TOHOKU
UNIVERSITY

E-IMR

# 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6年度
# 研究成果報告書

2024 Report on Research Activities

Research

東北大学金属材料研究所

## はじめに

エネルギー問題や地球温暖化・気候変動といった地球規模課題は年々深刻さを増しており、持続可能なエネルギー利用システムの構築は喫緊の社会的要請となっています。エネルギー変換・貯蔵技術や関連する新材料の研究開発は学術的にも産業的にも最重要テーマの一つであり、金属材料研究所では重点研究領域として全所的に推進しています。

先端エネルギー材料理工共創研究センター（E-IMR センター）は 2015 年 4 月の設立以来、エネルギー材料研究の拠点として活動を展開してきました。2022 年度からは第 4 期中期目標・中期計画に沿ってセンター第 2 期体制へ移行し、グリーンエネルギーテクノロジー開拓を中心とする 4 研究ユニット制を整備しました。本年度からは、研究対象をより広範にカバーするため、従来の「太陽エネルギー変換材料研究ユニット」を「エネルギー変換材料研究ユニット」と改称し、太陽光に限定されない多様なエネルギー変換研究に注力しています。

人員体制の充実も進みました。E-IMR 特任助教として研究に従事してきた野澤 純氏（コロイド科学・結晶成長）が藤原研究室の准教授に、李 弘毅氏（蓄電池分野、特にマグネシウム蓄電池とリチウム金属負極）が市坪研究室の助教に昇任し、ユニット内の研究推進力が一層高まりました。さらに国際連携の強化として、英国 University College London の紅林秀和教授（先端スピントロニクス研究開発センター（CSIC）兼務）がエネルギー変換材料研究ユニットに参画し、紅林グループの助教として Dion Troy Callum 氏が着任しました。国内では、国際卓越大学事業の枠組みを通じて大阪公立大学の林 晃敏教授（全固体電池）が金属材料研究所教授を兼任し、蓄エネルギー材料研究ユニットに加わりました。これらの参画により、センターの研究活動は国際性・多様性ともに大きく強化されました。

研究資金面では、特別推進研究や基盤研究（S）をはじめとする JSPS 科研費、JST-GteX、ALCA-Next といった大型プロジェクトが継続して進行中であり、蓄電池、水素、エネルギー変換、材料評価解析など多分野で計画的な研究が展開されています。各研究者は、センターの方向性に沿いながら独自性ある課題に挑戦し、着実に成果を積み重ねています。

本成果報告書では、これらの研究活動の進捗と成果を体系的にとりまとめました。E-IMR センターは今後も、量子ビーム解析やマテリアルズインフォマティクスを活用した先端的研究と若手人材育成を両輪として、革新的エネルギー材料の創製と社会実装に貢献し、カーボンニュートラル社会の実現に寄与してまいります。

令和 7（2025）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. 体制図* ........................................ *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 ........................................ 12

2−3. 材料評価・解析研究ユニット ........................................ 22

2−4. 複合モジュール・社会実装研究ユニット ........................................ 30

*3. 若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成 ....35*

3−1. 室温近傍での水素分子吸着を実現する骨格構造・担持金属に着目した
高分子材料の探索........................................ 35

3−2. X 線タイコグラフィー走査型転換電子収量同時イメージングによる
表面/バルク両敏感ナノマルチモーダル可視化計測技術の開発........................ 37

3−3. 多孔性構造と触媒活性サイトを有する無機−有機ハイブリッド型錯体ゲルを用いた
二酸化炭素変換反応の開拓 ........................................ 39

*4. 新聞発表等........................................41*

4−1. プレスリリース ........................................ 41

4−2. 新聞等掲載状況........................................ 43

4−3. 知的財産権 ........................................ 43

*5. 各種受賞・表彰........................................45*

受賞リスト........................................ 45

*6. 外部研究資金 ........................................47*

6−1. 科研費(学術研究助成基金助成金／科学研究費補助金) ........................ 47

6−2. 科研費以外の競争的研究費........................................ 47

*7. 主催した会議・研究会・ワークショップ........................................49*

7−1. 先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR)
Summer Meething 2024........................................ 49

7−2. 先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR)
E-IMR International Workshop 2024 ........................................ 53

*8. 職員及び運営委員名簿 ........................................59*

令和6(2024)年度　先端エネルギー材料理工共創研究センター名簿 ........................ 59

令和6(2024)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 ........ 60

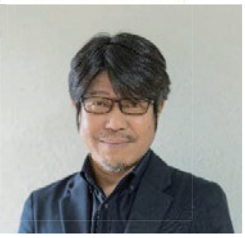
# 1．体制図

# 体制図（2024）

理学系研究部門出身　工学系研究部門出身

## センター長

センター長/教授
**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



## 運営委員会

## 研究支援室

特任教授（運営）（兼）
**佐藤敬浩**
研究企画・運営担当

## 研究戦略室

## 太陽エネルギー変換材料研究ユニット

教授
**藤原 航三**
結晶成長
Si多結晶太陽電池

教授(兼)
**関　剛斎**
磁性薄膜・ナノ構造
スピントロニクス

教授(委嘱)
**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 Ernst-Wilhelm**
物性理論物理
スピントロニクス
(材料科学高等研究所)

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多結晶の成長ﾒｶﾆｽﾞ
ﾑ

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)
**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(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
(材料科学高等研究所)

教授(兼)
**髙村 仁**
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
(工学研究科)

准教授(兼)
**佐藤　豊人**
水素貯蔵材料
水素関連材料

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

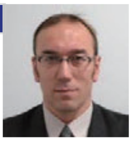
## 材料評価・解析研究ユニット

教授(兼)
**藤田 全基**
量子ビーム
教相関電子系
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)
**髙橋 幸生**
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
(国際放射光イノベーショ
ン・
スマートセンター)

准教授
**Belosludov, 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)
**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

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

特任助教
**宋 瑞瑞**
脱成分(デアロイン
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、関 剛斎(兼)、塚﨑 敦（兼)、BAUER, Gerrit Ernst-Wilhelm（兼 AIMR)
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

**【2024(令和 6)年度の成果概要】**

1.　太陽電池用 **Si** 多結晶の融液成長メカニズムに関する研究

　太陽電池用 Si 多結晶インゴットは一方向凝固過程で作製されているが、結晶粒界や亜粒界や転位など様々な結晶欠陥が不均一に分布しており、それらの制御が求められている。したがって、結晶欠陥の形成・発展メカニズムに関する基礎的な知見を得ることが必要である。

　本年度は、結晶粒界や亜粒界の発展メカニズムを明らかにするために、Si 多結晶の一方向凝固過程のその場観察実験を行った。図 1(a)は一方向凝固中の Si 多結晶の固液界面のスナップショットである[1]。固液界面の粒界部分には、{111} ファセット面で囲まれた溝が形成されている。従来、{111} ファセット面の成長モードは、1) 二次元核形成モデル、2) らせん転位によるスパイラル成長モデル、および、3) 微斜面によるステップフロー成長モデルが提案されているが、その成長キネティクスは依然不明なままである。本研究では、図 1(a)で観察される粒界溝の成長挙動を詳細に調べ、幾何学モデルを用いて上述した 1) ～3) のモデルを用いて粒界の時間発展をシミュレートした（図 1(b))。これにより、粒界溝を形成する {111} 面の成長は微斜面によるステップフローモードにより成長していることが示された[1]。また、粒界の発展方向が途中で変化する様子を観察することに成功し、この原因が、粒界溝の成長において転位の相互作用が関係することも示唆されている[1]。さらに、亜粒界の発展に関しても研究を進めており、一方向凝固過程において、一つの亜粒界が別の亜粒界を吸収する様子や転位のクラスターが亜粒界に吸収されていく様子を観察することに成功した[2]。これらの結晶欠陥挙動に関して議論を進めているところである。

[1] F. Yang et al., J. Crystal Growth 639, 127722 (2024).
[2] L-C. Chuang et al., J. Crystal Growth 644, 127822 (2024).

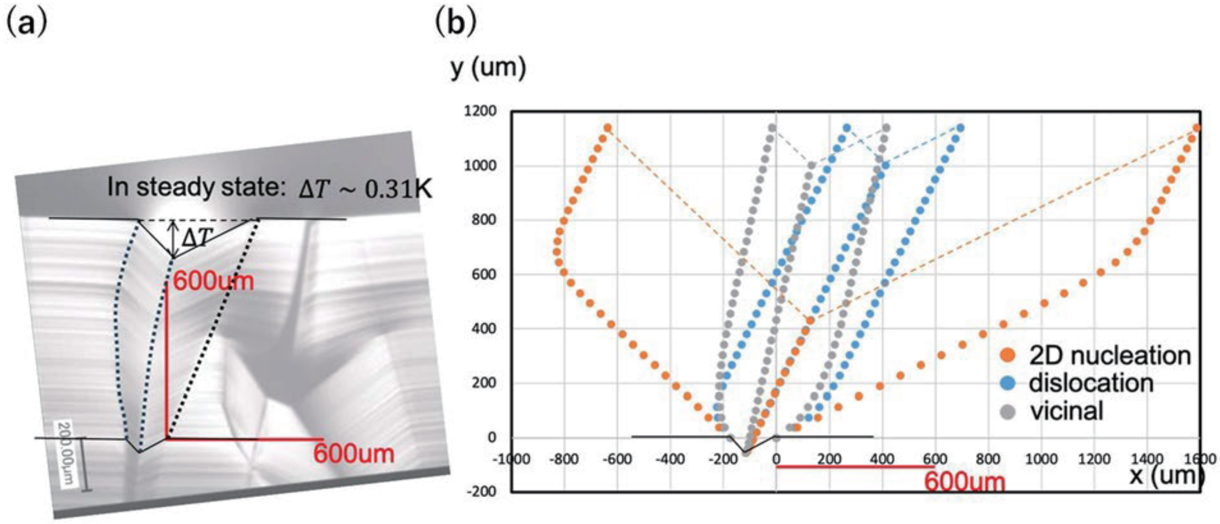



図 1(a) Si 多結晶の固液界面における結晶粒界の発展挙動の観察。
(b)幾何学モデルを用いた粒界発展挙動の解析結果。

## 2. 環境中水分子の吸収脱離を利用した酸化物蓄熱材料に関する研究

廃熱を蓄え必要に応じて熱エネルギーを放出することが可能な蓄熱材料のうち、K を含む層状二酸化マンガン（$K_{0.33}MnO_2 \cdot 0.83H_2O$）は、$MnO_2$ 層間の水分子が脱離・挿入を繰り返す水インターカレーション機構によって、高い環境保全性、比較的高い蓄熱エネルギー密度（約 1000 MJ/$m^3$）、速い吸放熱速度、良好なサイクル性などの優れた蓄熱特性を示すことが見出されている[3,4]。

本年度は、さらなる蓄熱エネルギー密度の向上および蓄熱温度領域(120~160℃)の低温化を図るため、K 含有層状 $MnO_2$ の結晶子サイズを制御することで比表面積を変化させ(図 2(a))、表面吸着水が蓄熱機構に及ぼす影響を系統的に検討した[5]。熱重量分析による吸放熱挙動の解析により、バルクインターカレーションにより層間に取り込まれた水分子は 120〜160°Cで脱離する一方、表面吸着水は約 60°C以下で脱離することが明らかとなった(図 2(b))。このことは、結晶子サイズの微細化により蓄熱温度を低温側にシフトできる可能性を示す。特に、酸化還元(Redox)法により合成した数十 nm 厚の $MnO_2$ ナノシートでは、表面吸着水の寄与によって水の吸着量および放熱量が増加し、従来の熱分解法で作製した試料と比較して約 1.3 倍の熱放出性能向上が得られた。また、単純な幾何学モデルにより結晶子サイズと表面・層間吸着比の関係を定量化し、$MnO_2$ 単層レベルへ薄膜化すると理論的には 2 倍以上の蓄熱容量向上が見込まれることを示した。表面吸着水の水和エンタルピーは層間水に比べて低く、酸化還元試料では液体に近い状態で存在することから、より低温域での吸脱着反応が可能となったと考えられる。これらの知見は、層状 $MnO_2$ を低温作動型かつ環境調和型の次世代蓄熱材料として高度に設計可能であることを示唆しており、今後の廃熱回収、住宅用蓄熱、車載機器の暖機運転等への応用展開が期待される。


[3] T. Hatakeyama, N. L. Okamoto, S. Otake, H. Sato, H. Li, and T. Ichitsubo, Nat. Commun. 13, 1452 (2022).
[4] N. L. Okamoto, H. Yoshisako, and T. Ichitsubo, Energy Storage Mater. 61, 102912 (2023).
[5] H. Yoshisako, N. L. Okamoto, K. Tanaka and T. Ichitsubo, Commun. Chem. 8, 169 (2025).

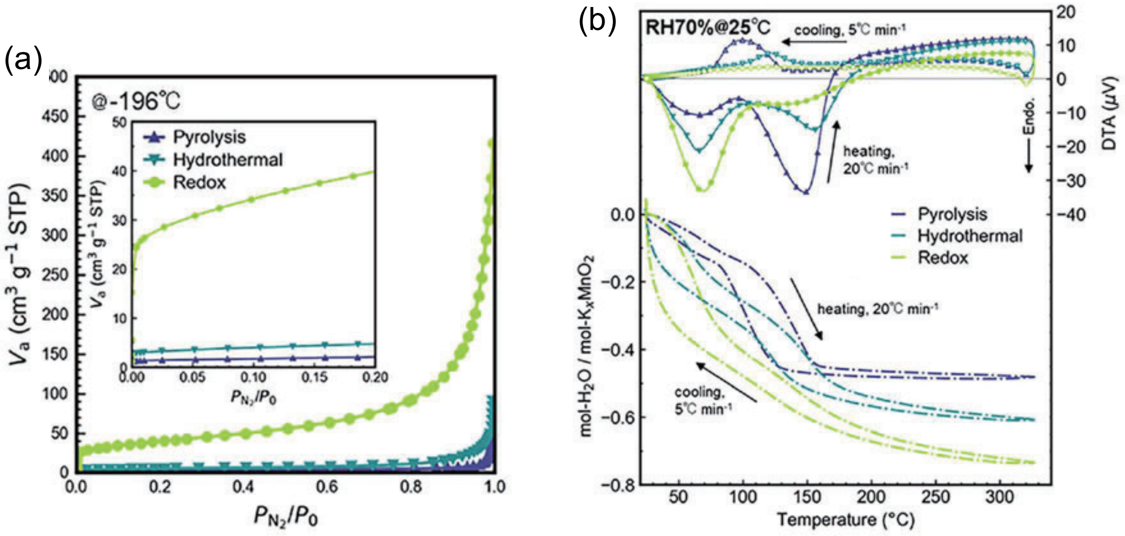




図 2(a) 熱分解法、水熱合成法および酸化還元法により作製した層状二酸化マンガンの−196°C における $N_2$分子の等温吸着曲線。(b) 湿潤 $N_2$雰囲気下における熱重量プロファイル。

3.　強磁性窒化物材料における磁気弾性特性の巨大変調

柔軟性をもつスピントロニクス素子の開発が求められており、磁性と格子変形を結び付ける磁気弾性特性の制御が脚光を浴び始めている。本研究では、$Fe_4N$ の Fe の一部を Co または Mn で置換することにより磁気弾性特性の巨大変調を実証し、様々な磁気物性との相関の有無を調べた(図 3)。[100]方向の磁歪定数($\lambda_{100}$)を測定した結果(図 3(c))、$Fe_4N$ 薄膜において Fe や Co 等の典型的な 3$d$遷移金属元素よりも絶対値が数倍大きい $\lambda_{100}$ = −121 ppm が得られ、希土類・貴金属フリーで低環境負荷な巨大磁気弾性材料として有望であることがわかった。加えて、$Fe_{2.3}Co_{1.7}N$ 薄膜では $\lambda_{100}$ = +46 ppm が得られ、Co 置換によって $\lambda_{100}$ の大きさを符号反転も含む広範囲で変調できることがわかった。図 3(a)-3(c)より、$\lambda_{100}$ と飽和磁化($M_s$)、磁気異方性エネルギー($K_1$)の間には相関関係は得られなかった。一方で、$|\lambda_{100}|$ と磁気ダンピング定数($\alpha$)の組成依存性を比較したところ(図 3(d)-3(f))、両者の相関が明らかとなった。$(Fe,Co)_4N$ について、第一原理計算により材料の電子構造で決定される内因性 $\alpha$($\alpha_{int}$)と $\lambda_{100}$ を計算したところ実験結果をよく説明でき、両者の相関の起源にはフェルミ準位における特定の $d$電子の状態密度が深く関わることがわかった。外因性 $\alpha$($\alpha_{ext}$)と $|\lambda_{100}|$ の相関は、膜中に存在する不均一歪みを介して、磁歪効果が 2 マグノン散乱を誘発した結果と考えられる。磁性窒化物はスピントロニクス特性と磁歪定数の巨大変調特性を合わせ持つことから、高感度スピントロニック歪みセンサーの候補材料として有望である[6]。

[6] K. Ito, I. Kurniawan, Y. Shimada, Y. Miura, Y. Endo, and T. Seki, Commun. Mater. 6, 53 (2025).

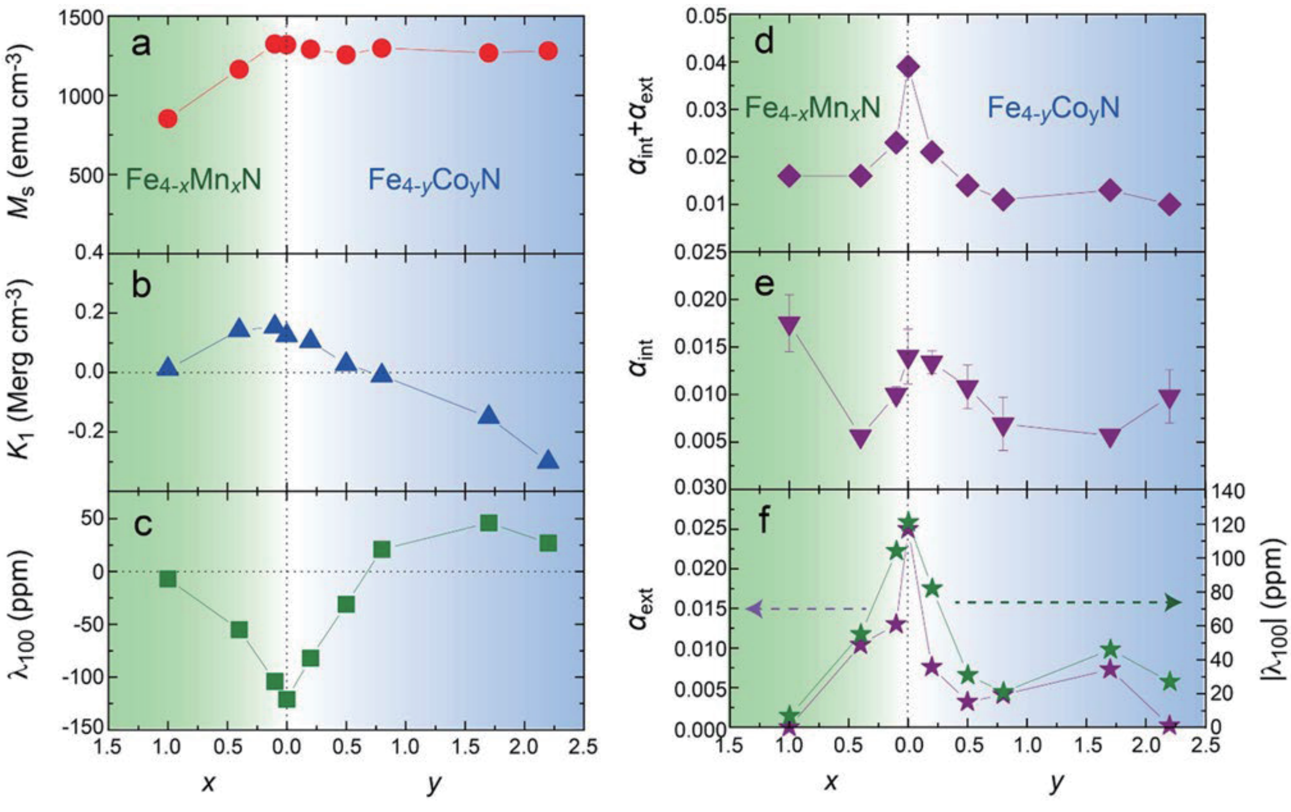



図 3 $Fe_{4-x}Mn_xN$ および $Fe_{4-y}Co_yN$ 薄膜における、(a)飽和磁化($M_s$)、(b)磁気異方性エネルギー($K_1$)、(c)[100]方向の磁歪定数($\lambda_{100}$)、(d)内因性および外因性磁気ダンピング定数の和($\alpha_{int}+\alpha_{ext}$)、(e)内因性磁気ダンピング定数($\alpha_{int}$)、(f)外因性磁気ダンピング定数($\alpha_{ext}$)および $\lambda_{100}$ の絶対値の組成依存性

【今後の計画】

1. 引き続き、Si 多結晶の一方向凝固過程における結晶粒界や転位の挙動に関して、その場観察実験を主体として明らかにしていく。また、マルセイユ大学や国内研究機関との共同研究により、理論的な成長モデルの構築も継続して進める。
2. 層状二酸化マンガンにバルク吸収および表面吸着している水分子の状態を、高温 FT-IR などを用いて詳細に解析する。また、層間カチオン種をイオン交換法などにより置換し、可逆的に挿入脱離可能な水分子量の増大、ひいては蓄熱エネルギー密度の向上を図る。
3. 磁性材料を使った熱電変換技術に関しては、$Fe_4N$ 層を非磁性層と多層化させて異常ネルンスト係数の向上を図る試みと並行して、薄膜における性能指数の評価を可能にする手法を確立する。加えて、新しい磁歪材料の創製を視野に入れて、結晶方位の異なる $Fe_4N$ 系薄膜について磁歪特性の系統的な評価を進め、更なる磁歪の増大あるいは抑制についての知見を得る。

