

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4年度
研究成果報告書

2022 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、理学と工学とを融合した「理工共創」の研究を協力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の創成に取り組んできました。

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年度から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は必須ですが、その活用は未だ十分ではありません。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。

第4期中期目標・中期計画が始まる令和4年度から組織の拡充・強化を図り、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と複合モジュール創製に向けた4つの研究ユニット体制に再編し、金属材料研究所のみならず本学他部局の研究者にも新たにご参画いただいております。

具体的な研究ユニットとそれぞれの研究ターゲットは以下の通りです。

- 1) **太陽エネルギー変換材料研究ユニット**では、太陽エネルギーを高効率で光励起変換・熱電変換する材料の開発を目指します。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の追求、太陽電池用多結晶材料の高品質化、ペロブスカイトなどの新規太陽電池などのハイブリッド化に関する研究の推進、太陽エネルギー利用の最大化の鍵ともなる熱電変換材料の開発および熱を貯める蓄熱材料との組み合わせにより、より効果的な蓄熱熱電変換システム構築を目指します。
- 2) **蓄エネルギー材料研究ユニット**では、次世代革新蓄電池・蓄水素および水素高度利用・蓄熱などの蓄エネルギー材料の開発を目指します。太陽エネルギー電気変換後のエネルギー貯蔵を考えるには、蓄電池および水素変換が必要であり、本ユニットでは、蓄エネルギーデバイスのポストリチウム候補として多価イオン電池材料の開発を行い、水素変換・貯蔵・利用にかかわる研究開発を積極的に推進します。
- 3) **材料評価解析研究ユニット**では、エネルギー材料の原子構造および電子構造などの計算科学・マテリアルDXによる評価および高度解析技術の適用を目指します。材料

評価・解析研究では、高性能な観察・計測装置で実施し、取得したデータのデジタル化およびAI解析技術を駆使して、材料設計に資する評価法を確立します。

- 4) **複合モジュール・社会実装研究ユニット**では、エネルギー材料の高性能化を目指したプロセス開発および複合デバイスの社会実装を目指します。学術的な材料研究を実施するだけでなく、社会実装に向けて企業や自治体と共同して研究に取り組み、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。

理学系および工学系研究者によって構成された各研究ユニットでは、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として令和4年度より3名の特任助教を任用しております。また、本学工学研究科や材料科学高等研究所、国際放射光イノベーションセンター (SRIS) 等をはじめとする学内外研究組織の教員・研究者の参画(頭脳循環)によって、これまで金研でカバーしていない領域の研究を進め、カーボンニュートラルに向けた太陽エネルギー利用グリーンエネルギー社会の構築に貢献します。

令和4年度以降、各研究ユニット内および研究ユニットを横断した研究者間の共創研究を基軸に学内外の大学・研究機関とも連携して、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プロジェクトを強力に推進しております。先端エネルギー材料理工共創研究センターの今後の活動にご期待ください。

令和 5(2023)年 7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	1
2. 研究成果報告	3
2-1. 太陽エネルギー変換材料研究ユニット.....	3
2-2. 蓄エネルギー材料研究ユニット	9
2-3. 材料評価・解析研究ユニット	17
2-4. 複合モジュール・社会実装研究ユニット	24
3. 新聞発表等.....	27
3-1. プレスリリース	27
3-2. 新聞等掲載状況.....	28
4. 外部研究資金	33
4-1. 科研費(学術研究助成基金助成金／科学研究費補助金)	33
4-2. 科研費以外の競争的研究費.....	34
5. 知的財産権.....	35
5-1. 特許リスト	35
6. 各種受賞・表彰.....	37
6-1. 受賞リスト	37
7. 主催した会議・研究会・ワークショップ.....	39
7-1. 先端エネルギー材料理工共創研究センター 2022 年度ワークショップ	39
8. 職員及び運営委員名簿	45
令和4(2022)年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター名簿	45
令和4(2022)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	46

1. 概要

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

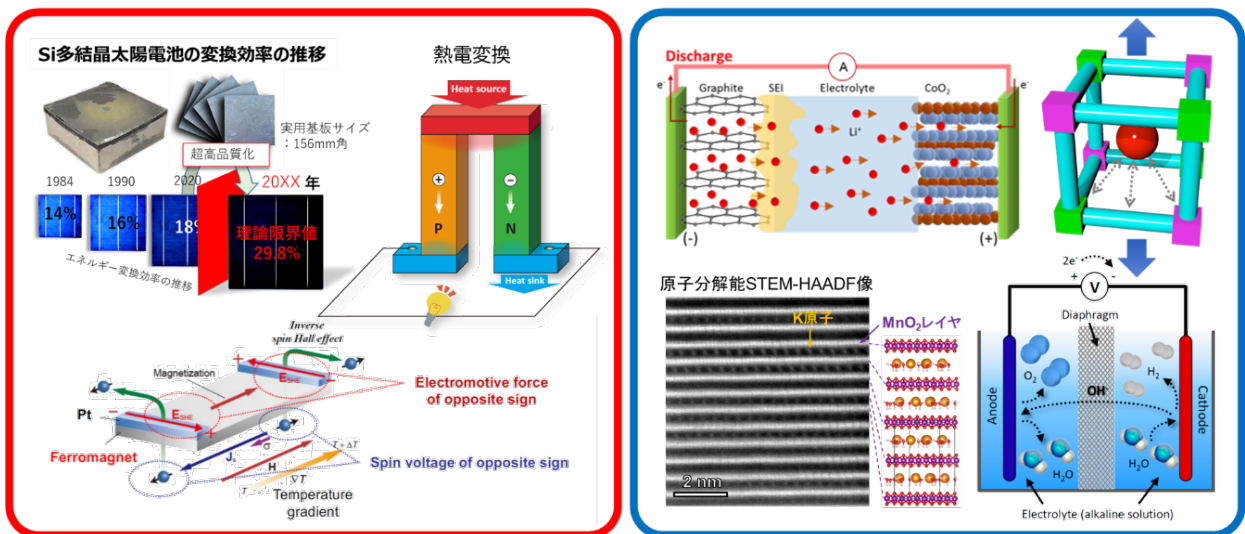
社会の脱炭素化は今や人類全体の課題であり、日本は2030年度の温室効果ガス排出量を2013年度から46%削減することを目指しています。その課題解決に向けて太陽エネルギーの利用は必須ですが、その活用は未だ十分ではありません。太陽光エネルギーで日本の年間エネルギー消費量を賄うためには、国土の約4%を太陽電池パネルで覆うことになりますが、変換効率を2倍に高めるとその半分で済みます。このことから、太陽電池の性能向上は必須です。また、太陽熱も電気に変換して利用できます。熱を蓄えることのできる『蓄熱材料』や熱を電気に変える熱電変換材料の性能を向上させれば、太陽熱も無駄なく利用することが可能となります。また、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



センター長 市坪 哲

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、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。

太陽エネルギー変換 x 「蓄電・蓄熱・蓄水素」なる3蓄の最大化



実施体制

2022年度 研究者一覧



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
機能協調型二次電池



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
電子ビーム
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
コヒーレント回折イメージング
微細構造・化学状態解析



准教授
Belosul'dov, 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
アノードガラス金属・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 瑞瑞
組成分（テアロイニング）
多孔質金属 / 合金触媒

2. 研究成果報告

2-1. 太陽エネルギー変換材料研究ユニット

構成員

教授：藤原 航三、塚崎 敦 (兼)、BAUER, Gerrit Ernst-Wilhelm (兼 AIMR)
委嘱教授：高梨 弘毅 (原研機構)
准教授：岡本 範彦 (兼)
助教：前田 健作 (兼)、伊藤 啓太 (兼)
特任助教：野澤 純

【2022(令和4)年度の成果概要】

・太陽電池用 Si 多結晶の融液成長メカニズムの研究

現在、実用太陽電池の90%以上が、Si単結晶基板を用いた太陽電池である。2000年代初旬から2018年頃まではSi多結晶基板を用いた太陽電池が実用太陽電池の主流であったが、この数年で急速にSi単結晶太陽電池へシフトした。この要因としては、Si単結晶基板の市場価格が低下したことが大きい。一方、Si多結晶太陽電池の変換効率が頭打ちとなっていることも大きな要因の一つである。つまり、現状の結晶成長技術では、Si多結晶インゴットのさらなる品質向上の見通しが立っていないという課題がある。しかしながら、Si多結晶インゴットがSi単結晶インゴットより低コストで製造できるという優位性は失われておらず、将来、Si多結晶インゴットの品質が劇的に向上すれば、再びSi多結晶太陽電池がマーケットシェアを伸ばすことも十分に考えられる。

そこで、本研究では、Si多結晶の融液成長メカニズムを基礎的に解明し、新たな結晶成長技術を開発することを目指している。

当該年度は、融液成長過程における結晶成長速度の異方性について調べた。Siの固液界面は、{111}固液界面が原子的に平坦な“ファセット面”であり、それ以外の界面は原子的に乱れた“ラフ面”であることが知られている。一方で、約1400度という高温においてSiの固液界面の移動速度（結晶成長速度）を実測することが困難であることから、成長速度の異方性に関する報告例は極めて限られている。当グループではその場観察実験により、{111}、{110}、および{100}固液界面の移動速度を実測し、各固液界面の移動速度の相違を明らかにした。

図1(左図)は{110}と{111}の種結晶を横に並べて結晶成長を同時に開始させた際の固液界面の観察結果である。両固液界面とも平坦な形状で移動しているが、{110}固液界面が{111}固液界面よりも前方に位置していることが分かる。つまり、{110}固液界面の移動速度は{111}固液界面の移動速度よりも大きいことが明らかとなった。種結晶の面方位の組み合わせを変えて同様の実験を行った結果、固液界面の移動速度の大小関係は

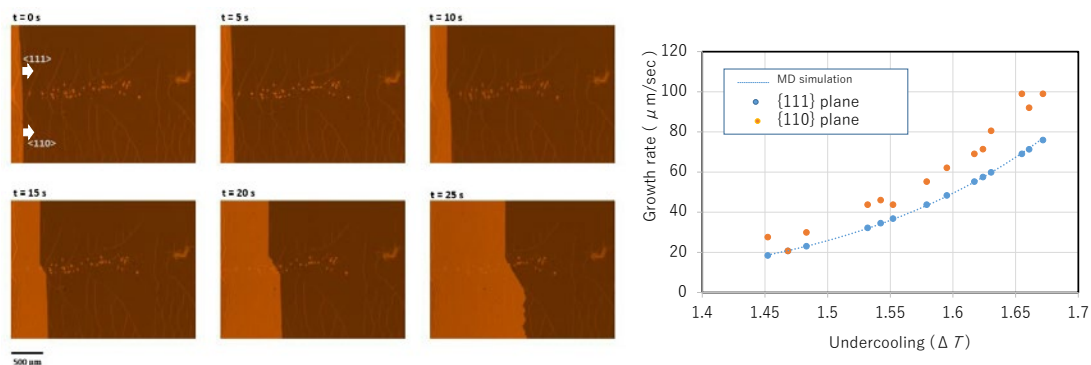


図1 (左) {110} および {111} 固液界面の成長の様子。(右) 過冷却度と成長速度の関係。

{100} ≈ {110} ≫ {111} であることが分かった。これは、ラフ面の結晶成長は付着成長により進行するが、ファセット面の成長には二次元核の形成が必要であるため核形成頻度の小さい低過冷却領域では、ラフ面の成長速度が大きくなるためである。一方、{100} と {110} の成長速度がほぼ同じである理由については、今後さらなる調査が必要である。

・新規太陽電池結晶材料の検討

次世代の太陽電池材料としてヘテロ接合太陽電池の研究が活発に行われている。当グループにおいても新規太陽電池の検討を開始した。Si 結晶基板だけでなく化合物半導体結晶基板上への高品質薄膜成長により高効率太陽電池の実現を目指す。現在、基板として用いる Si 多結晶および化合物半導体 CdTe の新規結晶成長技術の開発に取り組んでいる。

・国際共同研究体制の構築

当該年度は海外の研究者との研究協力体制の構築にも努めた。当グループでは光学的手法により Si の融液成長過程のその場観察実験を行っているが、Aix-Marseille 大の IM2NP-CNRS のグループでは、X 線イメージング法によりその場観察を行っている。当該年度は、当グループの藤原が客員教授として Aix-Marseille 大に滞在し、今後の研究協力体制の基盤を築いた。また、グルノーブル工科大の Thierry Duffar 名誉教授を客員教授として二か月間招聘し、Si の融液成長に関する実験および濃密な議論を行った。また、ドイツの結晶成長研究所 (IKZ) の協力のもと、当グループで使用している結晶成長炉内の温度分布シミュレーションに取り組み始めた。さらに東北大金研の国際共同研究プロジェクト (GIMRT) を利用し、インドの Anna 大および SSN Institutions の研究者と太陽電池材料および熱電材料に関する共同研究を実施した。

【今後の計画】

引き続き、Si の融液成長メカニズムの基礎研究、太陽電池用半導体バルク結晶の新規結晶成長技術開発、高品質薄膜成長技術開発を進める。基礎研究においては海外の研究者とも協力して融液成長の総理解を目指す。特に固液界面における結晶欠陥ダイナミクスの基礎的理解の深化に努める。半導体バルク結晶の新規結晶成長技術開発においては、実用化も視野に入れた大型高品質インゴットの実現を目指す。

【論文リスト】

1. Fujiwara K., Chuang L.-C., Maeda K., Dynamics at crystal/melt interface during solidification of multicrystalline silicon, *High Temperature Materials and Processes*, **41**, 1, 31-47 (2022)
2. Fukuda K., Miyamoto S., Nakahara M., Suzuki S., Dhamrin M., Maeda K., Fujiwara K., Uraoka Y., Usami N., Epitaxial growth of SiGe films by annealing Al-Ge alloyed pastes on Si substrate, *Scientific Reports*, **12**, 1, (2022)
3. Mishra S.S., Chuang L.-C., Maeda K., Nozawa J., Morito H., Fujiwara K., Difference in growth rates at {1 1 0} and {1 1 1} crystal/melt interfaces of silicon, *Journal of Crystal Growth*, **593**, (2022)
4. Nozawa J., Uda S., Niinomi H., Okada J., Fujiwara K., Heteroepitaxial Growth of Colloidal Crystals: Dependence of the Growth Mode on the Interparticle Interactions and Lattice Spacing, *Journal of Physical Chemistry Letters*, **13**, 30, 6995-7000 (2022)
5. Shiga K., Maeda K., Morito H., Fujiwara K., Facet formation during the solidification of pure antimony, *Journal of Crystal Growth*, **586**, (2022)
6. Shiga K., Takahashi A., Chuang L.-C., Maeda K., Morito H., Fujiwara K., Twin boundary formation at a grain-boundary groove during the directional solidification of InSb, *Journal of Crystal Growth*, **577**, (2022)

