



# 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

## NEWS LETTER

---

Vol2, No1. Oct. 2016



東北大学金属材料研究所

## 《目次》

### 研究者紹介

Belosludov, Rodion 准教授:材料プロセス・社会実装研究部  
井口亮 助教:スピネネルギー材料研究部

### 機器・装置紹介

高木成幸 准教授:スピネネルギー材料研究部

### 着任研究者紹介

1. 河野龍興 特任教授:材料プロセス・社会実装研究部
2. 藩伍根 教育研究支援者:光エネルギー材料研究部
3. Sheng Peng 教育研究支援者:CREST水口グループ
4. Himanshu Sharma 産学官連携研究員:CREST水口グループ

### 最近の動向

1. PVJapan2016に出展

### 今後の予定

E-IMR第2回ワークショップを開催予定

Belosludov, Rodion 准教授：材料プロセス・社会実装研究部



It is a great honor to be a member of the Research team at the Collaborative Research Center on Energy Materials. The major subject of my research is computer simulation of physical-chemical properties of complex materials that are of great scientific interest and have promising applications. Today, computer simulation has become an indispensable research tool because often experiments require theoretical interpretation and also computing power has grown rapidly in the last decade. Ab initio methods can potentially offer an independent model of material properties but can be limited by the size of the system at hand. However, simulation methods, which are based on ab initio parametrization of interaction potentials, can be used to perform large scale simulations at non-zero temperatures.

During my research activity I have been involved in accurate estimation of van der Waals interactions within the all-electron mixed-basis (TOMBO) code originally developed in IMR and in developing a lattice dynamics method for molecular crystals, which allows us to evaluate accurately the dynamic and mechanical stability (Nature 400 (1999) 647) as well as the thermodynamic properties (J. Chem. Phys. 131 (2009) 244510) of various nanoporous compounds. I believe that one of my research strengths is working in close cooperation with experimental researchers. For example, the high-sorption ability of specific metal organic framework (MOF) materials have been described in collaboration with experimentalists (Nature 436 (2005) 238; Science 343 (2014) 167). It has been shown that the concept using designable regular MOF materials could be applicable to a highly stable, selective adsorption system. Recently, a general design has been presented for functional 3D nanostructures which vary by three- or four-fold topology, porosity, degree of conjugation, and electronic structures (Figure 1). It has been shown that the electronic structures and optical properties of studied structures could be easily tuned via their size, topology, and the presence of bridging sp<sup>3</sup> carbon atoms. The ability to store large quantities of methane (106–216 cm<sup>3</sup>(STP)/cm<sup>3</sup>) has been observed in all cases with several compounds being close to or exceeding the DOE target of 180 cm<sup>3</sup>(STP)/cm<sup>3</sup> (Phys.Chem. Chem. Phys. 18 (2016) 13503).

In the Material Processing and Social Implementation Research Division I will make research efforts in developing theoretical approaches to demonstrate performance of energy materials realized in this Center by experimental researchers. This requires precise control of the structure and detailed understanding of the structure-property relationships. The obtained data will support the practical realization a novel class of materials with desired characteristics for energy applications. This will result in significant improvement in effectiveness, cost and safety as compared with the currently-known materials.

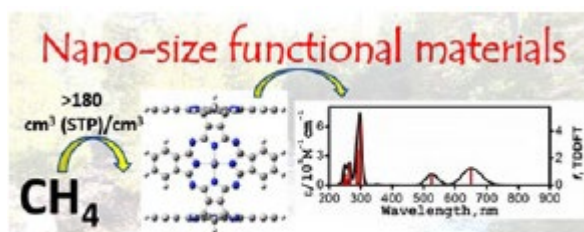


Figure 1. Nano-scale materials for CH<sub>4</sub> gas storage.

