

目次

はじめに	1
組織とメンバー: 2026年度	2
先端エネルギー材料研究紹介	
・鉄マンガン系エリンバー合金に潜む「格子のゆらぎ」	3
・格子系誘電率の高精度予測と高誘電体材料探索への応用	4
・先端エネルギー応用のためのナノ材料の理論的研究	5
イベント	
E-IMR Summer Meeting 2026	6
お知らせ	
E-IMRワークショップ	6

はじめに

先端エネルギー材料理工共創研究センター(E-IMRセンター)は、2015年4月の発足から10年を超え、エネルギー材料研究を取り巻く社会的要請の変化に対応しながら、その活動を発展させてまいりました。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の開拓を基軸として、エネルギー変換・貯蔵、材料評価・解析、さらには社会実装までを見据えた分野横断的な研究を推進しています。

2025年度は、これまで実施してきた若手研究者を対象とする研究助成に加え、大学院生を対象とした研究奨励支援を新たに開始しました。その一環として、日本学術振興会特別研究員DC1への申請を支援する「DC1申請学生のための革新的エネルギー素材・複合モジュール創製研究助成」制度を創設し、5名の学生を採択しました。また、6月16日に開催したE-IMRサマーミーティングでは、若手研究助成の採択者に研究成果をご発表いただき、世代や研究分野を越えた活発な意見交換を行いました。

さらに、12月3日にはサテライトワークショップを開催し、京都大学大学院工学研究科材料工学専攻の野瀬嘉太郎准教授より、「キャリア再結合の観点から考える化合物太陽電池の高効率化—ZnSnP₂太陽電池を例に—」と題して、化合物太陽電池の高効率化に向けた材料研究についてご講演いただきました。翌12月4日の2025年度E-IMRワークショップでは、文部科学

省研究振興局大学研究基盤整備課の熊谷果奈子課長補佐より「国立大学法人等の学術研究を取り巻く状況について」、大阪公立大学大学院工学研究科教授・全固体電池研究所所長で、本研究所教授も兼務される林晃敏教授より「大阪公立大学全固体電池研究所における研究開発」と題した招待講演をいただきました。加えて、E-IMRに参画する研究者による最新の研究成果が紹介され、活発な質疑応答を通じて、今後のエネルギー材料研究の方向性や研究拠点間の連携について議論を深める機会となりました。

このように、E-IMRセンターでは、個々の先端研究を推進するとともに、若手研究者への研究助成、大学院生への研究奨励支援、さらには異分野・研究拠点間の交流を通じて、次世代を担う研究者の育成と新たな研究連携の創出に取り組んでいます。2026年度もこれらの取組をさらに発展させ、基礎学理の深化と社会実装を両輪として、国内外の研究拠点との連携を進め、革新的エネルギー材料・複合モジュールの創製と持続可能な社会の実現に貢献してまいります。

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

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



特任教授

佐藤 敬浩

研究企画・運営担当



運営委員会

研究支援室

研究戦略室

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 (東京大学)	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)
教授(兼) 紅林 秀和 スピン物性二次元材料 ニューロモルフィック コンピューティング (CSIS)	准教授(兼) 岡本 範彦 透過電子顕微鏡 熱電材料	准教授(兼) 野澤 純 コロイド 結晶成長	助教(兼) Troy Dion スピントロニクス スピン波 マイクロログ計算 (CSIS)

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 機能協調型二次電池	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) 高村 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	助教(兼) 李 弘毅 デュアルカチオン電池 金属・合金負極材料開発	特任助教 周 子奇 電荷移動錯体格子 郵電材料

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) 高橋 幸生 放射光 コヒーレント回折 イメージング 微細構造・化学状態解析 (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
--	---	--	--

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 葉 夏桐 マグネシウム蓄電池 電 極電解液界面制御
--	---	---

大阪公立大学内サテライトオフィス

教授(兼) 林 晃敏 無機材料化学、ガラス材料 固体電解質、全固体電池	准教授(専) 山田 大貴 放射光分析 非晶質構造解析	助教(専) 鳥居 真人 計算材料科学、機械の特性 イオン伝導体
--	---	--