7. Sidharth D., Alagar Nedunchezian A.S., Rajkumar R., Kalaiarasan K., Arivanandhan M., Fujiwara K., Anbalagan G., Jayavel R., Thermoelectric performance of multiphase GeSe-CuSe composites prepared by hydrogen decrepitation method, *International Journal of Energy Research*, **46**, 12, 17455-17464(2022)
8. Okazaki Y., Oe T., Kawamura M., Yoshimi R., Nakamura S., Takada S., Mogi M., Takahashi K.S., Tsukazaki A., Kawasaki M., Tokura Y., Kaneko N.-H., Quantum anomalous Hall effect with a permanent magnet defines a quantum resistance standard, *Nature Physics*, **18**, 1, 25-29(2022)
9. Shiogai J., Jin Z., Satake Y., Fujiwara K., Tsukazaki A., Improvement of the detectivity in an Fe-Sn magnetic-field sensor with a large current injection, *Japanese Journal of Applied Physics*, **61**, (2022)
10. Yoshikawa N., Ogawa K., Hirai Y., Fujiwara K., Ikeda J., Tsukazaki A., Shimano R., Non-volatile chirality switching by all-optical magnetization reversal in ferromagnetic Weyl semimetal $\text{Co}_3\text{Sn}_2\text{S}_2$, *Communications Physics*, **5**, 1, (2022)
11. Shiogai J., Fujiwara K., Nojima T., Tsukazaki A., A large unidirectional magnetoresistance in Fe-Sn heterostructure devices, *Japanese Journal of Applied Physics*, **61**, 8, (2022)
12. Fujiwara K., Shibata K., Nishimura S., Shiogai J., Tsukazaki A., L21 ordering of Co_2FeSn thin films promoted by high-temperature annealing, *AIP Advances*, **12**, 6, (2022)
13. Chumak A.V., Kabos P., Wu M., Abert C., Adelmann C., Adeyeye A.O., Akerman J., Aliev F.G., Anane A., Awad A., Back C.H., Barman A., Bauer G.E.W., Becherer M., Beginin E.N., Bittencourt V.A.S.V., Blanter Y.M., Bortolotti P., Boventer I., Bozhko D.A., Bunyaev S.A., Carmiggelt J.J., Cheenikundil R.R., Ciubotaru F., Cotofana S., Csaba G., Dobrovolskiy O.V., Dubs C., Elyasi M., Fripp K.G., Fulara H., Golovchanskiy I.A., Gonzalez-Ballester C., Graczyk P., Grundler D., Gruszecki P., Gubbiotti G., Guslienko K., Haldar A., Hamdioui S., Hertel R., Hillebrands B., Hioki T., Houshang A., Hu C.-M., Huebl H., Huth M., Iacocca E., Jungfleisch M.B., Kakazei G.N., Khitun A., Khymyn R., Kikkawa T., Klaui M., Klein O., Klos J.W., Knauer S., Koraltan S., Kostylev M., Krawczyk M., Krivorotov I.N., Kruglyak V.V., Lachance-Quirion D., Ladak S., Lebrun R., Li Y., Lindner M., MacEdo R., Mayr S., Melkov G.A., Mieszczak S., Nakamura Y., Nembach H.T., Nikitin A.A., Nikitov S.A., Novosad V., Otalora J.A., Otani Y., Papp A., Pigeau B., Pirro P., Porod W., Porrati F., Qin H., Rana B., Reimann T., Riente F., Romero-Isart O., Ross A., Sadovnikov A.V., Safin A.R., Saitoh E., Schmidt G., Schultheiss H., Schultheiss K., Serga A.A., Sharma S., Shaw J.M., Suess D., Surzhenko O., Szulc K., Taniguchi T., Urbanek M., Usami K., Ustinov A.B., Van Der Sar T., Van Dijken S., Vasyuchka V.I., Verba R., Kusminskiy S.V., Wang Q., Weides M., Weiler M., Wintz S., Wolski S.P., Zhang X., Advances in Magnetism Roadmap on Spin-Wave Computing, *IEEE Transactions on Magnetics*, **58**, 6, (2022)
14. Zare Rameshti B., Viola Kusminskiy S., Haigh J.A., Usami K., Lachance-Quirion D., Nakamura Y., Hu C.-M., Tang H.X., Bauer G.E.W., Blanter Y.M., Cavity magnonics, *Physics Reports*, **979**, 1-61(2022)
15. An K., Kohno R., Litvinenko A.N., Seeger R.L., Naletov V.V., Vila L., De Loubens G., Ben Youssef J., Vukadinovic N., Bauer G.E.W., Slavin A.N., Tiberkevich V.S., Klein O., Bright and Dark States of Two Distant Macrospins Strongly Coupled by Phonons, *Physical Review X*, **12**, 1 (2022)
16. Kounalakis M., Bauer G.E.W., Blanter Y.M., Analog Quantum Control of Magnonic Cat States on a Chip by a Superconducting Qubit, *Physical Review Letters*, **129**, 3, (2022)
17. Tang P., Iguchi R., Uchida K.-I., Bauer G.E.W., Excitations of the ferroelectric order, *Physical Review B*, **106**, 8, (2022)

18. Bauer G.E.W., Tang P., Iguchi R., Uchida K.-I., Magnonics vs. Ferronics, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **541**, (2022)
19. Tang P., Iguchi R., Uchida K.-I., Bauer G.E., Thermoelectric Polarization Transport in Ferroelectric Ballistic Point Contacts, *Physical Review Letters*, **128**, 4, (2022)
20. Feringa F., Bauer G.E.W., Van Wees B.J., Observation of magnetization surface textures of the van der Waals antiferromagnet FePS₃ by spin Hall magnetoresistance, *Physical Review B*, **105**, 21, (2022)
21. Elyasi M., Saitoh E., Bauer G.E.W., Stochasticity of the magnon parametron, *Physical Review B*, **105**, 5, (2022)
22. Wei X.-Y., Santos O.A., Lusero C.H.S., Bauer G.E.W., Ben Youssef J., van Wees B.J., Giant magnon spin conductivity in ultrathin yttrium iron garnet films, *Nature Materials*, **21**, 12, 1352-1356(2022)
23. Schlitz R., Siegl L., Sato T., Yu W., Bauer G.E.W., Huebl H., Goennenwein S.T.B., Magnetization dynamics affected by phonon pumping, *Physical Review B*, **106**, 1, (2022)
24. Yu T., Bauer G.E.W., Efficient Gating of Magnons by Proximity Superconductors, *Physical Review Letters*, **129**, 11, (2022)
25. Fedorov D.V., Gradhand M., Tauber K., Bauer G.E.W., Mertig I., Seebeck effect in nanomagnets, *Journal of Physics Condensed Matter*, **34**, 8, (2022)
26. Kameda M., Bauer G.E.W., Barker J., Magnon spectrum of the amorphous ferromagnet Co₄P from atomistic spin dynamics, *Physical Review B*, **106**, 6, (2022)
27. Ito K., Honda S., Suemasu T., Transition metal nitrides and their mixed crystals for spintronics, *Nanotechnology*, **33**, 6, (2022)
28. Wang J., Lau Y.-C., Zhou W., Seki T., Sakuraba Y., Kubota T., Ito K., Takanashi K., Strain-Induced Large Anomalous Nernst Effect in Polycrystalline Co₂MnGa/AlN Multilayers, *Advanced Electronic Materials*, **8**, 9, (2022)
29. Yamazaki T., Seki T., Modak R., Nakagawara K., Hirai T., Ito K., Uchida K.-I., Takanashi K., Thickness dependence of anomalous Hall and Nernst effects in Ni-Fe thin films, *Physical Review B*, **105**, 21, (2022)
30. Ito K., Wang J., Shimada Y., Sharma H., Mizuguchi M., Takanashi K., Enhancement of the anomalous Nernst effect in epitaxial Fe₄N films grown on SrTiO₃(001) substrates with oxygen deficient layers, *Journal of Applied Physics*, **132**, 13, (2022)
31. Ito K., Kikuchi N., Seki T., Takanashi K., Perpendicularly magnetized epitaxial Co/Ni multilayers grown on Ru(0001) layers by alternate monoatomic layer deposition, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **563**, (2022)
32. Nozawa J., Uda S., Toyotama A., Yamanaka J., Niinomi H., Okada J., Heteroepitaxial fabrication of binary colloidal crystals by a balance of interparticle interaction and lattice spacing, *Journal of Colloid and Interface Science*, **608**, 873-881(2022)

【主な国際会議】

1. Gerrit Ernst-Wilhelm Bauer, APCC15, Ferronics vs. Magnonics, 2022-08, Korea(virtual)
2. Gerrit Ernst-Wilhelm Bauer, Northern Lights Conference 2022, Magnonics versus Ferronics, 2022-10, Reykjavik, Iceland
3. Gerrit Ernst-Wilhelm Bauer, Second International Spintronics Workshop - Spin Argentina 2022, Ferronics vs. Magnonics, 2022-11, Bariloche, Argentina

4. Norihiko L. Okamoto, Kosuke Fujiwara, Tomoki Hayashi, Tetsu Ichitsubo, SIPS2022, Mizutani Symposium, Anisotropic Transport Properties in an Iron Aluminide Consisting of a Tunnel Framework Structure and Guest Aluminum Atoms, 2022-11
5. Keita Ito, Takumi Ichimura, Takahiro Nishio, Hiroaki Kura, Hideto Yanagihara, Koki Takanashi, 24th International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces, Structures and magnetic properties of variant-free (110)-oriented $L1_0$ -FeNi films fabricated by a denitriding method, 2022-07
6. Takahiro Nishio, Hiroaki Kura, Keita Ito, Koki Takanashi, Hideto Yanagihara, 11th International Conference on Fine Particle Magnetism, Magnetism of $L1_0$ -FeNi films with island structures fabricated by nitrogen insertion and topotactic extraction technique, 2022-10
7. Weida Yin, Keita Ito, Yusuke Tsubowa, Masahito Tsujikawa, Masafumi Shirai, Koki Takanashi, 67th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Anomalous Nernst effect in epitaxially grown $Fe_{4-x}Ni_xN$ films, 2022-11
8. Keita Ito, Koki Takanashi, The 6th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics, and the 5th Symposium on International Joint Graduate Program in Materials Science, Modulation of the Anomalous Nernst Effect in Nitride Films on $SrTiO_3$, 2022-10

【主な国内会議】

1. 塚崎 敦、第 142 回東北大学金属材料研究所講演会、薄膜化学で拓くトポロジカル界面物性、2022-05
2. 戸崎烈, 阿部亮太, Martin Luckabauer, 岡本範彦, 市坪哲、第 6 回金属材料研究所構造材料研究部会、 β 型 Ti 合金の変形モード遷移を利用した α 相析出と力学特性向上、2022-09
3. 岡本範彦, 吉迫大輝, 市坪哲、第 6 回金属材料研究所構造材料研究部会、特異な電子回折図形を示す層状二酸化マンガンの結晶構造解析、2022-09
4. 戸崎烈, 阿部亮太, Martin Luckabauer, 岡本範彦, 市坪哲、第 171 回日本金属学会秋期講演大会、4. β 型 Ti 合金の変形モード遷移を利用した α 相析出と力学特性向上、2022-09
5. 岡本範彦, 小林駿斗, 市坪哲、第 184 回日本鉄鋼協会秋季講演大会、溶融亜鉛めっき鋼のめっきまま高力ボルト摩擦接合部のすべり挙動、2022-09
6. 張宇陽, 岡本範彦, 市坪哲、日本金属学会第 172 回春期講演大会、 $Cu_{2-\delta}Te$ 系化合物の低温規則相群の結晶構造解明と熱電特性評価、2023-03
7. 岡本範彦, 畠山 拓也, 吉迫 大輝, 市坪 哲、日本金属学会第 172 回春期講演大会、水分子脱挿入に伴う吸発熱を利用した層状二酸化マンガン蓄熱材料、2023-03
8. 伊藤啓太, Himanshu Sharma, 水口将輝, 高梨弘毅、第 46 回日本磁気学会学術講演会、 $SrTiO_3$ 基板上の窒化物薄膜における異常ネルンスト効果の変調、2022-09
9. Weida Yin, Keita Ito, Yusuke Tsubowa, Masahito Tsujikawa, Masafumi Shirai, Koki Takanashi, 第 46 回日本磁気学会学術講演会、Characterization of the anomalous Nernst effect in $Fe_{4-x}Ni_xN$ films、2022-09
10. Weida Yin, Keita Ito, Yusuke Tsubowa, Masahito Tsujikawa, Masafumi Shirai, Koki Takanashi, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会、Anomalous Nernst effect in $Fe_{4-x}Ni_xN$ and $Fe_{4-x}Co_xN$ films grown by molecular beam epitaxy、2022-09
11. 伊藤啓太、強制的秩序とその操作に関わる第 15 回夏の学校、窒化物を用いた高磁気異方性材料と磁気熱電材料の開発、2022-09

12. Weida Yin, Keita Ito, Masahito Tsujikawa, Masafumi Shirai, Koki Takanashi、日本金属学会 2023 年春季(第 172 回)講演大会、 Anomalous Nernst effect in $\text{Fe}_{4-x}\text{Mn}_x\text{N}$ films grown by molecular beam epitaxy、 2023-03
13. Hao Ding, Takeshi Seki, Keita Ito, Yasushi Endo, Koki Takanashi、 第 70 回応用物理学会春季学術講演会、 Structure and magnetic properties of epitaxial Fe-Ga thin films、 2023-03

2-2. 蓄エネルギー材料研究ユニット

構成員

教授：宮坂 等（兼）、市坪 哲（兼）、折茂 慎一（兼 AIMR）、
高村 仁（兼 工学）

助教：木須 一彰（兼）

特任助教：李 弘毅

【2022(令和4)年度の成果概要】

分子吸着材料における吸着ゲート開閉温度の解明（宮坂グループ）

低次元の金属錯体格子（MOF/PCP と呼ばれる）からなる吸着材料は、その特異な構造や機能により様々な分子を吸着させることができ、エネルギー貯蔵や変換、環境問題に関連する物質の吸着などへの応用が期待されていることから、次世代吸着材料として近年精力的に研究されている。一次元鎖錯体[Ru₂(*p*-MeOPhCO₂)₄(phenazine)] (図1) は、大気圧 (100 kPa) の CO₂ 下にて 385 K という高温でもゲート型吸着挙動を示すことが明らかとなった。このゲート開閉温度(T_G)は、従来報告された同型の鎖状錯体における T_G 温度 (200–270 K) に比べて著しく高い。 T_G は、吸着熱 (ΔH_G) と吸着エントロピー (ΔS_G) を用いて $T_G = \Delta H_G / \Delta S_G$ と表されるが、Clausius-Clapeyron 解析より ΔH_G に大きな違いは見出されなかったことから、高い T_G の値は主に ΔS_G に由来していることが示唆された。CO₂ 吸着相の構造を比較したところ、今回の化合物のみが、二次元的な広がりを持つ細孔ネットワークを有しているのに対し、他の化合物では一次元的な、あるいは分断された孤立型の空孔であった。すなわち、細孔次元性の違いが ΔS_G に反映され T_G を決定している事が明らかとなった。ゲート型吸着は、ガス分離などの機能性発現において重要な役割を果たす機構であるが、本結果はいまだに不明な点の多い MOF/PCP 材料のゲート型吸着現象を解釈する上で有用な洞察を提供するものである。

