

目次

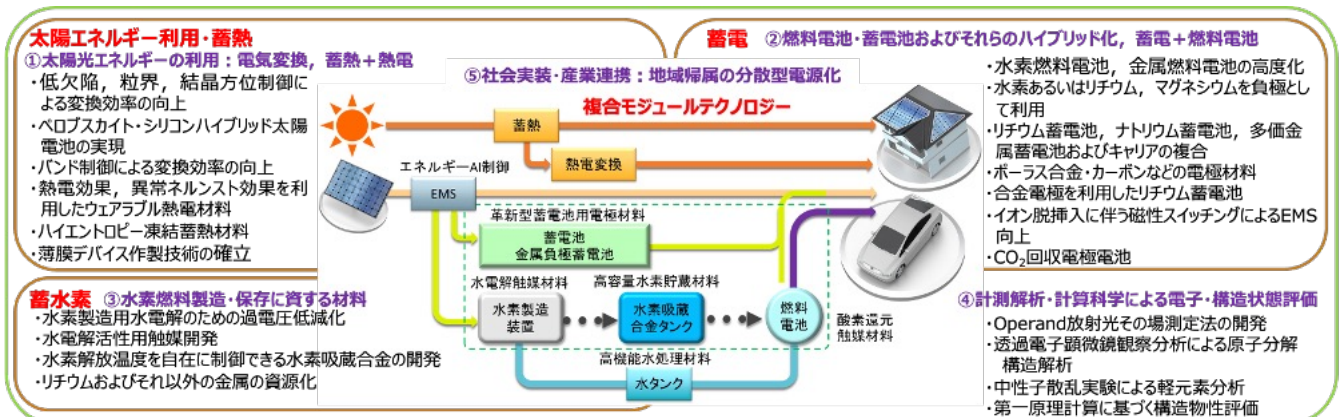
太陽エネルギーの利用と3つの『蓄』の最大化に貢献する革新的エネルギー材料・複合モジュールプロジェクトを開始します。	1
組織とメンバー：2022年度	2
先端エネルギー材料研究紹介1~3	
分子吸着材料における「創・蓄・操」を多面的に捉えるための拠点 — 分子スポンジ物性制御プラットフォーム —	3
蓄エネルギー材料研究開発の新展開	4
量子ビーム計測×計算科学 — その出会いで拓げる材料科学 —	6
イベント	
先端エネルギー材料理工共創研究センター 2022 ワークショップ	7
お知らせ	
『東北大学若手研究者による萌芽的なエネルギー材料研究への助成（仮称）』について	7

太陽エネルギーの利用と3つの『蓄』の最大化に貢献する革新的エネルギー材料・複合モジュールプロジェクトを開始します。

社会の脱炭素化は今や人類全体の課題であり、日本は2030年度の温室効果ガス排出量を2013年度に比べて46%削減することを目指しています。その課題解決に向けて太陽エネルギーの利用が欠かせないのですが、その活用は未だ十分とは言えません。太陽光エネルギーで日本の年間エネルギー消費量を賄うためには、国土の約4%を太陽電池パネルで覆うことになりませんが、変換効率を2倍に高めるとその半分で済みます。このことから、太陽電池の性能向上は必須です。また、太陽熱も電気に変換して利用できます。熱を蓄えることのできる『蓄熱材料』や熱を電気に変える熱電変換材料の性能を向上させれば、太陽熱も無駄なく利用することが可能となります。また、日々の天候や日照条件に左右されてしまう太陽エネルギーを電力として安

定して利用するためには、日中に貯めた電気を夜間に使うための『蓄電池』や夏に蓄えた電気を冬に使うための『蓄水素材料』の性能を向上させることも必要となります。さらに、既存性能を上回る革新的蓄エネルギー材料の創製とその実用を可能にするモジュール化、システム化が鍵となってきます。

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、2022年度から太陽エネルギーの利用と3つの『蓄』の最大化に貢献する革新的エネルギー材料・複合モジュール創製に欠かせない材料科学研究を加速し、脱炭素社会実現・2050カーボンニュートラルの実現に貢献します。