#### Contact information

E-mail: rodion@imr.tohoku.ac.jp

Tel: 022-215-2481, FAX: 022-215-2073

井口亮 助教：スピンエネルギー材料研究部



スピンエネルギー材料研究部では、スピン角運動量を用いて電気や熱を創出・制御する新しいエネルギーの利用方法について研究を行っています。スピン角運動量は物質を構成する電子の性質の一つで、近年、電流に対応するスピン角運動量の流れ、“スピン流”という概念が創出されました。それ以降、スピン流と電流熱流に関係した多くの現象が精力的に開拓されています。その中の一つは、熱流からスピン流を生成するスピンゼーベック効果で、従来の熱電素子と比較して応用面において、単純な大面積化によって電力を多く取り出せるという特徴的な利点を持っていました。このようなスピンを用いることで生まれる、エネルギー創出・制御における新しい利点を探索することが本研究部の活動になります。理学面からの原理解明と新現象開拓と共に、工学面からの有望な材料や構造の探索を行っています。私は、この中であって現在、スピン流測定方法の確立やスピン熱電効果の原理解明に向けた研究を行っています。本稿では、研究部内の融合によって実現したスピンの高感度な検出手法について紹介します。

スピン流を用いる利点は、電流と異なりジュール熱がほとんど発生しないこと、絶縁体中でもスピン流を流せることが挙げられます。このことから、スピン流を情報伝送のキャリアとして積極的に活用するといった応用が考えられています。一方で、スピンの難しさはその検出にあります。現在、スピンの電氣的検出を実現する効果の一つとして、スピン流を電気に変換する逆スピンホール効果と呼ばれる現象がよく知られていますが、この効果が大きい材料では同時に大きくスピン流を減衰させてしまいます。そこで、私たちは今回、スピン流ではなく、スピン流が形成するスピン蓄積を測定する手法を見出すことを目指しました。スピン流はスピン蓄積の空間勾配によって駆動されており、ちょうど電流が電圧の空間勾配である電場によって駆動される関係と同じです。このため、スピン蓄積を測ることはスピン流を測ることに繋がります。スピンの特徴に時間反転対称性の破れがあります。時間反転対称性の破れの顕著な例はホール効果で、磁場を印加することによって、電流が曲げられ、電流と磁場に直交した方向に起電力が生成されます。この効果は、強磁性体中では磁場ではなく磁化に比例した効果として現れることも知られています。私たちは、磁場や磁化同様にスピン蓄積が物質中にある状態ではホール効果を生じるのではないかと考え、試行錯誤の上、スピン蓄積の示すホール効果の検出に成功し、その原理の解明を行いました。この”スピン蓄積ホール効果”においては、従来のスピン-電気変換を行うスピンホール効果の効率のエネルギー微分が重要な役割を果たすことが明らかになりました。また、本効果における起電力信号は、スピン蓄積の量と検出用電流量の積に比例するため、電流量により信号強度を増やすことが可能であり、スピン蓄積の高感度な測定が可能です。本効果によって従来とは異なる材料系での高感度なスピン検出が可能になることから、今後、スピンの長距離輸送と高感度検出を両立した材料の探索を行うことで、情報伝送用途へのスピン流の活用が加速することが期待されます。

この他、スピンエネルギー材料研究部での研究として、スピンゼーベック効果の原理解明に向けた高速応答測定や、効率増大に向けた新規材料・構造の探索も行っています。

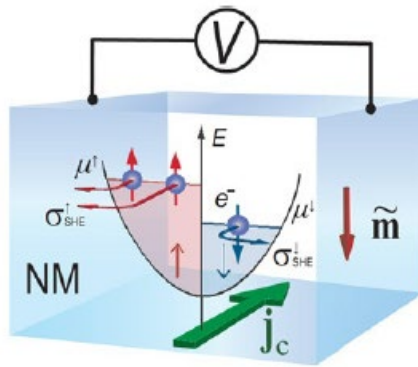


図1. スピン蓄積によるホール効果の概念図。スピンホール伝導度 $\sigma_{SHE}$ のスピンの(↑および↓)依存性により各スピンごとに横方向への散乱強度が変化する。この強度差が横方向電圧として検出される。