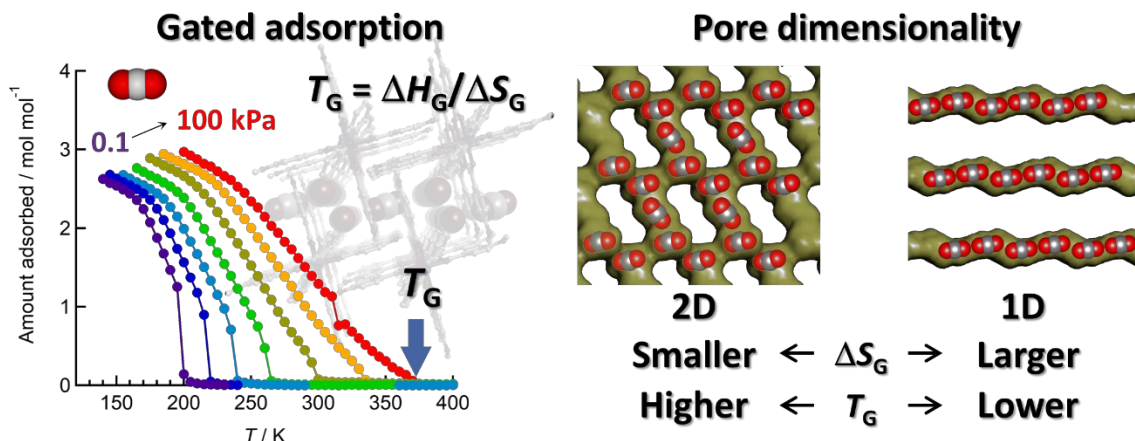


図1 一次元鎖錯体[Ru₂(*p*-MeOPhCO₂)₄(phenazine)]の構造と二酸化炭素吸着における等圧温度変化。細孔構造の次元が高い場合（本材料）、吸着エントロピー変化が小さくなり、高温でも二酸化炭素を吸着する。

室温マグネシウム蓄電池の酸化物正極と電解液の適合性調査（市坪・李グループ）

マグネシウム蓄電池は、その豊富な資源量と高い理論エネルギー密度から、ポストリチウムイオン電池の候補として有望視されている。しかし、室温において酸化物正極と Mg 金属負極を用いて実用的な電池を構築した報告はまだ多くはない。本研究グループはこれま

で、中温域 (150°C) において、 MgCoO_2 や ZnMnO_3 などのスピネル型酸化物正極を開発し、 MnO_2 多形正極の Mg イオン挿入に伴う相変態挙動を解明した。室温作動のマグネシウム蓄電池の実現に向け、本研究では、 $\text{Mg}[\text{TFSA}]_2/\text{G3}$ および $\text{Mg}[\text{Al}(\text{hfip})_4]_2/\text{G3}$ の2つの代表的な電解液において、 MnO_2 多形正極の反応挙動を比較した。 $\text{Mg}[\text{TFSA}]_2/\text{G3}$ では、 MnO_2 正極の放電容量は Mg の組成変化とよく一致しており、ナノロッド状の $\alpha\text{-MnO}_2$ や $\lambda\text{-MnO}_2$ 正極は室温で約 100mAh g^{-1} の容量を示した。しかし、この電解液は、 Mg 金属負極が不動態化しやすいという欠点がある。一方、 $\text{Mg}[\text{Al}(\text{hfip})_4]_2/\text{G3}$ では、高いクーロン効率で Mg 金属負極の可逆的な析出・溶解が可能であるが、 MnO_2 正極の放電過程では副反応が生じており、 Mg 挿入の代わりに MnO_2 正極が溶媒とともに還元分解する傾向があることが判明した。このような2種類の電解液における反応挙動の違いは、電解液の下図に示すように溶媒と構造の違いに起因しており、室温マグネシウム蓄電池を構築するため、酸化物正極と電解質の界面安定性を向上させることが重要であることが明らかになった。

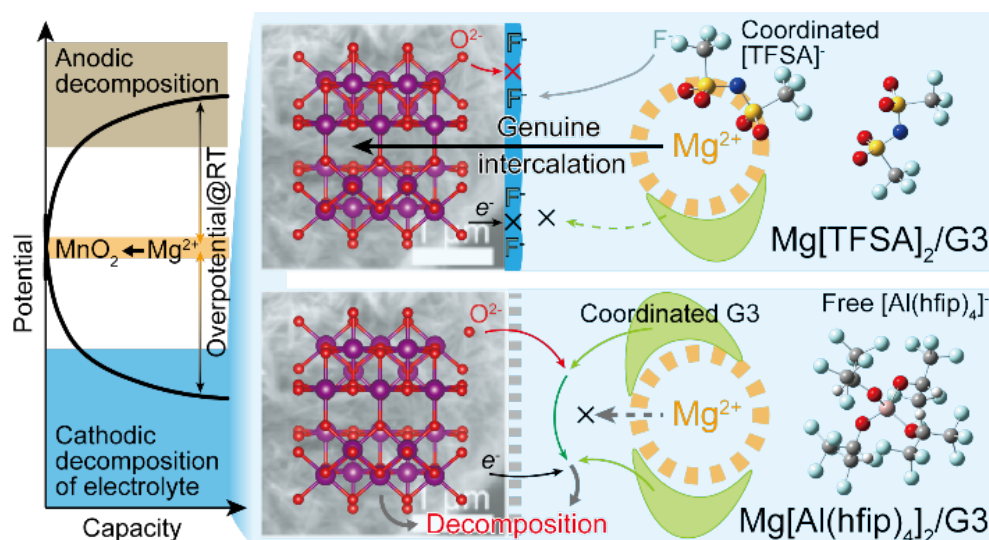


図2 電解液の溶液構造による $\alpha\text{-MnO}_2$ 正極の反応挙動の変化

多価イオン伝導体としての錯体水素化物水和物の開発 (折茂・木須グループ)

全固体型の多価蓄電池を目指し、クロソ系錯体水素化物の新たな多価イオン伝導体の探索研究に取り組んだ。2022年度は、錯体水素化物 $\text{MB}_{12}\text{H}_{12}\text{-nH}_2\text{O}$ ($\text{M}=\text{Zn}$ or Mg , $n=0\text{-}12$) を開発し、その構造とイオン伝導の関係を明らかにした。 $\text{NaB}_{12}\text{H}_{12}$ を出発原料として、イオン交換・中和反応・環境制御 (湿度・温度・圧力) によって、水和数の異なる Zn 系水素化物および Mg 系水素化物の単体合成に成功した。イオン伝導特性を電気化学的手法によって評価した結果、 Zn 系および Mg 系どちらにもおいても $n=12$ の試料において優れたイオン伝導率を有することがわかった (図2)。 $\text{ZnB}_{12}\text{H}_{12}\text{-}12\text{H}_2\text{O}$ の NMR 測定からは、(1) Zn イオンの伝導、(2) $\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ アニオンの回転運動、(3) Zn へ直接配位している H_2O と配位していない H_2O 間における交換反応、それぞれを示すシグナルが確認された。一方、その他の水和物または無水物については、これらのシグナルは得られていない。この結果より、 $\text{ZnB}_{12}\text{H}_{12}\text{-nH}_2\text{O}$ において、中性分子である水分子数によって構造変化の柔軟性が増すことで、イオン伝導を促していることが示唆された。さらに、 $\text{ZnB}_{12}\text{H}_{12}\text{-}12\text{H}_2\text{O}$ を固体電解質、有機物系正極材料、亜鉛金属負極を用いた全固体電池を構築からは可逆な充放電特性が確認されており蓄電池動作を実証した。

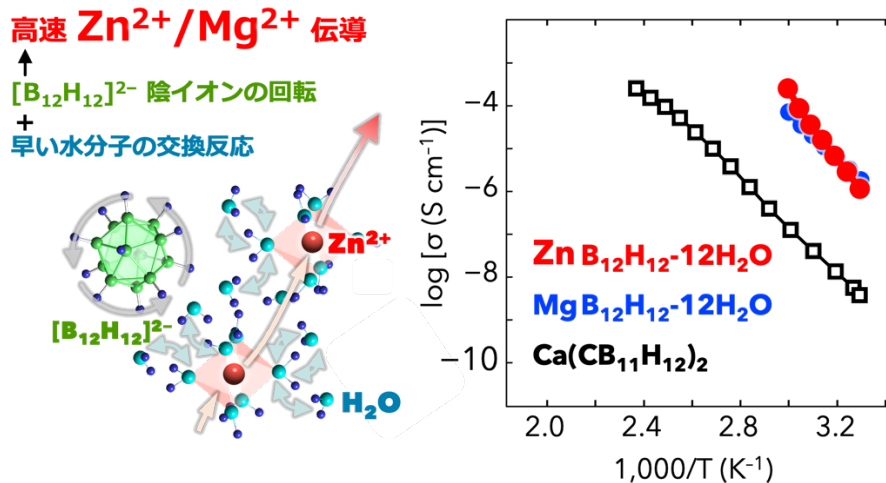


図3 ZnB₁₂H₁₂-12H₂O イオン伝導体のイオン伝導を示すイラスト。赤色、緑色、水色、青色の球体はそれぞれ、亜鉛、ホウ素、酸素、水素原子を表す。正二十面体は、個々のモノカルボランユニットを表している（左）。ZnB₁₂H₁₂-12H₂O、MgB₁₂H₁₂-12H₂O、Ca(CB₁₁H₁₂)₂（2021年度における成果）のイオン伝導度と温度の関係図（右）。

排ガス浄化用酸素貯蔵セラミックスの低温作動化（高村グループ）

自動車産業では電動化に加え、欧州で策定中の排ガス規制強化への対応が喫緊の課題である。この規制では有害ガス排出量のさらなる厳格化に加えて、規制物質の追加も検討されている模様であり、これらに対処するためには、エンジンの高性能化に加えて排ガス浄化触媒の高性能化・高機能化が必須である。排ガス浄化触媒は、ハニカム構造体、パラジウム等の貴金属触媒、助触媒と呼ばれる酸素貯蔵セラミックスから構成され、酸素貯蔵セラミックスには低い作動温度で十分な貯蔵量が求められている。これまでセリウム・ジルコニウム系酸化物へのコバルトや鉄などの遷移金属添加により酸素貯蔵量が向上することは知られていたが、添加元素の存在状態や性能向上の機構については諸説あり未解明であった。本研究ユニットでは、コバルトと鉄からなる酸化物（スピネル型酸化物）が強い磁性を持つことに着目し、精密磁化測定を用いて5%以下であればコバルトと鉄がセリウム・ジルコニウム系酸化物に固溶することを明らかにした。この5%のコバルトと鉄を含むセリウム・ジルコニウム系酸化物では、図4に示すように400℃という酸素貯蔵セラミックスとしては低い作動温度において、貴金属なしの条件下で既存材料の13.5倍の貯蔵量を示した。同時に、酸化物表面での酸素解離と取り込み速度もコバルトと鉄の固溶により向上し、その温度において十分なサイクル特性も確認された。さらに、鉄を添加したセリウム・ジルコニウム系酸化物では、図5に示すセリウムとジルコニウムが規則的に配列した特殊な結晶構造(κ構造)の生成が低温で促進された。これまで、この規則構造がより高い酸素貯蔵量を示すことは知られていたが、作製には1200℃・水素中という高温での強還元処理が必要であり、製造プロセスとして難しいことや、高温の熱処理により酸化物粒子が粗大化するため助触媒に求められる大きな比表面積を維持できず、実用化は困難であった。今回、鉄酸化物を添加するだけで、その規則構造がこれまでより400℃低い800℃で出現することが判明した。この低温合成された規則構造を持つ粒子は、比表面積を従来方法よりも大きく維持できるため実用化が期待される。

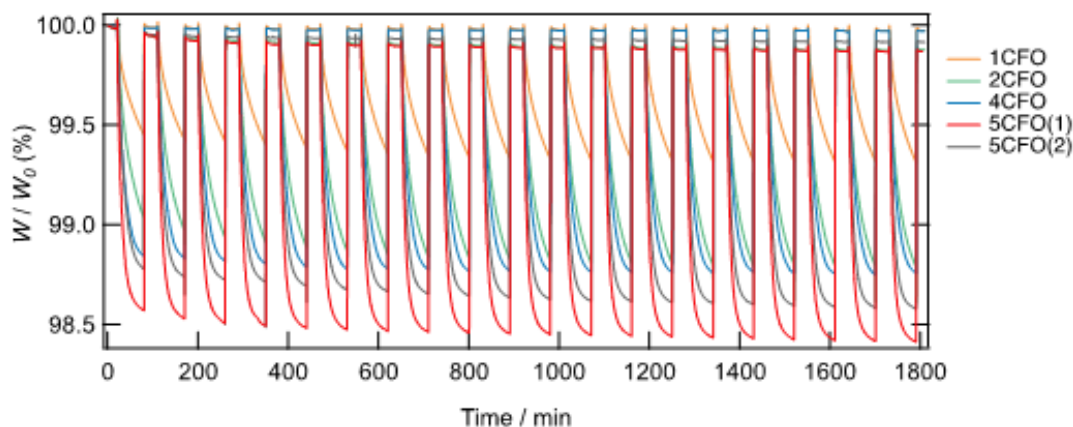


図4 開発材料の 400 °Cにおける酸素貯蔵特性（セラミックス材料のみの特性）

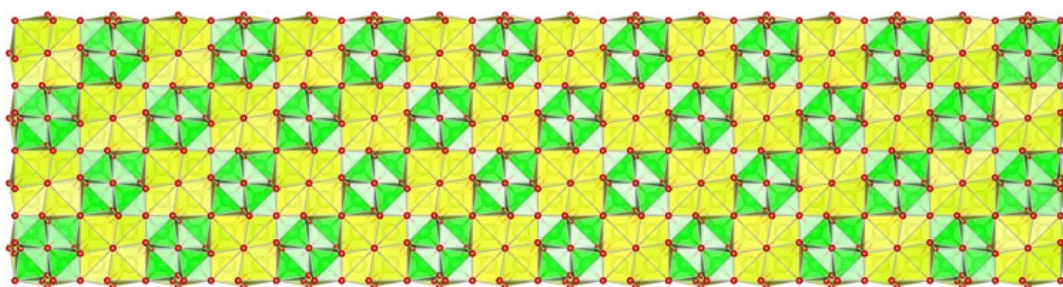


図5 セリウムとジルコニウムが規則的に配列した結晶構造（ κ 構造）

【今後の計画】

- 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、光触媒 CO₂ 分解反応、光触媒 H₂ 発生について検討を行う（宮坂 G）。
- マグネシウム蓄電池の正極・電解液界面安定化とデバイス設計（市坪・李 G）
- デュアルカチオンや合金反応を利用したアルカリ金属負極の析出・溶解可逆性向上（市坪・李 G）
- リチウム蓄電池用圧延アルミ箔の合金組織設計と電解液組成の最適化（市坪・李 G）
- 中性分子として有機分子を用いることで、より化学的・電気化学的安定性に優れるイオン伝導体・固体電解質を開発する（折茂・木須 G）。
- M(CB₁₁H₁₂)₂を母体とした水和物における材料探索を行う（折茂 G、木須 G）。
- パラジウム等の貴金属ナノ粒子と共にハニカム型触媒に搭載し、その排ガス浄化性能や寿命を評価（高村 G）
- 酸化物の規則—不規則変態を微量元素添加により制御する新たな手法として多様な結晶系に展開（高村 G）