【論文リスト】

1. Jun Nozawa, Masahide Sato, Satoshi Uda, Kozo Fujiwara, Multi-layer kagome lattices assembled with isotropic spherical colloids via heteroepitaxial growth, Colloid and Interface Science Communications **64,** 100815 (2025).
2. Peiyao Hao, Lu-Chung, Chuang, Kensaku Maeda, Jun Nozawa, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Lili Zheng, In situ observation and numerical analysis of temperature gradient effects on growth velocity during directional solidification of silicon, Journal of Materials Science **59,** 18446-18460 (2024).
3. D. S. Priyanka, M. Srinivasan, J. B. Sudharsan, K. Fujiwara, Compositional analysis on novel half Heusler alloys XPdSi(X=Ti, Zr, Hf) for waste heat recycling process, Materials Science in Semiconductor Processing **180**, 108524 (2024).
4. Fan Yang, Lu-Chung Chuang, Kensaku Maeda, Jun Nozawa, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Thierry Duffar, Dislocation interaction with vicinally faceted groove at grain boundary in multi-crystalline silicon, Journal of CrystalL Growth **639**, 127722 (2024).
5. Shashank Shekhar Mishra, Lu Chung Chuang, Jun Nozawa, Kensaku Maeda, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Thierry Duffar, Vicinal (111) surfaces at Si solid-liquid interface during unidirectional solidification, Scripta Materialia **247**, 116116 (2024).
6. Lu-Chung Chuang, Kensaku Maeda, Jun Nozawa, Haruhiko Morito, Kozo Fujiwara, Misorientation increase of small-angle grain boundaries during directional solidification of silicon, Journal of CrystalL Growth **644,** 127822 (2024).
7. Takeshi Seki, Hiroto Masuda, Varun K Kushwaha, Takumi Yamazaki, Keita Ito, Antisymmetric interlayer exchange coupling spontaneously built in synthetic antiferromagnetic structures using film growth, Journal of Physics D: Applied Physics **58**, 175002 (1-10) (2025).
8. V. K. Kushwaha, T. Yamazaki, T. Seki, Proof-of-Concept for Selective Magnetization Switching for Microfabricated Exchange-Spring Magnets by Spin Wave Excitation, Advanced Physics Research, Advanced Physics Research **4**, 2400160 (1-10) (2024).
9. Hao Ding, Keita Ito, Yasushi Endo, Koki Takanashi, Takeshi Seki, Magnetoelastic coupling for Fe–Ga thin films epitaxially grown on different substrates, Journal of Physics D: Applied Physics **57**, 385002 (2024).
10. Rajkumar Modak, Takamasa Hirai, Yuya Sakuraba, Seiji Mitani, Koichi Oyanagi, Takumi Yamazaki, Takeshi Seki, Ken-ichi Uchida, High-Throughput Optimization of Magnetoresistance Materials Based on Lock-In Thermography, Advanced Physics Research **3**, 2400021 (1-8) (2024).
11. T Seki, K Uchida, K Takanashi, Spin caloritronics in metallic superlattices, Journal of Physics: Condensed Matter **36**, 333001 (1-11) (2024).
12. Masayuki Murata, Takamasa Hirai, Takeshi Seki, Ken-ichi Uchida, Zero-magnetic-field operation of ordinary-Nernst-effect-based transverse thermoelectric module using embedded permanent magnets, Applied Physics Letters **124**, 193901 (1-7) (2024)

13. Molecular beam epitaxy of superconducting FeSexTe1-x thin films interfaced with magnetic topological insulators, Y. Sato, S. Nagahama, I. Belopolski, R. Yoshimi, M. Kawamura, A. Tsukazaki, N. Kanazawa, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, Y. Tokura, Physical Review Materials **8**, L041801 (2024).

14. Photogalvanic spectroscopy on MnBi2Te4 topological insulator thin films, T. Takagi, R. Watanabe, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, Y. Tokura, N. Ogawa, Applied Physics Letters **124**, 163102 (2024).
15. Strongly pinned skyrmionic bubbles and higher-order nonlinear Hall resistances at the interface of Pt/FeSi bilayer, T. Hori, N. Kanazawa, K. Matsuura, H. Ishizuka, K. Fujiwara, A. Tsukazaki, M. Ichikawa, M. Kawasaki, F. Kagawa, M, Hirayama, Y. Tokura, Physical Review Materials **8**, 044407 (2024).
16. Giant antisymmetric magnetoresistance arising across optically controlled domain walls in the magnetic Weyl semimetal Co3Sn2S2, K. Fujiwara, K. Ogawa, N. Yoshikawa, K. Kobayashi, K. Nomura, R. Shimano, A. Tsukazaki, Communications Materials **5**, 239 (2024).
17. Parity-independent Kondo effect of correlated electrons in electrostatically defined ZnO quantum dots, K. Noro, Y. Kozuka, K. Matsumura, T. Kumasaka, Y. Fujiwara, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, T. Otsuka, Nature Communications **15**, 9556 (2024).
18. Synthesis of a tailored semimetallic Weyl ferromagnet, I. Belopolski, R. Watanabe, Y. Sato, R. Yoshimi, M. Kawamura, S. Nagahama, Y. Zhao, S. Shao, Y. Jin, Y. Kato, Y. Okamura, X-X. Zhang, Y. Fujishiro, Y. Takahashi, M. Hirschberger, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, C-K. Chiu, G. Chang, M. Kawasaki, N. Nagaosa, Y. Tokura, Nature **637**, 1078 (2025).
19. RL Rodríguez-Suárez, X-H Zhou, CY Cai, Ping Tang, T Yu, GEW Bauer, SM Rezende, Surface and volume modes of polarization waves in ferroelectric films, American Physical Society **109,** 134307-1-134307-7 (2024).
20. Leran Wang, Alejandro O Leon, Wenqing He, Zhongyu Liang, Xiaohan Li, Xiaoxiao Fang, Wenyun Yang, Licong Peng, Jinbo Yang, Caihua Wan, Gerrit EW Bauer, Zhaochu Luo, Harnessing Interlayer Magnetic Coupling for Efficient, Field-Free Current-Induced Magnetization Switching in a Magnetic Insulator, WILEY ONLINE LIBRARY **5**, 2400006 (1-10) (2024).
21. Mehrdad Elyasi, Kei Yamamoto, Tomosato Hioki, Takahiko Makiuchi, Hiroki Shimizu, Eiji Saitoh, Gerrit EW Bauer, Nonlinear enhancement of coherent magnetization dynamics, American Physical Society **109**, L180402 (1-7) (2024).
22. Haruna Kaneko, Rikuto Ota, Keito Kobayashi, Shun Kanai, Mehrdad Elyasi, Gerrit EW Bauer, Hideo Ohno, Shunsuke Fukami, Temperature dependence of the properties of stochastic magnetic tunnel junction with perpendicular magnetization, Applied Physics Express **17**, 053001 (1-4) (2024).
23. Xiyin Ye, Ke Xia, Gerrit EW Bauer, Tao Yu, Chiral-damping-enhanced magnon transmission, Physical Review Applied **22**, L011001 (1-6) (2024).
24. Ping Tang, Gerrit EW Bauer, Thermal and Coherent Spin Pumping by Noncollinear Antiferromagnets, Physical Review Letters **133**, 036701 (1-8) (2024).
25. Chengyuan Cai, Zubiao Zhang, Ji Zou, Gerrit EW Bauer, Tao Yu, Spin-orbit-locked coupling of localized microwaves to magnons, Physical Review Applied **22**, 034042 (1-12) (2024).
26. Mehrdad Elyasi, Shun Kanai, Hideo Ohno, Shunsuke Fukami, Gerrit EW Bauer, Effect of nonlinear magnon interactions on stochastic magnetization switching, Physical Review B **110**, 094433 (1-11) (2024).
27. Ping Tang, Gerrit EW Bauer, Role of disorder in the intrinsic orbital hall effect, Physical Review Letters

**133**, 186302 (1-7) (2024).
28. Guibin Lan, Kang-Yuan Liu, Zhenyu Wang, Fan Xia, Hongjun Xu, Tengyu Guo, Yu Zhang, Bin He, Jiahui Li, Caihua Wan, Gerrit EW Bauer, Peng Yan, Gang-Qin Liu, Xin-Yu Pan, Xiufeng Han, Guoqiang Yu, Coherent harmonic generation of magnons in spin textures, Nature Communications **16**, 186302 (1-7) (2025).
29. Tomohiro Uchimura, Jiahao Han, Ping Tang, Ju-Young Yoon, Yutaro Takeuchi, Yuta Yamane, Shun Kanai, Gerrit EW Bauer, Hideo Ohno, Shunsuke Fukami, Unconventional Spin Hall Magnetoresistance in Noncollinear Antiferromagnet/Heavy Metal Stacks, Physical Review Letters **134**, 096701 (1-7) (2025).
30. Hongyi Li, Shohei Nishimura, Weiqi Liu, Norihiko L. Okamoto, Shingo Matsumoto, Yuki Nakata, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Takitaro Yamaguchi, T etsu Ichitsubo, Enhancing the durability of aluminium-foil anodes in rechargeable lithium batteries via uniformly distributed alloy addition in the matrix phase, Journal of Materials Chemistry A **13**, 5723-5731 (2025).
31. Norihiko L. Okamoto, Hiroki Yoshisako, Kazuya Tanaka, Tetsu Ichitsubo, Layered manganese dioxide as a versatile heat-storage material utilizing environmental water vapor, Proceedings of ENERSTOCK **2024**, 315-318 (2024).
32. Tomoya Kawaguchi, Masaya Yasuda, Natsumi Nemoto, Kohei Shimokawa, Hongyi Li, Norihiko L Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Defect Rocksalt Oxides As Cathodes for Rechargeable Magnesium Batteries, ECS Meeting Abstracts MA**2024-02**, 1426 (2024).
33. Masatsugu Oishi, Tomoya Kawaguchi, Raku Hamamoto, Satoshi Hiroi, Koji Ohara, Norihiko Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Evaluation of Electronic and Crystal Structures of Li-Rich Layered Oxide Cathode Using Combinations of Exes, XPS, and PDF Analyses, ECS Meeting Abstracts MA**2024-02**, 1436 (2024).
34. Masatsugu Oishi, Tomoya Kawaguchi, Yusuke Fujita, Masaya Izumi, Satoshi Hiroi, Koji Ohara, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Reversible Tetrahedral-Site Migration Inducing an Additional Charge Compensation Reaction in Li-Rich Layered Oxide 0.4Li2MnO3–0.6LiNi0.5Mn0.5O2, Chemistry of Materials **36**, 4849-4860 (2024).
35. Tomoya Kawaguchi, Natsumi Nemoto, Hikari Sakurai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Utilization of Delithiation-Induced Amorphous Oxide as a Cathode for Rechargeable Magnesium Batteries, Chemistry of Materials **36**, 4877-4887 (2024).
36. Keita Ito, Takahide Kubota, Koki Takanashi, Negative anomalous Nernst coefficient in a MnAlGe film and its enhancement in a (Mn-Cr)AlGe film, Physical Review Applied **21**, 054012 (1-7) (2024).
37. Keita Ito, Nobukiyo Kobayashi, Kenji Ikeda, Takumi Ichimura, Mitsuhiro Matsuki, Takahide Kubota, Kenta Amemiya, Akio Kimura, Koki Takanashi, Enhanced orbital magnetic moment in an FeCo-BaF2 granular film revealed by x-ray magnetic circular dichroism, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **606**, 172361 (1-5) (2024).
38. Keita Ito, Ivan Kurniawan, Yusuke Shimada, Yoshio Miura, Yasushi Endo, Takeshi Seki, Giant tunability of magnetoelasticity in Fe4N system as a platform to unveil correlation between magnetostriction and magnetic damping, Communications Materials **6**, 53 (1-8) (2025).

【主な国際・国内会議】

1. Kozo Fujiwara, Dynamics at solid-liquid interface of Si, The 12th International Workshop on Crystalline Silicon for Solar Cells, 2024/05/29
2. Takeshi Seki, Keita Ito, Control of Magneto-Elasticity in Magnetic Thin Films, REIMEI International workshop: Physics of Advanced Functional Materials, 2024/10/10
3. Takeshi Seki, Keita Ito, Giant Tunability of Magnetoelasticity in Fe4N System, The 5th International Symposium on Advanced Magnetic Materials and Applications (ISAMMA), 2024/08/06
4. A. Tsukazaki, Experimental detection of topological features in thin films of a Weyl magnet $Co_3Sn_2S_2$, RIKEN CEMS Topical meeting, 2024/05/20
5. A. Tsukazaki, Thin films studies on quantum materials, TSMC-UTokyo Semiconductor Technology Research Symposium, 2024/07/02
6. A. Tsukazaki, Thin films studies on quantum materials, ATF 研究会, 2024/0904
7. 塚﨑敦, 磁性ワイル半金属 $Co_3Sn_2S_2$ の磁区制御と異方性磁気抵抗効果, 東北大通研共同プロジェクト研究会, 2024/10/22
8. 塚﨑敦, ワイル磁性体の光による磁区制御と磁気抵抗検出, 界面最新科学研究会, 1024/10/26
9. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Interactions in magnonics, SPICE-Workshop on "Hybrid Correlated States and Dynamics in Quantum Materials, 2024/05/15
10. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Future of spin caloritronics, Spin Caloritronics XIII, 2024/0521
11. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Selected topics in magnonics and ferronics, Magnonics seminar Wuhan in the honor of Prof. Burkard Hillebrands, 2024/0525
12. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Introduction to spintronics, UCAS Summer Course, 2024/06/17
13. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Gated Spin Communities, SkySolMag Conference, 2024/06/26
14. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Selected topics in magnonics and ferronics, 2nd International Workshop on Microwave Research and Applications, 2024/06/29
15. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Gated Spin Communities, The 14th International Conference on Metamaterials,Photonic Crystals and Plasmonics, 2024/07/18
16. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Selected Topics in Magnonics and Ferronics, 22nd International Conference on Ternary and Multinary Compounds, 2024/09/09
17. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Dipolar chirality of magnon transport in thin magnetic films, REIMEI Workshop: Physics of Advanced Fundtional Materials, 2024/10/11
18. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Hybrid quasi-particles that carry magnetic or electric dipoles, WEH Seminar 'Hybrid angular momentum transport and dynamics', Bonn, 2024/10/31
19. GERRIT ERNST-WILHELM BAUER, Spin Transport in Ferromagnets vs. Polarization Transport in Ferroelectrics, School of Applied spintronics – III edition, 2024/12/12
20. Norihiko L. Okamoto, Hiroki Yoshisako, Kazuya Tanaka, Tetsu Ichitsubo, Layered manganese dioxide as a versatile heat-storage material utilizing environmental water vapor, ENERSTOCK2024, the 16th IEA ES TCP International Conference on Energy Storage, 2024/06/05
21. Norihiko L. Okamoto, Kosuke Fujiwara, Tetsu Ichitsubo, Anisotropic Thermal Conductivity in an Iron Aluminide Consisting of a Tunnel Framework Structure and Guest Aluminum Atoms, ICT/ECT2024, 2024/07/03

22. Norihiko L. Okamoto, Hiroki Yoshisako, Kazuya Tanaka, and Tetsu Ichitsubo, Layered Manganese Dioxide as a Heat-Storage Material Utilizing Environmental Water Vapor, The 5th China International Congress on Composite Materials (CCCM-5) 2024/07/26
23. 岡本範彦, 環境水分子の挿入脱離を利用した層状二酸化マンガン蓄熱材料, 第 13 回エネルギー・マテリアル融合領域シンポジウム, 2024/11/05
24. Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Layered Manganese Dioxide as a Heat-Storage Material Utilizing Environmental Water Vapor, E-IMR International Workshop, 2024/11/26
25. Norihiko L. Okamoto, Hiroki Yoshisako, and Tetsu Ichitsubo, Origin of Irreversible Capacity of Water Intercalation in δ-Type Layered Manganese Dioxide, Materials Research Society 2024 Fall Meeting, 2024/12/04
26. Norihiko L. Okamoto, Florian Brumbauer, Martin Luckabauer, Wolfgang Sprengel, and Tetsu Ichitsubo, Tin-Induced Cocktail Effect in Biocompatible β-Ti Alloys, Materials Research Society 2024 Fall Meeting, 2024/12/05
27. 岡本範彦, 市坪哲, 水分子を可逆的に脱挿入する層状二酸化マンガンの蓄熱材料への応用とその蓄熱特性の格子欠陥依存性, 日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会, 2025/03/09
28. Kensaku Maeda, Kozo Fujiwara, Fabrication of periodically-turned crystals by twin boundary manipulation, 3rd INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS, 2024/10/19
29. 前田 健作、夏東東、廣瀬光太郎、石川幸雄、鴻池一暁、藤原 航三, GaSb の一方向凝固過程における坩堝壁近傍の挙動, 第 53 回結晶成長国内会議（JCCG-53）, 2024/11/20
30. 於華萌,伊藤啓太,遠藤恭,関剛斎, Co 部分置換 Fe4N 薄膜の磁歪特性, 日本金属学会 2025 年春期(第 176 回)講演大会, 2025/03
31. Ivan Kurniawan, Keita Ito, Takeshi Seki, Keisuke Masuda, Yoshio Miura, Understanding the microscopic origin of the relation between magnetoelasticity and magnetic damping constant in Fe4xCo4-4xN, 16th Joint Conference on Magnetism and Magnetic Materials and Intermag, 2025/01
32. Takeshi Seki, Keita Ito, Control of Magneto-Elasticity in Magnetic Thin Films, Summit of Materials Science 2024, 2024/11
33. Keita Ito, Takeshi Seki, Anomalous Nernst effect in Fe4N films substituted by heavy metals, The 8th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 7th Symposium on International Joint Graduate Programs in Materials Science and Spintronics, 2024/11
34. Keita Ito, Development of spintronics materials based on ferromagnetic nitrides, The 8th Symposium for the Core Research Clusters for Materials Science and Spintronics and the 7th Symposium on International Joint Graduate Programs in Materials Science and Spintronics, 2024/11
35. Keita Ito, Takeshi Seki, Anomalous Nernst effect in heavy-metal-substituted Fe4N films, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024/09
36. Ivan Kurniawan, Keita Ito, Takeshi Seki, Yoshio Miura, First-principles study of magnetostriction and damping in Fe4xCo4-4xN, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024/09
37. 伊藤啓太,関剛斎, 重金属元素置換 Fe4N 薄膜における異常ネルンスト効果, 第 48 回日本磁気学会学術講演会, 2024/09
38. 野澤純, 宇田聡, 藤原航三, コロイドヘテロエピタキシャル成長における多段階核形成プロセス, 第 53 回結晶成長国内会議, 2024/11/20

## 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）、折茂 慎一（兼 AIMR）、髙村 仁（兼　工学）
准 教 授：佐藤 豊人（兼）
特任助教：李 弘毅

【2024（令和 6）年度の成果概要】

**水車型 Ru 二核錯体の活性サイトを保持した共有結合格子の作製と触媒能の開拓（宮坂グループ）**

カルボン酸架橋水車型 Ru および Rh 二核(II,II)錯体[$M_2^{II,II}$] (M = Ru, Rh)をエカトリアル方向（赤道方向）に一義的に繋げることができれば、触媒活性サイトとなるアキシャル位方向（極軸方向）を空けたまま合目的的に高次に展開できる。今回、以前に報告した 4-ホルミル安息香酸からなる[$Ru_2^{II,II}$]錯体（*Dalton Trans.* **2024**, *53*, 444-448）と新たに合成した[$Rh_2^{II,II}$]錯体を 2,5-dimethyl-1,4-phenylenediamine と 2:1 比でイミン結合集積させることにより、網状二次元層状格子 MCOF-[$M_2$]を合成することに成功した[1]。本合成戦略によって構築される MCOF-M は、１）格子が共有結合格子（COF）で安定であり、２）触媒活性点として機能する[$M_2^{II,II}$]の軸位が保持される、という特徴を持つ。光励起二酸化炭素($CO_2$)還元を行った結果、MCOF-Ru が MCOF-Rh の約 10 倍の CO を生成し、$H_2$ 発生との選択性は 96%と非常に優れていた。本研究は、[$Ru_2^{II,II}$]を用いた $CO_2$ 還元の最初の例であり、[$Ru_2^{II,II}$]錯体の触媒機能についての新たな方向性を示している。

[1] C. Itoh, M. Kitada, M. Kondo, S. Masaoka, H. Yoshino, W. Kosaka, Y. Ootani, J. Matsuda, M. Kubo, T. J. Konno, H. Miyasaka, "Reticular Imine-linked Coordination Polymers Based on Paddlewheel Diruthenium/Dirhodium Nodes: Synthesis and Metal-site Dependent Photocatalytic Reduction of $CO_2$", *ChemSusChem* **2024**, *17*, e202400885 (1-7). <Open Access> DOI: 10.1002/cssc.202400885

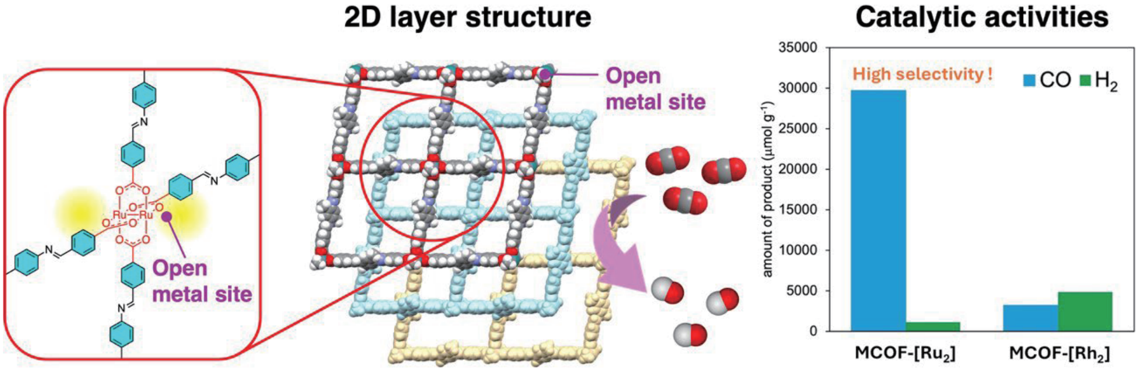



図 1. カルボン酸架橋水車型 Ru、Rh 二核(II,II)錯体を基にした共有結合格子の構造と $CO_2$ 光還元の生成物選択性.