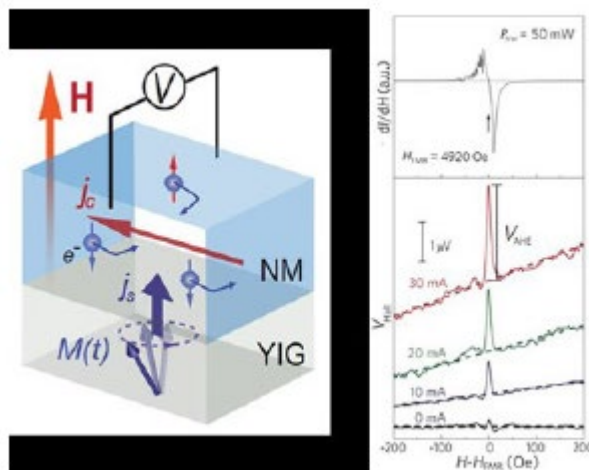


図2. スピン蓄積によるホール電圧の測定例。磁性絶縁体(図中YIG)基板が強磁性共鳴を示す(右上)際に、スピン蓄積が非磁性金属である金(図中NM)に現れる。このスピン蓄積に対し、電流を印加することでスピン蓄積ホール効果に由来する起電力が現れる。電流量を増やすことでより高感度に測定される。

#### 連絡先

E-mail: iguchi@imr.tohoku.ac.jp

Tel: 022-215-2023, FAX: 022-215-2020

高木成幸 准教授：イオンエネルギー材料研究部



## ラマン分光その場観察装置とハイパフォーマンスコンピュータ

携帯電話やノートパソコン、ハイブリッドカーなど、私たちの生活に身近な多くの製品に繰り返し充電して使用できるリチウムイオン二次電池が搭載されています。リチウムイオン二次電池は、正の電荷を運びたりチウムイオンが電解質を介して正極と負極の間を移動することにより充電や放電を行いますが、より速くリチウムイオンを動かすことができれば、より短時間で充電可能な電池が実現できます。水素を高密度に含む水素化物では、水素の振動によってリチウムイオンの動きやすい経路が形成され、高速にリチウムイオンを動かすことができることから新しいタイプの電解質として近年注目を集めており、イオンエネルギー材料研究部では、これらを用いた全固体二次電池の開発に取り組んでいます。今回ご紹介する機器・装置は、リチウムイオンを高速に動かすうえで非常に重要な水素の振動状態を捉える装置と、リチウム、水素を含めた原子の動きを理論的に解析・予測するためのハイパフォーマンスコンピュータです。

図1は、物質に入射して散乱した光を調べることにより、原子の振動状態を捉えるラマン分光装置とよばれる測定機器です。図中の赤い点線で囲われた部分がサンプルをセットするためのチャンバーになりますが、10気圧までの水素ガスを封入し、 $-190^{\circ}\text{C}$ から $500^{\circ}\text{C}$ の温度範囲で測定を行えるよう機能拡張されています。様々な環境下におけるサンプル中の水素の振動状態をその場観察で詳細に調べることにより、二次電池の電解質として最適な材料を設計するための指針を得ることができます。将来的には電池動作中における電解質のラマン分光測定も行えるようさらなる機能拡張していく予定です。

図2は、複数台のラックマウント型計算機をネットワークで接続し、ひとつのコンピュータに見立てて利用できるようにしたHPC（High Performance Computing）クラスターと呼ばれるシステムです。多数の計算機に分散して並列処理を行うことで、スーパーコンピュータに匹敵する性能を発揮することができます。3台のラックにはCPU計20個、352コア搭載されており、第一原理計算と呼ばれる実験データや経験的パラメーターを一切用いない理論計算を高速に実行することが可能です。これにより実験的には観測が困難なりチウムイオン一つの動きを高精度に再現・予測することができ、またその伝導メカニズムの解明にも役立ちます。理論計算で得られた知見をフィードバックした最適な物質設計のための指針構築に活躍しています。