【論文リスト】

1. Hatakeyama T., Okamoto N.L., Ichitsubo T., Thermal stability of MnO₂ polymorphs, *Journal of Solid State Chemistry*, **305**, (2022)
2. Shimokawa K., Matsubara S., Okamoto A., Ichitsubo T., Light-induced Li extraction from LiMn₂O₄/TiO₂ in a water-in-salt electrolyte for photo-rechargeable batteries, *Chemical Communications*, **58**, 69, 9634–9637 (2022)
3. Li H., Murayama M., Ichitsubo T., Dendrite-free alkali metal electrodeposition from contact-ion-pair state induced by mixing alkaline earth cation, *Cell Reports Physical Science*, **3**, 6, (2022)

4. Hatakeyama T., Okamoto N.L., Otake S., Sato H., Li H., Ichitsubo T., Excellently balanced water-intercalation-type heat-storage oxide, *Nature Communications*, **13**, 1, (2022)
5. Kawaguchi T., Bian X., Hatakeyama T., Li H., Ichitsubo T., Influences of Enhanced Entropy in Layered Rocksalt Oxide Cathodes for Lithium-Ion Batteries, *ACS Applied Energy Materials*, **5**, 4, 4369-4381(2022)
6. Ye X., Li H., Hatakeyama T., Kobayashi H., Mandai T., Okamoto N.L., Ichitsubo T., Examining Electrolyte Compatibility on Polymorphic MnO₂ Cathodes for Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries, *ACS Applied Materials and Interfaces*, (2022)
7. Han J., Yagi S., Takeuchi H., Nakayama M., Ichitsubo T., Control of Electrolyte Decomposition by Mixing Transition Metal Ions in Spinel Oxides as Positive Electrode Active Materials for Mg Rechargeable Batteries, *Journal of Physical Chemistry C*, **126**, 45, 19074-19083(2022)
8. Zhang J., Kosaka W., Kitagawa Y., Miyasaka H., A Host-Guest Electron Transfer Mechanism for Magnetic and Electronic Modifications in a Redox-Active Metal-Organic Framework, *Angewandte Chemie - International Edition*, **61**, 18, (2022)
9. Huang P.-J., Taniguchi K., Miyasaka H., Crucial Contribution of Polarity for the Bulk Photovoltaic Effect in a Series of Noncentrosymmetric Two-Dimensional Organic-Inorganic Hybrid Perovskites, *Chemistry of Materials* (2022)
10. Kosaka W., Watanabe Y., Aliyah K.H., Miyasaka H., Role of intramolecular hydrogen bonding in the redox chemistry of hydroxybenzoate-bridged paddlewheel diruthenium(ii, ii) complexes, *Dalton Transactions*, **51**, 1, 85-94(2022)
11. Kosaka W., Watanabe Y., Itoh C., Miyasaka H., High Stabilization of Low Valency in a Homoleptic ortho-Hydroxybenzoate-bridged Paddlewheel Diruthenium(II, II) Complex, *Chemistry Letters*, **51**, 7, 731-734(2022)
12. Kosaka W., Nemoto H., Nagano K., Kawaguchi S., Sugimoto K., Miyasaka H., Inter-layer magnetic tuning by gas adsorption in π -stacked pillared-layer framework magnets, *Chemical Science*, **14**, 4, 791-800(2022)
13. Kosaka W., Zhang J., Watanabe Y., Miyasaka H., Considerations on Gated CO₂ Adsorption Behavior in One-Dimensional Porous Coordination Polymers Based on Paddlewheel-Type Dimetal Complexes: What Determines Gate-Opening Temperatures? *Inorganic Chemistry*, **61**, 32, 12698-12707(2022)
14. Cuevas F., Amdisen M.B., Baricco M., Buckley C.E., Cho Y.W., De Jongh P., De Kort L.M., Grinderslev J.B., Gulino V., Hauback B.C., Heere M., Humphries T., Jensen T.R., Kim S., Kisu K., Lee Y.-S., Li H.-W., Mohtadi R., Møller K.T., Ngene P., Noréus D., Orimo S.-I., Paskevicius M., Polanski M., Sartori S., Skov L.N., Sørby M.H., Wood B.C., Yartys V.A., Zhu M., Latroche M., Metallic and complex hydride-based electrochemical storage of energy, *Progress in Energy*, **4**, 3, (2022)
15. Dematteis E.M., Amdisen M.B., Autrey T., Barale J., Bowden M.E., Buckley C.E., Cho Y.W., Deledda S., Dornheim M., De Jongh P., Grinderslev J.B., Gizer G., Gulino V., Hauback B.C., Heere M., Heo T.W., Humphries T.D., Jensen T.R., Kang S.Y., Lee Y.-S., Li H.-W., Li S., Møller K.T., Ngene P., Orimo S.-I., Paskevicius M., Polanski M., Takagi S., Wan L., Wood B.C., Hirscher M., Baricco M., Hydrogen storage in complex hydrides: Past activities and new trends, *Progress in Energy*, **4**, 3, (2022)
16. Fukutani K., Yoshinobu J., Yamauchi M., Shima T., Orimo S., Hydrogenomics: Efficient and Selective Hydrogenation of Stable Molecules Utilizing Three Aspects of Hydrogen, *Catalysis Letters*, **152**, 6, 1583-1597(2022)
17. Grewal M.S., Kisu K., Orimo S.-I., Yabu H., Increasing the ionic conductivity and lithium-ion transport of photo-cross-linked polymer with hexagonal arranged porous film hybrids, *iScience*, **25**, 9, (2022)
18. Kisu K., Dorai A., Kim S., Hamada R., Kumatani A., Horiguchi Y., Sato R., Sau

- K., Takagi S., Orimo S.-I., Fast divalent conduction in $MB_{12}H_{12} \cdot 12H_2O$ (M = Zn, Mg) complex hydrides: effects of rapid crystal water exchange and application for solid-state electrolytes, *Journal of Materials Chemistry A*, **10**, 46, 24877–24887(2022)
19. Nakayama R., Kawaguchi Y., Shimizu R., Nishio K., Oguchi H., Kim S., Orimo S.-I., Hitosugi T., Fabrication and Growth Orientation Control of $NaBH_4$ Epitaxial Thin Films Using Infrared Pulsed-Laser Deposition, *Crystal Growth and Design*, **22**, 11, 6616–6621(2022)
 20. Ohmasa Y., Takagi S., Toshima K., Yokoyama K., Endo W., Orimo S.-I., Saitoh H., Yamada T., Kawakita Y., Ikeda K., Otomo T., Akiba H., Yamamuro O., Rotation of complex ions with ninefold hydrogen coordination studied by quasielastic neutron scattering and first-principles molecular dynamics calculations, *Physical Review Research*, **4**, 3, (2022)
 21. Palumbo M., Kisu K., Gulino V., Nervi C., Maschio L., Casassa S., Orimo S.-I., Baricco M., Ion Conductivity in a Magnesium Borohydride Ammonia Borane Solid-State Electrolyte, *Journal of Physical Chemistry C*, **126**, 36, 15118–15127(2022)
 22. Pasquini L., Sakaki K., Akiba E., Allendorf M.D., Alvares E., Ares J.R., Babai D., Baricco M., Bellosta Von Colbe J., Bereznitsky M., Buckley C.E., Cho Y.W., Cuevas F., De Rango P., Dematteis E.M., Denys R.V., Dornheim M., Fernández J.F., Hariyadi A., Hauback B.C., Heo T.W., Hirscher M., Humphries T.D., Huot J., Jacob I., Jensen T.R., Jerabek P., Kang S.Y., Keilbart N., Kim H., Latroche M., Leardini F., Li H., Ling S., Lototsky M.V., Mullen R., Orimo S.-I., Paskevicius M., Pistidda C., Polanski M., Puszkiel J., Rabkin E., Sahlberg M., Sartori S., Santhosh A., Sato T., Shneck R.Z., Sørby M.H., Shang Y., Stavila V., Suh J.-Y., Suwarno S., Thi Thu L., Wan L.F., Webb C.J., Witman M., Wan C., Wood B.C., Yartys V.A., Magnesium- and intermetallic alloys-based hydrides for energy storage: Modelling, synthesis and properties, *Progress in Energy*, **4**, 3, (2022)
 23. Sato T., Ikeda K., Honda T., Daemen L.L., Cheng Y., Otomo T., Sagayama H., Ramirez-Cuesta A.J., Takagi S., Kono T., Yang H., Luo W., Lombardo L., Züttel A., Orimo S.-I., Effect of Co-Substitution on Hydrogen Absorption and Desorption Reactions of $Y\text{MgNi}_4$ -Based Alloys, *Journal of Physical Chemistry C*, **126**, 40, 16943–16951(2022)
 24. Utsumi R., Morimoto M., Saitoh H., Watanuki T., Sato T., Takagi S., Orimo S., In situ synchrotron radiation X-ray diffraction measurements of Fe-Mo alloy hydrides formed under high pressure and high temperature, *Journal of Alloys and Compounds*, **893**, (2022)
 25. Züttel A., Gallandat N., Dyson P.J., Schlapbach L., Gilgen P.W., Orimo S.-I., Future Swiss Energy Economy: The Challenge of Storing Renewable Energy, *Frontiers in Energy Research*, **9**, (2022)
 26. Murakami K., Sugawara Y., Tomita J., Ishii A., Oikawa I., Takamura H., The low-temperature synthesis of cation-ordered Ce-Zr-based oxide via an intermediate phase between Ce and Fe, *Journal of Materials Chemistry A*, **10**, 40, 21291–21299(2022)
 27. Yamaguchi M., Ishii A., Oikawa I., Yamazaki Y., Imura M., Takamura H., Antireflective black coatings comprised of Ag-Fe-O thin films with high electrical resistivity, *APL Materials*, **10**, 3, (2022)

【主な国際会議】

1. 宮坂等, 8th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC8), Phase Switchable Porous Magnets, 2022-07
2. T. Ichitsubo, 19th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy, Spatial elastic inhomogeneity of metallic glasses before and after structural relaxation using inelastic x-ray scattering and ultrasound techniques, 2022-06
3. Tetsu Ichitsubo, Japan-US Joint Seminar on Fundamentals of Next Generation Battery (Tentative), Development of Oxide Cathode Materials for Rechargeable Magnesium Battery, 2023-03
4. S. Orimo, 17th International Symposium on Metal-Hydrogen Systems (MH2022), Super-ionic conduction of mono-/di-valent cations and advanced battery application of complex hydrides: viewpoint from "HYDROGENOMICS" project, 2022-11
5. S. Orimo, MIRAI2.0 Research & Innovation Week, Super-ionic conduction of mono-/di-valent cations and advanced battery application of complex hydrides, 2022-11
6. S. Orimo, 15th International Symposium Hydrogen & Energy, Super-ionic conduction of mono-/di-valent cations and advanced battery application of complex hydrides: viewpoint from "HYDROGENOMICS" project, 2023-01
7. S. Orimo, I²CNER Center For Energy Systems Design (CESD) Kick-Off Workshop, Advanced hydride materials design for energy-related application, 2023-02
8. Hitoshi Takamura, 23rd International Conference on Solid State Ionics, Oxygen Surface Exchange Kinetics of Sm-Doped Ceria Catalyzed by Co-Based Oxides, 2022-07, Boston, USA
9. Kazuaki Kisu, SUSTech-AIMR joint workshop, Monocarborane Cluster Electrolyte for Room-Temperature Calcium Batteries, 2022-07
10. Kazuaki Kisu, Shin-ichi Orimo, International Conference on Frontier Materials 2022, COMPLEX HYDRIDE-BASED ELECTROLYTES FOR MULTIVALENT BATTERY APPLICATION, 2022-05
11. Kazuaki Kisu, Sangryun Kim, Munehiro Inukai, Andreas Züttel, Shin-ichi Orimo, 2nd International Symposium "Hydrogenomics", COMPLEX HYDRIDE-BASED ELECTROLYTES FOR MULTIVALENT BATTERY APPLICATION, 2022-05

【主な国内会議】

1. 宮坂等、熊本大学講演会、多孔性錯体格子材料と物性科学—低次元金属錯体格子の電荷とスピンを操る、2022-07
2. 市坪 哲、2022 年度 金属ガラス部門 合同研究会、金属ガラスにおける動的不均一性から受け継がれる静的不均一性と超安定化ガラスの形成、2022-12
3. Tetsu Ichitsubo、角度分解散乱分光研究会 2022 年度研究集会、“Circumventing nonergodicity towards ultrastable state” of fragile metallic glassformer that inherits heterostructure from dynamic heterogeneity、2023-03
4. 折茂慎一、日本学術振興会 分子系の複合電子機能第 181 委員会、カーボンニュートラルに資する水素科学技術 —ハイドロジェノミクスの視点—、2022-06
5. 折茂慎一、自動車技術会フォーラム 2022「モビリティの未来を支える材料技術の最新動向」、ハイドロジェノミクスに基づく新たな水素利用技術、2022-07

