

E - I M R

先端エネルギー材料
理工共創研究センター

Collaborative Research Center on Energy Materials

令和7年度 研究成果報告書

2025 Report on Research Activities

はじめに

エネルギー・環境問題への対応と持続可能な社会の実現に向けて、エネルギーの変換・貯蔵・利用を支える材料科学の重要性はますます高まっています。新たなエネルギー技術の創出には、個々の材料の高性能化にとどまらず、その基礎学理の解明から高度な評価・解析、さらにはデバイス化や社会実装までを見据えた分野横断的な研究が求められています。

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 月の発足以来、金属材料研究所におけるエネルギー材料研究の中核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、エネルギー変換、蓄エネルギー、材料評価・解析、複合モジュール・社会実装を柱とする研究体制のもと、理学と工学の融合による新たなエネルギー材料研究を推進しています。

2025 年度は、センター発足から 10 年という節目を迎えるとともに、研究体制と学術ネットワークのさらなる充実が進みました。センター内における若手研究者の成長と新たな研究者の参画に加え、University College London をはじめとする海外研究機関との連携、大阪公立大学との研究交流・連携体制の強化などを通じて、研究分野と組織の枠を越えた協働が一層広がりました。こうした連携は、エネルギー変換、蓄電池、水素、スピントロニクス、材料評価・解析など、多様な研究領域を結びつける本センターの特徴をさらに強めるものとなっています。

また、次世代を担う研究者の育成も本センターの重要な使命の一つです。従来から実施している若手研究者への研究助成に加え、2025 年度には大学院生を対象とした「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」制度を新たに創設し、5 名の学生を採択しました。研究者のみならず、これから研究の第一線を担う大学院生まで支援対象を広げることにより、研究活動と人材育成を一体的に推進する体制の充実を図りました。

各研究ユニットにおいては、基礎学理の探究から新材料・新機能の創出、先端計測・計算科学を活用した材料評価、さらには社会実装を志向した研究まで、多岐にわたる研究が展開されています。本成果報告書では、2025 年度に E-IMR センターを構成する研究者が取り組んだ研究活動とその成果を取りまとめました。本報告書を通じて、本センターにおける研究の広がりや相互のつながりを感じていただければ幸いです。

E-IMR センターは今後も、基礎研究と応用研究、理学と工学、さらには異なる研究分野・研究機関をつなぐ「共創」の場として、革新的なエネルギー材料・複合モジュールの創製を推進するとともに、次世代の材料科学を担う研究者の育成に取り組み、持続可能な社会の実現に貢献してまいります。



令和 8（2026）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. 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	11
2-3. 材料評価・解析研究ユニット	17
2-4. 複合モジュール・社会実装研究ユニット	25
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	31
3-1. マグネシウム蓄電池における酸化物正極・電解液界面の反応機構解明	31
3-2. Screening High-Performance Energy-Harvesting Semiconductors	33
3-3. 導電性と物質輸送が協奏する多孔性金属錯体格子の創出と光誘起キャリアによる 制御	35
3-4. ヘリカルスピнкаロリトロニクス現象の開拓	37
3-5. 受賞リスト	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	44
4-3. 知的財産権	45
5. 各種受賞・表彰	47
受賞リスト	47
6. 外部研究資金	49
6-1. 科研費(学術研究助成基金助成金／科学研究費補助金)	49
6-2. 科研費以外の競争的研究費	49
7. 主催した会議・研究会・ワークショップ	51
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 2025	51
7-2. 先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR) サテライトワークショップ	55
7-3. 先端エネルギー材料理工共創研究センター (E-IMR) 2025 年度ワークショップ	57
8. 職員及び運営委員名簿	63
令和7(2025)年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター名簿	63
令和7(2025)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	64

1. 体制図

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

佐藤敬浩

研究企画・運営担当



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
マイクロ波計算
(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)

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



材料評価・解析研究ユニット

教授(兼)

藤田 全基

量子ビーム
放射線電子系
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

宋 瑞瑞

脱成分(デアイオン
グ)
多孔質金属/合金
触媒



2. 研究成果報告

2-1. 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)、塚崎 敦 (兼)、BAUER, Gerrit Ernst-Wilhelm (兼 AIMR)
紅林 秀和 (兼)
准教授：岡本 範彦 (兼)、野澤 純 (兼)
助教：伊藤 啓太 (兼)、Troy Dion (兼)

【2025(令和7)年度の成果概要】

1. ヘテロエピタキシーによるコロイド結晶の核形成と成長の制御

コロイド結晶は、フォトニクス、センシング、触媒など幅広い応用が期待されることから、多様な研究分野で大きな注目を集めている。これらの機能を実現するためには、コロイド集合体の構造を精密に制御することが不可欠である。パターンニング基板などのテンプレート基板を用いてコロイド薄膜(エピタキシャル相)を成長させる「コロイドエピタキシー」は、広く用いられている手法である。しかしながら、従来のコロイドエピタキシーは、基板の格子間隔や対称性が、エピタキシャル相とよく一致する“ホモエピタキシー”にほぼ限定されてきた。

最近、当グループではこの技術を発展させ、基板とエピタキシャル相が異なる格子構造をもつ“ヘテロエピタキシー”を実現した[1]。このアプローチにより、従来のホモエピタキシーでは得ることが困難、あるいは不可能であった新しい構造体の作製が可能となった。例えば、コロイドカゴメ格子(図1a) [1] の作製に成功した。また、ヘテロエピタキシーはホモエピタキシーに比べて核形成速度を大幅に向上させるため、二元系コロイド結晶(図1b) [2] のように核形成速度が遅い系の研究にも特に有効である。核形成速度の向上により、準安定相を経由する結晶化経路を直接観察することも可能となる。

この利点を活かし、単一成分コロイド結晶において多形系を構築した [3]。ハードスフィア系でよく知られる bcc、fcc、hcp の多形とは異なり、本研究の系では、三次元的な島状集合体(α 相)と二次元の層状構造(β 相)という、互いに異なる二つの構造が現れる(図2)。これら多形の相対的安定性は、粒子間相互作用(枯渇引力)の強さを調整するポリマー濃度によって反転することが明らかとなった。本研究により、 α - β 相間の多形転移が、核形成-成長、溶解の過程で生じること、そしてそれらが2種類の固相転移と1種類の溶液媒介転移の計3つに分類できることが明らかになった。特に溶液媒介型の多形転移は、引力相互作用をもつコロイド系に特徴的であり、ハードスフィア系ではほとんど観察されない点は注目に値する。これらの多形転移によって、準安定相が中間体として働く非古典的な結晶化経路が生じることが明らかとなった。核形成過程においてはバルクの熱力学的安定性ではなく、準安定クラスターの安定性が多形転移を支配し、一方で成長過程では多形のサイズが重要な役割を果たすことを示した。これらの多形転移の発現確率が結晶化経路と最終結晶構造を決定づけることを実証した。

[1] J. Nozawa et al., Colloid Interface Sci. Commun. 64, 100815 (2025).

[2] J. Nozawa et al., Cryst. Growth Des. 25, 7309 (2025).

[3] J. Nozawa et al., Commun. Phys. 8, 134 (2025).

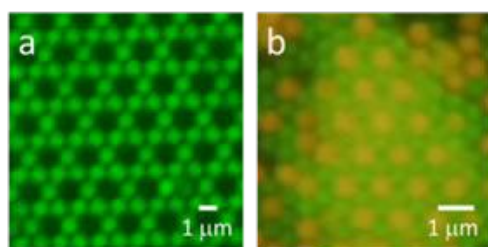


図1 a カゴメ格子コロイド結晶
b 二元系コロイド結晶

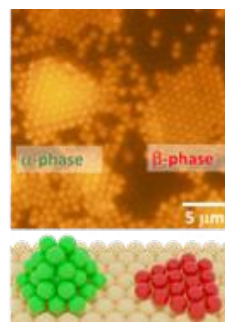


図2 ヘテロエピタキシーによって形成される、三次元島状構造(α 相)と層状構造(β 相)。

2. $\text{Cu}_{2.5}\text{Te}$ 低温相の結晶構造および熱電特性に関する研究

$\text{Cu}_{2.5}\text{Te}$ 系化合物は、低い格子熱伝導率と比較的高い電気伝導性を併せ持つことから、熱電材料として注目されている。しかし、狭い組成範囲に多くの低温相が存在し反応経路も複雑であり、従来報告されてきた結晶構造情報には多くの矛盾が含まれていた。そのため、熱電特性についても、相の同定が不十分なまま議論されてきたという問題があった。

本研究では、 $\text{Cu}_{2.5}\text{Te}$ 低温相の相平衡や結晶構造を明らかにするために、電子回折、原子分解能走査透過電子顕微鏡 (STEM)、粉末 X 線回折 (XRD)、SEM/EDS 分析、さらに第一原理計算を組み合わせた解析を行った。XRD は三次元的な結晶情報を平均構造として取得できる一方で、複雑な非化学量論構造では逆解析に依存するため、誤った構造モデルを導く可能性がある。これに対し、STEM は局所的な原子配列を直接観察できるが、本質的に投影像であるため三次元構造決定には限界がある。本研究では、これらの手法を相補的に用いることで、信頼性の高い構造解析を実現した (図 3)。電子回折による消滅則解析から、本相は菱面体晶対称性を有し、STEM 観察により $[\text{Te}-\text{Cu}-\text{Cu}-\text{Cu}-\text{Cu}-\text{Te}]$ から成る 6 層スラブ構造から構成されることが明瞭に示された。XRD 構造精密化の結果、外側層 Cu サイトには約 4% の構造空孔が存在し、組成は $\text{Cu}_{1.96}\text{Te}$ に近いことが明らかとなった。また、本化合物相は実質的にライン化合物として存在し、従来報告よりもやや Te-rich 側に偏った組成を示した。隣接するスラブ間では、Te-Te 結合が形成されており、これは van der Waals (vdW) 的性質を有している。特筆すべき点として、本化合物相は約 34 at.%Te と比較的 Te 濃度が低いにもかかわらず、層間 Te-Te 結合密度は代表的な vdW テルル化合物である Bi_2Te_3 (60 at.%Te) と同程度であることが分かった。このような高密度な vdW 的 Te-Te 結合に由来する大きな非調和性と Cu サイト空孔の存在が、本化合物相の低い格子熱伝導率 (2.2 W/m/K) の主要因であると考えられる [4]。

[4] Y. Zhang, N. L. Okamoto, and T. Ichitsubo, Chem. Mater. 37, 5365 (2025).