**高い耐久性を有する室温作動型の水素貯蔵材料の開発（折茂・佐藤グループ）**

水素を原子として貯蔵する材料（水素貯蔵材料）は、コンパクトな水素貯蔵を実現するが、課題は、重量当たりの低い水素貯蔵量（低い重量水素密度）や低い耐久性である。私たちは、これらの課題が克服された水素貯蔵材料の開発を目的に $Y_{0.7}Mg_{0.3}Co_{3.0}$ を開発した。$Y_{0.7}Mg_{0.3}Co_{3.0}$ は、2 種類の多面体が積層する結晶構造を有し、室温近傍で 100 回の水素吸蔵・放出の繰り返し後も高い水素貯蔵量（1.7 質量%）を維持する高い耐久性を示した（図 2）。多くの水素貯蔵材料は、水素吸蔵時と放出時で圧力差（ヒステリシス）が現れ、水素吸蔵・放出の格子膨張・収縮に伴う残留歪がヒステリシスの要因の一つとして考えられる。一方、$Y_{0.7}Mg_{0.3}Co_{3.0}$ は、ヒステリシスが極めて狭かったため、水素吸蔵・放出に伴う残留歪が

小さく、高い耐久性につながることが示唆された。更に、$Y_{0.7}Mg_{0.3}Co_{3.0}$は、高圧下で 2.9 質量%の水素を吸蔵することも明らかになった。

T. Sato, H. Saitoh, R. Utsumi, J. Ito, K. Obana, Y. Nakahira, D. Sheptyakov, T.Honda, H. Sagayama, S. Takagi, T. Kono, H. Yang, W. Luo, L. Lombardo, A. Züttel, S. Orimo, "Synthesis, Crystal Structure, and Hydrogen Storage Properties of an AB3-Based Alloy Synthesized by Disproportionation Reactions of AB2-Based Alloys" *J. Phys. Chem. C*, **2025**, *129*, 2865–2873.

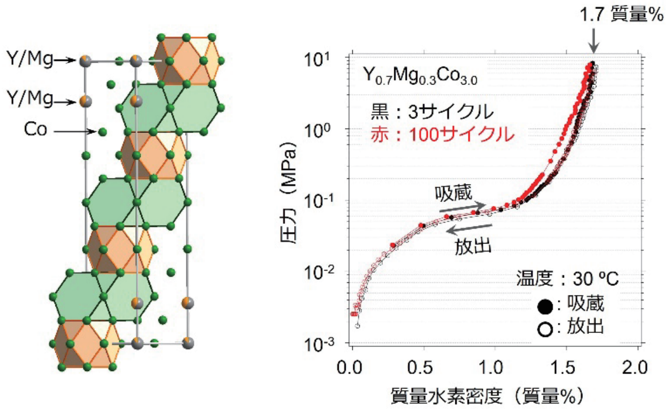



図 2．(左)$Y_{0.7}Mg_{0.3}Co_{3.0}$の結晶構造と（右）水素吸蔵・放出特性曲線（黒：3 サイクル、赤：100 サイクル）

## 固体酸化物セル電極材料の開発（高村グループ）

近年、グリーン水素関連技術として固体酸化物セル（SOC）の開発が進められている。SOC は 700 ℃近傍で作動し、発電に加えて、その逆作動、すなわち、電力による水蒸気の電気分解で高効率な水素製造が可能である。SOC の長所は、発電・水素製造に用いるアルカリ形や高分子膜形など室温近傍で作動する他の方式に比べて効率が高いことであるが、短所として、高温作動に由来する経時劣化や、材料選択の制限による製造コストの高さが指摘されている。特に、電極材料に用いられる高価なコバルト(Co)の使用量削減が求められている。現在、空気極材料には金属成分として 10 から 50 mol%程度のコバルトが必要であり、一般にコバルト量が多いほど発電・水素製造能力が高くなる。これまでにコバルトの役割として、空気中の酸素分子を酸化物表面で吸着・解離させ、酸化物中に取り込む反応速度の促進が示唆されているが、その反応速度とコバルト量の関係や、どこまでコバルト量を削減できるかは不明であった。

今年度の研究では、コバルト酸化物（$Co_3O_4$）をバリウム-ジルコニウム（Ba-Zr）系プロトン伝導体に添加した電極材料に着目した。図 3(a)に示すように、630℃の熱処理では $Co_3O_4$ が微細な粒子としてプロトン伝導体と混合された状態となるのに対し、図 3(b)の 880℃熱処理ではプロトン伝導体中に均一に固溶した。これら電極材料に酸素が吸着・解離し、取り込まれる速度（酸素表面交換反応速度）は、図 3(c)に示すように、880℃熱処理では%の添加で $Co_3O_4$ 無添加に対して 6.1 倍となった。また、630℃の低温熱処理により単に $Co_3O_4$ 粒子を分散した場合でも 10%添加で高温熱処理と同等の高い反応速度が得られた。この結果は、電極材料表面での酸素の吸着・解離の促進には、必ずしも数 10%から 50%といった多量のコバルトは必要なく、分散状態の最適化により数%から 10%程度の $Co_3O_4$ 添加でも可能ということを示唆している。

[1] Shinnosuke Kamohara, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Dissociative Oxygen Adsorption and Incorporation in $Co_3O_4$-dispersed $BaZr_{0.9}Sc_{0.1}O_{2.95}$ for PCFC Cathode, *ACS Applied Materials & Interfaces*, **16** (2024) 52339–52348.

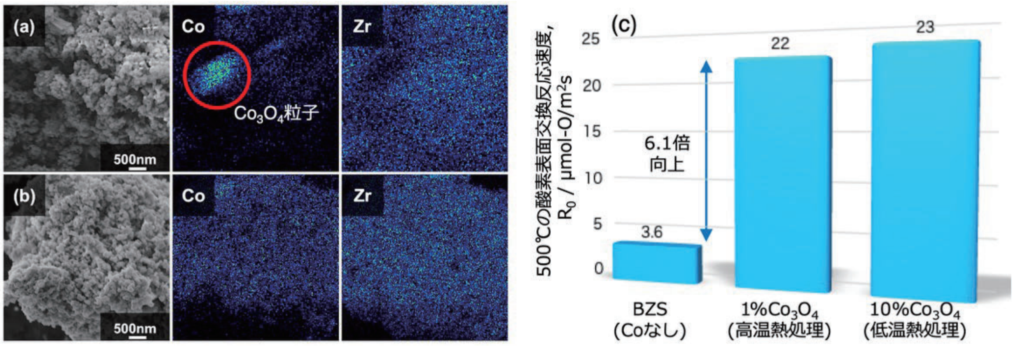



図 3．(a) 630 ℃, (b)880 ℃で熱処理された $Co_3O_4$ 添加 Ba-Zr 系プロトン伝導体の微細組織と (c) 酸素表面交換反応速度の比較

**均一 Si 固溶による Li 蓄電池用 Al 箔負極の耐久性向上（李・市坪グループ）**

持続可能なエネルギーシステムの構築に向けて，蓄電池の高エネルギー密度化と低コスト化が求められている．Li 蓄電池用の新規負極材料として，本研究グループは圧延 Al 箔負極の開発を進めてきた．本研究では，長期サイクルにおける Al 箔負極の構造安定性向上を目指して，Si 添加の効果に着眼し， 0-4 wt.%の範囲で添加量を制御して，Al 箔内の Si 分布状態と電極反応特性と相関を評価した．その結果，1 wt.%以下の Si を添加した Al 箔では，Si は Al 母相に固溶し，Li の合金化・脱合金化過程において，Li-Si(-Al)を形成することで，体積変化に伴う Al 母相の亀裂発生を抑制する効果があることが明らかになった．一方， 1 wt.%を超える Si 添加では，Si 粒子の粗大化と凝集が顕著となり，構造安定性に対する寄与が限定的であった．特に，Si の固溶濃度が最大となる Al-1%Si 箔では，Al 相の過剰な微細化が抑制され，サイクル寿命が顕著に向上した．

H. Li, S. Nishimura, W. Liu, N. L. Okamoto, S. Matsumoto, Y. Nakata, H. Hoshikawa, T. Kumagai, T. Yamaguchi, T. Ichitsubo, Enhancing the durability of aluminum-foil anodes in rechargeable lithium batteries via uniformly distributed alloy addition in the matrix phase. *J. Mater. Chem. A*, **2025**, *13*, 5723-5731.

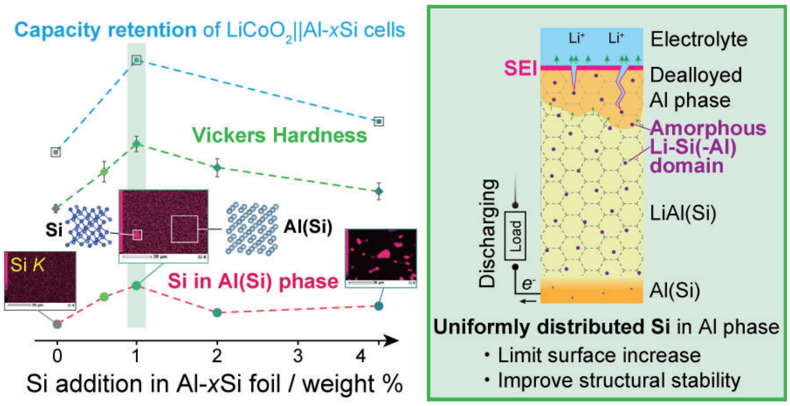



図 4.

**【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、$CO_2$ 選択的吸着と物性制御、$CO_2$ 電極分解反応、光触媒 $CO_2$ 分解反応、光触媒 $H_2$ 発生、電極触媒 $CO_2$ 還元について検討を行う（宮坂 G)。
- カーボンニュートラルを指向した高活性共有結合錯体格子 HP-MCOF の開発と触媒機能の開拓（宮坂 G)。
- 汎用的な金属で構成され、高密度に水素を貯蔵する新規材料開発（折茂・佐藤 G）
- 水素貯蔵材料中おける水素の結合状態の解明（折茂・佐藤 G）

- 本研究により、SOC 電極材料におけるコバルト使用量を大幅に削減できる可能性が示された。一方、電極材料には酸化物表面での反応速度に加えて、電解質材料との化学的・熱的特性のマッチングや、集電のために高い電気伝導度が求められる。今後は、コバルト量低減がこれら他の特性に及ぼす影響も考慮し、実際の SOC 用電極材料の低コスト化に取り組む（高村 G）。
- Al 箔負極の Al 母相内の Li 拡散を促進するための組成・組織調整（李・市坪 G）
- Al 箔負極の実用化に向けた電解質組成とセル構成の最適化（李・市坪 G）

【論文リスト】


1. Wataru Kosaka, Yudai Watanabe, Taku Kitayama, Chisa Itoh, and Hitoshi Miyasaka, Introduction of substituents for tuning the redox properties of benzoate-bridged paddlewheel diruthenium(II, II) complexes: What does the OH group bring?, Dalton Transactions **54**, 1838-1849 (2025).
2. Haruka Yoshino, Masaki Saigo, Takumi Ehara, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Jenny Pirillo, Yuh Hijikata, Shinya Takaishi, Wataru Kosaka, Keni-ichi Otake, Susumu Kitagawa, and Hitoshi Miyasaka, Ultrafast Luminescence Detection with Selective Adsorption of Carbon Disulfide in a Gold(I) Metal−Organic Framework, Angewandte Chemie International Edition **64**, e202413830 (1-7) (2025).
3. Chisa Itoh, Masaki Kitada, Mio Kondo, Shigeyuki Masaoka, Haruka Yoshino, Wataru Kosaka, Yusuke Ootani, Junko Matsuda, Momoji Kubo, Toyohiko J. Konno, and Hitoshi Miyasaka, Reticular Imine-linked Coordination Polymers Based on Paddlewheel Diruthenium/Dirhodium Nodes: Synthesis and Metal-site Dependent Photocatalytic Reduction of $CO_2$, Chem Sus Chem **17**, e202400885 (1-7) (2024).
4. Wataru Kosaka, and Hitoshi Miyasaka, Dynamic Spin Reordering in a Hybrid Layered Ferrimagnet with Intercalated Biferrocenium Radicals Qingxin Liu, Chemical Science **15**, 19411-19419 (2024).
5. Wataru Kosaka, Bhart Kumar, Dibya Jyoti Mondal, Hitoshi Miyasaka, Sanjit Konar, $CO_2$-actuated Spin Transition Tuning in an Interdigitated Hofmann-type Coordination Polymer Abhik Paul, Chemical Science **15**, 15610-15616 (2024).
6. Wataru Kosaka, Naoki Eguchi, Taku Kitayama, Ryoma Sato, Ryosuke Nakao, Yoshihiro Sekine, Shinya Hayami, Kouji Taniguchi, and Hitoshi Miyasaka, Impact of Layer Stacking Manner on Lithium-Ion-Battery Performance in Electrically Neutral Tetraoxolene-Bridged Iron (II) Hexagonal Layer Metal-Organic Frameworks, Chemistry of materials **36**, 3536-3573 (2024).
7. Kouji Taniguchi, Po-Jung Huang, Hajime Sagayama, Ryoji Kiyanagi, Kazuki Ohishi, Shunsuke Kitou, Yuiga Nakamura, Hitoshi Miyasaka, Tuning of spin-orbit coupling in chiral molecule-incorporated two-dimensional organic-inorganic hybrid perovskite copper halides with ferromagnetic exchange interactions, Physical Review materials **8**, 024409 (2024).
8. Chisa Itoh, Haruka Yoshino, Taku Kitayama, Wataru Kosaka, and Hitoshi Miyasaka, Post-synthetic molecular modifications based on Schiff base condensations for designing functional paddlewheel diruthenium (II, II) complexes, Dalton Transactions **53**, 444–448 (2024).
9. Takara Shinohara, Kazuaki Kisu, Shohichi Furukawa, Kenji Zushida, Shin-ichi Orimo, Tailoring Ca2+/Li+ dual-cation gel polymer electrolytes via cross-linking for reductive and oxidative stability in Ca-metal batteries, ACS Applied Energy Materials **8**, 3519-3527 (2025).
10. Vatra Reksa Ananda, Farah Nur Ramadhan, Azizah Mirza Kautsari, Tahta Amrillah, Angga Hermawan, Yoki Yulizar, Jarnuzi Gunlazuardi, Tohru Sekino, Shin-ichi Orimo, Shu Yin, Powder engineering of MXene-based heterojunction materials for photocatalysis and gas sensor applications, Advanced Powder Technology **36**, 104789 (1-10) (2025).
11. Reona Iimura, Shiori Kawasaki, Takashi Yabu, Shinnosuke Tachibana, Kazuya Yamaguchi, Toshihiko Mandai, Kazuaki Kisu,Naoto Kitamura, Zhirong Zhao-Karger, Shin-ichi Orimo, Yasushi Idemoto,

Masaki Matsui, Maximilian Fichtner,Itaru Honma, Tetsu Ichitsubo, Hiroaki Kobayashi, Ultrasmall α-MnO2 with Low Aspect Ratio: Applications to Electrochemical Multivalent-Ion Intercalation Hosts and Aerobic Oxidation Catalysts, SMALL **21**, 2411493 (1-10) (2025).

12. Toyoto Sato, Hiroyuki Saitoh, Reina Utsumi, Jyunya Ito, Kazuki Obana, Yuki Nakahira, Denis Sheptyakov, Takashi Honda, Hajime Sagayama, Shigeyuki Takagi, Tatsuoki Kono, Heena Yang, Wen Luo, Loris Lombardo, Andreas Züttel, Shin-ichi Orimo, Synthesis, Crystal Structure, and Hydrogen Storage Properties of an AB3-Based Alloy Synthesized by Disproportionation Reactions of AB2-Based Alloys, The Journal of Physical Chemistry C **129**, 2865-2873 (2025).
13. Eric Jianfeng Cheng, Huanan Duan, Michael J. Wang, Eric Kazyak, Hirokazu Munakata, Regina Garcia-Mendez, Bo Gao, Hanyu Huo, Tao Zhang, Fei Chen, Ryoji Inada, Kohei Miyazaki, Saneyuki Ohno, Hidemi Kato, Shin-ichi Orimo, Venkataraman Thangadurai, Takeshi Abe, Kiyoshi Kanamura, Li-Stuffed Garnet Solid Electrolytes: Current Status, Challenges, and Perspectives for Practical, Energy Storage Materials **75**, 103970 (1-40) (2025).
14. Satoshi Nakano, Hiroshi Fujihisa, Hiroshi Yamawaki, Yuki Shibazaki, Takumi Kikegawa, S hin-ichi Orimo, Pressure-Induced Dehydration and Reversible Recrystallization of Dihydrogen-Bonded Sodium Borohydride Dihydrate NaBH4·2H2O, Inorganic Chemistry **64**, 1302-1312 (2025).
15. Kazuaki Kisu, Arunkumar Dorai, Kan Hatakeyama-Sato, Tomoya Takano, Shigeyuki Takagi, Kenichi Oyaizu, Shin-ichi Orimo, Aqueous synthesis of lithium superionic-conducting complex hydride solid electrolytes, Journal of Materials Chemistry A, **17**, 1322-1331 (2025).
16. Hyerim Kim, Taehyun Kim, Seunghee Joo, J eonghyun Kim, Jaehyun Noh, Jiyoung Ma, Jung–Je Woo, Seungho Choi, KyungSu Kim, Woosuk Cho, Kazuaki Kisu, Shin–ichi Orimo, Sangryun Kim, Aqueous synthesis of lithium superionic-conducting complex hydride solid electrolytes, Journal of Materials Chemistry A **12**, 32132-32139 (2024).
17. Takara Shinohara, Kazuaki Kisu, Shigeyuki Takagi, Shin-ichi Orimo, Investigating the ion conductivity and synthesis conditions of calcium monocarborane solid-state electrolytes, Energy Advances **3**, 2758-2763 (2024).
18. Takara Shinohara, Kazuaki Kisu, Arunkumar Dorai, Kenji Zushida, Hiroshi Yabu, Shigeyuki Takagi, Shin-Ichi Orimo, Complex Hydride-Based Gel Polymer Electrolytes for Rechargeable Ca-Metal Batteries, Advanced Science (Weinheim, Baden-Wurttemberg, Germany) **11**, 2308318 (1-10) (2024).
19. Eric Jianfeng Cheng, Tao Yang, Yuanzhuo Liu, Linjiang Chai, Regina Garcia-Mendez, Eric Kazyak, Zhenyu Fu, Guoqiang Luo, Fei Chen, Ryoji Inada, Vlad Badilita, Huanan Duan, Ziyun Wang, Jiaqian Qin, Hao Li, Shin-ichi Orimo, Hidemi Kato, Correlation between mechanical properties and ionic conductivity of polycrystalline sodium superionic conductors: A relative density-dominant relationship, Materials Today Energy **44**, 101644 (1-12) (2024).
20. Fang-Ling Yang, Ryuhei Sato, Eric Jian-Feng Cheng, Kazuaki Kisu, Qian Wang, Xue Jia, Shin-ichi Orimo, Hao Li, Data-Driven Viewpoint for Developing Next-Generation Mg-Ion Solid-State Electrolytes, Journal of Electrochemistry **30**, 2415001 (1-12) (2024).
21. Kartik Sau, Shigeyuki Takagi, Tamio Ikeshoji, Kazuaki Kisu, Ryuhei Sato, Egon Campos dos Santos,

Hao Li, Rana Mohtadi, Shin-ichi Orimo, Unlocking the secrets of ideal fast ion conductors for all-solid-state batteries, Communications Materials **5**, 122 (1-27) (2024).