6. 折茂慎一、学振 R031 ハイブリッド量子ナノ技術委員会 第7回研究会、GXに資する水素科学技術ーハイドロジェノミクスの視点ー、2022-08
7. 折茂慎一、第16回若手水素研究会、水素科学技術の将来のために～若手研究者・学生の皆さんに伝えたいこと～、2022-09
8. 内海伶那, 齋藤寛之, 綿貫徹, 佐藤豊人, 高木成幸, 折茂慎一、日本金属学会 2022 年秋期 (第 171 回) 大会、放射光その場観察を用いた Mo-Mn 合金水素化物の高温高压合成、2022-09
9. 折茂慎一、日本金属学会 2022 年秋期 (第 171 回) 大会、ハイドロジェノミクスに基づく新たな水素利用技術、2022-09
10. 佐藤豊人, 折茂慎一、日本金属学会 2022 年秋期 (第 171 回) 大会、鉄を利用した水素貯蔵材料研究の進展と今後の展開、2022-09
11. 折茂慎一、第70回応用物理学会春季学術講演会、錯体水素化物中の一価および多価陽イオンの高速伝導現象とその電池応用ー“ハイドロジェノミクス”の視点からー、2023-03
12. 佐藤豊人, 齋藤寛之, 内海伶那, 伊藤純也, 中平夕貴, 尾花和紀, 高木成幸, 折茂慎一、日本金属学会 2023 年春期 (第 172 回)、高压下での LaNi_5 の水素吸蔵反応の観測、2023-03
13. 内海伶那, 齋藤寛之, 綿貫徹, 佐藤豊人, 高木成幸, 折茂慎一、日本金属学会 2023 年春期 (第 172 回)、Fe-Mo 合金の水素化で得られる長周期最密充填構造水素化物、2023-03
14. 折茂慎一、第10回FC-Cubic オープンシンポジウム、日本発信の統合的な水素科学：新学術領域「ハイドロジェノミクス」の成果と今後、2023-03
15. 高村仁, 村上和仁, 菅原蓉子, 富田惇喜, 石井暁大, 及川格、第48回固体イオニクス討論会、遷移金属添加 Ce-Zr 系酸化物の低温規則化挙動、2022-12
16. 木須一彰、第32回日本MRS年次大会、Hydride-based Monocarborane for Calcium Battery Electrolyte、2022-12
17. 木須一彰, 篠原宝良, 折茂慎一、第52回電池討論会、水素化物系電解質 $\text{Ca}(\text{CB}_{11}\text{H}_{12})_2$ を用いたカルシウム蓄電池の電気化学評価、2022-11
18. 木須一彰、第30回バッテリー技術シンポジウム、錯体水素化物イオン伝導体の開発と次世代蓄電池への応用、2022-08

2-3. 材料評価・解析研究ユニット

構成員

教授：藤田全基（兼）、熊谷悠（兼）、高橋幸生（兼 SRIS*）、
准教授：BELOSLUDOV, Rodion
助教：河口 智也（兼）

SRIS*…国際放射光イノベーション・スマート研究センター

【2022(令和4)年度の成果概要】

1. 中エントロピー合金 TrCoNi ($\text{Tr} = \text{Cr, Mn, Fe}$) の短距離秩序と規則化相の探索

金属材料研究所は、東海村の研究用原子炉 JRR-3 に三台中性子散乱・回折装置を設置しており、これら装置を活用した材料研究を本ユニットで行っている。そのひとつに、次世代構造材料として近年注目されている高エントロピー合金の構造解析がある。高エントロピー合金では、強度特性に対する **compositional short-range ordering** の役割に注目が集まっている。しかし、どのような規則相や準安定相が実際に存在するのかは未解明であり、理論計算と実験による研究が進められている。われわれは、この未解明課題を相平衡の基礎の重要な問題のひとつと位置付け、中性子実験により、面心立方晶の中エントロピー合金中 TrCoNi ($\text{Tr} = \text{Cr, Mn, Fe}$) の短距離秩序と規則化相の探索を行った。

MnCoNi において、面心立方構造に起因する Bragg 反射のほか、禁制反射位置に散漫散乱が観測された。この散漫散乱の熱処理変化の測定から、当該合金中では L1_0 型の長距離規則相が発達することがわかった。また散漫散乱は長時間焼鈍後も残存しており、大凡 1 nm 程度の空間相関長を持つ変調構造が共存することがわかった。対して、当該研究領域において最も注目を集めている CrCoNi 合金においては、新たな短・長距離秩序を示唆する信号は観測されなかった。この結果、 CrCoNi 合金において議論されている短距離秩序の実態は、そもそも存在しないか、少なくとも 1 nm 以下の空間相関長をもつ極めて短範囲の **compositional ordering** である可能性が明らかとなった。この結果は 2023 年日本金属学会（春）で発表し、*Mater. Trans.* に投稿した。

2. ハイスループット計算を用いた P 型透明導電酸化物の探索

過去数十年にわたり、可視光透過性と電気伝導性を持つ *n* 型透明導電酸化物 (TCO) は産業で使用されてきたが、*p* 型 TCO は依然として商業化に至っていない。実用に資する *p* 型 TCO を探すため、様々な第一原理計算を用いたスクリーニングが行われてきた。しかしながら、従来のスクリーニングは、過小評価されたバンドギャップを用いるなど、予測精度の低い計算に基づいて行われてきた。本研究では、高精度に計算された光吸収スペクトルと酸素欠陥の形成エネルギーをスクリーニングパラメータとして *p* 型 TCO の探索を行った。帯電した酸素空孔は、ホールを相殺することが知られているが、本研究により 845 種類の酸化物中、156 種類だけが *p* 型化に適した特性を持つことがわかった。そしてその中から、有効質量や光学ギャップに注目することで Na_3AgO_2 、 $\text{Rb}_2\text{Pb}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Cs}_2\text{Pb}_2\text{O}_3$ 、 CsCuO 、 $\text{K}_2\text{Pb}_2\text{O}_3$ および B_6O などの有望な *p* 型 TCO の候補物質を特定した。

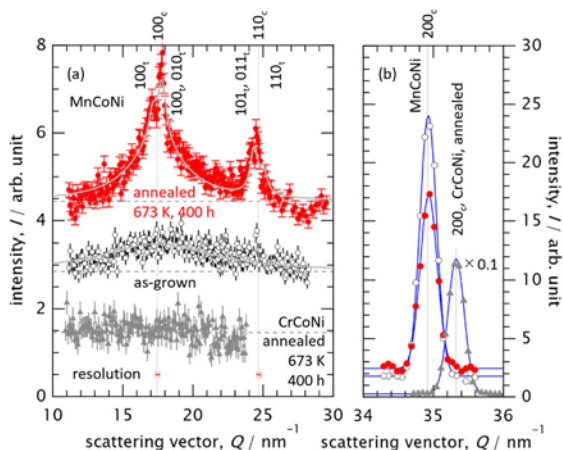


図 1. ミディアムエントロピー合金 MnCoNi において観測された散漫散乱の焼鈍時間依存性。図は投稿中の論文から引用転載。

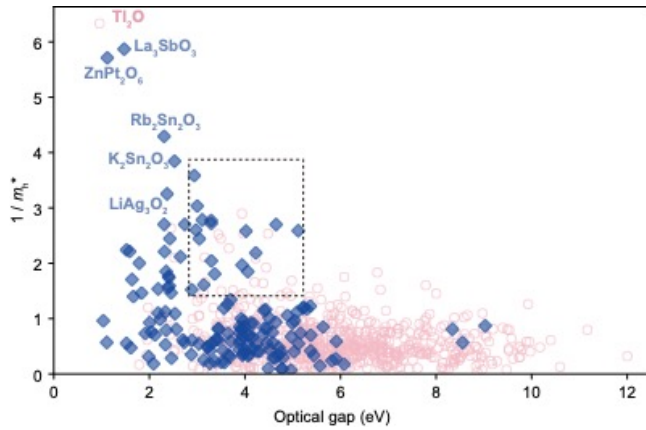


図 2. 845 酸化物の光学ギャップ(横軸)と最小有効正孔質量の逆数(縦軸)をプロットしたものの。青色は *p* 型 TCO に適切な酸素空孔を有する酸化物を表している。四角の波線の中の青い酸化物が有望な物質を表している。

3. テンダーX線スペクトロタイコグラフィによる含硫黄高分子粒子内部の硫黄化学状態の可視化

硫黄やリンなどの軽元素は、電池材料や生体が機能を発現する際に重要な役割を果たすことが知られている。それらの軽元素が機能発現にどのように関与しているかを正しく理解するためには、物質中での分布や化学状態を非破壊かつ高分解能で観察できる計測手法が必要である。これまで、干渉性に優れた X 線を用いて物質の微細構造と化学状態を高分解能で観察する X 線スペクトロタイコグラフィの計測を硫黄やリンなどの K 吸収端が含まれるテンダー X 線のエネルギー領域で実施可能なシステムを大型放射光施設 SPring-8 において開発してきた。本研究では、本システムによる硫黄化学状態イメージングの実証実験として、リチウム硫黄電池の正極材料として新たに開発された硫黄変性ポリブチルメタクリレート（主要構成元素：硫黄、炭素）の粒子（直径約 5 μm ）を硫黄の K 吸収端（ ~ 2.47 keV）近傍である 2.46-2.50 keV の 30 点で計測した。走査型電子顕微鏡と同様の形状を示す吸収像の再構成に成功したほか、吸収像より取得した空間分解 X 線吸収スペクトルが試料粉末から得られた参照スペクトルと相似形状を示したことから、計測精度の高さを確認できた（図 3 上段）。粒子内の元素分布や化学状態について詳細に解析するため、位相シフト量や空間分解 X 線吸収スペクトル中の硫黄-硫黄 (S-S) 結合と硫黄-炭素 (S-C) 結合の量を反映するピーク強度を硫黄量で規格化し、二次元的にマッピングした（図 3 下段）。これらの分布は一貫して粒子の中心付近ほど炭素が多く、表面付近ほど硫黄が多い傾向を示唆しており、この結果は電子顕微鏡により得られた別粒子の断面における元素分布とも整合していた。このことは、試料内部における硫黄の化学状態を非破壊かつ高空間分解能で観察可能なテンダー X 線タイコグラフィの有用性を示すものである。

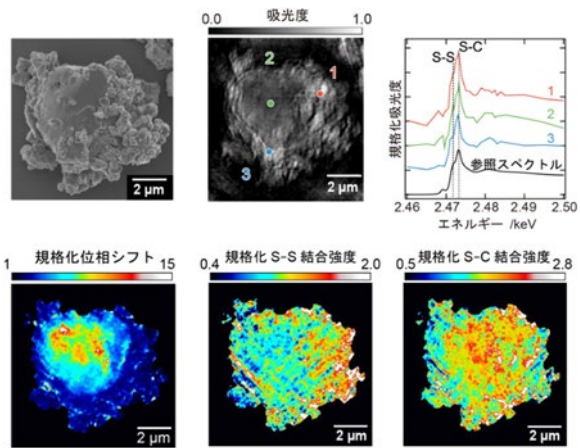


図 3. テンダー X 線タイコグラフィによる含硫黄高分子粒子の測定結果。

4. ハイエントロピー効果を利用した酸化物電極材料の電極性能評価と機構解析

多数の元素を固溶した際に現れるハイエントロピー効果が、酸化物電極材料の電極性能に与える影響とその機構を調査することを目的として、種々の酸化物材料の検討を行った。特に、これまで Mg の可逆的な挿入脱離が困難であるとされていた岩塩型構造を有する酸

化物材料において、可逆的な Mg の挿入脱離が実現する材料を見出し、その材料の詳細な評価・解析を実施した。

まず、見出した電極材料に対して電気化学特性、充放電特性の評価を様々な条件を行うことで、現状利用可能な蓄電池構成材や環境の中で、材料の特性を最も引き出せる条件を明らかにした。また、充放電状態の試料に対して、精密な X 線結晶構造解析、走査透過型電子顕微鏡解析、X 線吸収分光法を用いた電子構造解析、化学分析で、Mg イオンの挿入脱離が可逆的であることを実験的に実証した。次に、Mg の可逆的な脱挿入には構造中にカチオン空孔を十分量生成し、そのような空孔が Mg 挿入後にも消滅しないような材料設計が必要であることを明らかにした。これらの実験結果をもとに、Mg 挿入脱離を実現するハイエントロピー酸化物の設計指針を得るために、Mg 移動時のエネルギー障壁に対するカチオン空孔の影響を第一原理計算で評価し、Mg が低いエネルギー障壁を有する経路のみを通るような拡散が実現する組成領域を、パーコレーション理論に基づき検討した。

また放射光 X 線を用いた電極材料の新たな解析手法の開発も行った。電気化学反応で誘起される電極材料の形状変化や歪・欠陥の解析には、結晶粒の三次元形状や内部に存在する歪を可視化する測定手法である「ブラッグコヒーレント回折イメージング法 (BCDI)」が有効である。この手法をさらに高度化し、特にナノピペットを利用した数 100 nm 領域で局所的電気化学測定を実施する手法と組み合わせて、電気化学測定・制御を行う結晶粒子とイメージング観察をしている粒子が一対一対応するような測定システムの確立を行った[13]。

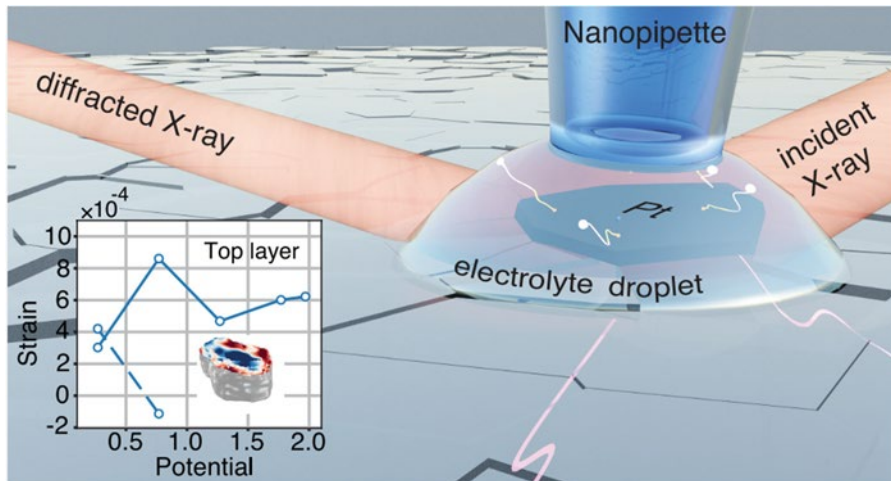


図 4. ナノピペットを用いた局所電気化学試験下におけるブラッグコヒーレント回折測定の概念図と電極上で観測された弾性ひずみの印加電位依存性[13]。

5. NbSe₂ の電荷密度波に対する固有の次元効果の解明

最先端のラマン分光と走査トンネル顕微鏡測定の結果を、金属材料研究所計算材料学センターのスーパーコンピュータで実行された第一原理計算の結果と組み合わせることで、NbSe₂ の電荷密度波 (CDW) に対する次元性の効果を確認した [9]。バルク試料の電荷密度波秩序化温度 (T_{CDW}) をはるかに上回る特徴を持つ、基板上サンプルにおける CDW の直接可視化によって実証されました。Se イオンを含む、軸方向に振動する A_{1g} フォノン モードのラマン強度の強い温度および厚さ依存性を見出し、これらは Se-p_z 軌道間に形成される層内結合と層間結合の間の競合から生じることを第一原理計算で見出した。この結果は、歪み駆動の CDW における Se の面外変位の重要な役割を示唆し、Se が次元効果において支配的であることを明らかにした。これらにより、層状 CDW 材料における化学結合と機械的安定性に対する新たな視点を確立した。