物理・化学エネルギーなどのあらゆるエネルギー源は太陽光の還元力に由来すると考えるのがこの事業の理念です。太陽光エネルギーを変換・貯蓄する各モジュール（発電機・熱電変換と3つの蓄：蓄電、蓄熱、蓄水素）の機能向上のため、量子・イオンの選択最適化及び構造・組織等の階層構造レベルでの材料設計により革新的エネルギー材料を創出し、更なるシナジー効果を生む複合モジュール化技術の創製を掲げ、永続的な太陽エネルギーの最大効率的な活用を実現します。

組織とメンバー：2022年度

先端エネルギー材料理工共創研究センターは、東北大学金属材料研究所を実施部局として材料科学高等研究所、大学院工学研究科、国際放射光イノベーション・スマート研究センターの参画を得て、理学系研究者と工学系研究者が連携する研究体制を構築しています。本センターは、太陽エネルギー変換材料研究ユニット、蓄エネルギー変換材料研究ユニット、材料評価・解析

研究ユニット、複合モジュール・社会実装研究ユニットで組織されています。ユニット内での研究のみならず、ユニットを超えた研究も展開しています。各ユニットでは国内外大学・研究機関所属研究者を研究戦略室メンバーとして迎えて意見交換を行い、最新の研究動向を踏まえた先端エネルギー材料・複合モジュール創製の研究を実施しています。