22. Ming Zeng, Carlos Escorihuela-Sayalero, Tamio Ikeshoji, Shigeyuki Takagi, Sangryun Kim, Shin-ichi Orimo, María Barrio, Josep-Lluís Tamarit, Pol Lloveras, Claudio Cazorla, Kartik Sau, Colossal Reversible Barocaloric Effects in a Plastic Crystal Mediated by Lattice Vibrations and Ion Diffusion, Advanced Science **11**, 2306488 (1-13) (2024).
23. Arunkumar Dorai, Sangryun Kim, Naoaki Kuwata, Junichi Kawamura, Kazuaki Kisu, Shin-ichi Orimo, Understanding Ion Dynamics in Closoborate-Type Lithium-Ion Conductors on Different Time-Scales, The Journal of Physical Chemistry Letters **15**, 4864-4871 (2024).
24. Fangling Yang , Egon Campos dos Santos, Xue Jia, Ryuhei Sato, Kazuaki Kisu, Yusuke Hashimoto, Shin-ichi Orimo, Hao Li, A dynamic database of solid-state electrolyte (DDSE) picturing all-solid-state batteries, Nano Materials Science **6**, 256-262 (2024).
25. Yume Okazaki, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Insights Into Low-Temperature Cation Ordering in Fe-Added Ce–Zr-Based Oxides, Small **21**, 2412830 (2025).
26. Akihiro Ishii, Ruon Katsuragi, Satoru Tanaka, Itaru Oikawa, Masaaki Imura, Hitoshi Takamura, Highly Refractive Transparent Half-Heuslers for Near Infrared Optics and Their Material Design, Advanced Optical Materials **12**, 2402295 (2024).
27. Shinnosuke Kamohara, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Dissociative Oxygen Adsorption and Incorporation in Co3O4-Dispersed BaZr0.9Sc0.1O2.95 for PCFC Cathode, ACS Applied Materials and Interfaces **16**, 52339-52348 (2024).
28. Kyoka Maruta, Sho Toyama, Misako Miwa, Hitoshi Takamura, Akihiro Ishii, Wataru Kada, Yohei Kikuchi, Shigeo Matsuyama, Development of a multimodal ion-beam-analysis system for the 1-MV tandem Pelletron accelerator installed at Tohoku University, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **554**, 165414 (2024).
29. Hongyi Li, Shohei Nishimura, Weiqi Liu, Norihiko L. Okamoto, Shingo Matsumoto, Yuki Nakata, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Takitaro Yamaguchi, Tetsu Ichitsubo, Enhancing the durability of aluminium-foil anodes in rechargeable lithium batteries via uniformly distributed alloy addition in the matrix phase, Journal of Materials Chemistry A **13**, 5723-5731 (2025).
30. Hongyi Li, Daichi Shimizu, Rongkang Jin, Tongqing Zhang, Daisuke Horikawa ,Katsuhiko Nagaya, Hiroshi Tsubouchi , Hiroyuki Yamaguchi, Motoyoshi Okumura, Tetsu Ichitsubo, Journal of Materials Chemistry A **13**, 3619-3633 (2024).

【主な国際・国内会議】

1. Hitoshi Miyasaka, Chemo-Switchable MOF Magnets, The 9$^{th}$ Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC9) 2024/02/19-22
2. Hitoshi Miyasaka, Charge and Spin Manipulations in MOF Magnets, 東北大学化学系サマースクール 2024/07/19-20
3. Hitoshi Miyasaka, Design of Metal-Covalent Organic Frameworks Using Paddlewheel Dimetal

Complexes Toward Functional Soft Materials, Pre-ACMM Conference, Asian Conference on Spin Transition (ACST) 2024/08/31

4. Hitoshi Miyasaka, Spin hybridized layered MOF magnets, 3rd Asian Conference on Molecular Magnetism (ACMM3) 2024/09/01-04
5. Hitoshi Miyasaka, Chemo-Switchable MOF Magnets: Charge Control in Frameworks, International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM2024) 2024/9/22-27
6. Hitoshi Miyasaka, Magnetic Sponges for Switching, Modern Trends in Molecular Magnetism (MTMM) and Spins in Molecular Systems (SiMS) 2024/11/05-08
7. Hitoshi Miyasaka, Chemo-Switchable MOF Magnets, Sumit of Materials Science 2024 (SMS2024) and GIMRT User Meeting 2024 2024/11/26-29
8. Hitoshi Miyasaka, Charge and Spin Manupulations in Layered MOFs, China-Japan RIGAKU Conference, 2025/1/11-12
9. Hitoshi Miyasaka, Charge and Spin Manipulations for Control of Magnetic Phase in Layered MOFs, Lecture in Huazhong University of Science and Technology 2025/01/13
10. 宮坂等,分子スポンジ物性制御　—化学—物理情報変換を指向した分子設計—, 島根大学講演会 2024/10/29
11. 折茂慎一, GX に貢献する水素科学技術 ーハイドロジェノミクスの視点からー, JST 未来社会創造事業第 97 回水素液化 PJ コロキウム＆第 104 回 GREEN セミナー, 2024/04/15
12. 折茂慎一, GX に貢献する水素科学技術 ーハイドロジェノミクスから革新水素貯蔵へー, GX 実現に向けた異分野連携シンポジウム, 2024/04/17
13. S. Orimo, Complex ｈydride-based ｍulti-valent ionic conductors -Advanced battery application and database construction, 18th International Symosium on Metal-Hydrogen Systems (MH2024), 2024/05/27
14. S. Orimo, Complex hydrides for multi-valent ionic conductors and advanced batteries, FY2024 4th I²CNER Seminar, 2024/09/11
15. S. Orimo, Advanced hydrides for battery and hydrogen storage application, The Japan Australia China Korea Singapore (JACKS) 2024 hydrogen forum JACKS 2024, 2024/09/24
16. 折茂慎一, 水素科学の新展開, 第 29 回 CROSSroads Workshop 「固体化学と固体物理の先端的量子ビーム利用研究」2024/10/01
17. 折茂慎一, GX 推進のための水素科学技術, 第 48 回電解技術討論会－ソーダ工業技術討論会－2024/12/11
18. 岡崎 由芽,石井 暁大,及川 格,高村 仁, Ce-Zr 系酸化物の陽イオン規則化に及ぼす第三元素添加の影響, 電気化学会第 92 大会, 2025/03/18
19. 八重樫,石井 暁大,及川 格,高村 仁, アクセプター置換による Ba-Zr 系酸水素化物の $H^-$量制御, 電気化学会第 92 大会, 2025/03/18
20. 佐藤 諒芽,石井 暁大,及川 格,高村 仁, 17O MAS NMR による Ba-Zr 系酸化物中のプロトンダイナミクス解析, 電気化学会第 92 大会, 2025/03/18
21. 石井 暁大,葛城 瑠音,及川 格,高村 仁, 近赤外域で透明な高屈折率ハーフホイスラ—化合物の探索と理解, 第 63 回セラミックス基礎科学討論会, 2025/01/08
22. 岡崎 由芽,石井 暁大,及川 格,高村 仁, Fe 添加 Ce-Zr 系酸化物における低温陽イオン規則化機構の解明, 第 55 回セミコンファレンス・第 37 回東北若手の会, 2024/12/16

23. 上山 歩己,石井 暁大,及川 格,高村 仁, LiBH4 系固体電解質と LiFePO4 正極を用いた全固体電池の作製, 第 55 回セミコンファレンス・ 第 37 回東北若手の会, 2024/12/15
24. 川添 誉司,石井 暁大,及川 格,高村 仁, Li3BN2 の Li+脱挿入容量急減メカニズムの分析, 第 55 回セミコンファレンス・ 第 37 回東北若手の会, 2024/12/15
25. 宇那木 優斗,川森 弘晶,小林 昌平,長田 憲和,石井 暁大,及川 格,高村 仁, Spectroscopic analysis of Cu2+ dissolved in BCZYYb and its impact on sinterability and proton conduction., 第 55 回セミコンファレンス・ 第 37 回東北若手の会, 2024/12/15
26. 石井 暁大,川添 誉司,寺川 佳輝,吉迫 大輝,及川 格,高村 仁, 窒化物系正極活物質 Li3BN2 の充放電容量減少メカニズム, 第 50 回 固体イオニクス討論会, 2024/12/09
27. Hitoshi Takamura, Atomistic insight into low-temperature cation ordering of Fe-added ceria-zirconia-based oxides, Mixed Conducting and Nonstoichiometric Compounds VIII, 2024/11/04
28. Yuto Unaki, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Spectroscopic analysis of Cu2+ dissolved in BCZYYb and its impact on sinterability and proton conduction, Mixed Conducting and Nonstoichiometric Compounds VII, 2024/11/03
29. Ryoga Sato, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Spectroscopic Observation of Proton and Hole in Ba-Zr-based Proton Conductors, Mixed Conducting and Nonstoichiometric Compounds VIII, 2024/11/03
30. Toshihiro Nishimura, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Experimental Verification of the Impact of Bottleneck Size on Li+ Conductivity, 23rd Korea-Japan Students' Symposium, 2024/11/01
31. Ryoga Sato, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, Protons and electron-holes in Ba-Zr-based proton conductors observed by NMR spectroscopy, 23rd Korea-Japan Students' Symposium, 2024/11/01
32. DAI YAN, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, Hitoshi Takamura, High-pressure synthesis and ion conduction of cubic borohydrides, 23rd Korea-Japan Students' Symposium, 2024/11/01
33. T. Nishimura, A. Ishii, I. Oikawa, H. Takamura, Synthesis of LiAlO2 Polymorphs Under High Pressure and Their Lithium-Ion Conductivity, Pacific Rim Meeting 2024, 2024/10/11
34. A. Ishii, H. Matsumoto, H. Kato, I. Oikawa, H. Takamura, Development of Proton Conductors with Skelton of Lithium-Ion Conducting Oxides, Pacific Rim Meeting 2024, 2024/10/09
35. I. Oikawa, Y. Sugawara, A. Ishii, H. Takamura, In Situ NMR Study on Hydrogen Incorporation in Electrochromic Oxides WO3 and TiO2, Pacific Rim Meeting 2024, 2024/10/09
36. S. Kamohara, A. Ishii, I. Oikawa, H. Takamura, Dissociative Oxygen Adsorption and Incorporation in Co3 O4 -Dispersed BaZr0.9 Sc0.1 O2.95 for a PCFC Cathode, Pacific Rim Meeting 2024, 2024/10/07
37. Y. Okazaki, A. Ishii, I. Oikawa, H. Takamura, Low-Temperature Cation Ordering in Ce0.5-X Zr0.5+XO2 Under Precisely Controlled P(O2), Pacific Rim Meeting 2024, 2024/10/06
38. 川添誉嗣,石井暁大,及川格,高村仁, π 共役系 Li3BN2 における電気化学的リチウムう脱挿入反応, 日本金属学会 2024 年秋季第 175 回講演大会, 2024/09/20
39. 三浦時瑛,石井暁大,及川格,高村仁, アクセプター添加ニオブ酸カリウム系強誘電体のイオン伝導性, 日本金属学会 2024 年秋季第 175 回講演大会, 2024/09/20
40. 中易奨貴,石井暁大,松本弘,加藤尚,及川格,高村仁, プロトン含有リン酸バリウムの高圧合成とプロトン伝導性, 日本金属学会 2024 年秋季第 175 回講演大会, 2024/09/20
41. 石井暁大,及川格,高村仁, 光反射・吸収スペクトルの自在制御に向けた光学薄膜材料の開発, 日本金属学会 2024 年秋季第 175 回講演大会, 2024/09/19

42. 上山歩巳,高村仁,及川格,石井暁大, Preparation of LiBH4-based all-solid-state batteries with LiFePO4 cathode, 令和 6 年度 化学系学協会東北大会, 2024/09/14
43. 石井暁大,松本弘,加藤尚,及川格,高村仁, リチウムイオン伝導性酸化物の結晶骨格を活用したプロトン伝導体の開発, 第 18 回 固体イオニクスセミナー, 2024/09/02
44. 川森弘晶,小林昌平,長田憲和,宇那木優斗,石井暁大,及川格,高村仁, PCEC 向け易焼結性電解質材料の開発 ー焼結助剤 Cu の検討ー, 第 18 回 固体イオニクスセミナー, 2024/09/02
45. 山口実奈,倉田真樹,守田結貴,石井暁大,高村仁,Riyan Achmad Budiman,八代圭司,川田達也, CeO2 系材料における高温光起電力と酸化物イオン伝導性の関係, 第 18 回 固体イオニクスセミナー, 2024/09/02
46. Ryoga Sato, Itaru Oikawa, Akihiro Ishii, Hitoshi Takamura, Electron-hole incorporation into Ba-Zr-based proton conductors by high-pressure oxidation, 24th International Conference On Solid State Ionics, 2024/07/18
47. Hitoshi Takamura, Mei Asakura, Yuta Tsujino, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa Kohei Kato, Shota Takemura, Shingo Ide, Defect Chemistry and Transport Properties of Anion-Doped Ba-Zr-Based Proton Conductors, 24th International Conference On Solid State Ionics, 2024/07/15
48. Toyoto Sato, Lecture on hydrogen storage reactions, HyTack School-2, 2025/02/20
49. Toyoto Sato, Intermetallic compounds as hydrogen storage materials, HyTack School-2, 2025/02/18
50. Toyoto SATO, Hiroyuki SAITOH, Reina UTSUMI, Jyunya ITO, Kazuki OBANA, Yuki NAKAHIR A,Denis SHEPTYAKOV, Takashi Honda, Hajime SAGAYAMA, Shigeyuki TAKAGI, Tatsuoki KONO, Henna YANG, Wen LUO, Loris LOMBARDO, Andreas ZÜTTEL, Shin-ichi ORIMO, Hydrogen absorption reactions and crystal structures on (Y, Mg)Co3, Summit of Materials Science 2024 and GIMRT User Meeting 2024, 2024/11/27
51. Toyoto SATO, Hiroyuki SAITOH, Reina UTSUMI, Jyunya ITO, Kazuki OBANA, Yuki NAKAHIR A,Denis SHEPTYAKOV, Takashi Honda, Hajime SAGAYAMA, Shigeyuki TAKAGI, Tatsuoki KONO, Henna YANG, Wen LUO, Loris LOMBARDO, Andreas ZÜTTEL, Shin-ichi ORIMO, A new AB3-based alloy with reversible hydrogen absorption/desorption reactions and less degradation, E-IMR International Workshop 2024, 2024/11/26
52. Toyoto SATO, Hiroyuki SAITOH, Reina UTSUMI, Jyunya ITO, Kazuki OBANA, Yuki NAKAHIRA, Denis SHEPTYAKOV, Takashi Honda, Hajime SAGAYAMA, Shigeyuki TAKAGI, Tatsuoki KONO, Henna YANG, Wen LUO, Loris LOMB ARDO, Andreas ZÜTTEL ,Shin-ichi ORIMO, Hydrogen absorption reactions on an AB3-based intermetallic compound, (Y, Mg)Co3, The 23rd KIM-JIMM Symposium, 2024/10/29
53. Toyoto Sato, Hiroyuki Saito, Reina Utsumi, Jyunya Ito, Kazuki Obana, Yuki Nakahira, Denis Sheptyakov, Takashi Honda, Hajime Sagayama, Shigeyuki Takagi, Tatsuoki Kono, Henna Yang, Wen Luo, Loris Lombardo, Andreas Züttel, Shin-ichi Orimo, Hydrogen absorption reactions on AB3-based intermetallic compounds (Y, Mg)Co3 below 10 GPa, The 18th International Symposium on Metal-Hydrogen Systems, MH2024, 2024/05/28
54. Hongyi Li, Takitaro Yamaguchi, Shingo Matsumoto, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Tetsu Ichitsubo, Development of Aluminum-Foil Anodes for Rechargeable Lithium Batteries, PRiME 2024, 2024/10/08
55. Hongyi Li, Tetsu Ichitsubo, Multivalent Cation Additives for Building Dendrite-Free and Stable Electrode-Electrolyte Interface on Lithium-Metal Anodes, PRiME 2024, 2024/10/06

## 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）、髙橋幸生（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

### 1. 中性子散乱と電気抵抗測定による Cr-Co-Ni 合金の短距離秩序と金属的挙動の評価[1-6]

近年、中エントロピー合金 Cr-Co-Ni において、単純な熱処理によりの 0.2%耐力がって 2 割以上増加することが Nature 誌に報告され、当該分野における議論の的のひとつとなっている。特に、局所的な化学的秩序（いわゆる短距離秩序／短範囲規則）による材料の強度や伝導特性に及ぼす影響については、革新的な構造材料の設計の観点から注目を集めている。しかしながら、報告された材料特性や Cr-Co-Ni における短範囲規則の有無については、肯定・否定の両見解があり、現時点では結論が得られていない。そのような中、我々は Cr-Co-Ni および Mn-Co-Ni などの関連合金に対し、中性子全散乱と逆モンテカルロ法による構造モデリングを用いて、当該合金中の短範囲規則度の評価を試みている。一昨年度から昨年度にかけての解析では、Mn-Co-Ni において、最近接では Mn-Ni、次近接では Mn-Mn、Ni-Ni が偏る可能性を示した。一方、未焼鈍の Cr-Co-Ni においては、有意な短範囲規則の兆候は観測されなかった[1]。また、同時期に複数の研究グループが、Cr-Co-Ni 合金において焼鈍処理により電気抵抗率が増加することを報告し、焼鈍後に何らかの短範囲規則が発達する可能性を示唆している。2024 年度には、われわれの研究グループにおいても電気抵抗率の温度変化を測定し、焼鈍による規則化の検証を行った。さらに、中性子散乱実験により、新たな超格子反射の有無を調べ、焼鈍による規則化の兆候を探索した。

<u>《電気抵抗率の焼鈍効果》</u>　Cr-Co-Ni においては、他のグループの報告と同様に、焼鈍により抵抗率が増加することを確認した。加えて、抵抗率は温度の降下と共に温度に比例して減少し、焼鈍の有無にかかわらず、液体ヘリウム温度まで線形性を保つことがわかった。この結果は、本合金が異常金属的な振る舞いを示すことを意味している。また、焼鈍前後の抵抗率の温度依存性の差分を解析したところ、不純物近藤効果的な挙動が見られた。この挙動は、焼鈍により近藤一重項形成が促進されることを示唆しており、焼鈍後の抵抗率増加の一因と考えられる。これまで、高エントロピー合金はフェルミ面が化学的な不均一性により大きくぼやけているものの、通常の金属に分類されると考えられてきた。しかし今回の研究により、低温において異常金属状態が現れることが明らかとなった。このようなふるまいが短範囲規則度の変化によって理解できるのか、あるいは強相関系で知られている非フェルミ流体的なふるまいが弱相関系にも現れるのかについては、金属物理学の観点から重要な問いである。今後は、単結晶試料による短範囲規則の検証、および磁気抵抗測定による異常金属状態の理解をさらに進める予定である。

<u>《中性子散乱実験による研究》</u>　Mn-Co-Ni 合金に対して中性子散乱実験を行った結果、磁気的な規則化によるものと思われる新たな超格子反射が低温で観測された。この超格子反射が現れ温度は、焼鈍処理によりわずかに上昇したが、$L1_0$ 規則相の発達にみられるような明確な焼鈍効果とは異なり、その影響は小さいことが示された。この結果は、磁気転移温度が主に組成比により決まり、規則化度の影響は限定的であることを意味している。今回観測された磁気信号からは、磁性に寄与する Mn-Mn 対の短範囲規則度を、他の原子対と分けて推定できる可能性があり、同様のアプローチにより、未だ明確な知見のない Cr-Co-Ni における短範囲規則の検証にもつながると考えられる。これらの成果は、修士論文（趙宏飛　氏）の一部として取りまとめられた[2]。

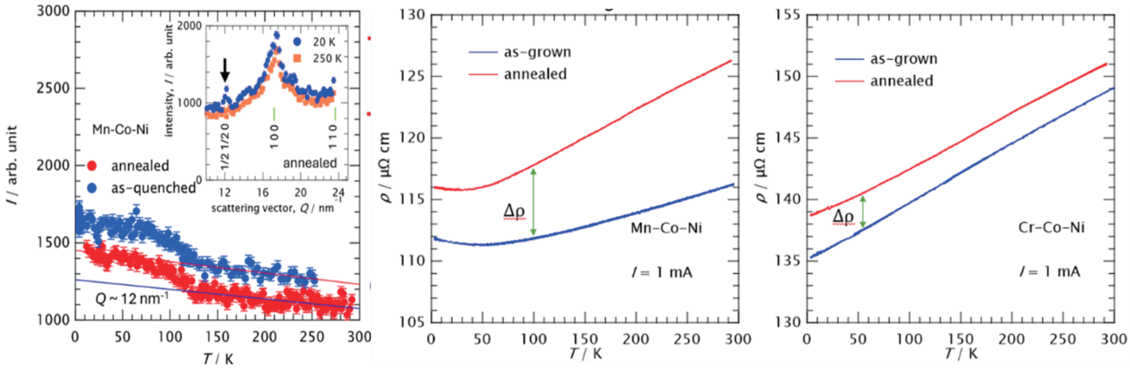



図 1　（左）中エントロピー合金 Mn-Co-Ni の規則反射（1/2, 1/2, 0）の強度の温度変化と焼鈍効果。反射強度の温度変化から、低温で磁気相関の発達が示唆される。磁気的な規則化開始温度は焼鈍による若干の増加が見られたものの、明確な効果が見られた $L1_0$ 規則相の発達とは異なる挙動であることが示された。（中）Mn-Co-Ni 合金と、（右）Cr-Co-Ni 合金の電気抵抗率の焼鈍効果。今回の測定により、これまで通常金属と考えられていた中エントロピー合金は、低温で異常金属状態になっていることが明らかにされた。（図は論文成果[1、2]より引用転載）

## 2.　２次元物質における点欠陥挙動の解析[7-11]

単層が原子 3 個分の厚さから成る TMDC は、優れた電気特性や光学特性を持つことから、次世代の電子デバイスへの応用が期待される材料である。特に $MoS_2$ は最も精力的に研究がなされている TMDC であり、ウェハースケールでの大面積化を実現していることから、従来のシリコン半導体の限界を超えた次世代デバイス材料として期待されている。電界効果トランジスタなどのデバイス製造において、元素を添加するドーピングによって伝導キャリアを導入し、電気特性を制御する必要があることから、$MoS_2$ への元素ドーピングに関する研究が盛んに行われている。しかし、実験で用いられる元素は、既にドーピング手法が確立されている Re やニオブ（Nb）など数種類に限られている。添加する元素の影響を系統的に調べることができれば、より電気特性の制御に適した元素の発見や、ドーピングによるキャリア導入のメカニズムの正しい理解につながり、結果としてデバイス応用におけるさらなる性能最適化が期待される。