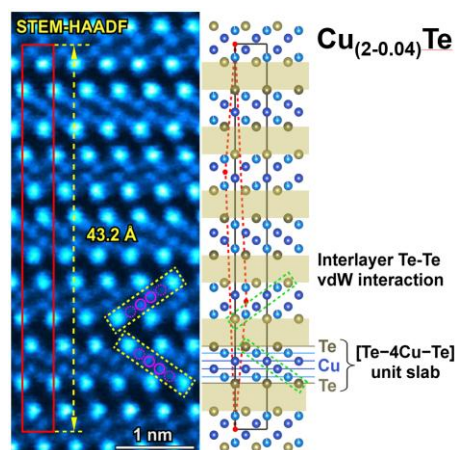


図 3 面内方向から観察した $\text{Cu}_{1.96}\text{Te}$ の STEM-HAADF 像と構造モデル。
Te-Te 層間結合部分には原子は存在しないことがわかる。

3. Fe₄N/MgO 多層構造における異常ネルンスト効果

磁性体の磁気モーメントと温度勾配の外積方向に電圧が発生する異常ネルンスト効果は、横型熱電変換という配置を活用した新たな環境発電技術として注目を集めている。異常ネルンスト係数(S_{ANE})は変換効率を決める因子であり、大きな S_{ANE} を示す材料の開発が重要な課題となっている。薄膜を多層膜化すると、界面におけるスピン軌道相互作用の増強や歪みの効果などにより、 S_{ANE} が増大することが報告されている。そこで本研究では、比較的大きな S_{ANE} を示す Fe₄N と MgO を交互に積層させた多層膜を作製し、 S_{ANE} の Fe₄N 層厚依存性を調べることで、 S_{ANE} が増大する積層構造を探索した。

分子線エピタキシー装置を用いて、電子線蒸着銃により Fe および MgO を、高周波ラジカル源により窒素を供給することで薄膜試料を作製した。MgO(001)基板上に 20 nm 厚の MgO バッファー層を成長した後、 $[\text{Fe}_4\text{N}(t)/\text{MgO}(3)]_{N=25/t}$ 多層膜および $\text{Fe}_4\text{N}(t)/\text{MgO}(3)$ 単層膜を成長した。多層膜における t は 2.5、3.6、4.2、5、6.3 および 12.5 nm とし、単層膜では 3.6、5 および 25 nm とした。試料の構造は反射高速電子回折および X 線回折により評価した。作製した薄膜試料をホールバー形状に微細加工し、異常ホール効果、ゼーバック効果、異常ネルンスト効果を測定することで、 S_{ANE} と横熱電係数(α_{xy})を評価した。

RHEED 観察および XRD 測定の結果から、すべての試料についてエピタキシャル成長が確認された。図 5 に、 S_{ANE} の Fe₄N 層厚依存性を示す。多層膜では、 t の低下に伴い S_{ANE} が増大する傾向が見られ、 $t = 3.6$ nm で $S_{ANE} = 1.64 \mu\text{V/K}$ の最大値が得られた。しかしながら、 $t = 2.5$ nm まで低減させると S_{ANE} は急激に低下した。格子定数の Fe₄N 層厚依存性および単層膜の結果と比較した結果、界面効果と歪みの効果の二つが S_{ANE} に寄与していることが示唆され、それらの機構によって S_{ANE} が極大となる層厚が決まっていると考えられる。

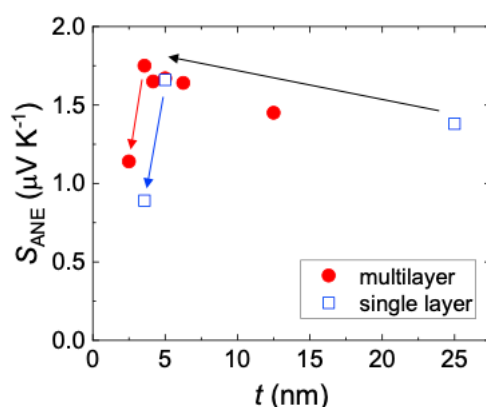


図 5 Fe₄N と MgO から構成される多層膜および単層膜における S_{ANE} の Fe₄N 層厚 t 依存性。

【今後の計画】

1. 固液界面現象の総理解に向けて、半導体物質、金属物質、およびコロイド物質を対象に、その場観察実験を継続して行う。また、化合物半導体バルク結晶の新規成長技術開発を行う。
2. 本研究で得られた正しい結晶構造情報を基に電子バンド構造の第一原理計算を行い、ゼーベック係数と電気伝導率の同時向上を図って元素置換を行う。また、 Ag_2Te や Cu_2S など一連の 2 対 1 カルコゲナイド(ヘミカルコゲナイド)相についても相平衡と構造-熱電物性相関を解明していく。
3. 第一原理計算と比較することで、多層膜における異常ネルンスト効果の増大の機構について理解の深化を図る。また、磁歪材料の開発に関しては、異なる結晶方位を有する Fe_4N 薄膜について磁歪特性を系統的に調べ、更なる磁歪の増大や抑制に関する指針を得る。

【論文リスト】

1. D. Shobana Priyanka, M. Srinivasan, K. Fujiwara
Ultra-low lattice thermal conductivity in 18 VEC quaternary Heusler alloys—Efficient thermoelectric materials. *Journal of Applied Physics*. **137**. 125001 (2025)
2. J. Nozawa, M. Sato, S. Uda, L.C. Chuang, K. Fujiwara
Multistep Crystallization of the Heteroepitaxially Grown Binary Colloidal Crystals. *Crystal Growth and Design*. **25**. 7309 (2025)
3. N. Akutsu, A. Kusaba, Y. Kangawa, K. Fujiwara, K. Maeda, Y. Akutsu
Faceted-rough surface on a crystallite's shape with nanometer-scale Kardar–Parisi–Zhang kinetic rough surfaces for interface-limited growth. *Applied Surface Science*. **708**. 163579 (2025)
4. R.K. Rasal, I. Badsha, K. Fujiwara, T. Devasena, M. Arivanandhan
Advanced ZrO₂–curcumin quantum dot nanocomposite for electrochemical sensing and nanofiber-based removal of xylene: mechanistic, statistical insights, and future outlook. *Chemical Papers*. . (2026)
5. J. Nozawa, M. Sato, S. Uda, K. Fujiwara
Polymorphic transitions during nonclassical nucleation and growth in the colloidal heteroepitaxy. *Communications Physics*. **8**. 134 (2025)
6. M. Sato, J. Nozawa
Role of small additive particles in hexagonal structure formation by colloidal heteroepitaxy. *Journal of Chemical Physics*. **163**. 34902 (2025)
7. M. Sato, J. Nozawa
Kagome Lattice Formation through Preliminary Structures in Colloidal Heteroepitaxy. *Journal of Physical Chemistry B*. **129**. 5054 (2025)
8. Shoki Kishida, Norihiko L. Okamoto, Ryoji Katsube, Akira Nagaoka, Isshin Sumiyoshi, Kensuke Nishioka, Tetsu Ichitsubo, Yoshitaro Nose
Ultrahigh Power Factor in n-type Chalcopyrite CdSnAs₂ Thermoelectrics: The Role of Supercooled Solidification. *ACS Applied Energy Materials*. **8**. 7475-7482 (2025)
9. Hiroki Yoshisako, Norihiko L. Okamoto, Kazuya Tanaka, and Tetsu Ichitsubo
Utilizing Surface Water Adsorption on Layered MnO₂ Nanosheets for Enhancing Heat Storage Performance. *Communications Chemistry*. **8**. 169 (2025)
10. Yuyang Zhang, Norihiko L. Okamoto, and Tetsu Ichitsubo
Crystal Structure of Cu₂-δTe with van der Waals-like Interlayer Te–Te Interaction Revealed by Scanning Transmission Electron Microscopy. *Chemistry of Materials*. **37**. 5365-5377 (2025)
11. Tomoya Kawaguchi, Hikari Sakurai, Shusuke Fukui, Xiatong Ye, Hongyi Li, Toshihiko Mandai, Norihiko L. Okamoto, and Tetsu Ichitsubo
Amorphous oxide cathode enabling room-temperature rechargeable magnesium batteries. *Communications Materials*. **6**. 203 (2025)
12. V. K. Kushwaha, T. Yamazaki, and T. Seki
Proof-of-Concept for Selective Magnetization Switching for Microfabricated Exchange-Spring Magnets by Spin Wave Excitation. *Adv. Physics Res.* Vol. **4**. Page 2400160-1-10 (2025)
13. Weida Yin, Keita Ito, Yusuke Tsubowa, Masahito Tsujikawa, Masafumi Shirai, Rie Y. Umetsu, and Koki Takanashi
Composition dependence of the anomalous Nernst effect in Fe₄-xMnxN and Fe₄-yCo_yN films. *J. Magn. Magn. Mater.* **628**. 173157-1-8 (2025)
14. 伊藤啓太、関剛斎
強磁性窒化鉄において磁気ひずみの巨大変調を実証—フレキシブルなスピントロニクス素子のための新材料として期待—。電子情報通信学会誌. Vo.**108** No.**9**. pp914-915 (2025)
15. Ivan Kurniawan, Keita Ito, Takeshi Seki, Keisuke Masuda and Yoshio Miura
Microscopic correlation between magnetostriction and magnetic damping. *Phys. Rev.* **B 112**. L100407-1-6 (2025)
16. Hiroto Masuda, Yuta Yamane, Takaaki Dohi, Takumi Yamazaki, Rajkumar Modak, Ken-ichi Uchida, Jun'ichi Ieda, Mathias Kläui, Koki Takanashi, and Takeshi Seki
Efficient Manipulation of Magnetic Domain Wall by Dual Spin-Orbit Torque in Synthetic Antiferromagnets. *Adv. Sci.* **12**. e14598-1-9 (2025)
17. Takumi Yamazaki, Yugo Ishitani, Katsuyuki Nakada, Tomoyuki Sasaki, Yasushi Endo, Koki Takanashi, and Takeshi Seki
Induction of large in-plane uniaxial magnetic anisotropy for Co-Fe-B-Pt thin Films by magnetic field annealing. *J. Appl. Phys.***138**. 233905-1-11 (2025)
18. Junwei Gu, Takumi Yamazaki, and Takeshi Seki
Oscillatory behavior of spin current transmission in epitaxial NiO(001) films with Pt underlayer thickness. *APL Mater.* **13**. 121110-1-10 (2025)