鉄マンガン系エリンバー合金に潜む「格子のゆらぎ」

藤田 全基教授
材料評価・解析研究ユニット
量子ビーム金属物理学研究部門

#研究の背景

温度が変化しても弾性率がほとんど変化しない「エリンバー (Elinvar)」合金は、機械式時計や精密センサーなど、高い精度と安定性が求められる機器に利用されてきた。中でもFe-25Mn-3Mo合金は、広い温度範囲でヤング率の変化が極めて小さい「スーパーエリンバー」特性を示す。従来、エリンバー特性は強磁性体における磁歪と関連づけて説明されてきたが、この合金は反強磁性であり、従来のモデルだけでは十分に説明できない。そこで我々は、マルテンサイト変態と、それに関連した結晶格子の不安定性に着目した。

量子ビームで調べる原子の動きと構造

本研究では、高分解能非弾性X線散乱、中性子回折、中性子全散乱、磁化測定を組み合わせ、原子の動的な振る舞いと静的な局所構造を調べた。SPRING-8では、結晶中を波として伝わる原子の集団運動「フォノン」を観測した。また、JRR-3でマルテンサイト相と母相の割合や磁気状態を調べ、J-PARCおよび米国オークリッジ国立研究所(ORNL)では、平均的な結晶構造だけでは捉えにくい原子間距離や局所的な原子配置を解析した。これらの量子ビーム実験により、巨視的な弾性特性と原子スケールの現象との関係を検証した。

フォノンの軟化と原子スケールの局所歪み

非弾性X線散乱の結果、せん断弾性に関係する横波音響フォノンが、波長の長い領域でエネルギーの低下する「フォノン軟化」を示すことが分かった。この異常は広い温度範囲で観測され、母相の面心立方格子がせん断変形や正方晶的な歪みに対して不安定であることを示している。さらに中性子全散乱から、平均構造から予想される原子間距離と実際の局所的な原子間距離と

の間に、わずかなずれが存在することを見いだした。Fe-25Mn-3Moでは、この「局所構造と平均構造のずれ」が温度とともに変化し、その傾向がフォノン軟化と対応していた。結晶全体として周期性を保ちながら、内部には微小な局所歪みが分布していると考えられる。

研究の意義と今後

以上から、鉄-マンガン系エリンバー合金では、磁歪だけではなく、マルテンサイト変態に関連した格子の不安定性と原子スケールの局所歪みが、弾性率の特異な温度依存性に深く関係していることが分かった。マルテンサイト変態後も母相の一部に残る格子歪みがフォノン異常を引き起こし、エリンバー特性に寄与している可能性がある。本研究は、平均的な結晶構造だけでなく、原子スケールの「わずかな歪み」と格子振動に着目することの重要性を示している。今後、こうした局所的な構造不安定性を制御することで、温度変化に対してより安定した弾性特性を持つ、新しい高機能合金の設計につながることを期待される。

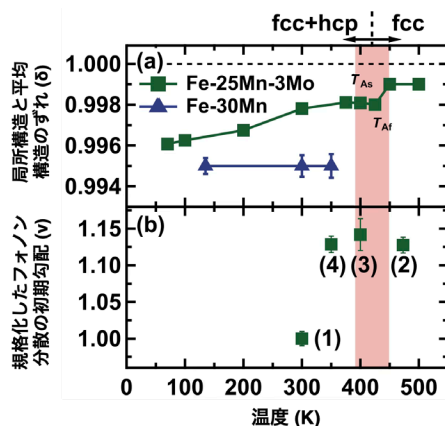


図 Fe-Mn系エリンバー合金における(a)局所的な原子配置のずれと、(b)フォノンから評価した弾性的性質の温度変化。両者の対応から、原子スケールの局所歪みと格子不安定性がエリンバー特性に関係することが示唆される。