センター長
市坪 哲

<運営委員会>

所内規程により設置

<研究戦略室>

センター長、ユニット長、国内外研究者（非公開）により構成

<研究支援室>



特任教授（運営）
湯本 道明

太陽エネルギー変換材料研究ユニット



教授/ユニット長
藤原 航三
結晶成長
Si 多結晶太陽電池



教授（兼）
塚崎 敦
超伝導薄膜
界面物性
トポロジカル物性・物質



教授（兼）
Bauer,
Gerrit E.-W.
(材料科学高等研究所)
物性理論物理
スピントロニクス



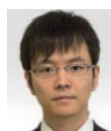
委嘱教授
高梨 弘毅
(日本原子力研究開発機構)
磁性材料
スピントロニクス



准教授（兼）
岡本 範彦
透過電子顕微鏡
熱電材料



助教（兼）
前田 健作
結晶成長
Si 多結晶の結晶成長



助教（兼）
伊藤 啓太
強磁性窒化物
規則合金



特任助教
野澤 純
コロイド
結晶成長

蓄エネルギー変換材料研究ユニット



教授（兼）/ユニット長
宮坂 等
酸化還元活性錯体格子
多機能型ソフトマテリアル
機能協奏型二次電池



教授/センター長
市坪 哲
蓄電池創製
相変態構造制御
統計熱力学組織形成論



教授（兼）
折茂 慎一
高密度水素貯蔵材料
超イオン伝導材料
多価蓄電デバイス



教授（兼）
高村 仁
(工学研究科)
固体酸化物形燃料電池
プロトン伝導性セラミックス
水素製造システム



助教（兼）
木須 一彰
多価蓄電池
イオン伝導
錯体水素化物



特任助教
李 弘毅
デュアルカチオン電池
金属・合金負極材料開発

材料評価・解析研究ユニット



教授（兼）/ユニット長
藤田 全基
量子ビーム
強相関電子系
結晶成長



教授（兼）
熊谷 悠
計算材料学
マテリアルズインフォマティクス
セラミックス



教授（兼）
高橋 幸生
(国際放射光イノベーション・スマートセンター)
放射光
コヒーレント回析イメージング
微細構造・化学状態解析



准教授
Belosulidov, Rodion V.
機能性ナノポーラス材料
ガス貯蔵・分離



助教（兼）
河口 智也
Li/多価蓄電池正極材料
放射光 X線散乱・分光解析

複合モジュール・社会実装研究ユニット



教授（兼）/ユニット長
加藤 秀実
ナノポーラス金属・半金属
金属ガラス・アモルファス合金



特任教授（客員）
河野 龍興
(東京大学)
産学官連携
エネルギーシステム



特任助教
宋 瑞端
脱成分（デアロイング）
多孔質金属/合金触媒

先端エネルギー材料研究紹介 1

分子吸着材料における 「創・蓄・操」を多面的に捉えるための拠点 — 分子スポンジ物性制御プラットフォーム —

宮坂 等 教授

蓄エネルギー材料研究ユニット長
金属材料研究所錯体物性化学研究部門

「蓄エネルギー材料研究ユニット」は、“蓄エネルギー”を看板に掲げていますが、むしろ、エネルギーを“創る”、“蓄える”、“操る”の“創・蓄・操エネルギー”という幅広い観点からユニークなエネルギー関連材料や現象を探求することを目的にしています。ターゲット材料やデバイスは、二次電池、イオン伝導体、燃料電池、水素貯蔵材料、不均一系固体触媒、分子吸着材料、物性変換材料など多岐にわたり、扱う物質も、柔らかい分子から固い無機物質や合金まで様々です。

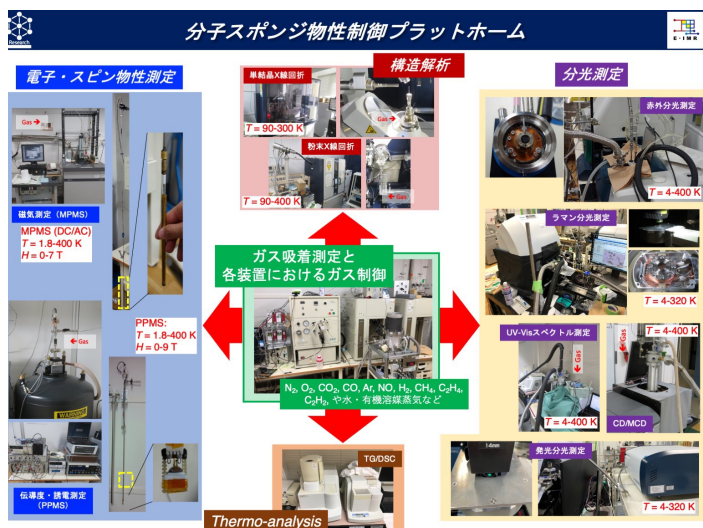
一つの研究ターゲットとして、「分子吸着に伴う物性変換制御」を行っています。分子吸着剤と言えば、活性炭やシリカゲルのような微細な空孔を持つ無機多孔性材料を思い浮かべますが、柔軟な分子からなる格子材料（多孔性分子格子材料）を用いることで、分子吸着に伴うより多くの事象を制御できるようになります。例えば、分子吸着による構造変化、挿入分子と吸着剤（分子格子）との化学的相互作用、常磁性ゲスト分子の磁気的影響、などです。当然、ホストである格子だけでなく、吸着分子自身の活性化も期待できます。このように、選択的な分子の吸脱着に伴う物理的な構造変化や化学的な摂動・化学反応（化学的なシグナル）を基に、ゲスト分子や吸着剤の電子状態やスピン状態（物理的なシグナル）を変換することができます。ある特定のガス分子のみを選択的に吸着し、その種類により

異なる物理的シグナルを発信する材料や、磁性や誘電性、伝導性変化など、エネルギー操作に関連する物性を分子吸着で制御できる材料などがターゲットになってきます。捕らえるガス分子も、特にエネルギー関連ガスやSDGs、環境問題に関わるガスなどに注目しています。

一方で、それらの分子吸脱着に伴う“変化”をどのように捉えるかが、研究遂行上の重要な課題になります。分子吸着は温度と圧力（分圧）に依存します。また、物性は温度、磁場、電場、光などの外場に関係します。それら複数のパラメータを同時に可変可能なクライオ装置を用いることで、化学的シグナルと物理的シグナルをその場観察で捉える必要があります。これらを解決するには、特別な装置のセットアップを伴う技術的なサポートも必要になります。しかし、一連の物性測定やその同定に係る分光測定、構造解析をガス下その場測定で包括的に行える場所は、本国のみならず世界的にもありません。そこで、我々の研究室では、E-IMRのサポートを受けながら、それら一連の測定技術と装置群を「分子スポンジ物性制御プラットフォーム」と位置づけ、分子吸着による物性変化を多面的に捉えるための拠点作りを行っています。金研共同利用共同研究からのサポートも得ながら、新しい分子吸着材料の探索と創製を行っています。