本研究では、$MoS_2$ に導入した 27 種の元素ドーピングを対象に、密度汎関数理論に基づいた理論計算を行った。まず、各元素に対し、元素置換、表面吸着、格子間配置など様々な配置を網羅的に計算することで添加元素の安定位置を示し、添加元素ごとの安定な原子構造を明らかにした（図 2）。また、シリコンなどの 3 次元半導体では、伝導キャリアは空間的に広がった状態で安定となり、室温で容易に励起され伝導に寄与する。しかし $MoS_2$ 中では、添加元素の種類によらず、空間的に局在するポーラロン状態が安定となり、深い準位を形成することが予測された。この結果、室温では励起されないことから、実験で観測されている電気伝導は、キャリアが伝導体を移動する通常のバンド伝導とは異なり、添加元素間を飛躍しながら移動する不純物伝導であることが示唆された。これらの理論予測は、最近実験で観測されている Re を添加した際の原子構造および電子構造とも良い一致を示しており、予測の確からしさが実験からもサポートされている。

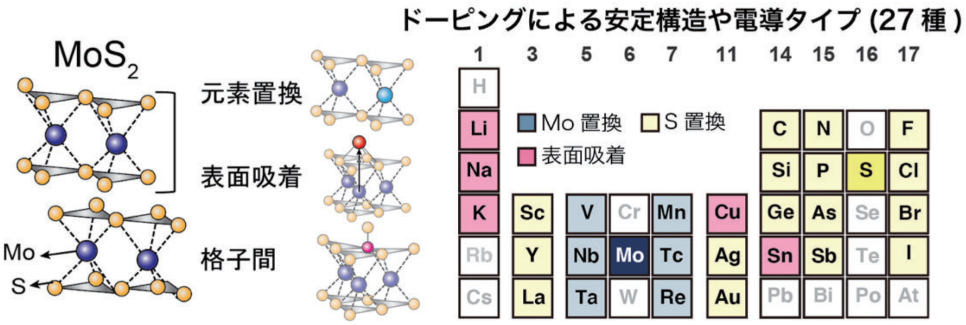



図 2. （左）は $MoS_2$ の原子構造と添加元素の安定位置。（右）の色を付けた内から Mo と S を除く 27 種の元素を、$MoS_2$ にドーピングした場合の安定位置を理論計算で求めた

## 3. NanoTerasu におけるテンダーX 線タイコグラフィ装置の開発とリチウム硫黄電池正極材料の観察[12-15]

2024 年 4 月より、東北大学青葉山新キャンパスに整備された 3 GeV 級高輝度放射光施設「NanoTerasu（ナノテラス）」の本格運用が開始された。NanoTerasu は、既存の大型放射光施設である SPring-8 と比べ、軟 X 線やテンダーX 線といった低エネルギーX 線領域において非常に高い輝度を実現しており、これにより放射光を用いた計測技術の一層の高性能化が期待されている。特に、空間分解能の向上や軽元素材料の高感度観察などにおいて、その有用性が注目されている。本研究では、NanoTerasu の X 線コヒーレントイメージングビームラインを活用し、テンダーX 線領域で高精度なタイコグラフィ計測が可能な新たな装置を開発した。タイコグラフィは、X 線の位相情報を再構成することで、非破壊かつ高空間分解能のイメージングを実現する技術であり、NanoTerasu の高輝度でコヒーレントな X 線特性を最大限に活かすよう設計されている。装置の性能評価としては、タンタル製の空間分解能テスト試料を用いた観察により、20 nm 未満の優れた分解能を達成した。さらに応用として、次世代蓄電池材料として期待されるリチウム硫黄電池の正極材料に対して、テンダーX 線タイコグラフィを適用し、軽元素を含む高分子粒子の内部微細構造を 50 nm 未満の分解能で非破壊的に観察することに成功した。

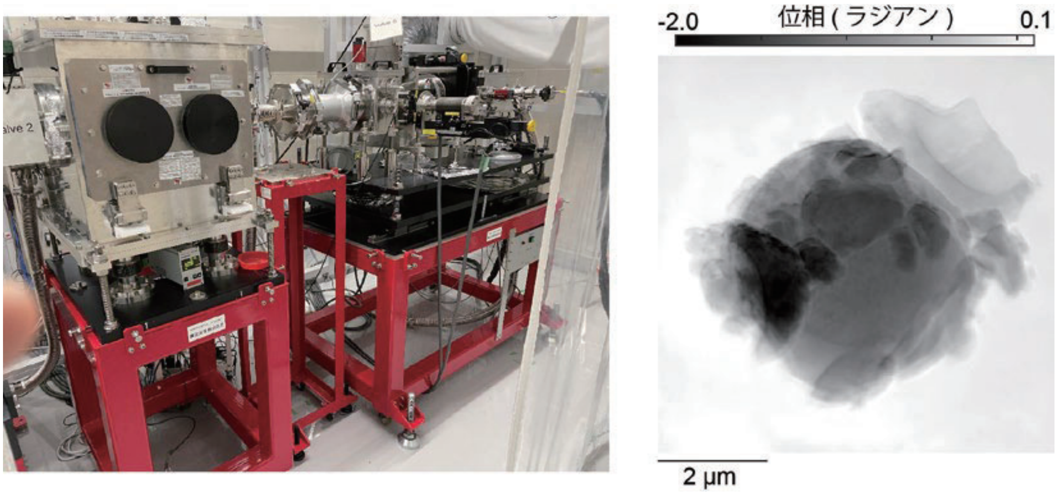



図 3. NanoTerasu に整備されたテンダーX 線タイコグラフィ装置の外観(左)。含硫黄高分子材料の再構成像(右)。

**4. 機能性ナノ材料の構造設計と特性評価[16-19]**

4-1. 遷移金属ダイカルコゲニド(TMD)のファンデルワールスギャップに金属原子を取り込むことは、その物性を調整するための有効な戦略として注目されている。本研究では、光電子分光と密度汎関数理論(DFT)計算を組み合わせて、$V_{1/3}NbS_2$、$Cr_{1/3}NbS_2$、および$Fe_{1/3}NbS_2$という3種類の層間化合物の電子構造を調査した。解析の結果、層間原子の軌道占有とイオン性の程度が、局在した層間原子状態と遍歴的なNb由来状態とのハイブリダイゼーションに強く影響することが明らかになった。これにより、化合物ごとに電子的性質に顕著な違いが生じており、$M_{1/3}NbS_2$ 化合物における層間元素の系統的なチューニングが、多様な電子特性を持つ磁性表面の設計に有効であることが、我々の実験および理論の統合的な研究により示された。これらの知見は、スピントロニクスをはじめとする応用に向けた機能性層状材料の新たな設計指針を提供するものである[16]。

4-2. 金属ガラス(ガラス形成合金とも呼ばれる)が高圧環境下でどのように応答するかを理解することは、その相安定性を探るだけでなく、構造や物性の制御手法を開発するうえでも極めて重要である。我々は、$Cu_{60}Zr_{40}$、$Ni_{60}Zr_{40}$、および$Zr_{55}Cu_{35}Al_{10}$を含む複数のガラス状合金系において、圧力誘起相分離を調査した[17]。詳細な解析の結果、原子サイズの差異や構成元素間のせん断弾性率の違いが、相分離を駆動する主要な要因であることが明らかとなりました。これらの知見は、金属ガラスが極限環境下でどのように振る舞うかに関する理解を大きく深化させるものである。

4-3. 中程度の温度および圧力条件下において、海水および純水中でのメタンハイドレート形成を促進する低濃度メタノールの役割を、古典分子動力学シミュレーションを用いて調査した。本研究では、準安定な水-メタン溶液におけるハイドレート形成初期段階における水素結合ネットワークの構造再編成に対するメタノールの影響に焦点を当てた[18]。特に海塩との共存下では、メタノールの存在により、一定時間内に形成されるハイドレート様キャビティの数が増加することが示され、これは先行研究の観察結果とも一致している。これらの結果は、過飽和気相中の均一系における最近の実験に見られるような、中程度条件下でのハイドレート核生成の微視的メカニズムに関する重要な知見を提供する。

4-4. リンは、その同素体が多様な構造を示すことでよく知られているが、化学的安定性と望ましい物性の両方を兼ね備えたものは限られている。本分野における主な課題のひとつは、赤リン系材料のバンドギャップを低減しつつ、安定性を維持または向上させることである。MFM-300(In)という多孔性フレームワーク内に白リン($P_4$)分子を封入し、光誘起重合を行う手法が検討した[19]。その結果、ホストフレームワークとリン分子間の相互作用、ならびにリン分子間の相互作用が、構造内における高分子状リン鎖の形成を促進することが確認された。理論計算の結果は UV-Vis 分光データとよく一致し、構造モデルの妥当性が裏付けられた。ホスト構造内に高分子状リン鎖を取り込むことで、バンドギャップが大幅に縮小されることが示された。この特性により、得られたホスト-ゲスト複合体は、ガスセンサーや光触媒による水浄化などの応用において、有望な候補材料となることが示された。

**5. アモルファス酸化物正極材料による室温動作マグネシウム電池の実現**

次々世代蓄電池として期待されるマグネシウム蓄電池(Rechargeable Magnesium Battery: RMB)に関して、新規正極材料の開拓ならびに、その反応機構の解明を実施した。特に注目をしたのは、アモルファス構造の酸化物電極材料である。この材料は昨年度に報告し、60 ℃というRMBとしては比較的低温での動作が実現している。今年度は本材料の合成過程を改良し微細粒を得るとともに、Mg金属負極の利用可能な電解液と組み合わせることで、室温動作可能な全電池の作成に取り組んだ。

本研究では $Li_2MoO_3$-$Li_2TiO_3$ 擬二元系材料(LTMO)を基礎とした系で検証を実施した。$Li_2MO_3$ ($M$ = Mo、 Ti)はもともと、リチウムイオン電池正極材料の中でLi過剰系酸化物と

して知られる層状岩塩型構造を有する材料である。本研究ではこの材料をテンプレートに用いて、イオン交換法により Li を Mg に置き換えることで RMB 正極材料としての利用を検証した。構造解析の結果、LTMO の大部分を Mg に置き換えた Mg-Li-Ti-Mo-O (MLTMO) では、合成過程におけるボールミルによる粉砕の段階で微量な岩塩相を残しつつ大部分がアモルファス化することが明らかとなった。その後、Mg イオンの挿入・脱離に対してアモルファス構造は維持されており、X 線吸収分光測定や X 線回折測定などから、形成したアモルファス相に対して可逆的に Mg が挿入・脱離していることが確認された。

また、本材料を正極に用い、負極を金属マグネシウムとした全電池においては、室温において 200 サイクル以上の可逆的な充放電が実現した。この結果は高電位実現が期待される酸化物系正極材料で全電池を用いて、室温で長期的に動作を実現した世界初の例とも言え、本研究結果を基に更に RMB の高性能化が加速するものと期待される。

【今後の計画】

高エントロピー合金 Cr-Co-Ni の短範囲規則については、理論的な提案がある一方で、実験的な理解は依然として不十分である。今後は、構造モデリングの高度化などを通じて、規則度の定量評価を目指す。また、単結晶試料を用いた短範囲規則の直接検証を引き続き進めるとともに、理論的に提案されている $L1_0/L1_2$ 構造の実在性について検証する。さらに、電気抵抗において観測された異常金属的ふるまいの起源を明らかにするため、他の輸送特性や熱力学量の測定にも取り組む予定である。

テンダーX 線タイコグラフィについて、今後は、装置のさらなる高度化と解析アルゴリズムの改良に取り組み、10 nm 未満という超高分解能の実現を目指す。また、それに伴い、リチウム硫黄電池の作動中における内部構造のリアルタイム解析や、材料の微細な劣化機構の解明といった応用展開を進める計画である。これらの取り組みにより、エネルギー関連材料の性能向上に貢献することが期待される。

次々世代蓄電池については、本年度の研究において，室温動作する全電池の RMB 作成の見通しがたった．今後は，もととなる物質が含有するアルカリ陽イオンを Li からより安価な Na や K に置き換えることや，電荷補償を担う元素を，Mo から他の遷移金属に置換していく材料設計が考えられる．また，アモルファス中での Mg 拡散機構は未だ十分に解明されておらず，実験・計算の両面から詳細な検討が必要である．

■ 本ユニットで今後行う、その他の研究課題を箇条書きで示す。

- 点欠陥形成エネルギーを高精度に予測するための機械学習手法の開発を進める。
- ベイズ最適化の手法を改良することで、新物質を効率的に探索する手法の開発を進める。
- 酸化物へのホールドーピングに関する一般的な傾向を解明する。
- 酸化テルリウムアモルファスにおける、ホールドーピングの起源と最適な組成を解明する。
- 高誘電体を効率的に探索するための機械学習手法を構築する。
- タイコグラフィ装置のさらなる高度化と解析アルゴリズムの改良に取り組み、10 nm 未満という超高分解能の実現を目指す。
- リチウム硫黄電池の作動中における内部構造のリアルタイム解析や、材料の微細な劣化機構の解明といった応用展開を進める。
- 実験グループと連携して、密度汎関数理論を用いて 6〜8 層の遷移金属ダイカルコゲナイド（TMD）ヘテロ構造を研究します。
- 外部磁場下における一次元ヘリマグネットの電子構造を研究し、その非相反輸送への影響を調査します。
- 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。

- 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。

【論文リスト】


1. Search for Significant Short-Range Ordering in Medium-Entropy Alloys Tr-Co-Ni (Tr = Cr, Mn, and Fe, Saiki Futami, Yoichi Ikeda, Hong-Fei Zhao, Yoshihiko Umemoto, Takashi Honda, and Masaki Fujita, Mater. Trans., **65**, 995-1000 (2024).
2. Study of Short-Range Ordering in Medium-Entropy Alloys through Neutron Scattering, Thermal and Transport Measurements, 趙　宏飛，修士論文，東北大学（2025 年 3 月）.
3. Investigation of Superconducting Gap of High-Entropy Telluride $AgInSnPbBiTe_5$, Asato Seshita, Hirotaka Okabe, Md. Riad Kasem, Yuto Watanabe, Jumpei G. Nakamura, Shoichiro Nishimura, Kensei Terashima, Ryo Matsumoto, Yoshihiko Takano, Aichi Yamashita, Masaki Fujita, and Yoshikazu Mizuguchi, High Entropy Alloys and Materials **3**, 135–140 (2025).
4. Neutron Powder Diffractometer HERMES - After the Decade-Long Shutdown, Yusuke Nambu, Yoichi Ikeda, Takanori Taniguchi, Manabu Ohkawara, Maxim Avdeev, and Masaki Fujita, J. Phys. Soc. Jpn., 93 091005(1-7) (2024).
5. Materials Science and Condensed Matter Physics on PATH Triple-Axis Spectrometers AKANE and TOPAN, Yoichi Ikeda, Takanori Taniguchi, Shusuke Takada, Yusuke Nambu, Manabu Ohkawara, and Masaki Fujita, J. Phys. Soc. Jpn., 93 091003(1-8) (2024).
6. 単結晶材料の育成技術と応用研究の進歩 量子ビーム実験における"結晶"の役割-中性子非弾性散乱実験によるスピン・ダイナミクスの研究を例に-, 藤田全基, 池田陽一, セラミックス 60, 24-27 (2025).
7. R. C-Amaral, S. Bae, V. T. N. Huyen, Y. Kumagai, Exploring Intrinsic and Extrinsic *p*-Type Dopability of Atomically Thin β-$TeO_2$ from First Principles, ACS Appl. Mater. Interfaces, **17** 1605–1614 (2025).
8. S. Kiyohara*, T. Tsuru, Y. Kumagai, First-principles calculations on dislocations in MgO, STAM, **25** 2393567 (2024).
9. S. Bae, I. Miyamoto, S. Kiyohara, Y. Kumagai*, Universal Polaronic Behavior in Elemental Doping of $MoS_2$ from First-Principles, ACS Nano, **18** 33988–33997 (2024).
10. V. T. N. Huyen, S. Bae, R. C-Amaral, Y. Kumagai, Native Defects and p-Type Dopability in Transparent β-$TeO_2$: A First-Principles Study, Phys. Rev. Appl., **22** 044065 (2024).
11. K. Matsuzaki, C.-W. Chang, T. Nagafuji, N. Tsunoda, Y. Kumagai, K. Nomura, F. Oba, H. Hosono, Size-Dependent Isovalent Impurity Doping for Ambipolar Control in $Cu_3N$, J. Am. Chem. Soc., **146** 24630–24637 (2024).
12. N. Ishiguro, F. Kaneko, M. Abe, Y. Takayama, J. Yoshida, T. Hoshino, S. Takazawa, H. Uematsu, Y. Sasaki, N. Okawa, K. Takahashi, H. Takizawa, H. Kishimoto, Y. Takahashi, Towards Sub-10 nm Spatial Resolution by Tender X-ray Ptychographic Coherent Diffraction Imaging, *Applied Physics Express*, **17**, 052006 (2024).
13. M. Abe, S. Takazawa, H. Uematsu, Y. Sasaki, N. Okawa, N. Ishiguro, Y. Takahashi, Guided image-filtering-assisted phase retrieval for amplitude reconstruction in single-frame coherent diffraction imaging, *Optica*, **11**, 2334-2536 (2024).
14. S. Takazawa, Y. Sasaki, M. Abe, H. Uematsu, N. Okawa, N. Ishiguro, Y. Takahashi, In situ heating coherent X-ray diffraction imaging for visualizing nanometer-scale structural changes in metallic materials, *Materialia*, **39**, 102311 (2025).
15. T.-S. Vu, M.-Q. Ha, A. Mukharil Bachtiar, D.-A. Dao, T. Tran, H. Kino, S. Takazawa, N. Ishiguro, Y. Sasaki, M. Abe, H. Uematsu, N. Okawa, K. Ozaki, K. Kobayashi, Y. Honjo, H. Nishino, Y. Joti, T. Hatsui, Y. Takahashi, H.-C Dam, PID3Net: A Deep Learning Approach for Single-Shot Coherent X-ray Diffraction Imaging of Dynamic Phenomena, *npj Computational Materials*, **11**, 66 (2025).

16. Chemical trends of the bulk and surface termination-dependent electronic structure of metal-intercalated transition metal dichalcogenides. B. Edwards, D.-A. Deaconu, P. AE Murgatroyd, S. Buchberger, T. Antonelli, D. Halliday, G.-R. Siemann, A. Zivanovic, L. Trzaska, A. Rajan, E. A. Morales, D. A. Mayoh, A. E. Hall, R. V. Belosludov, M. D. Watson, T. K. Kim, D. Biswas, T.-L. Lee, C. M. Polley, D. Carbone, M. Leandersson, G. Balakrishnan, M. S. Bahramy, P. DC King, Chemistry of Materials **36**, 7117-7126 (2024).
17. Room-temperature Pressure-induced Phase Separation in Glassy Alloys. D. V. Louzguine-Luzgin, R. V. Belosludov, M. I. Ojovan, Materials Today Communications **40**,109453 (1-5) (2024).
18. A Molecular Dynamics Study of the Influence of Low-Dosage Methanol on Hydrate Formation in Seawater and Pure Water Metastable Solutions of Methane.　R. V. Belosludov, K. V. Gets, R. K. Zhdanov, Y. Y. Bozhko, V. R. Belosludov, Journal of Marine Science and Engineering **12**, 1626 (1-9) (2024).
19. Direct synthesis of a semiconductive double-helical phosphorus allotrope in a metal-organic framework. S. A. Sapchenko, R. V. Belosludov, I. J. Vitoria-Irezabal, I. da Silva, X. Chen, G. FS Whitehead, J. Maddock, L. S. Natrajan, M. Kippax-Jones, D. De A. Jayasinghe, C. Bawn, D. M. Polyukhov, Y. Chen, V. P. Fedin, S. Yang, M. Schröder, Nature Communications **16**, 1578 (1-9) (2025).