<参考> 藤田教授の研究詳細はホームページをご覧ください。

<https://qblab.imr.tohoku.ac.jp/index.html>

格子系誘電率の高精度予測と高誘電体材料探索への応用

熊谷悠教授

材料評価・解析研究ユニット
複合機能材料科学研究部門

近年、半導体・エネルギー貯蔵デバイスの高性能化に伴い、トランジスタのゲート絶縁膜やコンデンサには、高誘電率 (high- κ) と大きなバンドギャップを両立する材料が求められている。しかし、フォノンや誘電応答を含む第一原理計算は計算コストが高く、大規模な材料探索には限界がある。そこで、機械学習によって物性を高速に予測するマテリアルズインフォマティクスが注目されている。

誘電率は電子寄与 (ϵ^{ele}) と格子系の寄与 (ϵ^{ion}) からなり、高誘電材料では主に ϵ^{ion} が支配的である。 ϵ^{ele} はバンドギャップとの相関が比較的明確で予測しやすい一方、イオン寄与はBorn有効電荷 (BEC) やフォノン特性に依存するため、高精度な予測が難しい。特に、高誘電率材料は学習データの範囲外に位置することが多く、モデルの汎化性能が課題となる。

本研究では、 ϵ^{ion} をBECとフォノン特性に分解して予測し、理論式に基づいて統合する「分解統合型機械学習モデル」を提案した。BECの予測には結晶構造の対称性を扱える等変グラフニューラルネットワーク (EGNN) を使い、フォノン特性の予測には学習済み機械学習ポテンシャルSevenNetを適用した。

図1に示すように、従来手法と比較してイオン寄与予測精度の大幅な向上が達成された。従来の直接予測モデルでは決定係数 $R^2=0.41$ にとどまっていたのに対し、本研究で提案した手法では $R^2=0.91$ にまで向上し、イオン寄与の予測において飛躍的な精度改善が確認された。

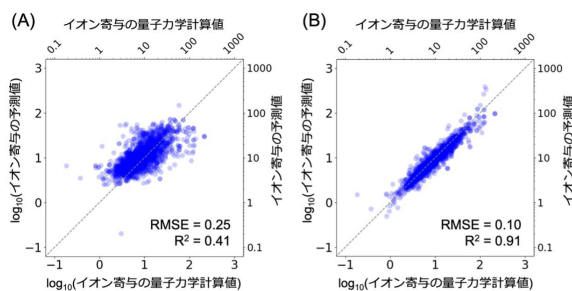


図1 イオン寄与の予測精度。直接予測 (A) に比べ、分解統合型モデル (B) で大幅に向上した。

〈参考〉 熊谷教授の研究詳細はホームページをご覧ください。

<https://kumagailab.imr.tohoku.ac.jp/>

次に、Materials Projectデータベース(MP)から取得した8,717種の酸化物に対してバーチャルスクリーニングを実施した。まず、SevenNetモデルを用いてフォノン計算を行い、動的に安定な構造のみを選別した。続いて、機械学習により予測された誘電率とMPに掲載されるバンドギャップにより、候補物質の絞り込みを行った。さらに、最終候補については第一原理計算による再評価を行うことで、予測結果の妥当性を検証した。

バーチャルスクリーニングの結果、最終的に31種類の高誘電率酸化物を同定することに成功した(図2)。これらの中には、訓練データセット中で最も性能が高かったKTaO₃を上回る性能を示すものも複数含まれており、本手法の探索能力の高さが実証された。また、選抜された候補の一部はすでに実験的に合成されていることが確認されており、モデルの予測が高誘電対材料の探索に有効であることを裏付けている。さらに、未合成あるいは誘電率未評価の材料も複数含まれており、今後の実験的検証により新たな高性能材料の発見につながる可能性が示された。