【主な国際会議】

1. Jun Nozawa
Mechanistic Insights and Control Growth of Colloidal Crystals. International Conference on Sustainable Technologies for Energy, Environment, and Health – 2025 (IC- STEEH-2025). September 17–19, 2025. None
2. Kotaro Hirose, Kensaku Maeda, Yukio Ishikawa, Kazuaki Konoike, Lu-chung Chuang, Keisuke Ohdaira, Kozo Fujiwara
In-situ observation of solid-liquid interface in GaSb directional growth. The 21st International Conference on Crystal Growth and Epitaxy (ICCGE-21). August 3-8, 2025. August 4-8, 2025
3. T. Yamazaki, N. L. Okamoto, T. Ichitsubo and T. Seki
Figure of merit of transverse thermoelectric conversion for magnetic thin film measured by all-in-one evaluation method. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies (IcAUMS 2025). 2025/4/21-24. 2025-04-21 00:00:00
4. Xiatong Ye, Hongyi Li, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo
Electrode-electrolyte interface stabilization for Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries with Oxide Cathodes. 76th ISE Annual Meeting. 2025/9/7-12. 2025-09-11 00:00:00
5. Norihiko L. Okamoto, and Tetsu Ichitsubo
Layered Manganese Dioxide as a Heat-Storage Material Utilizing Environmental Water Vapor. IMR-JBNU-KIST Joint Symposium. 2026-01-27 00:00:00. 2026-01-27 00:00:00
6. Hiroki Yoshisako, Norihiko L. Okamoto, Kazuya Tanaka, and Tetsu Ichitsubo
Cation Engineering of Water Intercalation in Layered Manganese Dioxide for Low-Temperature Thermal Energy Storage. TMS2026. 2026/3/15-19. 2026-03-18 00:00:00
7. Takumi YAMAZAKI
Figure of merit of transverse thermoelectric conversion for magnetic thin film measured by all-in-one evaluation method. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies. 2025.4.21-24. 2025.4.21
8. Keita Ito
Enhanced anomalous Nernst effect in Fe₄N films substituted by Pt and Pd atoms. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies. 2025.4.21-24. 2025.4.23
9. Xueyao HOU
Indirect Exchange Interaction for Perpendicularly Magnetized CoFeB Layers through W Interlayer. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies. 2025.4.21-24. 2025.4.28
10. Varun K. Kushwaha
Proof-of-concept for selective magnetization switching by spin wave excitation. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies. 2025.4.21-24. 2025.4.23
11. Takumi Yamazaki
Quantitative measurement of figure of merit for transverse thermoelectric conversion in Fe/Pt metallic multilayers. 12th International Symposium on Metallic Multilayers. 2025.7.13-18. 2025.7.16
12. Varun K. Kushwaha
Nonlocal Detection of Current-Induced Magnetization Dynamics in Microfabricated Ta/CoFe/n-GaAs Heterostructure. International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2025). 2025.9.15-18. 2025.9.17
13. Xueyao HOU
Tungsten-Mediated Interlayer Exchange Coupling System Revisited. MSSp2025: Materials Science and Spintronics for Sustainable Futures from Tohoku. 2025.11.04. 2025.11.05
14. Huameng Yu
Comprehensive study on magnetostriction for epitaxial Fe_{4-x}CoxN films. MSSp2025: Materials Science and Spintronics for Sustainable Futures from Tohoku. 2025.11.4-7. 2025.11.5
15. Takeshi SEKI
Recent Progress in Synthetic Antiferromagnetic Materials. International Workshop on "Spintronics Future Prospects". 2025.11.11-12. 2025.11.12

【主な国内会議】

1. 野澤 純、宇田 聡、荘 履中、藤原 航三
2 元系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. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/13

2. 夏 東東、莊 履中、藤原 航三、野澤 純
GaSb の固液界面不安定化の直接観察. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/12
3. 吉田 瑛紀、莊 履中、野澤 純、藤原 航三
Si の一方向凝固過程における固液界面形状に及ぼす不純物の影響. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/12
4. 莊 履中、野澤 純、藤原 航三
Growth and remelting of SiGe during directional solidification. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/11
5. 廣瀬光太郎、石川 幸雄、莊 履中、前田 健作、鴻池 一暁、大平 啓介、藤原 航三
一方向凝固で成長した GaSb 単結晶の Te 濃度分布の分析. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/11
6. 田中 尚暉、莊 履中、野澤 純、藤原 航三
純金の結晶成長過程で形成される固液界面形状のその場観察. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/11
7. 阿久津典子、草場彰、寒川義裕、藤原航三、前田健作、阿久津泰弘
KPZ 的に荒れたナノスケール表面から成るメゾスケール小結晶の平衡状態近傍の成長形と後退形. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/11
8. 阿久津典子、草場彰、寒川義裕、藤原航三、前田健作、阿久津泰弘
表面スティフネス・テンソルの結晶ファセット端での普遍的な飛び. 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54). 2025/11/11
9. 野澤 純、宇田 聡、藤原 航三
ヘテロエピタキシャル成長による 2 元系コロイド結晶の多段階核形成. Japan Geoscience Union Meeting 2025. 2025/5/25
10. 岡本範彦
廃熱エネルギー回収・再利用のための蓄熱材料研究. JFE フェスタ. 2025/5/15
11. 岸田 翔輝、岡本 範彦、勝部 涼司、永岡 章、住吉 壱心、西岡 賢祐、市坪 哲、野瀬 嘉太郎
CdSnAs₂ の凝固過程制御と熱電応用. 資源・素材学会 2025. 2025/9/4
12. 谷村 洋、本間 貴雄、岡本範彦、野瀬 嘉太郎、須藤 祐司、市坪 哲
強光励起時の SnSe の超高速光応答. 応用物理学会第 86 回秋季学術講演会. 2025/9/8
13. 岸田 翔輝、岡本 範彦、勝部 涼司、永岡 章、住吉 壱心、西岡 賢祐、市坪 哲、野瀬 嘉太郎
CdSnAs₂ の組織と熱電物性に対する凝固速度の影響. 応用物理学会第 86 回秋季学術講演会. 2025/9/10
14. 岡本範彦、市坪哲
水分子インターカレーションを利用した層状二酸化マンガンの構造と蓄熱特性. 日本セラミックス協会第 38 回秋季シンポジウム. 2025/9/19
15. 吉迫大輝、岡本範彦、田中万也、市坪哲
水分子の層間脱挿入と表面吸脱着の相乗効果による層状二酸化マンガンの低温蓄放熱特性の向上. 日本金属学会第 177 回秋期講演大会. 2025/9/19
16. 張 宇陽、○岡本範彦、市坪哲
Cu₂-δTe 系化合物の低温規則相群の結晶構造解明と熱電特性. 日本熱電学会第 22 回学術講演会. 2025/9/24
17. 岡本範彦、吉迫大輝、田中万也、市坪哲
水分子インターカレーションを利用した層状二酸化マンガ蓄熱材料の蓄熱特性の粒径および層間カチオン種依存性. 日本金属学会第 178 回春期講演大会. 2026/3/12

18. 山崎匠
サーモリフレクタンス測定により切り拓くスピнкаロリトロニクス. 日本伝熱学会東北支部
春季講演会. 2025.5.10
19. 関 剛斎
W 系人工反強磁性体におけるスピントロニクス機能. 令和 7 年 電気学会
基礎・材料・共通部門大会. 2025.9.3
20. Xueyao HOU
W-based Interlayer Exchange Coupling System Revisited. 2025 年 第 86 回 応用物理学会 秋季学
術講演会. 2025.9.8
21. Junwei GU
Observation of Unconventional Spin Current Transmission in Epitaxial NiO(001) Films Probed by
Thermo-spin Effects. 2025 年 第 86 回 応用物理学会 秋季学術講演会. 2025.9.8
22. 山崎 匠
Modulation of antiferromagnetic domain structure of
epitaxial NiO(001) films by inserting Pt underlayer. 2025 年 第 86 回 応用物理学会 秋季学術講演
会. 2025.9.8
23. 伊藤啓太
Fe₄N/MgO 多層膜の異常ネルンスト効果に対するバルク・界面寄与の分離 . 第 49 回日本磁
気学会学術講演会. 2025.9.17
24. 関 剛斎
タングステンを介した層間交換結合系の再考. 日本金属学会 2025 年秋期講演大会. 2025.9.19
25. 石田真輝
Fabrication and characterization of helimagnetic MnAu₂(001) epitaxial thin films. 2026 年第 73 回
応用物理学会春季学術講演会. 2026.3.15
26. Huameng Yu
Comprehensive investigation on magnetostrictive properties of epitaxial Fe₄-xCo_xN films. 2026 年第
73 回応用物理学会春季学術講演会. 2026.3.15
27. 鈴木駿斗
Significant Modulation of Interlayer Exchange Coupling in Synthetic Antiferromagnets by Ion
Irradiation. 2026 年第 73 回応用物理学会春季学術講演会. 2026.3.15
28. 関 剛斎
Spin-Pumping-Induced Spin Accumulation and Non-local Spin Detection in Microfabricated
Pt/CoFe/n-GaAs Structures. 2026 年第 73 回応用物理学会春季学術講演会. 2026.3.17

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）、高村 仁（兼 工学）

准 教 授：佐藤 豊人（兼）

助 教：李 弘毅（兼）、Ziqi Zhou

【2025(令和7)年度の成果概要】

酸素のスピンを感ずる多孔性層状磁石：協同現象による連続的な相転移変化を観測（宮坂・Zhou グループ）

金属—有機構造体（MOF）は、多孔性と長距離磁気秩序を併せ持つことが可能であり、物質輸送を介した磁気相の精密な変調を実現してきた。多くのゲスト応答性 MOF 磁石では、ゲスト分子の導入が格子に電子的または構造的摂動を与え、二元的な ON/OFF 型の相転移を誘起する。しかし、ゲストの挿入量に応じたドメイン形成や協同現象を伴う連続的な磁気相転移の制御については、これまで十分に議論されてこなかった。一方、酸素（O₂）のようなスピン活性ゲストは、磁気交換経路を直接媒介することにより、磁気秩序の連続的なかつ可制御な進化を実現し得る。しかし、ゲスト吸着とスピン媒介の動的磁気変遷は依然として未解明であった。本研究では、反強磁性層間に存在するボトルネック状の孤立細孔に O₂ 二量体が閉じ込められることで、結晶構造の大きな変化を伴うことなく、強磁性から反強磁性への連続的な磁気相転移が誘起されることを実証した[1]。さらに、O₂ の挿入量が反強磁性ドメインの協同的成長に対応することを明らかにした。密度汎関数理論（DFT）計算の結果、反強磁性的に結合した O₂ 二量体が隣接するフェリ磁性層間の磁気交換を媒介し、反強磁性秩序を安定化させていることが示された。

[1] J. Zhang, Y. Cao, W. Kosaka, Y. Kitagawa, H. Miyasaka, Cooperative Magnetic Phase Evolution via Oxygen Spin Coupling in a Layered Metal–Organic Framework, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 35742–35754. <Open Access> DOI: 10.1021/jacs.5c12038