図1. ラマン分光装置



図2. HPC (High Performance Computing) クラスター

河野龍興 特任教授：材料プロセス・社会実装研究部門



材料プロセス・社会実装研究部門では、センターでの先端エネルギー材料の研究開発成果を利用して、より広く社会へ実装されていくことを目標としています。高性能かつ高品質で経済性にも優れた材料を製造する材料プロセス研究、材料の性能評価手法の開発、および材料・デバイスの性能実証にも取り組み、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ていきます。またこの社会実装プロセスに向けては産官学の連携が必要不可欠であることから、今後より一層連携を強化していきます。

こちらでは水素技術に関する紹介をいたします。水素は最も軽く豊富に存在する元素であり、エネルギー源としても大きな魅力を持つ元素です。その水素を利用したアプリケーションで現在大きな市場を形成しているのが1990年に日本で実用化された「ニッケル水素電池」です。負極に水素を吸蔵する水素吸蔵合金を用い、水素の吸蔵・放出を用いて電気を充電・放電することができる二次電池であり、ハイブリッド自動車を始めとし様々なアプリケーションに用いられています\*1。発売当初は負極にLaNi<sub>5</sub>系合金が使われていましたが、年々開発が進み、放電容量が理論容量の85%以上に達したため、更なる高容量化に向けた新たな合金系の開発が切望されていました。そこで新たな合金系の研究に着手して、1997年にLaMgNi<sub>3-4</sub>系の新しい水素吸蔵合金を発見し、2000年に発表いたしました\*2。この合金は図1に示すように、AB<sub>2</sub>ユニットセルとAB<sub>5</sub>ユニットセルとの積層構造を有しており、LaNi<sub>5</sub>系合金の理論容量を超える放電容量を持ち、自己放電も少なく、高い電流密度での放電特性も優れていて、超格子合金と名付けました\*3。この超格子合金は2005年に三洋電機から「エネループ」として実用化され、現在パナソニックから世界80カ国以上で販売され、累計では3億7,000万個以上（2016年1月時点）に達しています。

また近年、再生可能エネルギーの急速な普及により、これらにおける出力変動の吸収技術の開発が求められており、高エネルギー密度でかつ長期間の蓄電が可能である水素エネルギーが注目されています。そこで再生可能エネルギーのみを用いた自立型の水素エネルギー供給システム「H<sub>2</sub>One™」の実用化・商用化に従事いたしました\*4。このシステムは太陽光発電装置、蓄電池、水素製造装置、水素吸蔵合金タンク、純水素燃料電池により構成されています。夏季に太陽光にて発電した電力を利用して、水素製造装置で製造した水素を水素吸蔵合金タンクに貯蔵しておきます。冬季に貯蔵した水素を利用して、純水素燃料電池で発電することにより、太陽光発電のみで年間を通じて電力を供給することが可能となります。このシステムでの大きなポイントは、水素を高密度で貯蔵できる水素吸蔵合金を用いたタンクを採用したことにより、従来のタンクサイズと比較して1/10の小型化を実現しました。今後は本システムを更に高性能化できる先端エネルギー材料の開発を行っていきます。