【会議での主な発表】

1. (Oral, invited) Masaki Fujita, "Doping Evolution of High-Energy Spin Excitations in $Pr_{1.4-x}La_{0.6}Ce_xCuO_4$ ", International Conference on Superconductivity and Magnetism 2024, 27 April – 4 May, 2024, Fethiye, Turkey.
2. (Oral, invited) Masaki Fujita, "Effects of element substitution and annealing on the electronic state of electron-doped $Pr_{2-x-y}La_yCe_xCuO_4$ studied with XAFX measurements", SUPERSTRIPES 2024 Quantum in Complex Matter International Conference 2024, 26- 29 June 2024, Ischia, Italy.
3. (Oral) Masaki Fujita, “Neutron scattering study on spin excitations coupled with charge and lattice dynamics”, Summit of Materials Science (SMS2024), 27-28 November 2024, Sendai, Japan.
4. （口頭）二見采樹，池田陽一，趙宏飛，藤田全基，“逆モンテカルロ法による中エントロピー合金中の短距離秩序変数の評価”，日本金属学会　第 175 回講演大会　公募シンポジウム ハイエントロピー合金の材料科学 (XI)，S2-3，2024 年 9 月 18 日 -9 月 25 日，大阪大学.
5. Yoichi Ikeda, “Search for significant short-range ordering in medium-entropy alloys”, REIMEI International Workshop: Physics of Advanced Functional Materials, Advanced Science Research Center, Japan Atomic Energy Agency, Oct. 10 - Oct. 11, 2024, Tokai, Japan.
6. （招待）池田 陽一，“中性子散乱と EXAFS による中エントロピー合金中の短距離秩序の探索”，2024 年度磁性材料研究会，東北大学，2025 年 1 月 24 日.
7. (Oral, invited) Yu Kumagai, “High-accuracy calculation of point defects inside non-metallic materials and its applications”, European Conference on Applications of Polar Dielectrics, 16-19 June 2024, Trondheim, Norway.
8. (Oral, invited) Yu Kumagai, “High-throughput calculations on oxygen vacancies and their applications”, International Congress on Ceramics (ICC’10), 14-18 July 2024, Montreal, Canada.
9. (Oral, invited) Yu Kumagai, "Insights on Point Defect Energetics in Non-Metallic Solids under Periodic Boundary Conditions", 2024 Defects in Semiconductors Conference (Gordon Research Conference), 4 - 9 August, 2024, Newry, Maine, United States.
10. (Oral, invited) Yu Kumagai, "Accurate Calculations for Point Defects in Non-Metallic Materials and Their Applications", The 8th International Conference on Electronic Materials and Nanotechnology for Green Environment, 24-27 November 2024, Jeju, Korea.
11. (Oral) Yu Kumagai, "Defects in Semiconductors: A First-Principles Investigation”, Summit of Materials Science (SMS2024), 27-28 November 2024, Sendai, Japan.
12. （招待），高橋幸生“テンダーX 線タイコグラフィによる sub-10 nm 分解能イメージングを目指して”，Optics & Photonics，2024 年 11 月 29 日-12 月 1 日，電気通信大学

13. (Oral, invited) Yukio Takahashi, "Visualization of nanoscale structures and chemical states by coherent X-ray diffraction imaging", Tohoku University & National Taipei University of Technology 2024 Joint Symposium (7th TU-TaipeiTech JS), 26-27 November, 2024, Sendai, Japan.
14. (Oral, invited) Yukio Takahashi, "Visualization of nanoscale structures and chemical states by coherent X-ray diffraction imaging", NIMS Award Symposium 2024 "State-of-the-art Characterization to Accelerate Materials Innovation, 6-7 November, 2024, Tsukuba, Japan.
15. (Oral, invited) Y Yukio Takahashi, "X-ray Spectroscopic Ptychography: Current Status and Future Perspectives ", International Conference on X-ray Optics and Applications 2024 (XOPT'24), 23-25 April, 2024, Yokohama, Japan.
16. (Oral, invited) T. Kawaguchi, "Bragg Coherent Diffraction Imaging Studies of Composition Distribution and Strain in Catalytic Alloy Nanoparticles", 245th Electrochemical Society Meeting, 26 May, 2024, San Francisco, USA.
17. (Oral) T. Kawaguchi et al., "Defect Rocksalt Oxides as Cathodes for Rechargeable Magnesium Batteries", PRiME 2024, 6 October, 2024, Honolulu, USA.
18. (Oral, invited) T. Kawaguchi et al., "Coherent X-ray Studies of Electrode Nanoparticles and Surfaces, PRiME 2024, 6 October, 2024 Honolulu, USA.
19. (Oral, invited) T. Kawaguchi, "Bragg Coherent Diffraction Imaging of Compositional Distribution and Strain in Catalytic Alloy Nanoparticles", 2025 MRS Spring Meeting, 8 April, 2025, Seattle, USA.
20. (Oral) R. V. Belosludov, "Structure-property relationship of nanoporous materials: Theoretical aspects", The 10$^{th}$ International Symposium on Surface Science, ISSS-10, 20-24 October, 2024, Kita-kyushu, Japan.
21. (Poster) R. V. Belosludov, V. Nemykin, "Theoretical Study of Functionalized Carbon-Based Nanomaterials Including Defects and Dopants", MRS Fall Meeting 2024, 1-6 December, 2024. Boston, USA.

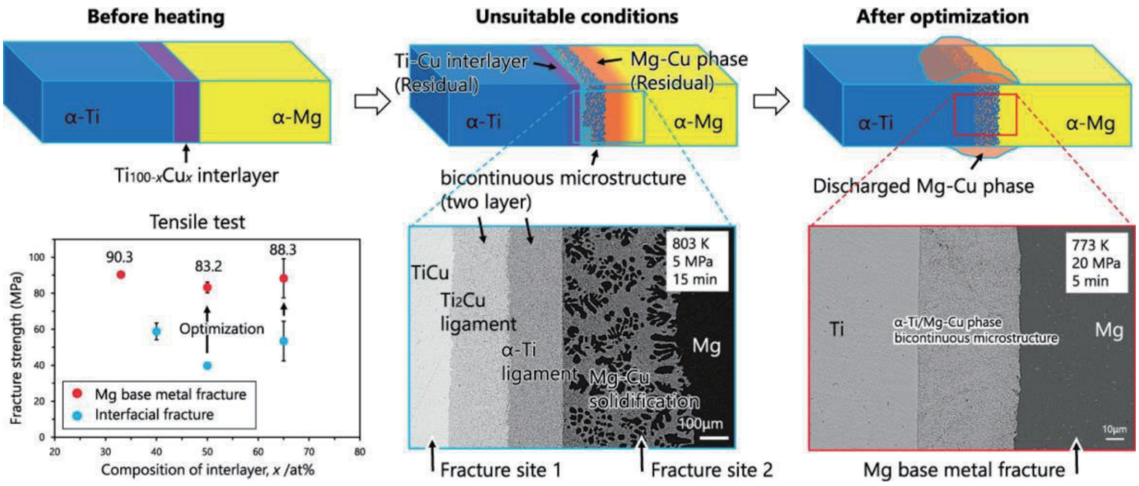
## 2-4.複合モジュール・社会実装研究ユニット

**構成員**

教　　授：加藤 秀実 (兼)、市坪　哲(センター長)
特任助教：宋 瑞瑞

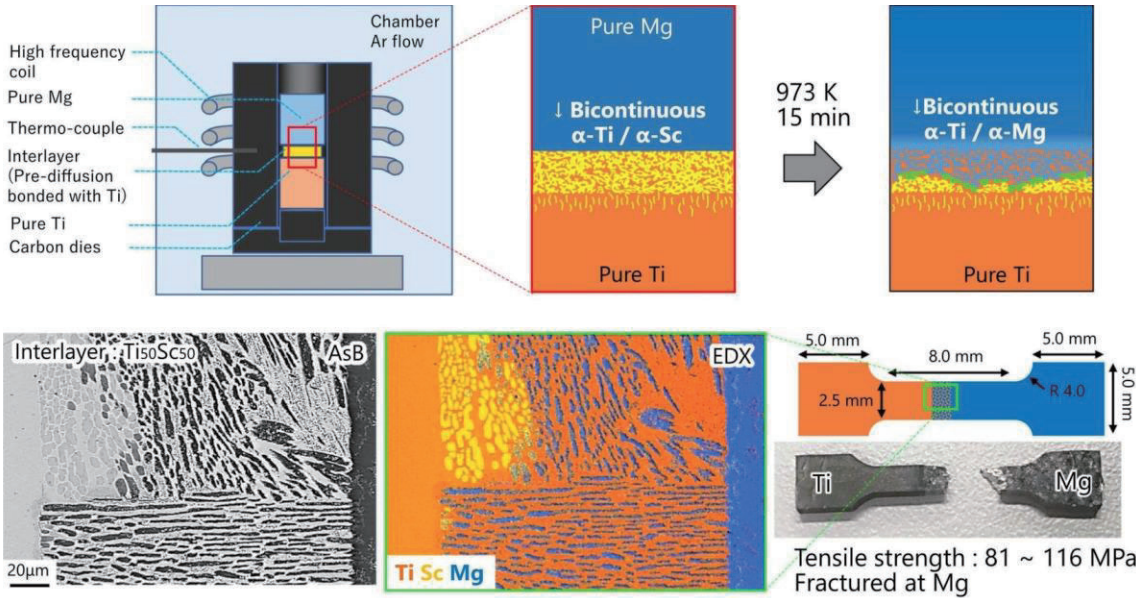
【2024(令和 6)年度の成果概要】

1. 共晶溶融を利用した液体金属脱合金による Ti/Mg 異種材料接合




本研究により、Ti と Mg という軽量かつ高強度な金属を脆性層なしで接合する技術が確立され、異種材料の組み合わせによる軽量構造体の設計が可能となった。これにより、輸送機器やエネルギー機器の軽量化・高効率化が進み、エネルギー消費の削減に寄与する。Ti と Mg 合金のように熱力学的に混ざり合わない主成分を持つ金属同士の接合は、従来、両者に親和性の高い第 3 元素を介して化学的に実現されてきましたが、接合界面に形成される脆性金属間化合物の制御が困難という課題がありました。本研究では、純 Ti と純 Mg を直接機械的に接合し、接合界面に脆性層を形成することなく、相互に混じり合わない 2 相の 3 次元絡み構造 (bicontinuous microstructure) を構築することに成功しました。まず、Ti-Cu 中間層を純 Ti に事前に拡散接合し、純 Mg と突合せ接合を行い、813 K・20 MPa・5 分間の加熱処理を施しました。接合界面では Cu と Mg の共晶が溶融し、中間層に対して液体金属脱合金が誘起されました。Ti-Cu 中間層全体が脱合金され、Mg-Cu 副生成物は加圧により排出され、結果として α-Ti と Mg-Cu 相の二連続構造のみが残存しました。これにより接合強度が向上し、Ti/Mg 接合体は引張試験において約 90 MPa で Mg 母材側で破断しました。本研究成果は、従来接合が困難とされてきた不相溶合金の接合に対する新たな指針を示すものです。

## 2. 液体金属置換法による不相溶相の二連続構造形成とその Ti/Mg 異種接合への応用




既存の微細構造を鋳型として活用し、全く新しい複合材料を創製する新たな微細構造制御手法「液体金属置換法 (liquid metal replacement method)」を開発しました。本手法では、原子間相互作用の違いを利用して、複合材料中の特定の相を選択的に別の相に置換します。この手法を、熱力学的に不相溶な Ti と Mg の異種材料接合に応用しました。α-Ti / α-Sc 相から成る中間層の一方を Ti に拡散接合した後、反対側を Mg と突合せ加熱処理を行いました。接合界面では、Mg と Sc の選択的相互拡散により、α-Sc 相が α-Mg 相に置き換えられ、もとの α-Ti / α-Sc 構造を鋳型として、新たな α-Ti / α-Mg の二連続構造が形成されました。また、Mg 側に拡散した Sc は、MgSc (B2) 相と (Mg, Sc) 固溶体が共存する反応層を形成しました。これらの新奇な複合構造と反応層により接合部の強度が向上し、界面破断を抑制して Mg 母材側で破断が生じ、最大 116 MPa の接合強度を達成しました。

## 3. 液体金属脱合金法を用いたナノ多孔性 $Fe_7Mo_6$ の形成と相変態機構

本研究では、液体金属脱合金法 (LMD) を用いたナノ多孔性 $Fe_7Mo_6$ 金属間化合物の形成を検討した。高温処理と Ni の選択的溶解が相変態を促進し、粗大化挙動を抑制することが明らかとなった。脱合金速度や粗大化は、金属浴中での拡散に制限され、1173 K 未満では十分に進行しなかった。原子スケールでの観察から、選択的 Ni 溶解に伴う準安定状態とスピノダル分解の温度依存的相互作用が確認された。973 K および 1173 K で処理後、μ-Fe7Mo6 の形成が確認され、本手法が階層的多孔材料の設計に有効である可能性が示された。この研究は、ナノ多孔性金属間化合物の構造制御に基づく階層的触媒設計に新たな指針を与え、先進的な高効率触媒材料の開発に科学的基盤を提供する。

【今後の計画】

**1. 液体金属脱合金を利用した Ti 合金/Mg 合金異種金属接合界面の高強度・軽量化設計**

2025 年度は、Ti 合金と Mg 合金という不混和系の軽量金属を、脆性層を形成せずに高強度で接合する新手法の確立を目的とする。Cu を含む中間層と Mg の共晶反応を利用した液体金属脱合金（LMD）プロセスを最適化し、Ti-6Al-4V および AZ31 合金を対象に、界面にバイコンティニュアス構造を形成することで、接合強度と信頼性の向上を図る。得られた構造体は、航空機・自動車・電動モビリティ等の輸送機器に応用可能であり、大幅な軽量化と走行時のエネルギー消費低減に貢献する。これにより、材料接合技術の新たな地平を切り拓くとともに、脱炭素社会の実現を支える先進技術の構築を目指す。

**2. 液体金属脱合金法で調製したナノ多孔性金属間化合物の階層構造制御と触媒応用**

前研究で明らかにした液体金属脱合金法（LMD）によるナノ多孔性金属間化合物形成メカニズムを発展させ、①マクロ/メソ/ミクロ多孔を併せ持つ階層構造の設計、②高表面積と物質輸送性を両立した触媒基材への応用を目的とする。特に、Ni 選択溶解とスピノダル分解の協奏効果を利用した孔隙率制御が鍵となる。具体的には階層構造の最適化，触媒特性評価，界面制御技術。触媒劣化の主因である粒子粗大化を、金属間化合物の本質的高耐熱性と孔隙構造で抑制。反応ガス流路としてのマクロ孔配置設計など、工学的観点を追加。

【論文リスト】

1. Wong Young Park, Jiuhui Han, Jongun Moon, Soo Hyun Joo, Takeshi Wada, Yuji Ichikawa, Kazuhiro Ogawa, Hyoung Seop Kim, Mingwei Chen, Hidemi Kato, Mechanically Robust Self-Organized Crack-Free Nanocellular Graphene with Outstanding Electrochemical Properties in Sodium Ion Battery, Advanced Materials **36**, 2311792 (2024).
2. Takeshi Wada, Akira Nakata, Ruirui Song, Hidemi Kato, Accelerated structural ordering during liquid metal dealloying and its effect on thermal coarsening of nanoporous refractory alloys, Scripta Materialia **247**, 116120 (2024).
3. Mingyue Guo, Junsheng Xue, Yanhui Li, Li Jiang, Lin Qi, Rie Y. Umetsu, Hidemi Kato, Wei Zhang, Effects of Cr addition on structure, magnetic properties and corrosion resistance of a Fe85.5B13Cu1.5 nanocrystalline alloy, Journal of Materials Research and Technology **30**, 2902-2910 (2024).
4. Benjamin Ducharne, Jae-Hyuk Lee, Soo-Hyun Joo, Pierre-Antoine Geslin, Eric Wasniewski, Hidemi Kato, Magnetic behavior of 3D interconnect nanoporous Fe Co synthesized by liquid metal dealloying, Materialia **36**, 102157 (2024).
5. Yangzheng Li, Liandong Li, Bing Lin, Jichao Qiao, Hailong Zhang, Taigang Zhou, Yingying Wang, Junlei Tang, Takeshi Wada, Hidemi Kato, Degradation mechanism of self-supported high-entropy metallic glass cathode in fluctuating renewable energy-powered acid water electrolysis, Corrosion Science **236**, 112223 (2024).
6. Liandong Li, Bing Lin, Hailong Zhang, Jichao Qiao, Takeshi Wada, Hidemi Kato,J unlei Tang, Self-Supported Metallic Glass as a Highly Durable HER Electrode under Fluctuating Renewable Power, ACS Sustainable Chemistry and Engineering **12**, 14425-14434 (2024).
7. Benjamin Ducharne, Soo Hyun Joo, Pierre Antoine Geslin, Eric Wasniewski, Hidemi Kato, Magnetic Behavior of Nanoporous FeCo, Fully and Partially Dealloyed by Liquid Metal, 2024 IEEE International Magnetic Conference - Short Papers, INTERMAG Short Papers 2024 – Proceedings (2024).
8. Jae Hyuk Lee, Soo Vin Ha, Jihye Seong, Akira Takeuchi, Ruirui Song, Hidemi Kato, Soo-Hyun Joo, Development of 3D interconnected nanoporous TiZrHfNbTaNi high-entropy alloy via liquid metal dealloying and subsequent synthesis of (TiZrHfNbTaNi)O high-entropy oxide, Journal of Materials Research and Technology **35**, 5204-5215 (2025).
9. Tomoya Kawaguchi, Natsumi Nemoto, Hikari Sakurai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo, Utilization of Delithiation-Induced Amorphous Oxide as a Cathode for Rechargeable Magnesium Batteries, Chemistry of Materials **36**, 4877-4887 (2024).
10. Isaac Oda-Bayliss, Shunsuke Yagi, Masao Kamiko, Kai Shimada, Hiroaki Kobayashi, Tetsu Ichitsubo, Effect of vanadium doping on α-$K_xMnO_2$ as a positive electrode active material for rechargeable magnesium batteries, Journal of Materials Chemistry A **12**, 17510-17519 (2024).
11. Masanao Ishijima, Arisa Omata, Kiyoshi Kanamura, Toshihiko Mandai, Xiatong Ye, Tetsu Ichitsubo, Koichi Kajihara, Oxalate-assisted Fe2O3 surface functionalization of nanosized MgMn2O4 and α-MnO2 cathodes for rechargeable magnesium batteries, RSC Applied Interfaces **2**, 179-184 (2024).
12. Hongyi Li, Daichi Shimizu, Rongkang Jin, Tongqing Zhang, Daisuke Horikawa, Katsuhiko Nagaya, Hiroshi Tsubouchi, Hiroyuki Yamaguchi, Motoyoshi Okumura, Tetsu Ichitsubo, Stable functional electrode–electrolyte interface formed by multivalent cation additives in lithium-metal anode batteries, Journal of Materials Chemistry A **13**, 3619-3633 (2024).
13. Hongyi Li, Shohei Nishimura, Weiqi Liu, Norihiko L. Okamoto, Shingo Matsumoto, Yuki Nakata, Hiroaki Hoshikawa, Toshiaki Kumagai, Takitaro Yamaguchi, Tetsu Ichitsubo, Enhancing the

durability of aluminium-foil anodes in rechargeable lithium batteries *via* uniformly distributed alloy addition in the matrix phase, Journal of Materials Chemistry A **13**, 5723-5731 (2025).

14. Reona Iimura, Shiori Kawasaki, Takashi Yabu, Shinnosuke Tachibana, Kazuya Yamaguchi, Toshihiko Mandai, Kazuaki Kisu, Naoto Kitamura, Zhirong Zhao-Karger, Shin-ichi Orimo ,Yasushi Idemoto, Masaki Matsui, Maximilian Fichtner, Itaru Honma, Tetsu Ichitsubo, Hiroaki Kobayashi Ultrasmall $\alpha$-$MnO_2$ with Low Aspect Ratio: Applications to Electrochemical Multivalent-Ion Intercalation Hosts and Aerobic Oxidation Catalysts, *Small*, **21**, 2411493 (2025).
15. Keita Sato, Takashi Komuro, Susumu Imashuku, Hongyi Li, Tetsu Ichitsubo, Hisako Hashimoto Transition Metal Parent Alumylene Complexes: Synthesis, Structures, and XPS Characterization of Aluminum Oxidation State, Inorganic Chemistry2024, **63**, 36, 16940–16948 (2024).

【主な国際・国内会議】

1. Hidemi KATO, Dissimilar Joining using Metallurgical Dealloying Reaction, JWRI/ACerS 3rd Global Conference and Exhibition on Smart Additive Manufacturing, Design & Evaluation (Smart MADE 2024) , 2024/04/12
2. Hidemi KATO, Liquid Metal Dealloying: A New Metallurgical Method Utilizing Unmixing Properties, NANO KOREA 2024, 2024/07/04
3. Hidemi Kato, Takeshi Wada, Soo-hyun Joo, Jung-Wook Kim, Seung-Guen Yu, Won-Young Park Yeon-Beom Jeong,Hyoung-Seop Kim,Ilya Okulov,Pierre-Antoine Geslin, Liquid metal alloying; A new metallurgical method utilizing ummixing properties, Pusan National University, 2024/08/09
4. Hidemi KATO, Liquid Metal Dealloying, Shanghai Jiao Tong University, 2024/12/04
5. Hidemi KATO, Liquid Metal Dealloying: A New Metallurgical Method Utilizing Unmixing Properties, Dankook University, 2024/07/02
6. 市坪 哲,李 弘毅,下川航平, アルミニウムおよび マグネシウムを用いた蓄電池用電 極材料の開発状況, 軽金属学会 147 回秋期大会, 2024/11/10
7. 市坪 哲, 資源制約フリーを目指したマグネシウム蓄電池の研究開発と展望, GteX・ALCA-Next 東北地区合同シンポジウム, 2024/04/17
8. Tetsu Ichitsubo, Hongyi Li, Kohei Shimokawa, Xiatong Ye, Challenges on DevelopingRoom-Temperature RechargeableMagnesium Batteries with OxideCathodes, PRiME2024, 2024/10/10

# ３．若手研究者のための
# 革新的エネルギー材料・
# 複合モジュール創製研究助成

## 3-1. 実施課題名： 室温近傍での水素分子吸着を実現する骨格構造・担持金属に着目した高分子材料の探索

構成員　古川翔一（材料科学高等研究所・特任助教）

芳野遼（金属材料研究所・助教）

岡本啓（金属材料研究所・助教）

### 1. 目的

人口増加や科学技術の進歩に伴う資源枯渇などの環境問題を解決するために二酸化炭素を発生しない再生可能エネルギーを効率的に利用する社会への移行が求められている。水素は高いエネルギー密度を持ち、二酸化炭素を排出しない次世代のエネルギー資源として注目されている。しかし、水素は酸素と混合された際に爆発性のあるガスである。水素の安全な貯蔵や輸送の技術には課題があり、世界的に研究開発が進められている。

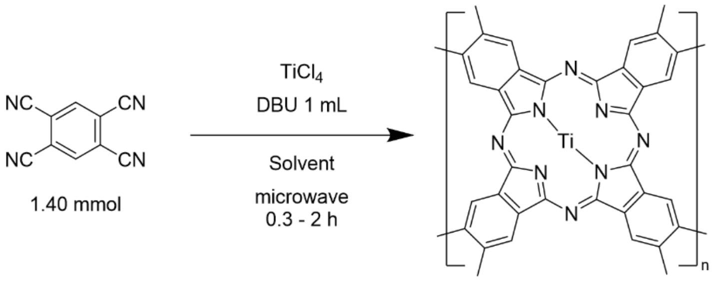
MOF (Metal-Organic Framework)やCOF (Covalent Organic Frameworks)などの多孔質材料は、それらの剛直な構造骨格かつ高い表面積から気体分子を吸着できる構造化合物として研究が盛んに行われてきた。水素分子は分子サイズが小さいことやファンデルワールス力が小さいことから材料表面への吸着が困難であり、MOFに代表される多くの多孔質材料は77 Kといった低温での水素吸着特性が調査されてきた。そのため、室温付近での高い水素吸着特性を示す材料の報告例は未だ少ない状況である。特に、高分子材料(COF)において室温付近での水素吸着特性評価は未開拓な研究領域といえる。計算科学による様々な多孔質材料の水素吸着能の調査は進められており、Metal-Phthalocyanine系シート型COFの室温近傍での高い水素吸着能が予測されるなど、水素吸脱着可能な多孔質材料の開発は計算科学による予測が先行している。