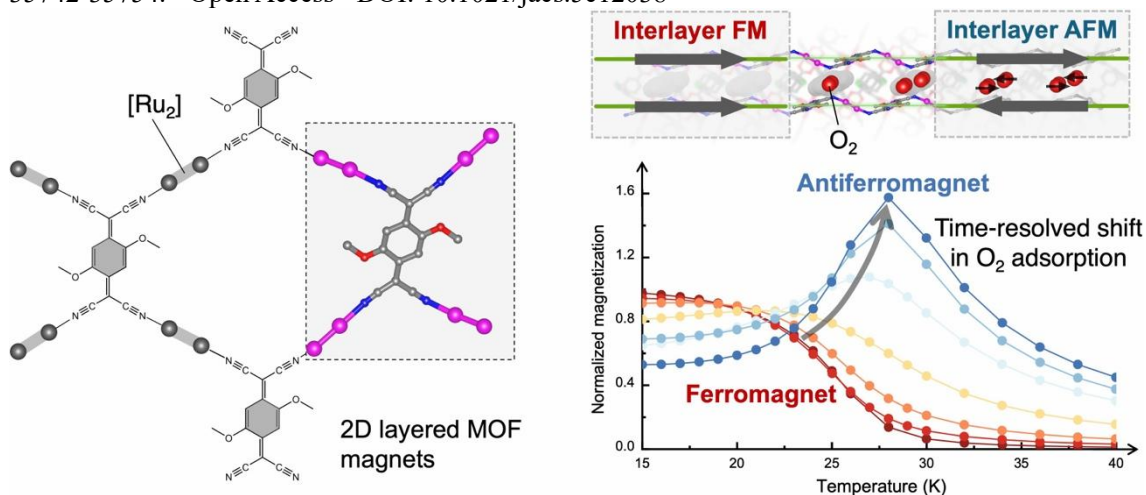


図 1. 二次元層状 MOF 磁性体の骨格と酸素吸着による連続的な磁気転移の推移。

新規水素吸蔵材料の開発（折茂・佐藤グループ）

水素貯蔵材料は、高压水素貯蔵や液体水素貯蔵に比べて、コンパクトな水素貯蔵が実現でき、金属間化合物 LaNi_5 が実用化されている。一方、その課題は、 LaNi_5 に代わる新たな材料開発である。一般的に水素貯蔵材料は、10 MPa 以下の水素ガス加圧下で水素吸蔵・放出が評価されるが、水素は、1 GPa 以上で化学ポテンシャルが急激に上昇する。即ち、1 GPa 以上で水素と材料の反応が促進されるため、この圧力領域で水素吸蔵反応実験は、新たな材料探索につながる。

私たちは、実用化されている水素貯蔵材料 LaNi_5 の水素吸蔵反応を 1 GPa 以上で観測した結果、 LaNi_5 の水素吸蔵反応後に新規金属間化合物 LaNi_2 と新規 LaNi_2H_3 が形成されることを明らかにした[2]。新規 LaNi_2 と LaNi_2H_3 の結晶構造は（図 2）、放射光 X 線回折と中性子回折で解明され、三方晶の結晶構造を有し、一部の水素は Ni 周りに配位していた。

[2] T. Sato, R. Utsumi, Y. Nakahira, H. Saitoh, T. Honda, S. Orimo, Crystal Structure Investigations of LaNi_2H_x ($x = 0$ and 3.08 with Metal Atoms in AlB₂ Units) and $\text{LaNiH}_{1.01}$, *Inorg. Chem.* 64, 21534–21540, (2025).

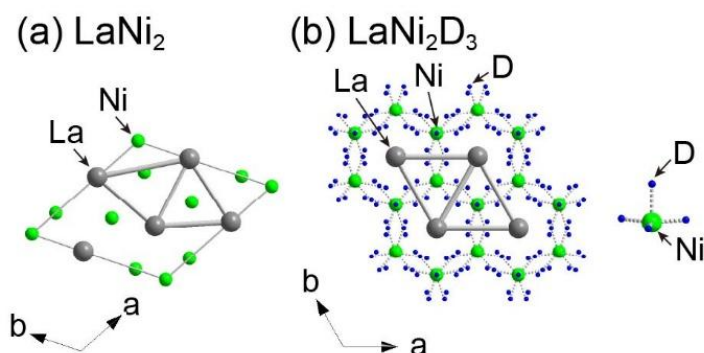


図 2. (a) LaNi_2 、(b) LaNi_2H_3 の結晶構造。灰：La、緑：Ni、青：重水素を示す。

Ba-Zr 系プロトン伝導体の焼結性とプロトン伝導性に及ぼす CuO 添加効果（高村グループ）

Ba-Ce-Zr 系プロトン伝導体は、高い化学的安定性とプロトン伝導性から注目されているが、焼結性の低さが課題であり、通常、緻密化のために遷移金属酸化物等の焼結助剤が添加される。しかし、焼結助剤が焼結メカニズムやプロトン伝導性に与える影響の包括的な理解は得られていない。そこで本研究では、焼結助剤として CuO が添加されたプロトン伝導体 $\text{BaCe}_{0.4}\text{Zr}_{0.4}\text{Y}_{0.1}\text{Yb}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ (BCZYY441) 中の Cu の存在状態を分光学的手法で検討し、 CuO が焼結性、プロトン伝導性に与える影響を解明することを目的とした。

Cu 固溶試料における ESR 分光では、 $g_{\parallel}=2.317$, $A=583.6$ MHz であった[3]。A 値と g 値の線形関係より BCZYY441 中に固溶した Cu 周りの酸素の配位数は、Fig. 1 に示すように、4 配位であった。このことから、固溶した Cu は A サイトに隣接した格子間位置に固溶

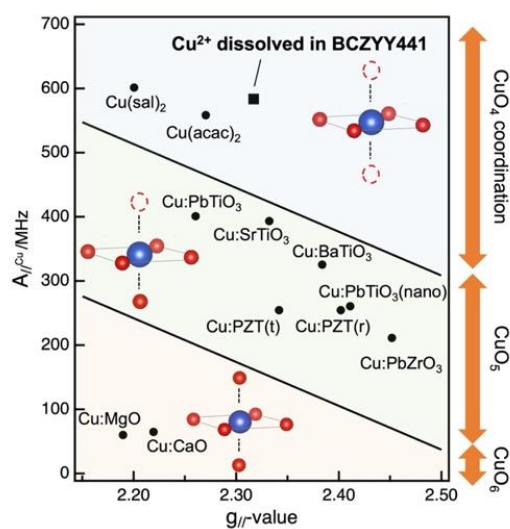


Fig. 1. Linear dependencies of $g_{\parallel}$ vs. $A_{\parallel}$ for varying the oxygen coordination of Cu^{2+} centers with indicated defect structure, in which the ESR data of diffusion couple heat-treated at 900 °C, along with those of Cu in various oxides cited from Eichel *et al.*, are plotted⁴.

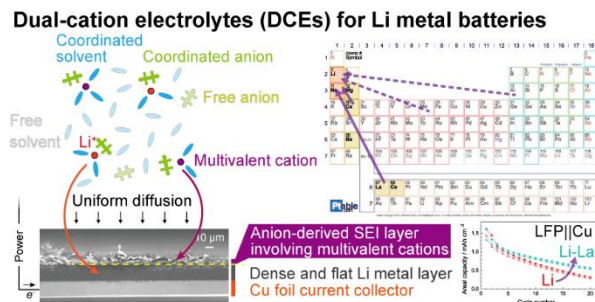
していると示唆された。Cu が格子間に固溶し Ba が粒界に排出されることで、液相が形成し、焼結が促進されると考えられる。一方、Cu 固溶により生じるホール欠陥によりプロトン輸率は 0.2 に減少した。

[3] Yuto Unaki, Hiroaki Kawamori, Shohei Kobayashi, Norikazu Osada, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa and Hitoshi Takamura, “Spectroscopic analysis of Cu^{2+} dissolved in Y- and Yb-doped barium zirconates and its impact on sinterability and proton conduction”, *J. Mater. Chem. A*, 13 (2025) 30427–30435.

多価カチオン添加によるリチウム金属負極界面の安定化と高耐久化機構の解明（李・市坪グループ）

本研究では、実験解析と第一原理計算・分子動力学計算を組み合わせることで、リチウム金属負極用電解液への多価カチオン塩（ Ca^{2+} , Ba^{2+} , La^{3+} , Ce^{3+} など）の導入による電極・電解液界面の安定化機構を体系的に解明した[4]。これらの多価カチオン塩の添加は、 Li^+ 周囲の溶媒和構造が変化し、アニオン直接配位型の溶媒和構造（CIP）が増加することで、析出時の電極界面における Li 枯渇が抑制され、平坦かつ緻密な Li 金属層形成が可能となった。また、特に LaTFSI_3 などランタノイド塩添加系では、多価カチオンの混入により、固体電解質界面（SEI）中に La-O および La-F 結合が形成されることで、SEI の化学的・構造的安定性が向上し、 $\text{Cu}||\text{LiFePO}_4$ 全電池においても内部抵抗増加の抑制とサイクル特性向上を確認した。

[4] H. Li, T. Ichitsubo et al, *J. Mater. Chem. A*, **2025**, 13, 3619.



