研究開発事業 期間：201807- 代表者
アルカリ水電解及び固体高分子形水電解の高度化

河野 龍興 JST戦略的国際共同研究プログラム (SICORP) 期間：201804-202103 分担者
Research on Hydrogen as a renewable energy carrier：再生可能エネルギー媒体としての水素研究

BELOSLUDOV, Rodion JST戦略的創造研究推進事業 (CREST) 期間：201910-202503 分担者
新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発

6. 知的財産権

6-1. 特許リスト

特許出願件数：9件

登録特許（国内）

【スピンエネルギー材料研究部】

三井好古、小林領太、小山佳一、梅津理恵、水口将輝

特許第6731633号 2020年 7月 9日 Mn-Al 永久磁石の製造方法

【イオンエネルギー材料研究部】

野上玄器、田沢勝、谷口貢、宇根本篤、折茂慎一

特許第6716324号 2020年 6月12日 電極活物質ならびにそれを含む電極層および全固体電池

島田昌宏、伊藤智裕、香取亜希、宇根本篤、折茂慎一

特許第6724044号 2020年 6月26日 イオン伝導体の製造方法

【光エネルギー材料研究部】

藤原航三、堀岡佑吉、勝亦具慶

特許第6836258号 2021年 2月 9日 単結晶成長装置、単結晶成長方法および単結晶

【材料プロセス・社会実装研究部】

和田武、加藤秀実

特許第6710707号 2020年 5月29日 ナノ複合金属部材の製造方法および相分離系金属固体同士の接合方法

和田武、加藤秀実

特許第6747670号 2020年 8月11日 金属部材の製造方法

和田武、加藤秀実

特許第6747673号 2020年 8月11日 ポーラス部材の製造方法

加藤秀実、津田雅史、高野勇郷、鈴木庸介、茅野務、鎌田晃二、室中正太

特許第6754198号 2020年 8月25日 多孔質炭素材料の製造方法および球状の多孔質炭素材料

野原正也、阪本周平、林政彦、小松武志、加藤秀実、和田武、森下史弥

特許第6799293号 2020年11月25日 リチウム空気二次電池

公開特許（国内）

【イオンエネルギー材料研究部】

市坪哲、下川航平

特開2021-034311 2021年 3月 1日 非水電解質二次電池および非水電解質二次電池用の正極活物質

野上玄器、谷口貢、田沢勝、宇根本篤、松尾元彰、折茂慎一

特開2020-064864 2020年 4月23日 全固体電池及び活物質の製造方法

【材料プロセス・社会実装研究部】

加藤秀実、津田雅史、高野勇郷、鈴木庸介、茅野務、鎌田晃二、室中正太
特開2020-114804 2020年 7月30日 多孔質炭素材料

加藤秀実、朱修賢

特開2020-125523 2020年 8月20日 ポーラス金属

7. 各種受賞・表彰

7. 受賞リスト

【スピンエネルギー材料研究部】

高梨弘毅

Senior member

IEEE

2020年6月

【イオンエネルギー材料研究部】

折茂慎一

第18回本多フロンティア賞

公益財団法人本多記念会

水素化物の新たな機能開拓とエネルギーデバイスへの応用

2021年2月

金相侖

第19回インテリジェント・コスモス奨励賞 インテリジェント・コスモス学術振興財団
水素化物超リチウムイオン伝導材料の開発と次世代エネルギーデバイスへの応用

2020年5月

金相侖

第60回原田研究奨励賞

公益財団法人本多記念会

水素化物超イオン伝導材料の開発と次世代蓄電池への応用

2020年7月

金相侖

2020年度研究開発奨励賞

一般財団法人エヌエフ基金

高エネルギー密度蓄電池の創出に向けた水素化物系超イオン導電体の開発

2020年11月

【光エネルギー材料研究部】

中嶋一雄, 藤原航三

文部科学大臣表彰科学技術賞 (研究部門)

文部科学省

太陽電池用シリコン多結晶インゴットの高品質化の研究

2020年4月

木口 賢紀

第75回日本セラミックス協会学術賞

公益社団法人日本セラミックス協会

電子顕微鏡による強誘電体薄膜の成長機構と組織形成に関する研究

2020年11月

【材料プロセス・社会実装研究部】

竹内章, 和田武, 加藤秀実

第68回 日本金属学会論文賞 物性部門

公益社団法人日本金属学会

Solid Solutions with bcc, hcp, and fcc Structures Formed in a Composition Line in
Multicomponent Ir-Rh-Ru-W-Mo System

2020年9月

竹内章, 和田武, **加藤秀実**

第 68 回 日本金属学会論文賞 材料プロセッシング部門

公益社団法人日本金属学会

High-Entropy Alloys with Hexagonal Close-Packed Structure in $\text{Ir}_{26}\text{Mo}_{20}\text{Rh}_{22.5}\text{Ru}_{20}\text{W}_{11.5}$
and $\text{Ir}_{25.5}\text{Mo}_{20}\text{Rh}_{20}\text{Ru}_{25}\text{W}_{9.5}$ Alloys Designed by Sandwich Strategy for the Valence Electron
Concentration of Constituent Elements in the Periodic Chart 2020 年 9 月