【今後の計画】

本ユニットでは、放射光・中性子ビーム技術と計算科学で、材料評価・解析を行っている。先端手法を個別に有するこれらが連携して、プラットフォーム化することで、E-IMR における材料研究の推進基盤が強固になる。本ユニットでは、今後、下記に挙げる活動を行いつつ、連携を強めていく。特に、金属材料研究所の中性子物質材料研究センターが JRR-3 に管理する中性子散乱・回折装置の活用を進める。

- 中性子回折装置における冷凍機・高温炉の整備を行い、低温から高温までシームレスな測定が柔軟に行える材料研究のための環境を整備する。
- 中性子ビームを活用して、センターのメンバーが有する軽元素を含むエネルギー材料、磁性元素を含む材料の結晶構造、磁気構造解析を行う。これにより、材料特性と構造の関係を明らかにする。
- 中性子非弾性散乱装置の高度化を進め、ダイナミクス測定が適応できる試料範囲を拡大する。
- 格子とスピンの詳細な動きを中性子散乱測定で明らかにし、ダイナミクスの観点から蓄電・放電やスピン流輸送のメカニズムの解明を目指す。
- 開発してきた点欠陥計算手法を用いて、新太陽電池光吸収材料の探索を行う。
- より高い精度で所望の物質を探索できるよう、新たな第一原理計算手法の開発を行う。
- リチウム硫黄電池正極材料の動作環境下(オペランド)での硫黄化学状態イメージングに向けた X 線スペクトロタイコグラフィ測定用電池セルの開発を行う。
- 今回得られたハイエントロピー酸化物正極材料を詳細に解析することで、材料の設計指針の緒が得られた。そこで今後は、この設計指針に従い、さらに高性能な正極材料を見出すべく組成の検討や解析を継続するとともに、ハイエントロピー化の効果がどのような物性において顕在化するのかを明らかにする。またこれらの材料に対して、その場測定を含む高度 X 線構造解析を実施することで、ハイエントロピー化効果の速度論的な側面における影響も検討する。
- 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、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。実験グループと共同研究する。
- 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実験グループと共同で実施する。
- 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。



図 5. 研究用原子炉 JRR-3 で金属材料研究所が管理する中性子散乱・回折装置群。

【論文リスト】

1. T. Taniguchi, S. Kitagawa, K. Ishida, S. Asano, K. Kudo, M. Takahama, Peiao Xie, Takashi Noji, and M. Fujita, ^{139}La -NMR Study of Spin Dynamics Coupled with Hole Mobility in T^* -type $\text{La}_{0.86}\text{Eu}_{0.86}\text{Sr}_{0.28}\text{CuO}_{4-\delta}$, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **91**, 074710 (2022)
2. K. Ikeuchi, S. Wakimoto, M. Fujita, T. Fukuda, R. Kajimoto, and M. Arai, Spin excitations coupled with lattice and charge dynamics in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, *Phys. Rev. B*, **105**, 014508 (2022)
3. Y. Shimura, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. Osato, R. Yamamoto, Y. Kusanose, K. Umeo, M. Fujita, T. Onimaru, and T. Takabatake, Magnetic refrigeration down to 0.2 K by heavy fermion metal YbCu_4Ni (featured), *J. Applied Phys.*, **131**, 013903 (2022)
4. M. Fujita, and M. Enoki, The interplay between the incommensurate spin correlations and superconductivity in Mn substituted $\text{La}_{1.90}\text{Sr}_{0.10}\text{CuO}_4$, *J. Phys. : Conf. Ser.*, **2323**, 012012 (2022)
5. Y. Kumagai, Computational Screening of p-Type Transparent Conducting Oxides Using the Optical Absorption Spectra and Oxygen-Vacancy Formation Energies, *Phys. Rev. Applied*, **19** 034063 (2022)
6. M. Abe, F. Kaneko, N. Ishiguro, T. Kubo, F. Chujo, Y. Tamenori, H. Kishimoto, Y. Takahashi, Visualization of Sulfur Chemical State of Cathode Active Materials for Lithium-Sulfur Batteries by Tender X-ray Spectroscopic Ptychography, *The Journal of Physical Chemistry C*, **126**, 14047 (2022)
7. N. Ishiguro, Y. Takahashi, Method for Restoring of X-ray Absorption Fine Structure in Sparse Spectroscopic Ptychography, *Journal of Applied Crystallography*, **55**, 929 (2022)
8. Pavel A. Gribov, Anatoly A. Sidelnikov, Rodion V. Belosludov, Alexander A. Matvienko, Synthesis of Nanocrystalline Yttrium Oxide and Evolution of Morphology and Microstructure during Thermal Decomposition of $\text{Y}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, *Ceramics*, **6**, 16-29 (2022)
9. Dongjing Lin, Ahmad Ranjbar, Xiaoxia Li, Xinyu Huang, Yuan Huang, Helmuth Berger, László Forró, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, Rodion V. Belosludov, Thomas D. Kühne, Haifeng Ding, Mohammad Saeed Bahramy, Xiaoxiang Xi, Axial-Bonding-Driven Dimensionality Effect on the Charge-Density Wave in NbSe_2 , *Nano Letters*, **22**, 9389-9395 (2022)
10. Ruirui Song, Jihui Han, Masayuki Okugawa, Rodion Belosludov, Takeshi Wada, Jing Jiang, Daixiu Wei, Akira Kudo, Yuan Tian, Mingwei Chen, Hidemi Kato, Ultrafine nanoporous intermetallic catalysts by high-temperature liquid metal dealloying for electrochemical hydrogen production, *Nature Communications*, **13**, 1-12 (2022)
11. T. Kawaguchi, X. Bian, T. Hatakeyama, H. Li, and T. Ichitsubo, Influences of Enhanced Entropy in Layered Rocksalt Oxide Cathodes for Lithium-Ion Batteries, *ACS Appl. Energy Mater.*, **5**, 4369 (2022)
12. S. Imashuku, T. Kamimura, T. Kawaguchi, and T. Ichitsubo, Evaluating the Validity of a Hydrogen Mapping Method Based on Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, *E-Journal Surf. Sci. Nanotechnol.*, **20**, 2022 (2022)
13. D. Sheyfer, R. G. Mariano, T. Kawaguchi, W. Cha, R. J. Harder, M. W. Kanan, S. O. Hruszkewycz, H. You, and M. J. Highland, Operando Nanoscale Imaging of

Electrochemically Induced Strain in a Locally Polarized Pt Grain, *Nano Lett.* **23**, 1 (2023)

【主な国際会議】

1. Masaki Fujita, Yizhou Chen, Shun Asano, Tong Wang, Peiao Xie, Shinnosuke Kitayama, Kenji Ishii, Daiju Matsumura, Takuya Tsuji, and Takanori Taniguchi, Cu K-edge X-ray absorption fine structure study of T'-type RE_2CuO_4 (RE = rare earth): Toward a unified understanding of the electronic state of 214 cuprate, 29th International Conference on Low Temperature Physics, Sapporo, 20220818-24
2. Masaki Fujita, Neutron scattering study of dual nature of spin excitations in hole-doped cuprate superconductors, International Conference on Magnetism and Its Applications, Online/Bari, 20220603
3. S. Takada, M. Fujita, Y. Goto, T. Honda, K. Ikeda, Y. Ikeda, T. Ino, K. Kaneko, R. Kobayashi, M. Okawara, T. Oku, T. Okudaira, T. Otomo and S. Takahashi, Study of Magnetic Environment for Neutron Spin Filters using Polarized Helium-3 at J-PARC and JRR-3, 11th International Workshop on Sample Environment, Nasu, 20220828-0901
4. Kotaro Osato, Takanori Taniguchi, Hirotaka Okabe, Yoichi Ikeda, Yusuke Nambu, Jun Gouchi, Yoshiya Uwatoko, Dita Puspita Sari, Isao Watanabe, Akihiro Koda, Masaki Fujita, Muon spin relaxation study in heavy fermion compound $YbCu_4Ni$, 6th International Conference on Functional Materials Science 2022, Bali, 20221129-30
5. Kaede Isomura, Xie Peiao, Takanori Taniguchi, Masaki Fujita, Toward a unified understanding of 214 cuprate superconductivity in 214 cuprates, 6th International Conference on Functional Materials Science 2022, Bali, 20221129-30
6. Yukio Takahashi, Development and Application of Spectroscopic Ptychography in Hard and Tender Energy Ranges at SPring-8, XRM 2022, Online, 20220622
7. Yukio Takahashi, Development of coherent diffraction imaging technique and its application to nanoscale visualization of catalyst material, Post Symposium of TOCAT9, Tohoku University, 20220731
8. Yukio Takahashi, Visualization of nanoscale structures and chemical states by coherent X-ray diffraction imaging, The 6th QST International Symposium Innovation in Science and Technology from NanoTerasu, Iino Hall & Conference Center, Tokyo, 20221115
9. Rodion Belosludov, DFT study of hydrogen-evolution reaction on Mo-based alloys, MRS 2022 Fall Meeting, Boston, 20221127-1202
10. Tomoya Kawaguchi, Thomas F. Keller, Henning Runge, Luca Gelisio, Christoph Seitz, Young Y. Kim, Wonsuk Cha, Stephan O. Hruszkewycz, Ross Harder, Ivan A. Vartanyants, Andreas Stierle and Hoydoo You, Reaction-driven restructuring of Pt-Rh nanoparticles: Bragg coherent diffraction imaging (BCDI) during gas-surface reactions, at APS March Meeting 202303
11. Tomoya Kawaguchi, Vladimir Komanicky, Vitalii Latyshev, Wonsuk Cha, Evan R. Maxey, Ross Harder, Tetsu Ichitsubo, and Hoydoo You, "Strain Evolution in Pt-Ni Alloy Nanoparticles During Electrochemical Ni Leaching Revealed by Bragg Coherent Diffraction Imaging", 241st ECS meeting, Vancouver, 20220529-0602

12. Tomoya Kawaguchi, Bragg Coherent Diffraction Imaging Studies of Catalytic Alloy Nanoparticles, MIRAI2.0 Research & Innovation Week 2022, Fukuoka, 20221115-18

【主な国内会議】

1. 藤田全基、214系構造異性体の超伝導と磁気・電荷相関、日本物理学会 2022 年秋季大会シンポジウム、東京、2022 年 9 月
2. 藤田全基、量子ビームによるスピンドYNAMICS 観測、 相関電子の軌道自由度から生まれる多様性と普遍性、東北大学、2022 年 10 月
3. 熊谷 悠、“計算科学を使った物性予測はどれほど進歩しているのか”、学振 69 委員会、オンライン
4. 熊谷 悠、“点欠陥特性に関する計算材料データベース構築”、電気化学界面シミュレーション 第 2 回研究会、オンライン、2022 年 8 月
5. 熊谷 悠、“計算材料科学とマテリアルズインフォマティクス”、東北大学 材料科学フェスタ 2022、仙台、2022 年 9 月
6. 熊谷 悠、“酸化物に関する計算材料データベース構築”、日本セラミックス協会第 35 回秋季シンポジウム、徳島、2022 年 9 月
7. 熊谷 悠、“第一原理計算の材料科学への応用”、東京大学 マテリアルズ・インフォマティクスの基礎と応用、オンライン、2022 年 9 月
8. 熊谷 悠、“酸化物を対象とした計算材料データベースの構築”、透明酸化物光・電子材料研究会、オンライン、2022 年 10 月
9. 高橋幸生、X線タイコグラフィによる蓄電固体材料のナノスケール微細構造・化学状態イメージング、2022 電気化学会秋季大会、横浜、2022 年 9 月
10. 高橋幸生、放射光 X線タイコグラフィとデータ科学の連携による材料機能の可視化、再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点 DX-GEM 発足記念シンポジウム、東京、2023 年 2 月
11. 河口智也、卞篠、安田優哉、畠山拓也、李弘毅、市坪哲、「リチウムイオン電池用酸化物正極材料におけるハイエントロピー化効果」、第 48 回 固体イオニクス討論会、仙台、2022 年 12 月
12. 河口智也、安田優哉、根本菜摘、下川航平、李弘毅、岡本範彦、市坪哲、「ハイエントロピー酸化物を用いた蓄電池正極材料」、電気化学会第 90 回大会、仙台（ハイブリッド方式）、2023 年 3 月

2-4. 複合モジュール・社会実装研究ユニット

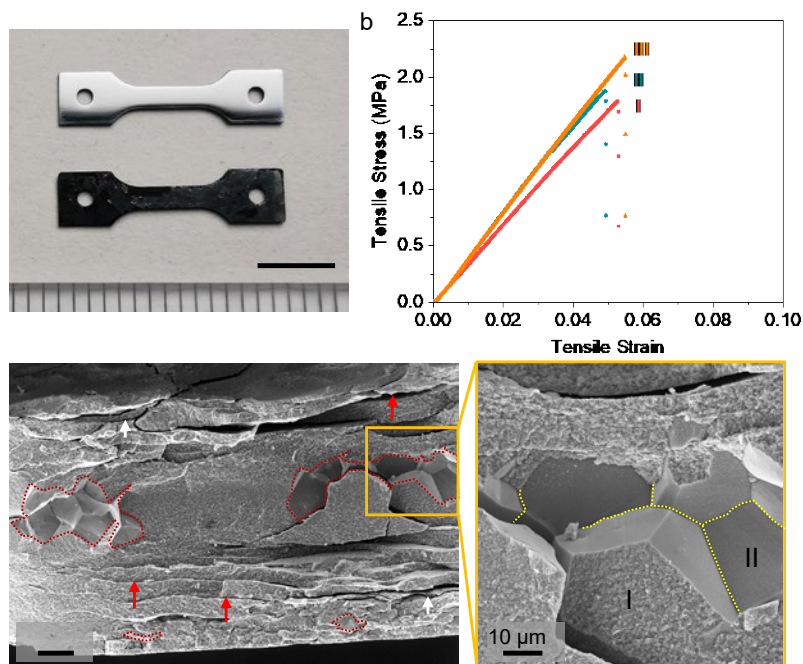
構成員

教授：加藤 秀実（兼）
特任教授：河野 龍興
特任助教：宋 瑞瑞

【2022(令和4)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）

令和4年度は、1.0 M KOH 電解液中でナノポーラス Co_7Mo_6 相の電気触媒性能を確認した。分子動力学シミュレーション手法を用いて、このナノポーラス構造の異常とも言える成長抑制挙動をもたらす極微細な気孔サイズの形成原因を考察した結果、純 Co および Mo に比べて Co_7Mo_6 相の界面拡散の活性化エネルギーが高いことを明らかにした。また、引張試験によって機械的性質の評価も行い、破断強度は 1.8~2.2 MPa の範囲で、その平均値が約 2.0 MPa であった。ハンドリング可能な強度を有するで、脆い性質を示した（関連する結果を <https://doi.org/10.1038/s41467-022-32768-1> に公開した）。更に、広範な pH 範囲を有する電解液で、電気触媒性能を評価する装置を準備した。