図

【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・Zhou G）。
- 電荷移動型キラル MOF の開発とエネルギー貯蔵の検討（宮坂・Zhou 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・Zhu G）。
- 今後は、適度な圧力領域で得られる高い水素貯蔵量を有する材料探索に加えて、汎用的な金属で構成される新規水素貯蔵材料を探索する（折茂・佐藤 G）。
- プロトン輸率を減少させない焼結助剤の開発（高村 G）
- 焼結助剤の添加量抑制と除去方法の開発（高村 G）
- プロトン伝導セル(PCFC/PCEC)の開発（高村 G）
- 力学特性評価による Li 金属負極の電極・電解液界面の構造安定性解明（李・市坪 G）
- Li 金属負極の長寿命化に向けた電解液濃度・組成依存性解明（李・市坪 G）
- Na, Mg など資源制約が少ない新規蓄電池系への展開（李・市坪 G）

【論文リスト】

1. Itaru Oikawa, Akihiro Fujimaki, Akihiro Ishii, Fuminori Tamazaki, Hiroshi Okamoto, Hitoshi Takamura
Four and six-coordinated Al in a fluorite-type structure: A key to the stabilization of Sc₂O₃-stabilized ZrO₂. *Solid State Ionics*. **430**. 116997. (2025)
2. Yuto Unaki, Hiroaki Kawamori, Shohei Kobayashi, Norikazu Osada, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa and Hitoshi Takamura. Spectroscopic analysis of Cu²⁺ dissolved in Y- and Yb-doped barium zirconates and its impact on sinterability and proton conduction. *J. Mater. Chem. A*. **13**. 30427–30435. (2025)
3. Keita Kurigami, Akihiro Ishii, Itaru Oikawa, and Hitoshi Takamura. Design of High-Energy Anode for All-Solid-State Lithium Batteries – A Model with Borohydride-Based Electrolytes. *Adv. Mater. Interface*. e00781. (2025)
4. 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. (2025)
5. 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)
6. 李弘毅. 市坪哲. リチウム蓄電池用アルミニウム箔負極の体積ひずみ緩和と耐久性向上.
電気化学. **93**. 223-226. (2025)
7. Tomoya Kawaguchi, Hikari Sakurai, Shusuke Fukui, Xiatong Ye, Hongyi Li, Toshihiko Mandai, Norihiko L Okamoto, Tetsu Ichitsubo. Amorphous oxide cathode enabling room-temperature rechargeable magnesium batteries. *Communications Materials*. **6**. 203. (2025)
8. Qingxin Liu, Honoka Nemoto, Wataru Kosaka, and Hitoshi Miyasaka. Guest-Induced Reversible Phase Conversion via Spin Frustration Relief in Spin-Intercalated Layered Antiferromagnets. *Advanced Science*. **12**. e07957. (2025)
9. Jun Zhang, Yang Cao, Wataru Kosaka, Yasutaka Kitagawa, Hitoshi Miyasaka. Cooperative Magnetic Phase Evolution via Oxygen Spin Coupling in a Layered Metal–Organic Framework. *Journal of the American Chemical Society*. **147**. 35742–35754. (2025)
10. Ke Ji, Wataru Kosaka, and Hitoshi Miyasaka Magnetostuctural Correlations in Charge Transfer Ionic Chains Derived from Assembly of Paddlewheel Diruthenium (II, II) Complexes and 7,7,8,8-Tetracyano-p-quinodimethane Derivatives. *Crystal Growth & Design*. **25**. 6745–6753. (2025)
11. Wataru Kosaka, Taku Kitayama, Tomoka Shimada, Yoshihiro Sekine, and Hitoshi Miyasaka. Synthesis of Trans-Heteroleptic Carboxylate-Bridged Paddlewheel-type Diruthenium (II,II) Complexes with Poly Aromatic Hydrocarbon Carboxylate. *Chemistry Letters*. **54**. upaf065. (2025)
12. 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)
13. Haruka Yoshino, * Masaki Saigo, Takumi Ehara, Kiyoshi Miyata, Ken Onda, Jenny Pirillo, Yuh Hijikata, Shinya Takaishi, Wataru Kosaka, Ken-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)
14. 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. *The Journal of Physical Chemistry C*. **129**. 2865-2873. (2025)
15. A. Chari, T. Sato, S. Bercha, J. S. R. Fernando, A.A. Gorzkowska-Sobas, W. M. Tucho, O. Zavorotynska, S. M. Chavan. Direct synthesis of sulfonic acid functionalized zirconium metal-organic framework. *Microporous and Mesoporous Materials*. **392**. 113639. (2025)
16. T. Sato, R. Utsumi, Y. Nakahira, H. Saitoh, T. Honda, S. Orimo. Crystal Structure Investigations of LaNi₂H_x (x = 0 and 3.08 with Metal Atoms in AlB₂ Units) and LaNiH_{1.01}. *Inorganic Chemistry*. **64**. 21534-21540 (2025)
17. Y. Ohashi, T. Sato, K. Miwa, K. Ikeda, K. Sakaki, S. Orimo. Synthesis, crystal structure, electronic state, and reversible hydriding/dehydriding reactions of light metal-based YMgAl and its hydride. *International Journal of Hydrogen Energy*. **215**. 153884. (2025)

【主な国際会議】

1. Nathawuth Wongwutcharanukoun Surface Oxygen Exchange Rate of Co-Doped $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ for LT-SOC Electrodes. 2025 Materials Research Society Spring Meeting & Exhibit. 2025/4/9
2. Hitoshi Takamura Dissociative Oxygen Adsorption Rates of Co-Based Electronic and Mixed Conducting Oxides—Which is Better? 2025 Materials Research Society Spring Meeting & Exhibit. 2025/4/10
3. Hitoshi Takamura Local Structure and Dynamics of Protons, Holes and Hydride Ions in Perovskite-Type Oxides. The 21st International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL2025) . 2025/6/25
4. Yume Okazaki Low-Temperature Cation Ordering in $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ Triggered by Fe Dissolution. The 21st International Conference on Diffusion in Solids and Liquids (DSL2025) . 2025/6/26
5. Hitoshi Takamura Protons, Holes, and Hydride Ions in Perovskite-Type Oxides : Do they coexist?. Petite XIII : An International Workshop on the Defect-Chemical Nature of Solids. 2025/9/12
6. Hongyi Li Degradation Mechanisms and Durability Enhancement of Aluminum-Foil Anodes for Rechargeable Lithium Batteries. 76th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry. 2025/9/10
7. Miyasaka Hitoshi Chemo-Switchable MOF Magnets. The 7th International Conference of Asian Union of Magnetism Societies (IcAUMS2025).2025/4
8. Miyasaka Hitoshi Nature of Magnetic Phases in Spin-Intercalated Layered MOF Magnets. Advances in Coordination Chemistry 2025: A Bridging Symposium Between Japan and Korea.2025/8
9. Miyasaka Hitoshi Magnetic Sponges for Switching. 14th China-Japan Joint Symposium on Metal Cluster Compounds.2025/10
10. Miyasaka Hitoshi Magnetic Phase Evolution via O2 Spin Coupling in Layered Metal-Organic Framework Magnets. 10th Asian Conference on Coordination Chemistry (ACCC10).2025/10
11. Miyasaka Hitoshi Phase Switching via Spin Frustration in Spin-Intercalated Layered MOF Antiferromagnets. 19th International Conference on Molecular Magnetism 2025.2025/10
12. Miyasaka Hitoshi Phase Switching via Spin Frustration in Spin-Intercalated Layered MOF Magnets. International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2025 (Pacifichem2025).2025/12
13. T. Sato, S. Orimo Neutron scattering studies of intermetallic compounds as hydrogen storage materials. International Symposium on Hydrogen and Energy Storage 2025 (iSHES'25). 2025/10/29
14. 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, hydrogen storage properties and crystal structure of AB_3 -based alloys, (Y, Mg) Co_3 . 3rd International Conference on Frontier Materials (ICFM2025). 2025/4/20

【主な国内会議】

1. 宇那木 優斗 Ba-Zr 系プロトン伝導体の焼結性とプロトン伝導性に及ぼす CuO 添加効果. 2025 電気化学会秋季大会. 2025/9/4
2. 佐藤 伶 イットリア安定化ジルコニア固体電解質のレーザー焼結 . 2025 電気化学会秋季大会. 2025/9/4
3. 佐藤 諒芽 高圧酸化による Ba-Zr 系プロトン伝導体への電子正孔の導入とその存在状態 . 第 51 回固体イオニクス討論会. 2025/11/27
4. 岡崎 由芽 Fe イオン固溶により誘起される Ce-Zr 系酸化物の低温陽イオン規則化とその機構. 第 64 回セラミックス基礎科学討論会. 2026/1/10
5. 上山 歩巳 PLD 法による SiC 薄膜の作製とその電気化学特性. 第 64 回セラミックス基礎科学討論会. 2026/1/11
6. 加藤 杏菜 三次元頂点共有ポリアニオン骨格を有する Li_3AlN_2 のリチウムイオン脱挿入反応. 第 64 回セラミックス基礎科学討論会. 2026/1/11
7. 岡崎 由芽 Ce-Zr 系酸化物における Fe イオン高速拡散と低温陽イオン規則化. 電気化学会第 93 回大会. 2026/3/18
8. 八重樫 樹 BaZrO_3 における水素化物イオンの安定性に及ぼすアクセプター種の影響. 電気化学会第 93 回大会. 2026/3/18
9. 山岡 尚樹 トポケミカル反応によるペロブスカイト型酸化物バルク体への水素化物イオン導入 . 電気化学会第 93 回大会. 2026/3/19
10. 宮坂 等 低次元分子磁性体における物質輸送と磁気制御. 第 7 回固体化学フォーラム研究会.
11. 宮坂 等 分子格子 MOF の可能性：物質輸送と磁気制御. 第 10 回岩崎コンファレンス 「磁性体がもたらす多様性と可能性」 .
12. 宮坂 等多孔性磁性体の酸素吸着による 連続的磁気相変換. E-IMR ワークショップ. 2025/12/3
13. 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 and crystal structure of a new La-Ni hydride. 日本金属学会 2025 年秋期(第 177 回)講演大会. 2025/9/19

2-3. 材料評価・解析研究ユニット

構成員

教 授：藤田全基（兼）、熊谷悠（兼）、高橋幸生（兼 SRIS*）、

准教授：BELOSLUDOV, Rodion

SRIS*…国際放射光イノベーション・スマート研究センター

【2025(令和7)年度の成果概要】

量子ビーム解析による Fe-Mn 系エリンバー合金の格子不安定性と局所構造の解明[1-3]

本研究では、Fe-Mn 系エリンバー合金の異常弾性挙動の微視的起源を明らかにするため、高分解能非弾性 X 線散乱によるフォノン分散測定に加え、中性子回折および中性子全散乱を用いた平均構造・局所構造解析を実施した。分担部分においては、特に中性子散乱を用いた構造評価を通じて、バルク物性だけでは識別が難しい格子不安定性と局所歪みの寄与を抽出し、量子ビーム複合解析の有効性を示した。

その結果、面心立方相における横波音響フォノンのゾーン中心近傍で非線形分散が観測され、 $(C_{11}-C_{12})/2$ に対応する弾性不安定性が広い温度領域で持続することが明らかとなった。また、磁化測定と中性子回折の結果から、当該合金のエリンバー特性は強磁性磁歪に起因するものではなく、マルテンサイト変態に結びついた格子不安定性に本質があると示された。さらに、中性子全散乱から得られた二体分布関数により、平均構造では捉えられない局所構造の乱れが検出され、静的局所歪みを含む多階層的な構造不均一性が示唆された。

本成果は、量子ビームを相補的に組み合わせることで、フォノン異常・平均構造・局所構造を一体として評価できる解析基盤を実証した点に意義がある。特に、中性子回折および全散乱による構造情報は、機能性合金の異常応答を理解するうえで不可欠であり、基盤 S における分担研究として、量子ビーム融合型の材料機能解明を前進させる成果となった。今後は、こうした多面的解析を他の複雑合金系へ展開することで、局所構造に立脚した機能性材料研究の深化が期待される。