本研究では、COF が側鎖など柔軟性を有する構造骨格を持ち、圧力や温度の変化において構造変化が可能であることに着目し、幅広い圧力や温度領域での多孔質高分子材料(COF ※担持金属種含む)の構造や性質と水素吸着特性の関係を解明することを目的とする。本研究の遂行により、室温付近で取り扱い容易な水素貯蔵材料の開発が期待されるだけでなく、水素と高分子材料における学理の構築の一助となるといえる。

### 2. 主要成果の概要

図 1 に示すような Metal : Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ti, V, Mn, Mo, $H_2$ を有する Metal Pc-COF を合成するために、Ti において COF の最適合成条件の探索を行った。その結果、当該フタロシアニン系 COF を合成するためには、マイクロウェーブ装置にて 300 W 以上の出力かつ高沸点溶媒を使用することが重要であった(Table 1)。Table 1 と同様に上記の種々の金属を導入した Metal

Table 1. TiPc-COF合成における最適条件検討




| Entry | Solvent[a] | [mL] | Power [W] | time [h] | temp. [C] | Condition | Yield [%] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | EE | 20 | 100 | 2 | 140 | 茶色液体 | - |
| 2 | EG | 10 | 100 | 2 | 197 | 緑個体 | 79 |
| 3 | EG | 10 | 150 | 2 | 197 | 緑個体+黒固体 | 24+17 |
| 4 | EG | 5 | 300 | 0.3 | 197 | 黒固体 | 61 |

a) EE: 2-Etoxyethanol, EG: Etylene glycole

Pc-COF の合成を達成した。目的物は、SEM-EDX(図 2)により数 10 μm~100 μm の粒形であることが観察され、元素マッピングにより Ti 元素が導入されていることも示唆された。また、Table 1 Entry 2 ではフタロシアニン単体の単結晶が観察され、Entry 3 では Entry 2 の形状も少し見られており、完全には COF が形成されていないことも示唆された。XPS からも C, N, Ti における結合ピークが観察されたため、これからも Ti の導入が示唆された。更に、XRD より、ブラッグピークを観測できなかったことからアモルファス構造であることも示唆された（図 3）。以上の最適反応条件を用いて 10 種類の中心金属を有する Metal Pc-COF の合成を達成した（図 1）。

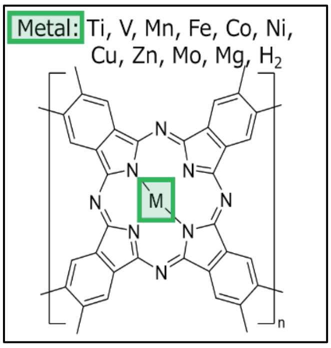



図 1. 各種金属を有する MPc-COF の合成

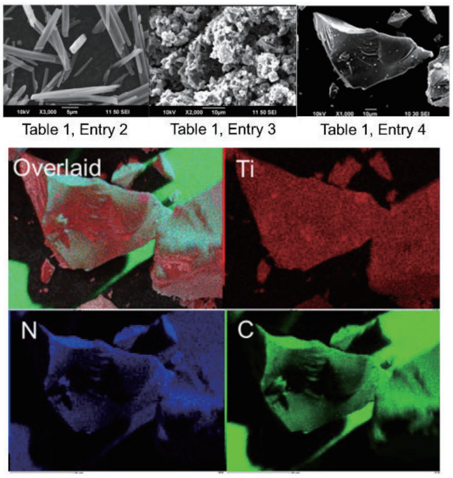



図 2. TiPc-COF の SEM-EDS 測定結果

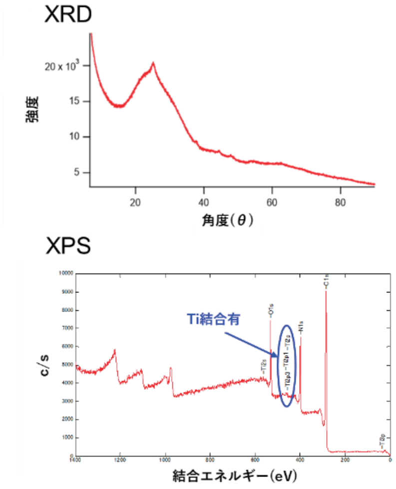



図 3. TiPc-COF の XRD 及び XPS 測定結果

TiPc-COF 及び FePc-COF において室温大気圧での水素吸着測定を実施したが、ほぼ吸着されなかった。また、図 4 に示す通り FePc-COF において水素吸着の特性評価を行った。高圧水素 PCT 測定により水素吸着測定を実施したが、室温、10 MPa では 0.06 wt%水素吸着であり低い値であった(図 4)。

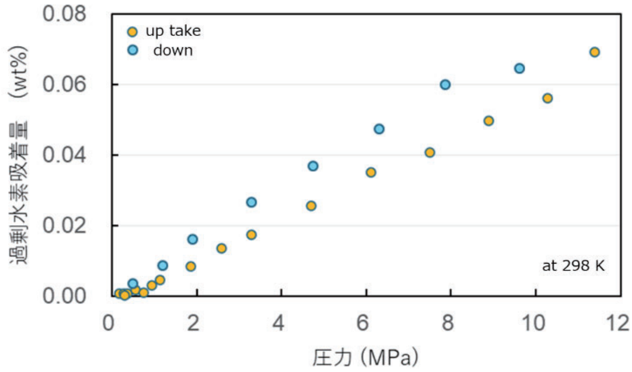



図 4.FePc-COF の高圧水素 PCT 測定結果

また、そのため、各材料における窒素吸着測定により、ガス吸着特性がある金属種の調査を行った。現在のところ Ti, Fe, Cu を有する COF において測定を行ったが、吸着量は低かった。今後、残りの合成した MPc-COF についてガス吸着特性の評価を行う計画をしている。

## 3-2. 実施課題名：X 線タイコグラフィ−走査型転換電子収量同時イメージングによる表面/バルク両敏感ナノマルチモーダル可視化計測技術の開発

構成員　石黒志（国際放射光ｲﾉﾍﾞｰｼｮﾝ・スマート研究センター・准教授）
河口智也（金属材料研究所・助教）
阿部真樹（国際放射光ｲﾉﾍﾞｰｼｮﾝ・スマート研究センター・学振特別研究員）

### １．目的

本研究課題では、固体触媒・蓄電池電極活物質粒子の表面活性構造の選択的直接空間可視化の実現を念頭に、X 線イコグラフィ−走査型転換電子収量(CEY)イメージングの同時計測技術の開発を目指し、CEY 計測専用フローセルの開発と計測条件を検討した。最終的に試料粒子の表面/バルク両敏感なナノマルチモーダルイメージ取得を実現する(図 1)。CEY 自体は、分光(XAFS)測定などで既に使われている手法だが、ナノイメージングではシグナルがより微小になる。また単独の走査型 CEY イメージング計測では空間分解能はビームサイズ程度(〜100 nm)が限度になるが、タイコグラフィ法と CEY 計測を同時に行うことができれば、タイコグラフィ画像再構成から試料複素透過関数と同時に得られる入射 X 線照射関数を用いて、走査型 CEY イメージのデコンボリューション処理による表面敏感イメージの高精細化が可能になり、両計測手法の相乗効果を見込むことができる。表面/バルク両敏感のマルチモーダル測定が可能になれば、触媒粒子の表面金属−担体相互作用や電池材料の充放電過程での表面−バルク間のイオン伝導の高空間分解オペランド可視化の実現に近づく。

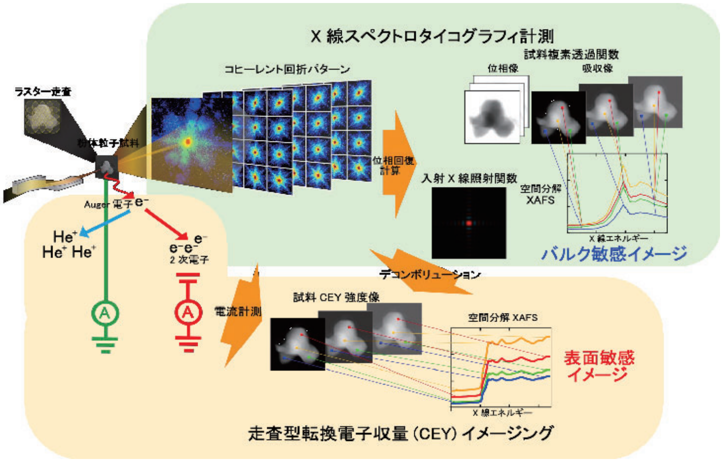



図 1: X 線タイコグラフィ−走査型転換電子収量法(CEY)イメージングの同時計測の概略図。

### ２．主要成果の概要

本課題では、上記研究目的を達成する上で、以下に述べる 2 項目に取り組んだ。

**(1)高強度テンダーX 線タイコグラフィによるバルク化学状態イメージング測定の確立**

NanoTerasu BL10U でのテンダーX 線タイコグラフィの測定の高スループット化を確立する、Advanced-KB ミラー集光光学系と CITIUS 検出器の導入を行い、リチウムイオン電池正極活物質粒子である $Li_2RuO_3$ 粒子をモデル試料に Ru L3 端のスペクトロタイコグラフィ測定を行った。

NanoTerasu BL10U にて、SiN 薄膜メンブレン上に担持した約 2.5 μm 大の $Li_2RuO_3$ 粒子について Ru $L_3$ 端でのタイコグラフィ測定を行った。Advanced-KB 集光光学系により 1.9 $\times 10^9$ photon/s・800 nm サイズのコヒーレント集光 X 線を利用することが可能になった。図 2 に測定結果を記す。図 2a の SEM 像に対応した、再構成吸収像(図 2b)と位相像(図 2c)を取得することができ、図 2b 中、点 A,B,C における Ru $L_3$ 端空間分解 XAFS の取得にも成功し、テンダーX 線領域におけるバルク化学状態イメージングを実現した。

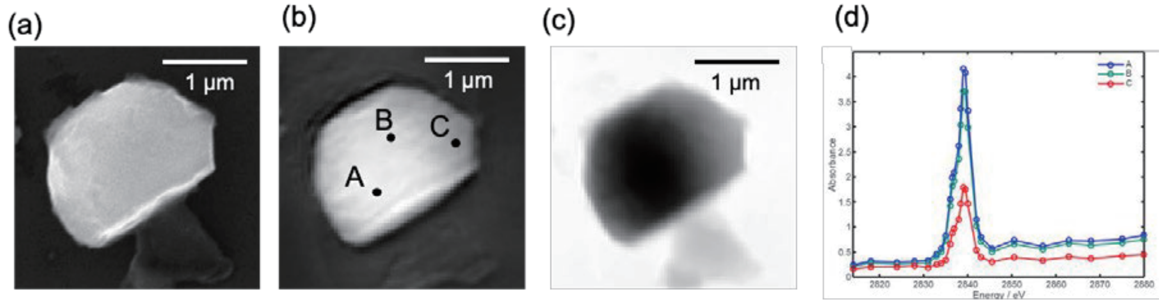



図 2: NanoTerasu BL10U で実施した、リチウムイオン電池正極活物質 $Li_2RuO_3$ 粒子の Ru $L_3$ スペクトロタイコグラフィ測定結果。(a) SEM 像, (b)再構成吸収像 (2.9 keV), (b)再構成位相像像 (2.9 keV), (d)点 A,B,C における Ru-L3 端空間分解 XAFS スペクトル。

**(2)タイコグラフィ測定と同時測定可能な薄型 CEY セルの開発と計測条件の探索・最適化**

X 線タイコグラフィ計測との同時計測を実現するために、専用の計測セルを製作する。セル試作には PEEK 対応の 3D プリンタなどを活用し、ラボ内所有の放射光実験リハーサル用真空チャンバで、ガスフロー、電圧印加を実施した。また、現状の NanoTerasu BL10U の光学系スペックからシグナルを最大化する測定条件最適化を行った。CEY シグナルの更なる S/N 向上を目指し、ロックイン検出法(設備備品に計上)に測定法を検討した。タイコグラフィの測定光学系と干渉しない CEY セルを製作し、研究室でのリハーサル実験により He ガスフロー条件下でも真空チャンバ内へのもれなく電圧印加ができる事を確認した。残念ながら(1)の実験に本セルを投入する事は叶わなかったが、2025 年度早期にテストを実施する予定である。(1)の実験で達成した光学系スペックと、セル印加電圧と $Li_2RuO_3$ の級数係数・Auger 電子発生効率を考慮すると、セルからは~pA オーダーのシグナルを検出できる事が分かり、現有設備のプリアンプなどを使用すれば検出可能な見込みを得た。ただ、高品質な CEY イメージ取得のためには,更なる S/N 向上が求められるので、今後チョッパと組合わせたロックイン検出による CEY 計測法の開発にも取り組んでいく予定である(図 3)。

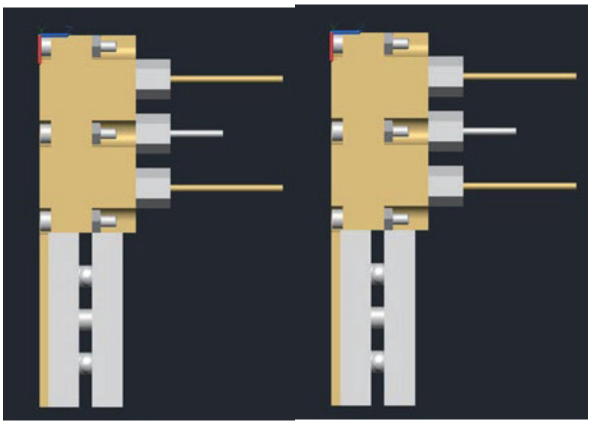


図 3: (a)作成した CEY セルの CAD 図、(b)ロックイン検出を使用した CEY イメージングの検討。

## 3-3. 実施課題名：多孔性構造と触媒活性サイトを有する無機–有機ハイブリッド型錯体ゲルを用いた二酸化炭素変換反応の開拓

構成員　芳野遼（金属材料研究所・助教）
岡弘樹（多元物質科学研究所・准教授）
豊田良順（理学研究科化学専攻　錯体化学研究室・助教）

### １．目的

二酸化炭素 ($CO_2$) の濃度上昇に起因する環境問題や持続可能なカーボンニュートラル社会の実現という観点から、$CO_2$ を効率的に捕捉し、産業面で重要な化学物質に変換可能な触媒材料の開発は最も重要な研究対象の 1 つである。しかし、安定な炭素化合物である $CO_2$ をより高いエネルギーを有する化学種へ効率的に還元することは困難であるため、より高性能な $CO_2$ 還元触媒材料開発に関する研究が世界中で行われている。

これまでに申請者は、電子ドナー性を有する水車型ルテニウム二核 (II,II) 錯体 (**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]**) を基軸とした機能性材料を系統的に開発している[1]。近年 **[Ru$_2$]** の軸位サイト (配位不飽和部位; OMS) は触媒活性な反応場として機能することが明らかになり注目されているが[2]、OMS を反応場として保持した状態で規則的に **[Ru$_2$]** を配列させた多次元格子の開発は合成条件上極めて難しく、報告例は皆無であった。そこで申請者は、有機化学的手法を用いることで酸化還元活性な **[Ru$_2$]** 錯体を共有結合によって架橋し、触媒活性点である OMS が保持された機能性材料の合成手法 (後置的な分子修飾法) を開発した。

具体的に、アルデヒド基 (–CH=O) を有した新規 **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]** 錯体 (**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-CHO**) にアミン分子を反応させると、戦略通りイミン架橋型機能性 **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]** (図 1(a))[3]) や高結晶性の共有結合型錯体格子 (**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-MCOF**[4]) の系統的合成に成功し、さらに **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-MCOF** の $CO_2$ 光還元触媒実験を行うと、選択的な CO 生成、かつ極めて高い触媒活性が確認されたため (図 1(b)))、現在までに特異な反応場である **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]** の OMS を活かした新たな不均一系触媒の開発を達成している。

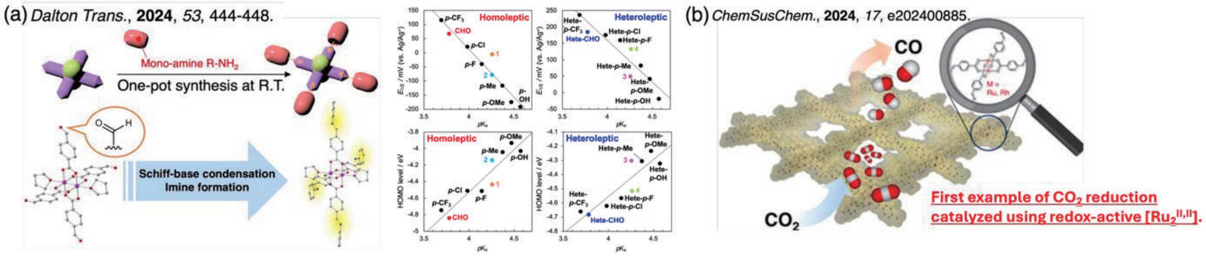



図１．後置的な分子修飾法を用いた材料・触媒能開拓 (先行研究)[3,4]

本研究では、先行研究で確立した後置的な分子修飾法の適応範囲をソフトマテリアルまで拡張し、空間機能と触媒活性サイトが共存した共有結合型アモルファスゲル/エアロゲルの系統的な合成を目的とした。従来の結晶性材料では困難であった柔軟かつ階層的な多孔性ネットワークの構築と触媒活性サイトの高密度化を通し、より触媒活な触媒性能を有する不均一系材料の開発に取り組んだ。

## ２．主要成果の概要

**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-CHO** にトリアミン分子 (TABTA) を室温で反応させると、ゲル状の化合物 (**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel**) の系統的合成に成功した (図 2(a))。**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel** の IR スペクトルではイミン形成を示唆するピーク ($\nu_{\mathrm{C=N}}$) が観測されたことから、目的とした共有結合性ゲルの構築が示唆された (図 2(b))。また、**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel** に対して超臨界 $CO_2$ (SC-$CO_2$) 処理を行うと粉末状態のエアロゲル (**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel**) が得られた (図 2(c))。SEM 画像 (図 2(c))、ガス吸着特性から **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** の多孔性構造を確認し、77 K における $N_2$ 吸着等温線 (図 2(d)) から見積もった表面積 ($S_{\mathrm{BET}}$ = 247 m$^2$/g) は先行研究の **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-MCOF** よりも大きく、SC-$CO_2$ 処理による柔軟かつ階層的な多孔性ネットワークの構築を確認した。さらに、**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** の電子状態は XPS から調査し、雛形化合物の **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-*p*-CHO** と同様の電子状態であることを確認した (図 2(e))。

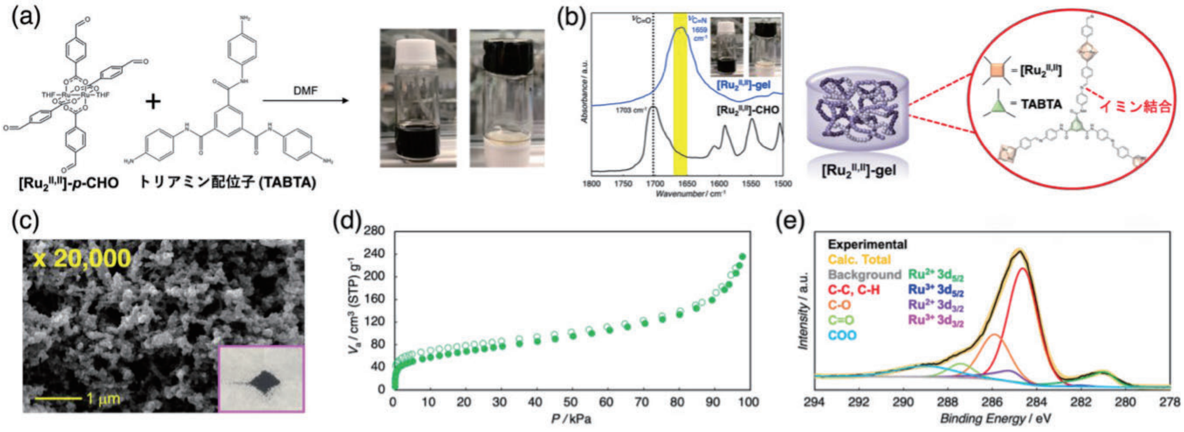



図 2(a). 後置的な分子修飾法を用いた **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel** の合成、(b) **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel** の IR スペクトル、(c) **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** の SEM 画像、(d) **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** の 77 K における $N_2$ 吸着等温線、(e) **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-*p*-agel** の XPS

上記から **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-gel/agel** の同定を行ったため、**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** の触媒活性評価を行った。具体的に、NMP 溶液・**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel**・BIH・TFE、および [Ir(ppy)$_3$] を加えた不均一系条件で $CO_2$ の光還元実験を行うと、**[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-agel** は CO を主な活性種として機能する $CO_2$ 還元触媒として機能することを見出し、さらに先行研究で報告したよりも優れた **[Ru$_2^{\mathrm{II,II}}$]-MCOF** よりも優れた触媒活性・構造耐久性を示す明らかになり、目的とした不均一系触媒の開発に成功した。

## ３．本研究に関する成果

第 18 回分子科学討論会　優秀講演賞 「水車型二核錯体の後置的な分子修飾法を介した活性配位空間の合理的構築」

## ４．参考文献


1. H. Miyasaka, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **2021**, *94*, 2929-2955.
2. M. J. Trenerry, C. M. Wallen, T. R. Brown, S. V. Park, J. F. Berry, *Nat. Chem.*, **2021**, *13*, 1221–1227.
3. C. Itoh, H. Yoshino, T. Kitayama, W. Kosaka, H. Miyasaka, *Dalton Trans.*, **2024**, *53*, 444-448.
4. C. Itoh, M. Kitada, M. Kondo, S. Masaoka, H. Yoshino, W. Kosaka, Y. Ootani, J. Matsuda, M. Kubo, T. J. Konno, H. Miyasaka, *ChemSusChem*, **2024**, *17*, e202400885.