(図) ナノポーラス $\mu\text{-Co}_7\text{Mo}_6$ の機械的特性(a) 予備合金と引張試験用試料の外観画像、(b) 3つのナノポーラス $\mu\text{-Co}_7\text{Mo}_6$ の引張応力-ひずみ曲線、および、(c) 引張試験後のナノポーラス $\mu\text{-Co}_7\text{Mo}_6$ の破断面 SEM 像。

■ 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構築（河野特任教授）

再エネ水素製造システムを設計する上では、システムに課す要求事項は何であるかを明確化しておく必要がある。経済性、品質、高効率等の様々な観点から、それぞれの要求事項を明確化し、各プロセスにおいて最適化を重ねていく手順を踏むことが必要である。

・システム全体最適化の方法

蓄電池を利用した水電解システムにおいては、再エネ電力を蓄電優先か水素製造優先かの電力配分の制御を、発電量予測の下で適切に実施することが重要である。そのための電力管理システム(EMS)の制御アルゴリズムは最適であることが、再エネ電力の最大限の利用と構成機器容量の最適化設計につながる。その制御アルゴリズムの最適化のため、機器容量の最適化は遺伝的アルゴリズム(GA)を利用し、導入機器容量が決定している場合、その他の構成機器容量を経済性や品質要件を満たす最適解を得ることができる。また導入機器容量が決定していない場合でも、電力管理システムの最適制御(EMSの最適化)の結果を踏まえた構成機器容量の最適化を行うことが可能である。

・再エネ水素製造システムモデルの特徴

再エネ出力変動に対応可能で、人工知能を利用した最適制御や機器容量の最適化が可能な水素製造システムモデルを新たに開発した。蓄電池による電力変動の吸収に加えて、低コストでグリーンな水素を製造して、電解槽保護を考慮しつつ、GAによる最適制御を実現できるシステムモデルを提案した。

【今後の計画】

令和5年度は、(1)水素発生反応における広いpH範囲でのナノポーラスCo₇Mo₆電極の活性と安定性の研究、(2)高い電荷伝達と物質伝達プロセスの両方で高効率を満たすための階層的なポーラスCo₇Mo₆相の設計・作製、および、(3)金属溶湯脱成分反応中に金属間化合物相の形成が促進されるメカニズムの調査を進める。(加藤教授)

【論文リスト】

1. Zadorozhnyy V., Tomilin I., Berdonosova E., Gammer C., Zadorozhnyy M., Savvotin I., Shchetinin I., Zheleznyi M., Novikov A., Bazlov A., Serov M., Milovzorov G., Korol A., Kato H., Eckert J., Kaloshkin S., Klyamkin S., Composition design, synthesis and hydrogen storage ability of multi-principal-component alloy TiVZrNbTa, *Journal of Alloys and Compounds*, **901**, (2022)
2. Song R., Han J., Okugawa M., Belosludov R., Wada T., Jiang J., Wei D., Kudo A., Tian Y., Chen M., Kato H., Ultrafine nanoporous intermetallic catalysts by high-temperature liquid metal dealloying for electrochemical hydrogen production, *Nature Communications*, **13**, 1, (2022)
3. Liang X., Sharma P., Zhang Y., Kato H., Nanoimprinting of magnetic FeCo-based metallic glass thin films, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **542**, (2022)
4. Joo S.-H., Kato H., 3D interconnected nanoporous FeCo soft magnetic materials synthesized by liquid metal dealloying, *Journal of Alloys and Compounds*, **908**, (2022)
5. Ren J., Li Y., Liang X., Kato H., Zhang W., Role of Fe substitution for Co on thermal stability and glass-forming ability of soft magnetic Co-based Co-Fe-B-P-C metallic glasses, *Intermetallics*, **147**, (2022)

【主な国際会議】

1. Ruirui Song, Yeon Beom Jeong, Hidemi Kato, The 17th International Symposium on Novel and Nano Materials (ISNNM), Liquid Metal Dealloying for Functional/Structural Materials, 2022-11

【主な国内会議】

1. 加藤秀実、電気化学会第90回大会、金属溶湯脱成分法を用いた金属の共連続ナノポーラス化と電解コンデンサへの応用、2023-03
2. 加藤秀実、大阪大学接合科学研究所招聘教授特別講演、金属溶湯脱成分法を用いた新材料研究、2023-03

3. 新聞発表等

3-1. プレスリリース

1. 特定のレアメタルだけには依存しないリチウム蓄電池正極材料の合成に成功
酸化物におけるハイエントロピー化の効果を浮き彫りに
2022年 4月12日
[プレスリリース本文]
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220408_04web_Li.pdf
2. リチウムやナトリウム金属の針状析出発生抑制に成功 アルカリ金属負極蓄電池の実現へ向けた大きな一歩
2022年 5月23日
[プレスリリース本文]
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220519_01web_metal.pdf
3. 無機化合物の2つの基本構造の共存と制御を達成ー環境浄化や人工光合成の実現に向けた新たな材料設計指針を提示ー
2022年 8月 3日
[プレスリリース本文]
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220801_04web_photocatalytic.pdf
4. 室温で実用的な特性を実現したLiイオン電池用 高分子固体電解質の合成に成功 ミクロ多孔膜と光架橋高分子電解質の複合化で達成
2022年 8月18日
[プレスリリース本文]
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220818_02web_ion.pdf
5. 硫黄の化学状態を50ナノメートルの高分解能で捉える計測技術を確立ーリチウム硫黄電池の反応・劣化メカニズムの解明に期待ー
2022年 9月 5日
[プレスリリース本文]
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220905_02web_sulfur.pdf
6. 印刷で高品質なシリコンゲルマニウム半導体を実現ー超高効率多接合太陽電池の飛躍的な低コスト化に貢献ー
2022年 9月13日
[プレスリリース本文]
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220913_02web_silicone.pdf
7. 貴金属不要な低コスト・高効率水素発生用の 触媒候補材を開発ー脆く溶けにくく加工性の悪い金属間化合物の 3次元ナノ構造化を実現ー
2022年 9月14日
[プレスリリース本文]
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20220914_03web_metal.pdf

8. 二酸化炭素の吸着で磁石になる多孔質材料を開発 ～ガス吸着に伴う構造変化に起因する磁気相変換は世界初～
2023年 1月27日
[プレスリリース本文]
https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20230127_02_magnet.pdf
9. 室温でマグネシウム蓄電池から 大量のエネルギーを取り出せる正極材料を開発 —リチウムイオン電池を置き換える安価で 高性能の蓄電池実現に向け大きな一歩—
2023年 1月30日
[プレスリリース本文]
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20230130_01web_battery03.pdf
10. バレートロンクス分野における新発見
2023年 2月22日
[掲載URL]
<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1494.html>
11. 鉄とマグネシウムの強固な機械接合に成功 —輸送機器の大幅な軽量化による環境影響低減に期待—
2023年 3月31日
[プレスリリース本文]
http://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressing/tohokuuniv-press20230331_01web_femg.pdf

3-2. 新聞等掲載状況

(2023年5月10日調べ)

1.	日本経済新聞 (電子版)	2022年 4月15日	東北大学、レアメタルに頼らない電極を開発 【プレスリリース#1】
2.	日経産業新聞 (紙(第9面))	2022年 4月22日	レアメタルに頼らない電極 【プレスリリース#1】
3.	ASCII.JP (オンライン)	2022年 4月13日	東北大、リチウム電池正極材料合成で脱レア メタル依存 【プレスリリース#1】
3.	ASCII.JP (オンライン)	2022年 5月24日	東北大が金属負極蓄電池の実用化へ一歩、 針状析出の発生を抑制 【プレスリリース#2】
4.	MIT Technology Review (オンライン)	2022年 8月18日	室温で実用的な性能、リチウムイオン電池向 け固体電解質＝東北大 【プレスリリース#4】

5.	信濃毎日新聞 (電子版)	2022年 9月 5日	世界初の高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
6.	福井新聞 (電子版)	2022年 9月 5日	世界初の高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
7.	高知新聞 (電子版)	2022年 9月 5日	世界初の高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
8.	ゴム報知新聞 (電子版)	2022年 9月 5日	住友ゴム工業、世界初の高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
9.	月刊タイヤ (電子版)	2022年 9月 5日	DUNLOP: 世界初の高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
10.	日刊自動車新聞 (紙(第3面)、電子版)	2022年 9月 6日	住友ゴム、硫黄化合物の可視化に成功 リチウム硫黄電池やタイヤの劣化解明に応用 【プレスリリース#5】
11.	ゴム化学新聞 (電子版)	2022年 9月15日	住友ゴム工業 電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
12.	週刊タイヤ新報 9月19・26日合併 2372号	2022年 9月20日	世界初の計測技術 住友ゴムが共同開発 硫黄化合物の可視化に成功 【プレスリリース#5】
13.	自動車タイヤ新聞 9月21・28日合併 2771号	2022年 9月21日	住友ゴムなどの研究グループ 電池用「硫黄」の可視化に成功 【プレスリリース#5】
14.	日経クロステック	2022年10月 3日	東北大学など、リチウム硫黄2次電池の反応・劣化メカニズム解明 【プレスリリース#5】
15.	月間JETI (紙 2023年3月号)	2023年 2月22日	◇高精度計測技術による電池用「硫黄」の可視化 【プレスリリース#5】
16.	鉄鋼新聞 (電子版)	2022年 9月13日	産学共同研究／高品質なシリコンゲルマニウム半導体、印刷で製造／超高効率多接合太陽電池の低コスト化に寄与 【プレスリリース#6】

17.	電波新聞 (電子版)	2022年 9月14日	東洋アルミニウムの特殊ペーストから高品質なシリコンゲルマニウム半導体 名大、阪大、東北大、奈良先端科技大学院大の共同研究グループが成功 【プレスリリース#6】
18.	ASCII.JP (オンライン)	2022年 9月15日	超高効率太陽電池を低コスト化、10分の1に 【プレスリリース#6】
19.	化学工業日報 (電子版)	2023年 5月10日	東北大など、CO ₂ 吸着で磁石化の新多孔質材料開発 【プレスリリース#8】
20.	ASCII.JP (オンライン)	2023年 2月 3日	マグネシウム蓄電池の高エネルギー正極材料を開発＝東北大など 【プレスリリース#9】
21.	MIT Technology Review	2023年 2月 3日	マグネシウム蓄電池の高エネルギー正極材料を開発＝東北大など 【プレスリリース#9】
22.	日経クロステック (電子版)	2023年 2月13日	東北大学などがマグネシウム蓄電池の newPos 極材料、ナノ粒子と多孔質を両立 【プレスリリース#9】
23.	日経産業新聞 (紙)	2023年 2月22日	正極容量、リチウムイオン越え－東北大、マグネシウム蓄電池で－ 【プレスリリース#9】
24.	鉄鋼新聞 (紙・電子版)	2023年 4月3日	鉄とマグネシウム、強固に接合／東北大が基礎研究で成果 【プレスリリース#11】
25.	読売新聞 鹿児島県全域版 (紙)	2022年 8月24日	水分子のインターカレーション機構で吸放熱反応を示す層状二酸化マンガンを発見－繰り返し使える高性能な蓄熱材料の応用展開に期待－

ほか電子版ニュースサイト、ネットニュース等に掲載多数

【掲載サイトの例】

Nikkei Press Release

共同通信 PRWire

47NEWS

毎日新聞 プレスリリース

The Fastening journal

EE Times Japan

fabcross forエンジニア

TECH+ マイナビニュース

ほか

4. 外部研究資金

4-1. 科研費（学術研究助成基金助成金／科学研究費補助金）

折茂 慎一	新学術領域研究	期間：201806-202303	領域代表
ハイドロジェノミクス：高次水素機能による革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成			
折茂 慎一	新学術領域研究	期間：201806-202303	代表者
高密度水素による超機能材料の合成			
折茂 慎一	新学術領域研究	期間：201806-202303	代表者
ハイドロジェノミクスの研究推進			
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			
高梨 弘毅	基盤研究 (S)	期間：201806-202303	代表者
金属人工格子ルネサンス			
市坪 哲	基盤研究 (S)	期間：201806-202303	代表者
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			
高橋 幸生	基盤研究 (S)	期間：201806-202303	代表者
多次元X線タイコグラフィによる次世代放射光顕微分光プラットフォームの構築			
藤田 全基	基盤研究 (S)	期間：202107-202603	代表者
中性子スピン偏極物性科学の開拓			
高村 仁	基盤研究 (A)	期間：201804-202303	代表者
次世代二次電池のためのソフト巨大クロソイオンを活用した高速イオン伝導体の開発			
BAUER, Gerrit E.-W.	基盤研究 (A)	期間：201904-202303	代表者
Magnon Chemistry			
宮坂 等	基盤研究 (A)	期間：202004-202403	代表者
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			
藤原 航三	基盤研究 (A)	期間：202104-202503	代表者
その場観察法による各種半導体材料の固液界面不安定化現象の解明と高温物性値の決定			
加藤 秀実	基盤研究 (A)	期間：202104-202503	代表者
相分離する異種金属のデアロイング接合			
塚崎 敦	基盤研究 (A)	期間：202204-202703	代表者
電気化学エッチング法で創製するカゴメ金属単原子層の物性科学			
岡本 範彦	基盤研究 (B)	期間：202004-202303	代表者
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			

河口 智也	基盤研究(B)	期間：202104-202403	代表者
多元素固溶効果を用いた微細組織制御による高容量蓄電池正極材料の創成			
熊谷 悠	基盤研究(B)	期間：202204-202503	代表者
酸化物表面における酸素空孔物性の解明			
木須 一彰	基盤研究(B)	期間：202204-202603	代表者
多価イオン伝導特性を導く指導原理：配位環境制御による水素化物分子結晶の創成			
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			
伊藤 啓太	基盤研究(C)	期間：202104-202403	代表者
強磁性窒化鉄薄膜への第三元素添加と多層構造化による異常ネルンスト効果の増大			
高橋 幸生	挑戦的研究(開拓)	期間：202007-202403	代表者
シングルショットX線タイコグラフィによる放射光動画撮像の革新			
高梨 弘毅	挑戦的研究(開拓)	期間：202107-202403	代表者
ハイエントロピー合金における電磁機能の開拓			
宮坂 等	挑戦的研究(萌芽)	期間：202104-202303	代表者
ホストゲスト間電子移動に基づくゲスト応答型多孔性分子格子材料の開発			
河口 智也	国際共同研究強化(B)	期間：202104-202303	代表者
第4世代放射光を用いた先進的X線解析によるハイエントロピー酸化物電極材料の開拓			