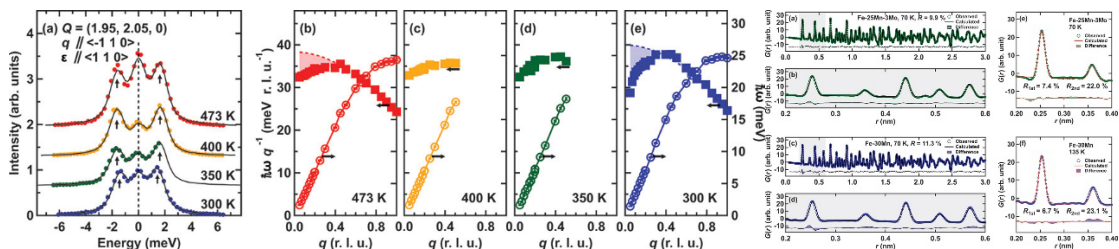


図 1：Fe-Mn 系エリンバー合金における横波音響フォノン分散と局所構造解析結果。[1]より転載。

また、本研究では、中性子散乱を用いた材料研究の高度化に向けて、J-PARC において小型 in-situ ^3He 中性子スピフィルターの開発を進めた [2]。本装置は、実験条件下で中性子偏極を制御・利用するための基盤技術であり、磁性材料やスピダイナミクスの研究における偏極中性子実験の利便性向上に資する。今後、磁気構造や磁気揺らぎと格子自由度の相関を調べるうえで、量子ビーム解析の適用範囲を広げる技術的基盤となる。さらに、ファンデルワールス反強磁性体 FeGa_2S_4 における特異なスピダイナミクスを調べ、低次元磁性体におけるスピ揺らぎや磁気相関の特徴を明らかにした [3]。この成果は、局所構造、格子自由度、磁気自由度が相互に結合した複雑材料系を理解するうえで重要であり、Fe-Mn 系エリ

ンバー合金で得られた格子不安定性・局所歪みの知見を、磁性層状物質や量子材料へ展開する基盤となる。

欠陥形成エネルギーを高精度の予測する機械学習手法の開発[4-6]

近年、第一原理計算と機械学習を融合し、計算機を用いて新材料の発見につなげる研究が産学を問わず活発に進められているが、その多くは欠陥のない理想結晶を前提としている。一方、実材料中に必ず存在する欠陥は、電氣的・光学的・機械的特性に大きな影響を及ぼす重要な要素であり、その理解は実用材料の開発に不可欠である。しかし、欠陥形成エネルギーを量子力学計算によって評価するには膨大な計算資源を要するため、この高い計算コストが優れた実材料の探索を妨げる大きな要因となってきた。そこで本研究では、人工知能(AI)を活用し、結晶構造の情報のみから非金属中の欠陥形成エネルギーを高精度に予測する新たな手法を開発した。本手法は、結晶構造をグラフとして表現するグラフニューラルネットワーク(GNN)を基盤とし、中性および正に帯電した酸素空孔など、異なる電荷状態の欠陥を単一のAIモデルで統一的に扱える点に特徴がある。従来は電荷状態ごとに個別の計算とモデル構築が必要であったが、本研究では電荷の違いを共通の尺度で表現し、その情報を結晶構造とともに学習させることで、多様な欠陥状態の形成エネルギーを一括して予測可能とした。その結果、構造情報のみを入力とする汎用欠陥予測モデルとして世界最高水準の精度を実現し、従来は数日を要していた欠陥形成エネルギー計算を瞬時にできる可能性を示した。

さらに本研究では、このAIモデルを用いて約2,000種類の酸化物材料を対象としたp型半導体材料の探索を実施した(図X)。まず、酸化物のp型化を阻害する主因である酸素空孔によるホール補償が起こりにくい材料を、本研究で開発したAIモデルによりスクリーニングし、その後、有害元素および希少元素を含む材料を除外した。加えて、量子力学計算により光吸収係数およびホール有効質量を評価することで、可視光をよく吸収し太陽電池用光吸収体として有望な材料や、高い透明性とp型伝導が期待される透明導電酸化物として有望な材料を抽出した。以上の成果は、欠陥を含む「現実の材料」を対象として、AIにより高速に予測・設計する新たな道を切り開くものである。

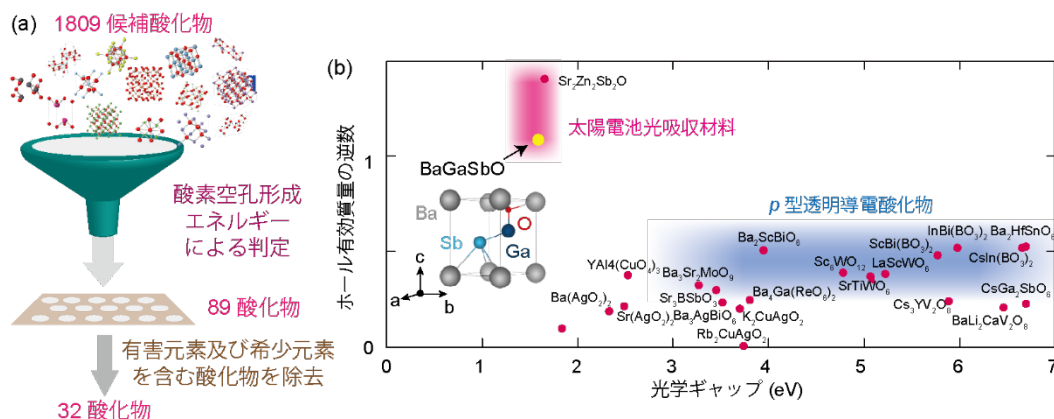


図2. (a) 本研究におけるp型酸化物の仮想スクリーニングの概略図。(b) スクリーニングにより抽出した32種の酸化物について、横軸に光学ギャップ、縦軸に自由電子質量を単位とした平均ホール有効質量の逆数をプロットした結果。なお、太陽電池用光吸収材料として有望な酸化物候補をピンク色、透明導電性酸化物として有望な候補を青色でそれぞれ示している。

3. オペランドX線ナノ化学イメージングによるリチウムイオン電池正極反応の多次元解析[7-10]

リチウムイオン電池の高性能化には、電極内部で進行する不均一な電気化学反応の理解が不可欠である。特に、正極は活物質、導電助剤、バインダーからなる複合構造を有しており、電極スケールから粒子スケールに至る階層的な構造と化学状態の不均一性が電池性能を大きく左右する。そのため、動作環境下（オペランド）において構造と化学状態を同時に観察する手法の確立が求められている。本研究では、代表的な正極材料である $\text{LiNi}_{0.6}\text{Mn}_{0.2}\text{Co}_{0.2}\text{O}_2$ (NMC622) を対象とし、フルフィールド透過型 X 線顕微鏡 (TXM) と X 線吸収微細構造 (XAFS) を組み合わせたオペランド X 線ナノ化学イメージング (TXM-XAFS) により、電極から粒子スケールに至る多次元解析を実現した。さらに、専用のオペランドセルの設計と、X 線照射損傷を抑制するための測定プロトコルを構築することで、高分解能かつ高信頼性のデータ取得を可能とした。その結果、充電過程における Ni の酸化状態（価数）分布は粒子ごとに大きく異なり、電極内に顕著な反応不均一性が存在することを明らかにした。特に、反応の進行はセパレータからの距離や電極構造に強く依存しており、電極内のイオン輸送環境が反応分布を支配する主要因であることが示唆された。さらに、2 次元および 3 次元計測データを統合し、ガウス混合モデルを用いたデータクラスタリング解析を適用することで、反応に寄与しない不活性領域を定量的に抽出した。その結果、不活性領域は単なる幾何学的要因だけでなく、Ni と Li のカチオン混合に起因する局所電子構造の不均一性とも関連している可能性が示された。本研究で確立した、オペランド多次元イメージングとデータ駆動型解析を融合した手法は、複雑な電池反応の理解を大きく進展させるものであり、電極設計および材料開発における新たな指針を提供することが期待される。

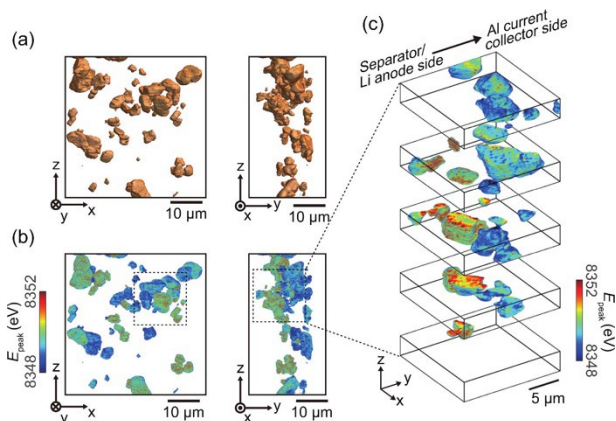


図 3(a) 8350 eV における二値化吸収強度の体積レンダリング像。(b) 3 次元 Ni 価数分布の体積レンダリング像。表面垂直方向（左）および面内方向（右）。(c) 点線領域から抽出した z 方向に沿った 3 次元 Ni 価数分布の断面像。

機能性ナノ材料の構造設計と特性評価

低密度非晶質氷 (LDA) と六方晶氷 (Ih) における音響フォノンと光学フォノンの相互作用に関連するボソンピーク (BP) の性質を、格子力学法により研究した [1]。その結果、非晶質氷および結晶氷の双方に BP が存在することを示し、BP が音響-光学共鳴に起因することを明らかにした。音響フォノン分枝には擬似ファンホーベ特異点が現れ、低周波光学モードの状態密度が増大する。さらに、結晶氷のプロトン無秩序および非晶質氷のプロトン・酸素複合無秩序により振動状態密度と共鳴が増強され、BP に関連する低温熱容量異常も再現された。これらの結果は、結晶氷および非晶質氷における実験観測と整合している [11]。

第一原理計算により、 $\text{Na}_{16}\text{Ba}_8\text{Si}_{136}$ 組成をもつタイプ II Si クラスレートの電子状態を解析した [2]。計算結果は、フェルミ準位が伝導帯中に位置し、本物質が金属的性質を示すことを示唆している。

伝導帯のバンド構造およびフェルミ準位近傍の状態密度は、ゲスト原子の組成比や占有率に依存して変化する。超伝導を示す構造 I ($\text{Na}_2\text{Ba}_6\text{Si}_{46}$) ではフェルミ準位が状態密度の高い領域に位置する一方、構造 II では電子数が少なく、フェルミ準位が状態密度の低い領域に位置する。この電子状態の違いが、タイプ II クラスレートにおける超伝導の欠如と関連していると考えられる[12]。