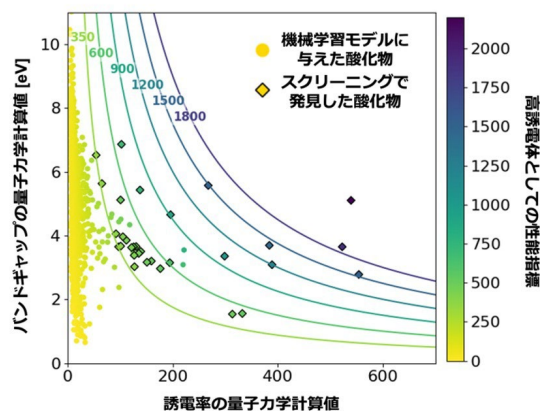


図2 8,717種の酸化物から31種の高誘電率候補 (◇) を特定した。

本成果: A. Takigawa, S. Kiyohara and Y. Kumagai, *Phys. Rev. X* 16, 021006 (2026).

先端エネルギー材料研究紹介2

先端エネルギー応用のためのナノ材料の理論的研究

Belosludov, Rodion V 准教授
材料評価・解析研究ユニット
機能性ナノポーラス材料

私の研究活動は、各種実用目的に対して最適な材料を選択するための実験支援計算機予測を主としています。新組成と有用特性を有する材料を理論的に設計するためには、材料の原子スケールでの化学的および物理的特性を十分に理解していることが重要です。実験結果に対しては理論的解釈が必要なことが多く、計算能力が過去10年間で急速に成長したスパコンによるコンピュータシミュレーションは、現在、材料研究に不可欠な研究ツールとなっています。以下に最近の実績を述べます。

バレートロンクスは、半導体中の電子の谷の自由度を情報処理に利用することを目的とした新規技術です。基礎となるバレー-スピン分割は、スピン-軌道結合によって設定され、外部磁場の印加または近接結合によって調整することができます。 NbS_2 は、電荷密度波状態からは発生しない超伝導を示す遷移金属ダイカルコゲナイド(TMD)ファミリーの最も興味深い材料の一種です。遷移金属イオンと隣接する NbS_2 層間のファンデルワールスギャップにインターカレートすると、種々の非自明なスピントクスチャを誘導する長距離磁気秩序を実現出来る可能性があります。セントアンドリュース大学およびマンチェスター大学と共同で、Vインターカレート遷移金属ダイカルコゲナイド $\text{V}_{1/3}\text{NbS}_2$ の電子構造を研究しています。実験結果を再現する我々のシミュレーション計算により、 $\text{V}_{1/3}\text{NbS}_2$ の表面における遍歴電子への局所的磁気モーメント結合が、この材料におけるバレースピンの分裂を制御するための強力な道筋を提供出来ることを明らかにしました。[*Nature Materials* **22** (2023) 459–465]

2D状態の探索は、その特性が最先端のデバイスアプリケーションにとって望ましく不可欠であるため、物性物理および材料研究で非常に多用されるようになりました。2次元電子ガス(2DEG)は非常に高いキャリア移動度を有し、基本的な物性現象の観察も可能としており、 Eu_xTaO_3 では、フラクショナルペロブスカイトによって誘起される正方晶場(TCF)により、低エネルギーキャリアが準2Dであることが示されました。

これらのキャリアは、近接効果を介して外部磁場によって間接的に制御されるトポロジカルに非自明なスピントクスチャを持っています。この事実から、このシステムは最先端スピントロニクスデバイスでのアプリケーション向けの準2DEGを実現するための理想的なプラットフォームになります。また、この準2D挙動が発散的なShubnikov-de Haas(SdH)振動と振動ゼーベック効果に関係することも示されました。これらは2つとも本材料構造の優れた実験的特徴です。[*Adv. Funct. Mater.* **33** (2023) 2300995]フェルミオロジーは、超伝導系におけるバンド構造の電子配置とフェルミ面の形状を説明します。すなわち、微視的な電子対形成メカニズムを決定し、エキゾチックな量子現象を生成する上で重要な役割を果たします。実験家との共同研究により、 $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ において、コヒーレンス長変調を用いた3次元から2次元への超伝導の次元クロスオーバーを実現するためのフェルミロジー工学戦略を実証しました。超伝導の最大 T_c を示す圧力で、正孔から電子への圧力誘起キャリア型遷移があり、加圧によるバンド構造進化とそれに対応するフェルミオロジー変調を示唆しています。我々の密度汎関数理論計算によれば、 $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ はフォノン媒介電子対によって形成されたBardeen-Cooper-Schrieffer(BCS)超伝導体であるため、 x の変化に伴って最大 T_c が減少する根本的なメカニズムは、立方晶リン格子にドーブされた重いヒ素元素とともに $\text{As}_x\text{P}_{1-x}$ のフォノンエネルギーが減少する超伝導のよく知られた同位体効果と類似しています。[*Science Advances* **9** (2023) eadf6758]