(参考) 宮坂教授の研究詳細はホームページをご覧ください。

<http://www.miyasaka-lab.imr.tohoku.ac.jp/>



先端エネルギー材料研究紹介2

蓄エネルギー材料研究開発の新展開

蓄エネルギーユニット所属の市坪(E-IMRセンター長)は、現在、各研究ユニットのメンバーと協力し、エネルギー材料にかかわる研究テーマとして、大きく分類して、革新型蓄電デバイス材料および熱マネージメント材料に関わる分野に携わっています。

革新型蓄電池に向けた基礎研究を詳細に分類すると、

1. リチウムイオン電池新規正極材料開発 (河口助教)、
2. 合金負極蓄電池用負極材料開発 (李特任助教)、
3. アノードフリーリチウム金属負極の開発 (李特任助教)、
4. マグネシウム金属負極蓄電池用正極材料開発 (学際研: 下川助教)、
5. 将来型蓄電池としてのデュアルイオン蓄電池 (李特任助教) 等となります。

1 に関しては、最近の流行でもあるハイエントロピー酸化物を利用することにより、元素選択の幅を広げることを目指しています。Co などのレアメタルなどの使用を削減すべく、Cr, Mn, Fe, Ni などを等分量含んだ層状酸化物正極材料の開発に成功しました。2 では、リチウムイオン電池で用いられる炭素系負極材料の3倍以上の容量を有するAl金属負極の開発を行っています。巨大歪を回避する新たな技術確立を、組織形成論に基づいた材料設計等に取り組んでいます。巨大歪回避機構に関する成果は、Nature Communications 11, 1584 (2020) に掲載されました。3 では、リチウムやナトリウムなどのアルカリイオン電析時に発生するデンドライト問題を克服する機構解明およびその技術開発を行っています。溶液中に存在するアルカリイオンの溶媒和構造を改変させることにより、デンドライト防止が可能になることを実証し、Cell Reports Physical Science 3, 100907 (2022) に掲載されました。4 では、ALCA-SPRING 事業の支援を頂き、特に多価電池として有望視されているマグネシウム蓄電池の正極材料の開発に向けた基礎研究を行っています。研究開発経緯を図に示しますが、第1世代のスピネル型酸化物 $MgCo_2O_4$ から、第2世代のZnを含有するスピネル型酸化物、第3世代のZnベースの欠陥スピネル酸化物 $ZnMnO_3$ と開発が進み、100サイクルを超える寿命特性を得ました。この材料は MnO_2 がベースとなっていることに基づいて、温故知新として MnO_2 の多形に着目し、新たな正極材料開発を

市坪 哲 教授

先端エネルギー材料理工共創研究センター長
蓄エネルギー材料研究ユニット
金属材料研究所構造制御機能材料学研究部門

目指しています。また、スピネル構造にMgなどが挿入されると、半整合相転移として岩塩構造が生成しサイクル劣化するのですが、そのような岩塩構造が形成された状況であってもMgイオンの移動が可能となる材料設計をハイエントロピーの概念に基づいて行っています。最後に、5に関しては主に基盤研究Sの支援を受けて行われましたが、1価イオン(Li, Na, Kイオン)および2価イオン(具体的にはMgイオンに限定)が同時に挿入されると、マグネシウムイオンの移動度が顕著に上昇することが示されました。第一原理計算などにより、1価および2価のイオンが協調的に動くことにより、イオン移動の活性化エネルギーが著しく低下することが判明しました。これは、マグネシウムなどの多価イオンは酸化物や硫化物結晶内部で強いクーロン相互作用のために移動しにくい、という既存概念を打ち破るものであり、今後の新たな蓄電池システムへ大いに有効となる考え方と言えます。