BELOSLUDOV, Rodion Vladimirovich

ACS PUBLICATIONS AWARDS

American Chemical Society

2021 年 3 月

8. 主催した会議・研究会・ ワークショップ

(7) Simulation of STM image of metallic glass surface

材料プロセス・社会実装研究部 BELOSLUDOV, Rodion V. 准教授

【パネルディスカッション】

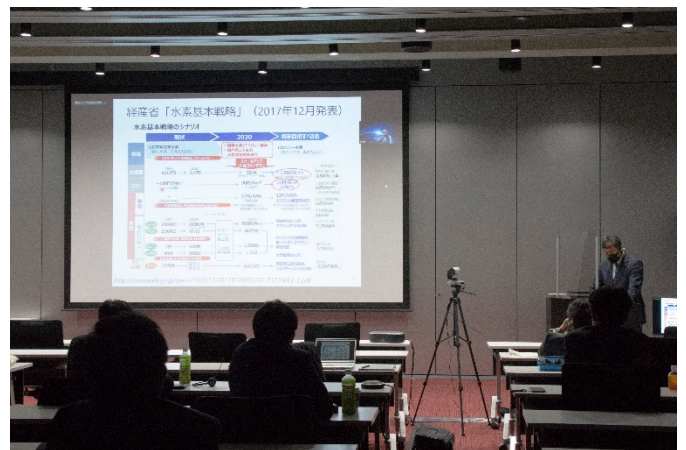
モデレーター 市坪哲センター長

パネリスト (50 音順)

内本喜晴教授 (京都大学)、折茂慎一教授 (E-IMR)、加藤秀実教授 (E-IMR)、
河野龍興特任教授 (E-IMR)、高梨弘毅教授 (E-IMR)、藤原航三教授 (E-IMR)、
宮坂等教授 (E-IMR)

※共催：産学官広域連携センター

先端エネルギー材料理工共創研究センター 2020年度ワークショップ



9. 職員及び運営委員名簿

令和2（2020）年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター名簿

センター長／教授（兼）	市坪 哲
教授	高梨 弘毅
教授	藤原 航三
特任教授	河野 龍興
教授（兼）	Bauer, Gerrit Ernst-Wilhelm
教授（兼）	宮坂 等
教授（兼）	加藤 秀実
委嘱教授	水口 将輝（～2020. 4. 30准教授、6. 1～）
准教授	Belosludov, Rodion Vladimirovich
准教授（兼）	木口 賢紀
准教授（兼）	岡本 範彦
助教（兼）	伊藤 啓太
助教（兼）	前田 健作
助教（兼）	金 相侖
特任助教（兼）	李 弘毅
特任教授	湯本 道明

**令和 2（2020）年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター
運営委員会委員**

組織（先端エネルギー材料理工共創研究センター内規第 5 条）：委員長及び次の各号に掲げる委員

- （1）研究所（センターを除く。）の教授又は准教授 若干人
- （2）センターの教授又は准教授 若干人
- （3）研究所の事務部長
- （4）その他委員長が必要と認めた者 若干人

任期：第 5 条第 1 号及び第 4 号に掲げる委員 2 年（再任を妨げない）

令和 2（2020）年 5 月 1 日現在

所属	職名	氏名	任期	備考
金属材料研究所	センター長	市坪 哲		委員長
金属材料研究所	所 長	古原 忠	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	今野 豊彦	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	宮坂 等	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	加藤 秀実	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	高梨 弘毅		5 条 2 号
金属材料研究所	教 授	藤原 航三		5 条 2 号
金属材料研究所	教 授	Bauer, Gerrit Ernst-Wilhelm	R2(2020).4.1- R4(2022).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	特任教授（研究 企画・運営担当）	湯本 道明	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	特任教授（研究）	河野 龍興	H31(2019).4.1- R3(2021).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	事務部長	藤王 勉		5 条 3 号

**令和 2（2020）年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター
運営委員会委員**

組織（先端エネルギー材料理工共創研究センター内規第 5 条）：委員長及び次の各号に掲げる委員

- （1）研究所（センターを除く。）の教授又は准教授 若干人
- （2）センターの教授又は准教授 若干人
- （3）研究所の事務部長
- （4）その他委員長が必要と認めた者 若干人

任期：第 5 条第 1 号及び第 4 号に掲げる委員 2 年（再任を妨げない）

令和 2（2020）年 4 月 1 日現在

所属	職名	氏名	任期	備考
金属材料研究所	センター長	市坪 哲		委員長
金属材料研究所	所 長	古原 忠	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	今野 豊彦	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	宮坂 等	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	加藤 秀実	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 1 号
金属材料研究所	教 授	高梨 弘毅		5 条 2 号
金属材料研究所	教 授	藤原 航三		5 条 2 号
金属材料研究所	准教授	水口 将輝		5 条 2 号
金属材料研究所	教 授	Bauer, Gerrit Ernst-Wilhelm	R2(2020).4.1-R4(2022).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	特任教授（研究企画・運営担当）	湯本 道明	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	特任教授（研究）	河野 龍興	H31(2019).4.1-R3(2021).3.31	5 条 4 号
金属材料研究所	事務部長	藤王 勉		5 条 3 号

令和3年10月発行

発行者 東北大学 金属材料研究所
先端エネルギー材料理工共創研究センター

〒980-8577

宮城県仙台市青葉区片平2-1-1

TEL 022-215-2072

FAX 022-215-2073

E-Mail e-imr@grp.tohoku.ac.jp

URL <http://www.e-imr.imr.tohoku.ac.jp/>