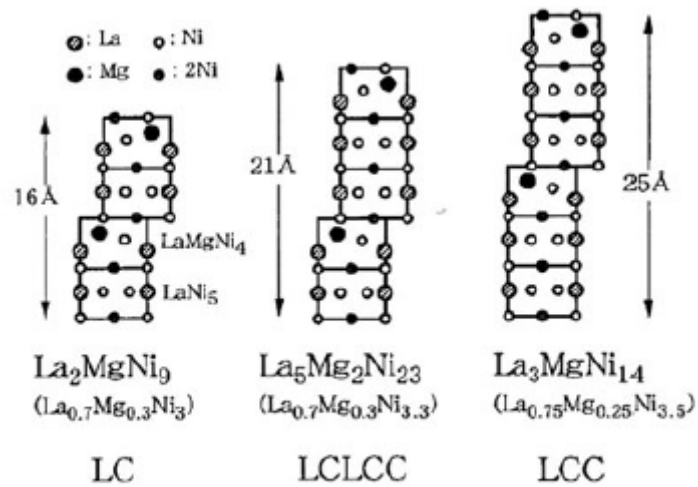


図1. LaMgNi系超格子合金の結晶構造

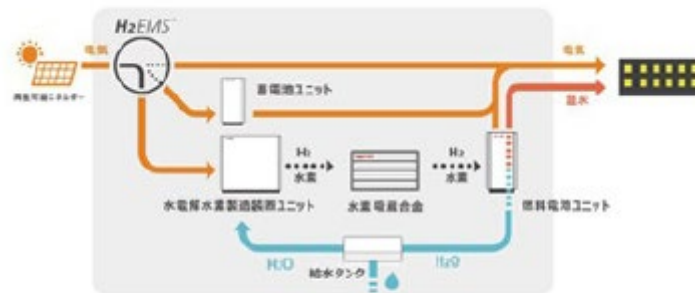


図2. 自立型水素エネルギー供給システムの構成図

< 参考資料 >

1. <http://www.baj.or.jp/knowledge/history03.html>
2. T. Kohno, et al., J. Alloys Comp., 311, L5-7, 2000.
3. 河野龍興, 「水素吸蔵合金開発の最前線 La-Mg系合金」, 金属 6月号, p.47, 2002.
4. [http://www.toshiba.co.jp/about/press/2016\\_03/pr\\_j1402.htm](http://www.toshiba.co.jp/about/press/2016_03/pr_j1402.htm)

連絡先

E-mail: tatsuoki@imr.tohoku.ac.jp

Tel: 022-215-2230, FAX: 022-215-2073



藩伍根 教育研究支援者：光エネルギー材料研究部



この数十年、結晶系（単結晶又は多結晶）Si太陽電池産業は急速に発展してきましたが、電池のモジュール変換効率は20%未満に留まっています。太陽電池の更なる普及のためには、Si結晶技術の進歩と、Si結晶品質の判定技術及びSi結晶品質に合ったセル技術を確立しなければなりません。現状のp型Si単結晶や多結晶には、ドーパントのホウ素（B）以外に高濃度の酸素（O）や多数の不純物が含まれています。これらの不純物は基板の面内方向または厚み方向に不均一に分布しており、空間的にランダムな欠陥分布と不連続なバンド構造を有しています。この様な結晶基板を用いて、太陽光の受光面に薄い急峻なpn接合を作ることは困難であり、変換効率に直結している要因は、各部位のキャリア寿命ではなく基板全体の実効キャリア数のみと考えられています。私達は、大型Si結晶基板に対して、実効キャリア数の高速測定法を開発し、結晶品質で問題となる不純物分布を一つのパラメーターにまとめ、基板ごとの変換効率を的確に判定できる技術を開発しています。

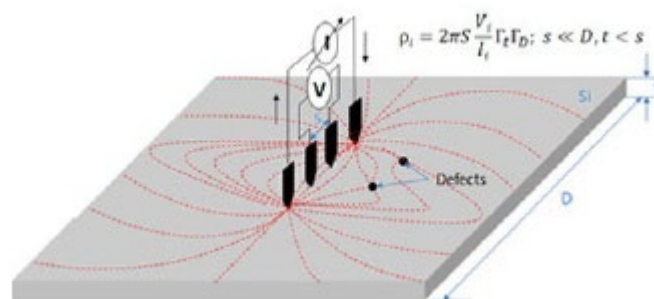


Figure 1. High-Speed Current-Modulating Four-Point-Probe-Method(HSCMR)

連絡先

E-mail: wugenpan@imr.tohoku.ac.jp

Tel: 022-215-2013, FAX : 022-215-2011

Sheng Peng 教育研究支援者：CREST水口グループ



Education: 2013 Ph. D., Osaka University

Experience: 2013–2016 Post-doctor Researcher, National Institute for Materials Science (NIMS)

### Research purpose in E-IMR

“Spin-caloritronics” has been attracting comprehensive attention for spintronics researchers. It concerns the interplay among heat currents, spin and charge, such as spin Seebeck effect (SSE). Since the SSE usually accompany with the anomalous Nernst effect (ANE), the significance role of ANE in spin-caloritronics is now recognized. ANE is the thermal analogue of anomalous Hall effect, see Figure 1. Based on the systematical work in Ref. [1], material dependence of anomalous Nernst effect was investigated, ANE is roughly in proportion to the strength of the spin-orbit coupling. To furtherly understand ANE in nano-structures, more detailed study about the physics mechanism will be investigated in my work here.