今後の研究予定には、実験グループや理論グループとの国際共同研究が含まれます。ナノ材料の電子特性を理解することにより、対象とする新規材料の複雑な構造と物性の関係を説明するための原子レベルの理解が得られます。以上の方策により、先端エネルギー応用のための新材料の実験的探索を支援することが可能となります。

E-IMR Summer Meeting 2026

開催日：2026年6月1日(月) 15:20ー17:20

開催場所:東北大学金属材料研究所 講堂

2026年 6月1日(月)に金属材料研究所講堂においてE-IMR Summer Meeting 2026を開催しました。このイベントは、本センターで実施されている研究活動をご紹介するとともに、研究者による講演と今後のセンター活動の意見交換を目的としております。研究発表の部では、山崎匠助教、Vu Thi Ngoc Huyen助教、西山智貴助教、李 弘毅助教、による研究活動紹介を行いました。

E-IMR Summer Meeting 2026 (エネルギー材料研究会) 2026.6.1 (月) 15:20-17:20	
時間	コンテンツ・講演者
15:20 - 15:25	開会あいさつ 市坪 哲 [E-IMRセンター長/金属材料研究所教授]
【研究発表】	
15:25 - 15:50	「MnAu ₂ エピタキシャル薄膜の異方性熱電現象」 山崎 匠 [金属材料研究所研究室/助教]
15:50 - 16:15	「Investigation of hole dopability in Oxygen 2p-Dominated Bands」 Vu Thi Ngoc Huyen [金属材料研究所宮坂研究室/助教]
【休憩・10分】	
16:25 - 16:50	「物質輸送と電荷輸送の協奏を指向した金属錯体分子格子の創出」 西山 智貴 [金属材料研究所宮坂研究室/助教]
16:50 - 17:15	「ホランド型二酸化マンガン正極におけるカチオン挿入の空間分布解析」 李 弘毅 [金属材料研究所市坪研究室/助教]
17:15 - 17:20	閉会あいさつ 市坪 哲 [E-IMRセンター長/金属材料研究所教授]

『2026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』の採択課題

先端エネルギー材料理工共創研究センターでは、東北大学内の若手研究チームを対象として、脱炭素社会の実現(2050カーボンニュートラルの達成等)に貢献することを目指す材料科学およびその関連分野の萌芽的研究を支援するため、『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』制度を設けています。2026年度は、金属材料研究所 市坪研究室YE XIATONG特任助教「マグネシウム蓄電池における界面反応制御に基づく界面設計指針の

構築」・金属材料研究所 加藤研究室 xiao bian学術研究員「脱合金ポーラス金属基材を用いたBi ナノ複合電極の創製と長寿命Na/Mg 合金負極への応用」・金属材料研究所 宮坂研究室Z H O U Z I Q I特任助教「CO₂吸脱着で異方的電荷移動を制御するTDET型キラルMOF」・金属材料研究所 宮坂研究室芳野遼助教「炭素フリー資源を用いた電気エネルギー生産系の創出」の4課題を採択しました。

ご案内

毎年12月に開催しているE-IMRワークショップを今年度も下記要領で開催いたします。講演内容の詳細についてはE-IMRのホームページでお知らせいたします、ぜひご参加ください。

【開催日】2026年12月 18日(金)

【開催場所】東北大学金属材料研究所講堂