4-2. 科研費以外の競争的研究費

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			
河野 龍興	NEDO水素利用等先導研究開発事業	期間：201807-202303	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			

5. 知的財産権

5. 特許リスト

特許出願件数： 国内 5件（PCT国内移行1件含む）、国際（PCT） 3件

登録特許（国内）5件

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7093085号 2022年 6月21日
多孔質炭素材料

加藤秀実、和田武、柴田悦郎、津田雅史
特許第7126229号 2022年 8月18日
多孔体

野上玄器、島田昌宏、外山直樹、金相侖、折茂 慎一
特許第7150818号 2022年 9月30日
Li₂B₁₂H₁₂およびLiBH₄を含むイオン伝導体およびその製造方法、並びに該イオン伝導体を含む全固体電池用固体電解質

加藤秀実、朱修賢
特許第7173491号 2022年11月 8日
ポーラス金属

塚崎敦、藤原宏平、塩貝純一
特許第7244157号 2023年 3月13日
磁気センサおよび磁気検出方法

公開特許（国内）8件

鈴木庸介、佐山明、和田武、加藤秀実
特開2022-056741 2022年 4月11日
多孔質金属の製造方法および多孔質金属

伊賀悠太、山本洋、彦坂英昭、松浦広幸、金相侖、折茂慎一
特開2022-081801 2022年 6月 1日
二次電池の製造方法

松浦広幸、伊賀悠太、藤田秀紀、彦坂英昭、山本洋、金相侖、折茂慎一
特開2022-082413 2022年 6月 1日
分散液の製造方法、シートの製造方法、二次電池の製造方法、シート及び二次電池

山口滝太郎、松本慎吾、**市坪哲、李弘毅**

特開2022-088261 2022年 6月14日

金属負極、リチウム二次電池、バッテリーシステム及び金属負極の製造方法

高村仁、城前信太朗、大山旬春、井手慎吾

特開2022-102787 2022年 7月 7日

複合酸化物

王建、関剛斎、**高梨弘毅**

特開2022-129848 2022年 9月 6日

磁性材料、積層体及び積層体の製造方法並びに熱電変換素子及び磁気センサ

西尾隆宏、**伊藤啓太、高梨弘毅**

特開2023-026949 2023年 3月 1日

正方晶系薄膜構造体

西尾隆宏、藏裕彰、**伊藤啓太、高梨弘毅**、市村匠、柳原英人

特開2023-027013 2023年 3月 1日

正方晶系薄膜構造体

公開特許 (WO) 5件

山口滝太郎、松本慎吾、**市坪哲、李弘毅**

W02022/118912 2022年 6月 9日

金属負極、リチウム二次電池、バッテリーシステム及び金属負極の製造方法

山崎雄亮、伊村正明、**高村仁**、山口実奈

W02022/130953 2022年 6月23日

膜付き透明基板及び調理器用トッププレート

木須一彰、キムサンユン、**折茂慎一**

W02022/163664 2022年 8月 4日

カルシウム電池の電解質用組成物、カルシウム電池の電解質、及び、カルシウム電池

王建、関剛斎、**高梨弘毅**

W02022/ 181642 2022年 9月 1日

磁性材料、積層体及び積層体の製造方法並びに熱電変換素子及び磁気センサ

市坪哲、李弘毅、村山将来

W02023/026476 2023年 3月 2日

アルカリ金属二次電池用電解液およびアルカリ金属二次電池

6. 各種受賞・表彰

6. 受賞リスト

塚崎敦

Outstanding reviewer -reviewer of the Month on April 2022 -

Communications Physics 誌

2022年4月

木須一彰

第21回インテリジェント・コスモス奨励賞

公益財団法人インテリジェント・コスモス学術振興財団

水素化物多価イオン伝導体の開発と次世代蓄電池への応用

2022年5月

河口智也

第62回原田研究奨励賞

公益財団法人本多記念会

放射光 X 線を用いた蓄電池・合金触媒材料の解析と材料創成

2022年7月

高梨弘毅

2022 AUMS award

The Asian Union of Magnetism Societies (AUMS)

2022年9月

熊谷 悠

第2回東北大学材料科学世界トップレベル研究拠点賞

東北大学 材料科学世界トップレベル研究拠点

2022年10月

岡本 範彦

日本金属学会 第81回 功績賞

公益社団法人日本金属学会

合金および金属間化合物の結晶欠陥構造と塑性変形挙動の相関に関する研究 2023年3月

7. 主催した会議・研究会・ ワークショップ

7. 先端エネルギー材料理工共創研究センター 2022年度ワークショップ

日時：2022(令和4)年12月22日(木) 13:00-17:00

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方式)

【招待講演1】

カーボンニュートラルの実現に向けた大学等への期待

文部科学省 研究開発局環境エネルギー課長 轟 渉 氏

【招待講演2】

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

茨城大学 理工学研究科 教授 池田 輝之 氏

【E-IMR 研究発表】

(1) 先端エネルギー材料理工共創研究センターの概要

先端エネルギー材料理工共創研究センター長 市坪 哲 教授

(2) 半導体バルク材料の結晶成長研究

太陽エネルギー変換材料研究ユニット 藤原 航三 教授

(3) 太陽電池の高効率化に向けた結晶成長研究

: CdTe 多結晶とコロイド結晶の成長制御

太陽エネルギー変換材料研究ユニット 野澤 純 特任助教

(4) 高温水蒸気電解による水素製造のための材料開発

蓄エネルギー材料研究ユニット 高村 仁 教授

(5) 多価カチオンを利用した金属負極蓄電池開発

蓄エネルギー材料研究ユニット 李 弘毅 特任助教

(6) 単色・白色中性子を活用した物性材料研究

材料評価・解析研究ユニット 藤田 全基 教授

(7) 放射光顕微分光イメージング計測技術の開発とエネルギー材料解析への応用

材料評価・解析研究ユニット 高橋 幸生 教授

(8) Mechanically robust self-organized crack-free nanocellular graphene prepared by Liquid Metal Dealloying

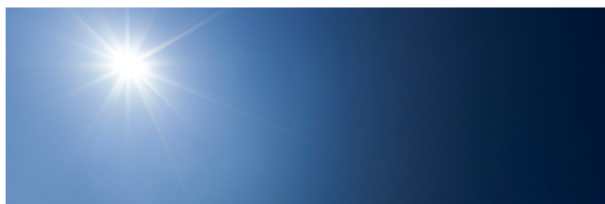
複合モジュール・社会実装研究ユニット 加藤 秀実 教授

(9) Ultrafine Porous Intermetallic Compounds Fabricated by High-Temperature Liquid Metal Dealloying for Electrochemical Hydrogen Production

複合モジュール・社会実装研究ユニット 宋 瑞瑞 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

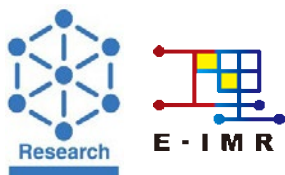
2022.12.22 [木]13:00 - 17:00
金属材料研究所講堂 / zoomウェビナー ハイブリッド開催

- 【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 藤原航三
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 宋瑞端
- 【クロージング】
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





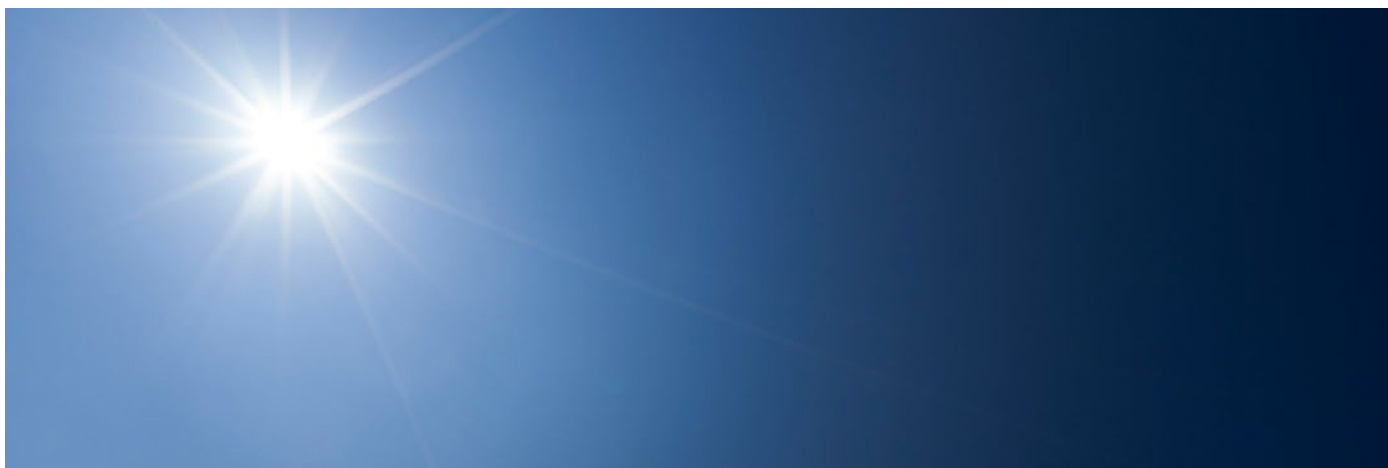




東北大学金属材料研究所

先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR)
Collaborative Research Center on Energy Materials

2022年度ワークショップ[®] 2022.12.22 [木] 13:00 – 17:00



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

会場

東北大学金属材料研究所
2号館 講堂
(オンライン併用)

※新型コロナウイルス感染拡大防止のため
本学関係者以外の皆さまはオンラインのみ。

参加無料

事前申込優先

ご登録はこちらから



<https://forms.gle/homoL1cQ7Sv9jvwD7>



私たちは持続可能な開発目標 (SDGs) を支援しています

【お問合せ】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(E-IMR) 研究支援室
電話：022-215-2072
メール：e-imr*grp.tohoku.ac.jp *を@に変更ください

E-IMR 2022年度ワークショップ 2022.12.22 Thu. 13:00-17:00

時間	コンテンツ・講演者
12:50	開場
13:00 - 13:05	開会あいさつ 古原 忠 [東北大学金属材料研究所長]
【招待講演】	
13:05 - 13:45	招待講演 1 「カーボンニュートラルの実現に向けた大学等への期待」 轟 渉氏 [文部科学省研究開発局環境エネルギー課長]
13:45 - 14:25	招待講演 2 「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」 池田 輝之 氏 [茨城大学 理工学研究科 教授]
14:25 - 14:35	休憩 (10分)
【研究発表】	
14:35 - 14:45	先端エネルギー材料理工共創研究センターの概要 市坪 哲 [先端エネルギー材料理工共創研究センター長/金属材料研究所教授]
14:45 - 15:00	半導体バルク材料の結晶成長研究 藤原 航三 [太陽エネルギー変換材料研究ユニット長/金属材料研究所教授]
15:00 - 15:15	太陽電池の高効率化に向けた結晶成長研究：CdTe多結晶とコロイド結晶の成長制御 野澤 純 [太陽エネルギー変換材料研究ユニット/特任助教]
15:15 - 15:30	高温水蒸気電解による水素製造のための材料開発 高村 仁 [蓄エネルギー材料研究ユニット/工学研究科教授]
15:30 - 15:45	多価カチオンを利用した金属負極蓄電池開発 李 弘毅 [蓄エネルギー材料研究ユニット/特任助教]
15:45 - 15:55	休憩 (10分)
15:55 - 16:10	単色・白色中性子を活用した物性材料研究 藤田 全基 [材料評価・解析研究ユニット長/金属材料研究所教授]
16:10 - 16:25	放射光顕微分光イメージング計測技術の開発とエネルギー材料解析への応用 高橋 幸生 [材料評価・解析研究ユニット/SRIS教授※]
16:25 - 16:40	Mechanically robust self-organized crack-free nanocellular graphene prepared by Liquid Metal Dealloying 加藤 秀実 [複合モジュール・社会実装研究ユニット長/金属材料研究所教授]
16:40 - 16:55	Ultrafine Porous Intermetallic Compounds Fabricated by High-Temperature Liquid Metal Dealloying for Electrochemical Hydrogen Production 宋 瑞瑞 [複合モジュール・社会実装研究ユニット/特任助教]
16:55 - 17:00	閉会あいさつ 市坪 哲 [先端エネルギー材料理工共創研究センター長/金属材料研究所教授]

※SRIS：東北大学 国際放射光イノベーション・スマート研究センター

8. 職員及び運営委員名簿

令和4（2022）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	藤原 航三
教授（兼）	宮坂 等
教授（兼）	藤田 全基
教授（兼）	加藤 秀実
教授（兼）	塚崎 敦
教授（兼）	熊谷 悠
教授（兼 AIMR ^{※1} ）	Bauer, Gerrit Ernst-Wilhelm
教授（兼 AIMR ^{※1} ）	折茂 慎一
教授（兼 工学研究科）	高村 仁
教授（兼 SRIS ^{※2} ）	高橋 幸生
委嘱教授（原研機構 ^{※3} ）	高梨 弘毅
特任教授（客員）	河野 龍興
准教授	Belosludov, Rodion Vladimirovich
准教授（兼）	岡本 範彦
助教（兼）	前田 健作
助教（兼）	伊藤 啓太
助教（兼）	木須 一彰
助教（兼）	河口 智也
特任助教	野澤 純
特任助教	李 弘毅
特任助教	宋 瑞瑞
特任教授	湯本 道明

※1 AIMR : 材料科学高等研究所

※2 SRIS : 国際放射光イノベーション・スマート研究センター

※3 原研機構：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

令和4（2022）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4（2022）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	教授	古原 忠	R4(2022).4.1- R6(2024).3.31	5条1号 所 長
金属材料研究所	教授	正橋 直也	R4(2022).4.1- R6(2024).3.31	5条1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	宮坂 等		5条2号
金属材料研究所	教授	藤田 全基		5条2号
金属材料研究所	教授	加藤 秀実		5条2号
工学研究科	教授	高村 仁	R4(2022).4.1- R6(2024).3.31	5条4号
S R I S※	教授	高橋 幸生	R4(2022).4.1- R6(2024).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	R4(2022).4.1- R6(2024).3.31	5条4号
金属材料研究所	事務部長	船田 正幸		5条3号

※ S R I S：国際放射光イノベーション・スマート研究センター

令和5年7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/>