# 4. 新聞発表等

## 4-1. プレスリリース

1. 理論計算と機械学習により無機材料表面の性質を高精度かつ網羅的に予測 －光触媒材料などの探索や電子・光電子デバイスの設計を支援－
   2024 年 4 月 1 日
   〔プレスリリース本文〕 # 熊谷研
   https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20230607_01web_proton.pdf

2. スズ添加が生体材料用チタン合金を しなやかにする仕組みを明らかに ―合金設計のカクテル効果に乾杯―
   2024 年 5 月 16 日
   〔プレスリリース本文〕 # 市坪研
   https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20240516_01web_sn.pdf

3. 酸化ルテニウムは本当に第三の磁性体か？～素粒子ミュオンと第一原理計算で挑む「悪魔の証明」～
   2024 年 5 月 20 日
   〔プレスリリース本文〕 # 藤田研
   https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1624.html

4. 機械学習が解き明かす新たな水素化反応メカニズム
   2025 年 6 月 2 日
   〔プレスリリース本文〕#折茂研
   https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/jp/achievements/press/2025/20250602_001982.html

5. 入れ子状にした物質への光照射で生じる新しいエネルギー現象を観測
   2024 年 6 月 3 日
   〔プレスリリース本文〕#熊谷研
   https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20240603_05web_CNT.pdf

6. 固体酸化物セルのコバルト使用量を削減-グリーン水素の利用・製造コストの低減に貢献-
   2024 年 9 月 24 日
   〔プレスリリース本文〕 # 髙村研
   https://www.eng.tohoku.ac.jp/news/detail-,-id,2977.html

7. 近赤外光センシングを高精度化する超高屈折率で透明な新素材を発見-自動運転・デジタルツインの普及加速へ期待-
   2024 年 10 月 16 日
   〔プレスリリース本文〕 # 髙村研
   https://www.eng.tohoku.ac.jp/news/detail-,-id,2997.html

8. 酸化亜鉛における電界制御量子ドット形成と量子多体効果観測を実現 ー新材料量子デバイス開発に期待ー
   2024 年 11 月 8 日
   〔プレスリリース本文〕 # E-IMR
   https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20231004_01web_alkali.pdf

9. 銅酸化物高温超伝導体 Bi2212 の紫外・可視光領域における 大きな光学的異方性の起源を解明
   2024 年 11 月 20 日
   〔プレスリリース本文〕 # 藤田研
   https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20241120_02web_Bi2212.pdf

10. 理論計算で 2 次元半導体中における 27 種類の添加元素の影響を系統的に予測 ― 次世代の電子や光学デバイス開発の指針に ―
    2024 年 12 月 4 日
    〔プレスリリース本文〕 # 熊谷研
    https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20231120_02web_co2.pdf

11. ガラスは温度の上下を繰り返すと若返る？ ―金属原子の並び方と振動の変化―
    2024 年 12 月 17 日
    〔プレスリリース本文〕 # 市坪研
    https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20231204_01web_co2.pdf

12. 毒性ガス二硫化炭素の選択的・超高速発光検出を達成 環境・健康問題を見据えた高感度ケミカルセンサーの応用に期待
    2024 年 12 月 20 日
    〔プレスリリース本文〕 # 宮坂研
    https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20240109_02web_topo.pdf

13. 合成技術の「新旧融合」二酸化マンガンを極小ナノ粒子に ～極小ナノ領域のユニークな粒子形態によって次世代蓄電池や触媒が高性能に～
 2025 年 1 月 21 日
 〔プレスリリース本文〕 # 折茂研 # 市坪研
 https://www.tohoku.ac.jp/japanese/newimg/pressimg/tohokuuniv-press20250121_01_ultrasmall2.pdf

14. 金属有機構造体を用いた半導体性二重らせんリン同素体の直接合成
 2025 年 2 月 26 日
 〔プレスリリース本文〕 # E-IMR
 https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1705.html

### 4-2. 新聞等掲載状況

1. NHK 宮城のニュース
 2024 年 5 月 16 日 ナノテラス使った実験 初の学術論文発表

2. 日本経済新聞(紙)
 2024 年 5 月 29 日 仙台市「ナノテラス」運用 2 ヵ月高解像度実証成果じわり

3. テレビ・チャージ！第 1 部（東日本放送)
 2024 年 9 月 12 日 温泉の熱や蒸気を活用 鳴子温泉で次世代エネルギーを考える

4. テレビ・チャージ！第 1 部（東日本放送)
 2024 年 11 月 1 日 水産関係者対象にセミナー 次世代エネルギーの活用法学ぶ

5. 石巻かほく(新聞)
 2025 年 2 月 11 日 水産業 燃料電池で脱炭素化 石巻地域推進協、県が勉強会 「排出削減企業価値に」 地元関係者ら 必要性 理解深める

### 4-3. 知的財産権

【特許出願】
出願件数・24 件（非公開期間中)

# 5. 各種受賞・表彰

## 5.受賞リスト

**芳野　遼**
第 18 回分子科学討論会（京都）2024　分子科学学会・優秀講演賞
「水車型二核錯体の後置的な分子修飾法を介した活性配位空間の合理的構築」
2024 年 10 月 16 日
※2024 年度若手研究者のための革新的エネルギー材料・複合モジュール創製研究助成に関する研究表彰

表彰状
分子科学会優秀講演賞
芳野　遼殿
分子科学会は第18回分子科学討論会における貴殿の発表「水車型二核錯体の後置的な分子修飾法を介した活性配位空間の合理的構築」に対してその格段に優れた研究業績を讃え今後の益々の発展を期待しここに表彰します
令和6年10月16日
分子科学会
会長 中井 浩巳

**岡崎　由芽**
電気化学会第 92 回大会（東京）　電気化学会・優秀学生講演賞
「Ce–Zr 系酸化物の陽イオン規則化に及ぼす第三元素添加の影響」
2025 年 3 月 19 日
https://www.material.tohoku.ac.jp/news/20250401.html

# 6. 外部研究資金

## 6-1. 科研費（学術研究助成基金助成金／科学研究費補助金）

高橋　幸生　　特別推進研究　　期間：202304-203003　　代表者
超タイコグラフィによる微視的非平衡状態の可視化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

市坪　哲　　基盤研究（S）　　期間：202304-202803　　代表者
メタルアノード蓄電池に向けたデュアルイオンが織りなす世界の学理構築

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

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

塚﨑　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

関　剛斎　　基盤研究（A）　　期間：202304-202703　　代表者
３次元ノンコリニア磁気秩序の人工創製とスピントルク磁化操作

市坪　哲　　挑戦的研究（萌芽）　期間：202304-202503　　代表者
パイエルス歪を有するカルコゲナイド結晶性相変化材料の光励起挙動評価

宮坂　等　　挑戦的研究（萌芽）　期間：202304-202503　　代表者
細孔内水素結合を電荷移動トリガーとするゲスト誘起磁気相変換の開拓

河口　智也　　国際共同研究強化(B)期間：202210-202603　　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酸化物電極材料の開拓

## 6－2. 科研費以外の競争的研究費

塚﨑　敦　　JST/CREST　　期間：201904-202503　　代表者
トポロジカル機能界面の創出

折茂　慎　　JST/GteX　　期間：202304-202803　　代表者
高密度・高耐久・低コスト化を実現する水素貯蔵システムの開発

市坪　哲　　JST/GteX　　期間：202304-202803　　代表者
資源制約フリーを目指したマグネシウム蓄電池の研究開発

岡本　範彦　　JST/ALCA-NEXT JST/GteX　　期間：202304-202803　　代表者
環境水分を利用する高サイクル高エネルギー密度酸化物蓄熱材料

熊谷　悠　　旭硝子財団助成金　　期間：202304-202503　　代表者
機械学習ポテンシャルを用いた物質探索手法の開発

# 7. 主催した会議・研究会・ワークショップ

# 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

# Summer Meeting 2024
# （エネルギー材料研究会）

## 2024.6.17 (月)
## 15:30 – 17:30

## 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

**参加無料**

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 Summer Meeting 2024
# (エネルギー材料研究会)
# 2024.6.17 (月) 15:30-17:30

| 時間 | コンテンツ・講演者 |
|---|---|
| 15:30 - 15:35 | 開会あいさつ<br>市坪　哲　［E-IMRセンター長/東北大学金属材料研究所教授］ |
| **【研究発表】** | |
| 15:35 – 15:55 | 非強誘電体の双晶形成を利用したバルク周期分極反転構造の作製<br>前田　健作［太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教］ |
| 15:55 - 16:15 | 横型熱電変換素子用の強磁性体材料の開発<br>伊藤　啓太　［太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教］ |
| 16:15 – 16:35 | コロイド結晶におけるヘテロエピタキシャル成長メカニズムの研究：新規エネルギー変換材料の開発に向けて<br>野澤　純　［太陽エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所特任助教］ |
| **【休憩・10分】** | |
| 16:45 – 17:05 | アルカリイオン添加を用いたマグネシウムイオンの固体内拡散促進<br>李　弘毅　［蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所特任助教］ |
| 17:05 – 17:25 | Spinodal Decomposition and Phase Transformation during Fabricating Nanoporous $Fe_7Mo_6$ Intermetallic Compounds by Liquid Metal Dealloying<br>宋　瑞瑞［複合モジュール・社会実装研究ユニット/金属材料研究所特任助教］ |
| 17:25 – 17:30 | 閉会あいさつ<br>市坪　哲　［E-IMRセンター長/東北大学金属材料研究所教授］ |

## 7-1. 先端エネルギー材料理工共創研究センター（E-IMR）Summer Meeting 2024（エネルギー材料研究会）

**日　時：2024(令和 6)年 6 月 17 日（月）15:30－17:30**

**場　所：東北大学　金属材料研究所講堂**

**【研究発表】**

非強誘電体の双晶形成を利用したバルク周期分極反転構造の作製
太陽エネルギー変換材料研究ユニット/ 助教 前田　健作

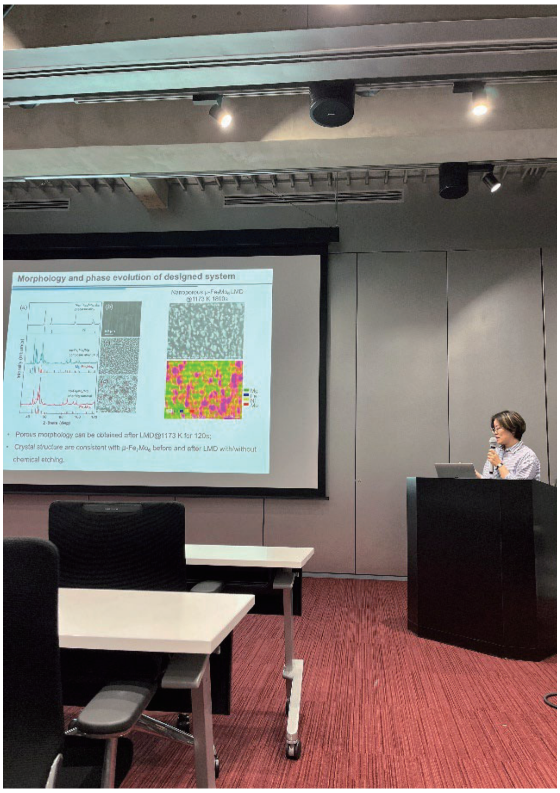
横型熱電変換素子用の強磁性体材料の開発
太陽エネルギー変換材料研究ユニット/ 助教 伊藤　啓太

コロイド結晶におけるヘテロエピタキシャル成長メカニズムの研究：新規エネルギー変換材料の開発に向けて
太陽エネルギー変換材料研究ユニット/ 特任助教 野澤　純

アルカリイオン添加を用いたマグネシウムイオンの固体内拡散促進
蓄エネルギー変換材料研究ユニット/特任助教 李　弘毅

Spinodal Decomposition and Phase Transformation during Fabricating Nanoporous Fe7Mo6 Intermetallic Compounds by Liquid Metal Dealloying
複合モジュール・社会実装研究ユニット/特任助教　宋　瑞瑞

Li only
Mg only
Mg-Li


Morphology and phase evolution of designed system

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

7-2

E-IMR

# Institute for Materials Research, Tohoku University
# Collaborative Research Center on Energy Materials (E-IMR)

# E-IMR International Workshop 2024

## 2024.11.26 （Tue）

## 12:55 – 17:30

**Maximization of solar energy utilization and innovative materials for heat, electricity, and hydrogen storages**

**Venue**

Institute for Materials Research, Tohoku University Auditorium, Bldg. 2(Online)

**Free of charge**

**Click here to register**

https://docs.google.com/forms/d/1uWs7S1WE4sCDZxz5cum9jFtuAzOA6COiBoHJQTBdTgM/edit

SUSTAINABLE DEVELOPMENT GOALS

私たちは持続可能な開発目標（SDGs）を支援しています

【 Contact us 】
Institute for Materials Research, Tohoku University
E-IMR Research Support Office
Phone: 022-215-2072
E-mail: e-imr*grp.tohoku.ac.jp Please change * to @.

# E-IMR International Workshop 2024 11.26 Thu. 12:55-17:30

| Hours | Content & Speakers |
|---|---|
| 12:40 | opening |
| 12:55 - 13:05 | Opening Remarks<br>Tetsu Ichitsubo ［Center Director, E-IMR Center］ |
| 【research publication】 | |
| 13:05 – 13:20 | 「On the dynamics of magnets and ferroelectrics」<br>Bauer Gerritt E.W [Solar Energy Conversion Materials Research Unit / Advanced Institute for Materials Research Professor］ |
| 13:20 – 13:45 | 「Recent Progresses in Skyrmionic Materials and Devices」<br>Wanjun Jiang [Tsinghua University Professor］ |
| 13:45 – 14:00 | 「Dissociative Oxygen Adsorption and Incorporation in $Co_3O_4$-Dispersed PCFC Cathodes」<br>Hitoshi Takamura ［Energy Storage Materials Research Unit / School of Engineering Tohoku University Professor] |
| 14:00 – 14:25 | 「Revealing the Surface Termination Effect of Perovskite for Oxygen Exchange Reaction」<br>Di Chen ［Tsinghua University Associate Professor] |
| 14:25 – 14:50 | 「Mobility and clustering of O and anion vacancies in perovskites as energy materials」<br>Francesco Cordero ［CNR-ISM Istituto di Struttura della Materia Primo Ricercatore］ |
| 14:50 – 15:00 | Break (10 minutes) |
| 15:00 – 15:15 | 「Nanostructure and chemical state imaging of energy materials by coherent X-ray diffraction」<br>Yukio Takahashi ［Materials Evaluation and Analysis Research Unit / International Center for Synchrotron Radiation Innovation Smart Professor] |
| 15:15 – 15:30 | 「Layered Manganese Dioxide as a Heat-Storage Material Utilizing Environmental Water Vapor」<br>Norihiko Okamoto ［Solar Energy Conversion Materials Research Unit / Institute for Materials Research Associate Professor］ |
| 15:30 – 15:45 | 「A new AB3-based alloy with reversible hydrogen absorption and desorption reactions and less degradation」<br>Toyoto Sato ［Energy Storage Materials Research Unit / Institute for Materials Research Associate Professor] |
| 15:45 – 16:00 | 「Interface Design for Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries with Transition Metal Oxide Cathodes」<br>Hongyi Li ［Energy Storage Materials Research Unit / Institute for Materials Research Project Assistant Professor] |
| 16:00 – 16:10 | Break (10 minutes) |
| 16:10 – 16:35 | 「Recent advances of silicon cystal for solar cells」<br>Deren Yang ［Zhejlang University Professor］ |
| 16:35 – 17:00 | 「Probing the Multipolar Structure of Berry Curvature in Magnetization Space by the In-plane Anomalous Hall Effect」<br>Dazhi Hou ［University of Science and Technology of China Professor］ |
| 17:00 – 17:25 | 「Formation Rate as a Key Factor in Enhancing the Stability of Anode-Less Lithium Metal Batteries」<br>Michael De Volder ［University of Cambridge Professor］ |
| 17:25 – 17:30 | Closing Remarks<br>Tetsu Ichitsubo ［Center Director, E-IMR Center］ |

## 7-2. 先端エネルギー材料理工共創研究センター（E-IMR）

### E-IMR International Workshop

日　時：2024(令和 6)年 11 月 26 日（火）12:55－17:30

場　所：東北大学　金属材料研究所講堂

【research publication】

「On the dynamics of magnets and ferroelectrics」
Bauer Gerritt E.W　[Solar Energy Conversion Materials Research Unit / Advanced Institute for Materials Research Professor〕

「Recent Progresses in Skyrmionic Materials and Devices」
Wanjun Jiang　[Tsinghua University Professor〕

「Dissociative Oxygen Adsorption and Incorporation in Co3O4-Dispersed PCFC Cathodes」
Hitoshi Takamura　〔Energy Storage Materials Research Unit / School of Engineering Tohoku University Professor]

「Revealing the Surface Termination Effect of Perovskite for Oxygen Exchange Reaction」
Di Chen　〔Tsinghua University Associate Professor]

「Mobility and clustering of O and anion vacancies in perovskites as energy materials」
Francesco Cordero　〔CNR-ISM Istituto di Struttura della Materia　Primo Ricercatore〕

「Nanostructure and chemical state imaging of energy materials by coherent X-ray diffraction」
Yukio Takahashi　〔Materials Evaluation and Analysis Research Unit / International Center for Synchrotron Radiation Innovation Smart Professor]

「Layered Manganese Dioxide as a Heat-Storage Material Utilizing Environmental Water Vapor」
Norihiko Okamoto　〔Solar Energy Conversion Materials Research Unit / Institute for Materials Research Associate Professor〕

「A new AB3-based alloy with reversible hydrogen absorption and desorption reactions and less degradation」
Toyoto Sato　〔Energy Storage Materials Research Unit / Institute for Materials Research Associate Professor]

「Interface Design for Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries with Transition Metal Oxide Cathodes」
Hongyi Li　〔Energy Storage Materials Research Unit / Institute for Materials Research Project Assistant Professor]

「Recent advances of silicon cystal for solar cells」
Deren Yang　〔Zhejlang University Professor〕

「Probing the Multipolar Structure of Berry Curvature in Magnetization Space by the In-plane Anomalous Hall Effect」
Dazhi Hou　〔University of Science and Technology of China Professor〕

「Formation Rate as a Key Factor in Enhancing the Stability of Anode-Less Lithium Metal Batteries」
Michael De Volder〔University of Cambridge Professor〕

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

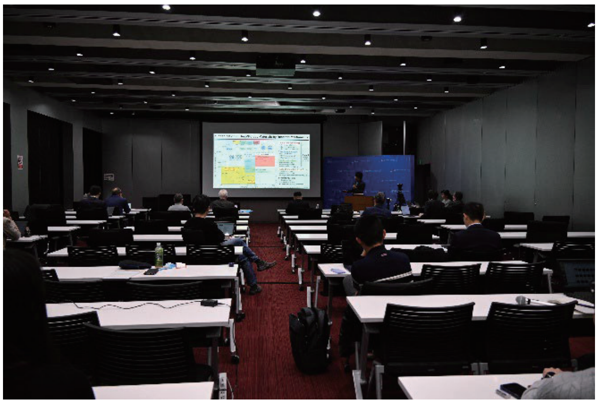
IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

IMR 東北大学 金属材料研究所

Formation Rate as a Key Factor in Enhancing the Stability of Anode-Less Lithium Metal Batteries
E-IMR Conference, November 26th, 2024
Soochan Kim, Michael De Volder
University of Cambridge
THE FARADAY INSTITUTION
UNIVERSITY OF CAMBRIDGE



# 8. 職員及び運営委員名簿

## 令和６（2024）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） | 関　剛斎 |
| 教授（兼） | 塚﨑 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） | 髙村 仁 |
| 教授（兼 SRIS※２） | 髙橋 幸生 |
| 准教授 | Belosludov, Rodion Vladimirovich |
| 准教授（兼） | 岡本 範彦 |
| 准教授（兼） | 佐藤 豊人 |
| 助教（兼） | 前田 健作 |
| 助教（兼） | 伊藤 啓太 |
| 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（運営）（兼） | 佐藤 敬浩 |

※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

## 令和６（2024）年度　先端エネルギー材料理工共創研究センター<br>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６（2024）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 | 佐々木　孝彦 | R6(2024).4.1-<br>R8(2026).3.31 | ５条１号<br>所　長 |
| 金属材料研究所 | 教　授 | 笠田　竜太 | R6(2024).4.1-<br>R8(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 | 髙村　仁 | R6(2024).4.1-<br>R8(2024).3.31 | ５条４号 |
| ＳＲＩＳ※ | 教　授 | 髙橋　幸生 | R6(2024).4.1-<br>R8(2024).3.31 | ５条４号 |
| 金属材料研究所 | 特任教授（運営） | 佐藤　敬浩 | | ５条４号 |
| 金属材料研究所 | 事務部長 | 船田　正幸 | | ５条３号 |

※　ＳＲＩＳ：国際放射光イノベーション・スマート研究センター

令和７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/

※無断転載、複写、複製配布などの行為を固く禁じます。