It is instructive for founding the way to enhance ANE and future applications.

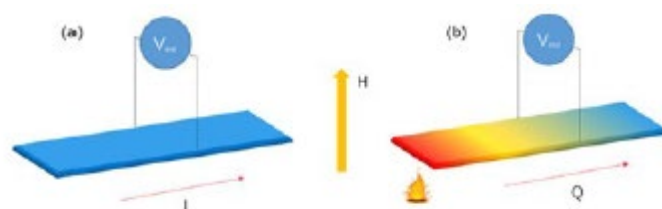


Figure 1. AHE and ANE measurement setup sketch.

Reference:

1. K. Hasegawa, M. Mizuguchi, Y. Sakuraba, T. Kamada, T. Kojima, T. Kubota, S. Mizukami, T. Miyazaki, and K. Takanashi, *Appl. Phys. Lett.*, 106, 252405 (2015).

### Contact information

E-mail: sheng@imr.tohoku.ac.jp

Tel: 022-215-2071, FAX: 022-215-2073

Himanshu Sharma 産学官連携研究員：CREST水口グループ



Education: 2016 PhD., Indian Institute of Technology Bombay (IITB), India

Experience: 2011–2016 Research Assistant for magnetometers and Cryogenic Plant, IIT Bombay, India

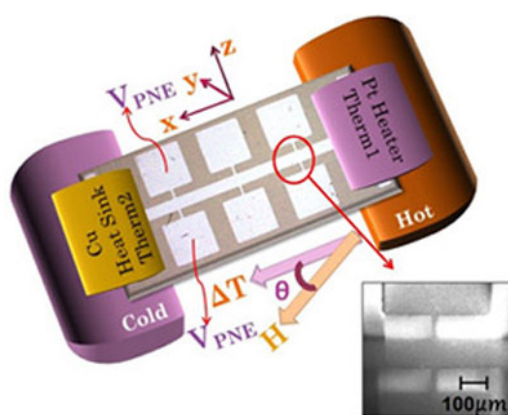
## 1. Research purpose in E-IMR

The E-IMR provides me a striking research platform with a broad and acute interest in the discovery of new spintronics, thermoelectric and spin caloritronic based innovative devices. I particularly enjoy the application based research (i.e., the practical thermoelectric power generation) under the direction of Prof. Mizuguchi. We are investigating a new thermoelectric power generation technique based on the anomalous Nernst effect (ANE) in ferromagnetic nano-structured materials.

## 2. Introduction of Research

We have investigated the thermoelectric and spin caloritronic effects in manganite, where a sample develops a transverse voltage in response to a thermal gradient ( $\nabla T$ ) applied in-plane of the sample. These effects have attracted much attention due to its potential applications based on the generation and detection of spin current. The contribution of Anomalous Nernst Effect (ANE), or anomalous thermopower in spin Seebeck effect (SSE) has been observed in some materials. Nernst effect gives these materials an advantage for application and increases the possibility of its use in spin-based devices.

We are also investigating the possibility to enhance the ANE using three dimensional type nano-structured devices.