熱マネージメント材料に関わる分野としては、6. 新規熱電材料の探索 (岡本准教授)、7. 新しい蓄熱材料の開発 (岡本准教授)、があげられます。6. については、PbTe や BiTe などのカルコゲナイド系化合物の類縁で、全く結晶構造が異なるいくつかの化合物構造を有するCu-Te系に着目し、その結晶構造解析を新たに遂行し、これまで未知であった構造を明らかにするとともに、その熱電特性との関連性について詳細に研究を行っています。熱マネージメント材料の主役となる材料として、蓄熱分野を新たなステージに導くべく研究を精力的に進めています。この有望な蓄熱材料とは、Birnessite としてよく知られた層状型 δ - MnO_2 であり、蓄熱には、この物質をホスト構造として水の脱挿入により、その固体-気体相転移に伴って生じる大きなエントロピー変化を利用します。構造中への水の脱挿入においては $La_2(SO_4)_3 \cdot H_2O$ が Hatada らにより Adv. Mater. 29, 1 (2017) で報告されていますが、水のインターカレーション(層状物質に水分子が脱挿入する)機構をとるものとしては、おそらくこの材料が初めての報告だと思われます。この成果は、Nature Communications 13, 1452 (2022) に掲載されました。まだ引用は少ない

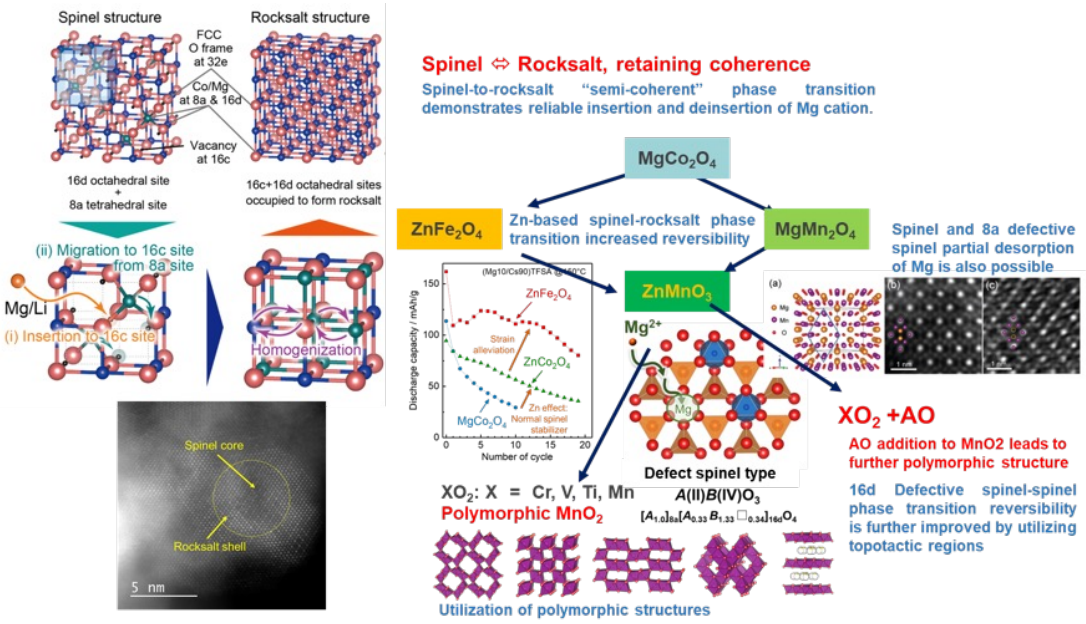


図1 空間群 #227 に割り当てられたスピネル型構造と岩塩型構造 (左)。我々のマグネシウム二次電池の正極材料研究開発の経緯 (右)。

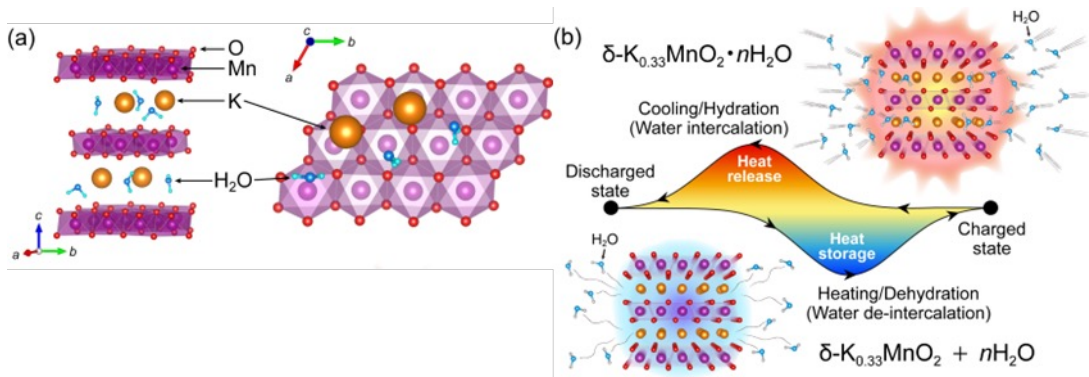


図2 (a) 層状二酸化マンガン $\delta\text{-K}_{0.33}\text{MnO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ の結晶構造. (b) 水分子の脱離・インターカレーション機構による蓄熱・放出反応の模式図。

ものの、関連企業からの問い合わせもあり、今後の蓄熱分野の発展に大きく貢献できるものと期待しています。

(参考) 市坪教授の研究詳細はホームページをご覧ください。
<http://ilab.imr.tohoku.ac.jp/index.html>

先端エネルギー材料研究紹介3

量子ビーム計測×計算科学 —その出会いで広げる材料科学—

藤田 全基 教授