実空間変分量子モンテカルロ法 (VMC) および拡散量子モンテカルロ法 (DMC) を用いて、金属密度範囲における常磁性および強磁性二次元均一電子液体 (2D-UFL) のエネルギーバンドと有効質量を調査した[13]。高密度では常磁性系の有効質量は自由電子の値に近いが、密度の低下に伴い増加する。一方、強磁性系では密度低下に伴い有効質量が急速に抑制される。VMC と DMC の結果は誤差範囲内でよく一致し、電子相関が有効質量の挙動に大きく影響することが確認された。また、高品質な試行波動関数を用いる場合、VMC は大規模系に対して DMC に代わる効率的な手法となることが示された[13]。

第一原理計算により、 Cu_2SnSe_3 の単斜晶相がフェルミ準位近傍に孤立したワイルノードを有する有望な材料候補であることを示した[41]。本物質では、電流誘起軌道磁化、円偏光光ガルバニック効果、熱電輸送特性が調査され、赤外光検出、キラル光電流生成、高効率エネルギー変換などへの応用可能性が示された。 Cu_2SnSe_3 におけるトポロジー、対称性、スピン軌道相互作用の協奏は、基礎研究および応用研究の双方において魅力的なプラットフォームを提供する[14]。

ヘリ磁性体については、Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用を必要とせず、競合する交換相互作用によりらせん状スピン構造が安定化する吉森型ヘリ磁性体を対象とした。外部磁場により誘起される相における電子構造を記述する最小モデルを導入し、磁場駆動円錐相でバンド非対称性が生じ、二次光学応答や注入型光伝導を誘起することを示した[15]。さらに、このモデルを密度汎関数理論により得られた $\alpha\text{-EuP}_3$ の電子構造に拡張し、実験で観測された非相反輸送の特徴を定性的に説明した[16]。これらの成果は、キラルスピン構造と電子自由度の結合が非従来型輸送現象を生み出す機構を明らかにするものである。

代表的なワイル半金属 TaAs におけるスピン偏極カイラルフェルミオン状態を、Shubnikov-de Haas (SdH) 振動測定と密度汎関数理論計算の組み合わせにより解析した[17]。第一原理計算から、隣接するワイルノードを取り囲むフェルミポケットが、スピン軌道相互作用、空間反転対称性の破れ、結晶鏡映対称性の相互作用により、反対のカイラリティをもつ強いスピン偏極を示すことが明らかになった。これらの状態は外部磁場下で顕著なゼーマン分裂を示し、磁場方向に依存した SdH 振動の振幅および周波数変化として観測される[17]。

【今後の計画】

今後、藤田は、Fe-Mn 系エリンバー合金で確立した量子ビーム複合解析を、機能性金属材料およびエネルギー関連材料の構造・ダイナミクス評価へ展開する。高分解能非弾性 X 線散乱によるフォノン分散測定、中性子回折による平均構造解析、中性子全散乱による局所構造解析を相補的に組み合わせ、弾性異常、磁気応答、局所歪み、格子不安定性の相関を定量的に明らかにする。特に、組成、温度、応力、磁場を制御した系統的測定により、マルテンサイト変態前駆現象と機能発現の関係をさらに明確化する。

また、中性子スピンフィルター技術や磁性層状物質のスピンダイナミクス解析の知見を活用し、磁気構造と格子自由度が強く結合した材料群へ研究対象を拡張する。Fe-Mn 系合金で見いだされた局所歪みとフォノン異常の相関を、磁気弾性結合を示す合金、トポロジカル磁性体、ファンデルワールス磁性体などに適用し、局所構造揺らぎが磁気・弾性・輸送特性に与える影響を解明する。さらに、金属材料研究所が有する中性子散乱装置を E-IMR における革新的エネルギー材料研究へ活用する。蓄エネルギー材料、熱電材料、水素関連材料、磁気エネルギー変換材料などでは、軽元素位置、局所歪み、欠陥、相分離、イオン拡散経路の把握が性能向上の鍵となる。中性子回折・全散乱・小角散乱・偏極中性子技術を組み合わせ、X 線では捉えにくい軽元素挙動や磁気相関を非破壊で評価し、E-IMR が目指すエネルギー材料・複合モジュール創製に資する構造評価基盤を構築する。

これらの量子ビーム複合解析および E-IMR との連携を基盤として、本ユニットでは、実験・計測・理論・データ科学を横断する材料評価・解析研究を推進する。中性子散乱や放射光計測により得られる構造・電子状態・局所不均一性に関する実験情報と、第一原理計算、機械学習、データ駆動型解析を統合し、エネルギー材料、ナノ材料、量子材料、電池材料における構造欠陥、局所歪み、電子相関、イオン輸送、反応不均一性など、材料機能を支配する要因を明らかにする。

熊谷は、第一原理計算と機械学習を組み合わせたデータ駆動型材料設計を進める。具体的には、誘電率を高精度に予測する手法を開発し、高誘電体材料の効率的探索を行う。また、アモルファス酸化物を対象として、酸素空孔が構造安定性や電子物性に与える影響を調べる。さらに、酸化物イオン伝導体に関する過去の文献を精査し、データベース化を進めることで、イオン伝導機構の体系的理解と新規材料探索につなげる。加えて、半導体中のキャリア捕獲に関する理論計算手法を確立し、材料ごとの欠陥準位やキャリア捕獲挙動の傾向を議論することで、電子・光機能材料の高性能化に資する知見を得る。

高橋は、NanoTerasu において X 線タイコグラフィを用いたオペランド X 線ナノ化学イメージングの高度化を進める。時間分解能および空間分解能をさらに向上させることで、電池材料や機能性デバイス材料における反応・劣化過程を、作動環境下で高精度に可視化する。さらに、データ駆動型解析との融合を深化させ、電池材料における不均一性発現機構を定量的に理解し、次世代材料・デバイス設計指針の創出につなげる。特に、10 nm 未満の超高分解能 X 線ナノ化学イメージングの実現を目指すとともに、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。

Belosludov は、理論計算と実験グループとの連携により、低次元量子材料および包接化合物の構造・電子状態・相安定性に関する研究を進める。具体的には、二次元 NbSe₂/グラファイト系におけるモアレ超格子ヘテロ構造を対象として、実験グループとの共同研究を行う。また、密度汎関数理論を用いて遷移金属ダイカルコゲナイド (TMD) ヘテロ構造の電子状態や界面効果を解析する。さらに、量子モンテカルロ法を用いて二次元 FeSe 系における相関電子状態を研究し、低次元超伝導・強相関物性の理解を深める。加えて、クラスレート水和物の原子構造、ゲスト分布、温度圧力相図に関する研究を実験グループとの共同研究として実施し、包接化合物における構造安定性と機能発現の関係を明らかにする。

以上の個別研究を連携させ、量子ビーム計測、NanoTerasu 先端 X 線イメージング、第一原理計算、機械学習、量子モンテカルロ法を融合した材料評価・解析基盤を構築する。これにより、多様な機能性材料の構造・欠陥・局所不均一性・電子状態を横断的に理解し、E-IMR が目指す革新的エネルギー材料および複合モジュール創製に貢献する。

【文献】

- [1] “Phonon anomaly and local distortion in iron-manganese-based Elinvar alloys”, Yoshihiko Umemoto, Yoichi Ikeda, Takashi Honda, Daisuke Ishikawa, John A. Schneeloch, Joerg C. Neufeld, Shinichiro Tozawa, Rie Umetsu, Despina Louca, Alfred Q. R. Baron, Masaki Fujita, *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **26**, 2540278 (2025).
- [2] “Development of a compact in-situ ³He neutron spin filter at J-PARC”, S. Takahashi, R. Kiyonagi, T. Okudaira, S. Takada, R. Kobayashi, M. Okuizumi, T. Ino, K. Asai, Y. Tsuchikawa, K. Oikawa, M. Harada, T. Ohhara, J. Suzuki, M. Fujita, Y. Ikeda, K. Kakurai, T. Oku, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, **1075**, 170410 (2025).
- [3] “Unusual spin dynamics in the van der Waals antiferromagnet FeGa₂S₄”, Yifei Tang, Yoshihiko Umemoto, Yo Kawamoto, Masahiro Kawamata, Shinichiro Asai, Yoichi Ikeda, Masaki Fujita, Yusuke Nambu, *J. Phys.: Condens. Matter*, **37**, 035801 (2025).

- [4] “Investigation of Hole Dopability in Oxygen-2p-Dominated Bands”,
T. N. H. Vu, Y. Kumagai,
Chem. Mater., **37**, 9505–9514 (2025).
- [5] “Machine-Learning Prediction of Charged-Defect Formation Energies from Crystal Structures”,
S. Kiyohara, C. Shibui, S. Bae, Y. Kumagai,
Phys. Rev. Lett., **135**, 246101 (2025).
- [6] “Bayesian Optimization with Gaussian Processes Assisted by Deep Learning for Material Designs”,
S. Kiyohara, Y. Kumagai,
J. Phys. Chem. Lett., **16**, 5244 (2025).
- [7] “Development of Operando Hard X-ray Ptychography: Application to Thin-Film All-Solid-State Lithium-Ion Batteries”,
Y. Sasaki, N. Ishiguro, H. Uematsu, S. Takazawa, M. Abe, N. Okawa, Y. Suzuki, K. Ozaki, K. Kobayashi, Y. Honjo, H. Nishino, Y. Joti, T. Hatsui, Y. Iriyama, Y. Takahashi,
J. Phys. Chem. C, **129**, 10624 (2025).
- [8] “Multidimensional Tracking and Clustering of Electrochemical Reactions in Positive Electrode of Lithium-ion Battery via Operando X-ray Nanoscale Chemical Imaging”,
H. Uematsu, N. Ishiguro, K. Kawai, Y. Sasaki, O. Sekizawa, M. Okubo, Y. Takahashi,
Chem. Biomed. Imaging, **4**, 44 (2026).
- [9] “Spatiotemporal Mapping of Alloy Mesostructure Dynamics via Multimodal Coherent X-ray Diffraction Imaging”,
S. Takazawa, K. Ninomiya, M.-Q. Ha, T.-S. Vu, Y. Sasaki, M. Abe, H. Uematsu, N. Okawa, N. Ishiguro, K. Ozaki, T. Hatsui, T. Hoshino, M. Nishibori, H.-C. Dam, Y. Takahashi,
Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., **122**, e2513369122 (2025).
- [10] “Broadband High-Resolution X-ray Ptychography System Spanning Tender to Hard X-rays Regimes”,
Y. Sasaki, N. Ishiguro, M. Abe, S. Takazawa, H. Uematsu, N. Okawa, F. Kaneko, Y. Takahashi,
IUCrJ, **13**, 11 (2026).
- [11] “Nature of Boson Peak and Associated Heat Capacity Anomaly Caused by Structural and Proton Disorder in Ih and LDA Ices”,
R. V. Belosludov, K. V. Gets, R. K. Zhdanov, Yu. Yu. Bozhko, V. R. Belosludov,
Sci. Rep., **15**, 15190 (2025).
- [12] “Single Crystal Growth of Type-II Si Clathrate Containing Fully Occupied Na and Ba From a Na-Based Metal Complex Solution”,
H. Morito, Y. Iijima, M. Fujioka, R. Belosludov, M. Terauchi, H. Yamane, K. Fujiwara,
Cryst. Growth Des., **25**, 2120(2025).
- [13] “Quantum Monte Carlo Study of the Quasiparticle Effective Mass of the Two-dimensional Uniform Electron Liquid”,
S. Azadi, N. D. Drummond, A. Principi, R. V. Belosludov, M. S. Bahramy,
Phys. Rev. B, **112**, 045117 (2025).
- [14] “Low-Symmetry Weyl Semimetals: A Path to Ideal Topological States”,
D.-A. Deaconu, V. Shah, R. V. Belosludov, M. S. Bahramy,
Adv. Funct. Mater., **36**, e06483 (2026).