**Figure 1.** Schematic view of the setup used for the Nernst effect measurements.

## Contact information

E-mail: himanshu@imr.tohoku.ac.jp

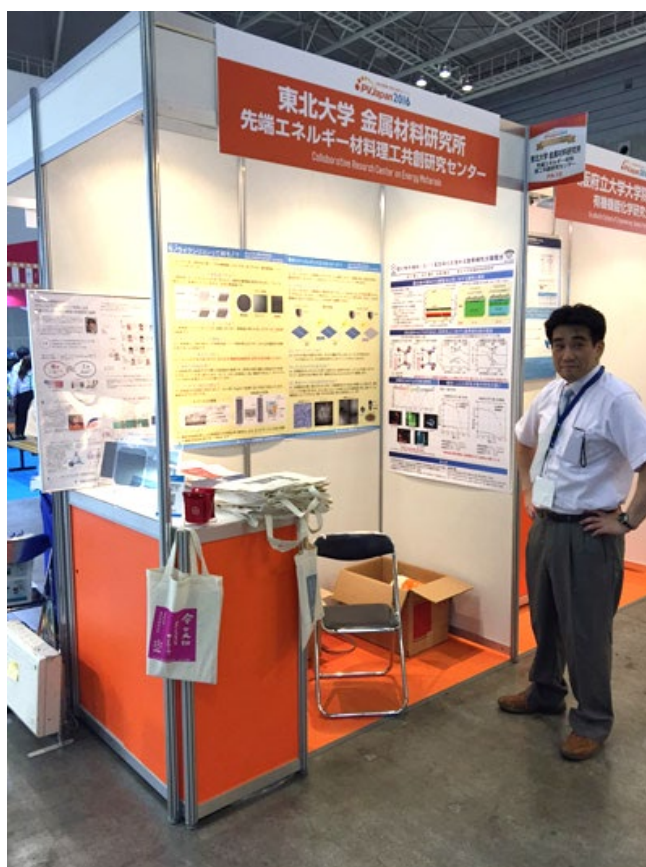
Tel: 022-215-2071, FAX: 022-215-2073

### PVJapan2016に出展

6月29日から7月1日にかけてパシフィコ横浜で開催された太陽光発電に関する展示会「PVJapan2016」にて、昨年に引き続きE-IMRのブース展示を行ないました。同展示会は太陽光発電協会（JPEA）が主催する国内最大級の太陽光発電専門の展示会です。また再生可能エネルギー世界展示会も同時開催され、太陽光発電のみならず、あらゆる再生可能エネルギーに関する展示が行なわれました。イベント全体での来場者数は3日間合計で2万5千人と大盛況の展示会でした。

E-IMRの展示は、大学・研究機関の展示が集まるアカデミックギャラリーにて行なわれました。松岡教授、沓掛助教、木村研究員の3名が説明にあたり、金研およびE-IMRの概要と、太陽電池に関連した研究の内容を紹介しました。また出展者セミナーにおいても、沓掛助教が本センターの概要と研究内容を講演しました。

3日間とも本センターのブースには大変多くの方に足を運んでいただきました。金研および本センターの研究内容を広報するとともに、参加者の方と非常に有益な情報交換をすることができました。来場者は、太陽光発電のバリューチェーンの下流、すなわち太陽電池パネル製造や設置、電力系統連携に関する企業の方が多かった印象ですが、バリューチェーンの最上流である「材料」に期待する声を多く頂戴しました。特に、品質・特性と同時に「コスト」の要望が多く、その他にも様々なエネルギー材料に特有の研究開発課題を伺うことができ、産業界の声を直接聞ける良い機会となりました。



## 今後の予定

### 平成28年12月8日（木）にE-IMR第2回ワークショップを開催します。

平成28（2016）年12月8日（木）13時から金属材料研究所講堂（2号館1階）において、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第2回ワークショップを開催いたします。今回の基調講演では、文部科学省研究開発局環境エネルギー課長 藤吉尚之様と新日鐵住金株式会社技術開発本部上席主幹研究員 大村朋彦様のご講演を予定しております。なお、詳細が決まり次第、E-IMRのホームページにてお知らせいたします。

また、E-IMRの前身である低炭素社会基盤材料融合研究センター（LC-IMR）第7回ワークショップも同日、平成28（2016）年12月8日（木）9時30分から開催いたします。こちらにつきましても詳細が決まり次第、LC-IMRのホームページにてお知らせいたします。

E-IMR News Letter, vol.2, no.1

発行：平成28年10月

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事務局

E-Mail：[e-imr@imr.tohoku.ac.jp](mailto:e-imr@imr.tohoku.ac.jp)

TEL: 022-215-2072