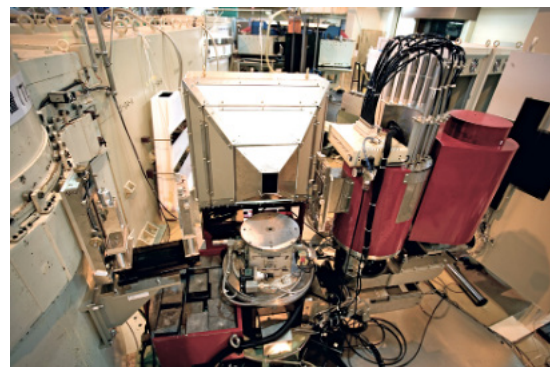
材料評価・解析研究ユニット長
金属材料研究所量子ビーム金属物理学研究部門

2022年度から、材料評価・解析研究ユニットのユニット長を拝命しました藤田です。研究は、スピン物性をテーマに、量子ビームと言う手法で行っています。「二刀流」と言うやや大げさかも知れませんが、スピン物性と量子ビームの両方がキーワードです。前者については、スピンが関与する超伝導現象や量子臨界現象が研究の対象で、新物質の単結晶作成も行っています。材料の観点では、磁性材料やエネルギー材料に通じます。量子ビームとは、中性子ビーム、放射光、ミュオンビームなど高度に制御された粒子や波の流れで、ミクロスケールでモノを観る手法に活用されます。私および私の研究室が、本ユニットにおいて力を発揮できる点は、この量子ビームによる材料評価と言えます。

量子ビームの発生には専用施設や大型機器が必要で、利用にバリアがあることは否めません。しかし、中性子ビームに関して言えば、東北大学は研究用原子炉 JRR-3 および大強度陽子加速器施設 J-PARC に装置を設置しており、金属材料研究所の中性子物質材料研究センターと共に運営の一翼を担う私達は、ほぼいつでも実験や評価を行うことができます。具体的には、構造解析と分光測定が可能で、中性子の特性を活かして、

水素やリチウムなどの軽元素からウランなどの重元素まで幅広い元素と、電子が持つスピンについて、位置と運動を調べるプラットフォームがあります。この環境を本センターの研究でも活用したいと考えています。

また、本ユニットは、材料研究に先端放射光技術を活用される高橋先生と河口先生、高度な計算技術を駆使される熊谷先生と Belosludov 先生が構成メンバーになっておられます。量子ビーム計測と計算科学・データ科学の専門家が集うユニークなユニットで、多角的な評価・解析を実行していく上で、これら先生との協働はとて心強いです。ともすれば、上記の手法は個々の高い独自性のため、相補利用にはなっても融合利用にはなりにくいものです。しかし、我々には、他ユニットで産み出される新材料という、魅力的で共通する研究対象が身近にあります。センターの「材料」が求心力となって、評価・解析手法およびそれを行う人々の化学反応が起こり、材料科学における新しい研究手法が生み出されると期待しております。私自身、わくわく感を持って、その実現に務めたいと思っております。これから、よろしくお願いいたします。



研究用原子炉 JRR-3 に金属材料研究所が設置している中性子回折装置（左）と中性子分光器（右）。原子とスピンの位置および運動に関する情報を得ることができます。

(参考) 藤田教授の研究詳細はホームページをご覧ください。
<http://qblab.imr.tohoku.ac.jp/>

イベント

先端エネルギー材料理工共創研究センター 2022 ワークショップ

開催日：2022年12月22日(木) 13:00 - 17:00

開催場所：東北大学金属材料研究所 講堂、オンラインとのハイブリッド開催

2022年12月22日(木)に金属材料研究所講堂においてワークショップを開催しました。今回は、Zoom Webinarによるオンライン配信と東北大学関係者の会場参加によるハイブリッド方式で行いました。

招待講演1では、文部科学省研究開発局環境エネルギー課長の轟渉様に「カーボンニュートラルの実現に向けた大学等への期待」と題するご講演を、招待講演2では、茨城大学理工学研究科の池田輝之教授より「多元素組成空間における材料探索—環境調和型熱電材料の開発に向けて」と題するご講演をいただきました。

センターの研究紹介では、新たに本センターに参画いただいている工学研究科高村仁教授と国際放射光イノベーション・スマートセンター高橋幸生教授をはじめ、4つの研究ユニットからそれぞれ2名の研究者が発表を行いました。活発な質疑応答を通じて2050年のカーボンニュートラル、脱炭素社会の実現に向けた今後のエネルギー材料研究の方向性や、所内間・学内間・大学間、産業界、自治体等との連携に関する議論を深めることができました。



金属材料研究所長
古原 忠 教授



E-IMR センター長
市坪 哲 教授



文部科学省環境エネルギー課長
轟 渉 様



茨城大学理工学研究科
池田輝之 教授



李 弘毅 特任助教



宗 端端 特任助教

先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR)
2022年度ワークショップ

太陽エネルギーの利用と3つの「蓄」の最大化に貢献する
革新的エネルギー材料・複合モジュール創製

2022.12.22 [木] 13:00 - 17:00
金属材料研究所講堂 / zoomウェビナー ハイブリッド開催

【オープニング】
13:00- 開会あいさつ 金属材料研究所長 古原忠
【招待講演】
13:05- 文部科学省 環境エネルギー課長 轟渉氏
13:45- 茨城大学 理工学研究科 教授 池田輝之氏
<休憩>
【研究発表】
14:35- 先端エネルギー材料理工共創研究センター長 市坪哲
14:45- 太陽エネルギー変換材料研究ユニット長 教授 藤幸樹三
15:00- 太陽エネルギー変換材料研究ユニット 特任助教 野澤純
15:15- 蓄エネルギー材料研究ユニット/工学研究科教授 高村仁
15:30- 蓄エネルギー材料研究ユニット 特任助教 李弘毅
<休憩>
15:55- 材料評価・解析研究ユニット長 教授 藤田全基
16:10- 材料評価・解析研究ユニット/SRIS教授 高橋幸生
16:25- 複合モジュール・社会実装研究ユニット
16:40- 複合モジュール・社会実装研究ユニット 特任助教 宋瑞培
【閉会挨拶】
16:55- 先端エネルギー材料理工共創研究センター長 市坪哲

お知らせ

『東北大学若手研究者による萌芽的なエネルギー材料研究への助成（仮称）』について

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、令和5年度に『東北大学若手研究者による萌芽的なエネルギー材料研究への助成（仮称）』の実施を予定しています。近日中に募集要項を先端エネルギー材料理工共

創研究センターのホームページ (<http://www.e-imr.imr.tohoku.ac.jp/>) にて、ご案内する予定です。応募への検討をお願いいたします。

NEWS LETTER, vol. 6, nos. 1-2

発行：2023年3月31日

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研究支援室



私たちは持続可能な開発目標 (SDGs) を支援しています。