[15] “Field-Driven Band Asymmetry and Nonreciprocal Transport in a Helimagnet”,
D.-A. Deaconu, A. Agarwal, R. V. Belosludov, R.-J. Slager, M. S. Bahramy,
Phys. Rev. Lett., **135**, 096701 (2025).

[16] “Band Asymmetry-driven Nonreciprocal Electronic Transport in a Helimagnetic Semimetal α -EuP3”,
A. H. Mayo, D.-A. Deaconu, H. Masuda, Y. Nii, H. Takahashi, R. V. Belosludov, S. Ishiwata, M. S. Bahramy, Y. Onose,
Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., **122**, e2405839122 (2025).

[17] “Observation of Zeeman splitting in the spin-polarized chiral fermion state in the Weyl semimetal TaAs”,
H. Murakawa, M. Komada, D.-A. Deaconu, M. S. Bahramy, R. V. Belosludov, T. Kida, M. Hagiwara, H. Sakai, N. Hanasaki,
Phys. Rev. B, **112**, 045117 (2025).

【主な国際会議】

1. M. Fujita, Activity of Tohoku University neutron spectrometers and diffractometer at JRR-3, Japan" International HANARO symposium 2025, M. Fujita, Sep. 12, 2025, Daejeon, Korea
2. M. Fujita, Structural studies on “un-doped superconductivity in T'-structure 214-based cuprates", The 19th Conference of Asian Crystallographic Association 2025, Dec. 4, 2025, Taipei City
3. Yu Kumagai. Prediction of Defect Formation Energies by Machine Learning. The 33rd ICDS, 2025/9/17
4. Yu Kumagai. Development of Defect Database and its application. ICAMD2025
5. Yukio Takahashi Development and Application of Tender X-ray Ptychography: From SPring-8 to NanoTerasuNSLS-II & CFN Annual Users' Meeting. 2025/4/30
6. Yukio Takahashi Development of High-resolution X-ray Ptychography: Bridging SPring-8 and NanoTerasuAO-SRI 2025. 2025/10/31
7. Yukio Takahashi, Visualization of multiscale structural dynamics via coupled coherent X-ray diffraction imaging and photon correlation spectroscopyPacifichem 2025. 2025/12/15
8. Rodion V. Belosludov, The effect of the MOF framework on electronic and structural properties of the encapsulated guest species. The 11th Conference of Asian Consortium for Computational Materials Science (ACCMS-11) 1-3 July, 2025

【主な国内会議】

1. 熊谷 悠. 点欠陥計算材料データベース構築とその応用例, DXMag セミナー
2025/04/22
2. 池田陽一, 大亀佑太, 梅本好日古, 藤田全基 チタン中に埋め込まれた 4d 遷移金属元素周りの局所ひずみの定量評価
日本金属学会 第 177 回講演大会 (札幌) 2025/9/18
3. 高橋幸生. 硬 X 線・テンダー X 線領域におけるコヒーレント回折イメージング技術の新展開 第 75 回 精密工学会超精密加工専門委員会. 2025/9/25
4. 熊谷 悠. バーチアルスクリーニングによる新セラミック材料探索 第 54 回結晶成長国内会議 (JCCG-54) 2025/11/12
5. 藤田全基 JRR-3 将来計画への期待と意見 日本中性子科学会 シンポジウム"JRR-3 の 未来一装置の再配置" 2025/11/26
6. 池田陽一、大河原学、高橋玄、高田秀佐、谷口貴紀、藤田全基,
東北大学中性子実験装置の 2025 年日本中性子科学会 第 25 回年会 (和光市)
2025/11/27
7. 池田陽一、大河原学、高橋玄、高田秀佐、谷口貴紀、藤田全基
JRR-3 における東北大学中性子実験装置の活動報告
第 1 回 JRR-3 ユーザーミーティング 2025/12/16~12/17
8. 熊谷 悠. 新セラミック材料探索に向けた ハイスループット第一原理計算と 機械学習の応用 CAMM フォーラム 2026/02/06
9. 高橋幸生, 石黒志, 金子房恵, 阿部真樹, 高山裕貴, 吉田純也, 星野大樹, 高澤駿太郎, 上松英司, 佐々木雄平, 大川成, 高橋慧智, 滝沢寛之, 岸本浩通
テンダー X 線タイコグラフィによるサブ 10 nm 分解能の達成を目指して
第 73 回応用物理学会春季学術講演会. 2026/3/15

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

【2025(令和7)年度の成果概要】

1. 共晶融液誘起金属溶湯脱成分法による Fe-Mg 継手の強度に及ぼす界面マイクロ組織形態
鉄鋼とマグネシウム合金間の接合において、両合金の主成分である Fe と Mg が互いに混じり合わない（不混和）性質を持つため、強固な継手を得るのは困難とされてきた。本研究では、犠牲元素としてニッケル（Ni）を用いた「Fe-Ni 層」を予め Fe 先端に作製し、Mg と突合せて共晶融液誘起金属溶湯脱成分法（Eutectic melt induced Liquid Metal Dealloying：EMI-LMD）を適用することで、接合界面には Ni が脱成分された α -Fe 相と Mg 相が互いに連続に絡み合った複合層が形成された（図1）。複合層におけるアンカー効果により、強固な Fe-Mg 機械接合に成功した。継手強度を支配する複合層のマイクロ組織形態について調査を行い、得た知見を以下にまとめる。

- ・ **強度の支配因子：**複合層厚さおよび Mg/複合層の界面（デアロイングバック）におけるマイクロ組織形態が継手強度の支配因子となることが判明した。特に複合組織の軟質相である Mg 相には応力が集中しやすく、効果的に応力を分散させるための最適な複合構造を実験とシミュレーションを用いて同定した。
- ・ **複合層の最適条件：**
 - I. デアロイングバックにおける Mg 相分率が約 50%を超えると、同一面内で Mg 相にかかる応力集中が分散され、継手強度が向上した。
 - II. 複合層の厚さがデアロイングバックにおける α -Fe リガメント（骨格）サイズの約 20 倍となると、深さ方向への荷重伝達効果により、継手強度が向上した（図2）。上記のような最適構造を有する複合層が界面に形成したことで Mg 母材強度を超える強固な Fe-Mg 継手を達成できた。

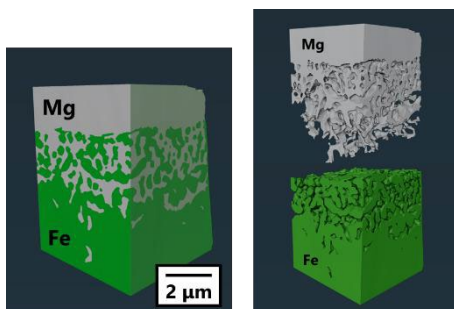


図1．EMI-LMDにより作製した Fe-Mg 継手のトモグラフィ像

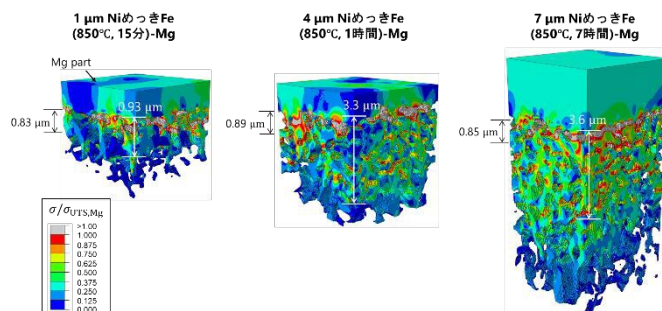


図2．有限要素法により可視化した Fe-Mg 継手の Mg 部における最大引張応力下での応力分布

2. 部分脱成分による階層的ナノポーラス Ni-Mo 金属間化合物の作製と水素発生反応用触媒への応用

本研究では、多段階の部分脱成分という新たなアプローチを用い、粗大孔と微細孔が共存する階層的ナノポーラス構造を有した Ni-Mo 金属間化合物を作製し、その水素発生反応 (HER) 触媒特性を系統的に評価した。

評価の結果、作製したすべてのナノポーラス Ni-Mo 試料において、従来の Ni-Mo 金属間化合物を上回る優れた触媒活性が確認された。これは、リガメントの微細化に伴う比表面積の増大に加え、階層的な細孔構造の導入によって物質輸送性が改善され、特に高電流密度領域での性能が向上したためである。電気化学分析 (LSV、タフェル勾配、ECSA) の結果からも、リガメントの微細化による活性点密度の増加と、階層構造による反応物の効率的な輸送促進が、高い触媒性能を支えていることが裏付けられた。

最適化された試料は、既存の主要な触媒に匹敵する高い HER 活性を達成した一方で、安定性試験においては、酸化や表面再構成に伴う低活性相の形成により、性能が低下するという課題も浮き彫りになった。以上の成果は、部分脱成分法が Ni-Mo 系 HER 触媒の活性向上において極めて有効な戦略であることを示すとともに、今後は界面および相制御工学を通じて耐久性を高める必要があることを示唆している。

【今後の計画】

1. 共晶誘起金属溶湯脱成分法を利用した鉄鋼-マグネシウム商用合金接合への展開

純金属 Fe-Mg 間における単純モデル接合実験で導出した知見を基に、商用合金間における接合へと展開する。

- ・ **溶質成分の影響**：鉄鋼やマグネシウム合金に含まれる溶質成分は界面反応挙動に影響を与えるため、ミクロ組織観察や反応キネティクスを調査し、理想の構造を有する複合組織を形成するための接合条件を最適化する。
- ・ **継手強度の評価**：実際に接合し、化合物など副生成物による影響を調査する。

最終目標：強固な接合が達成できるような条件を最適化し、強度向上の指針を得る。

2. 高耐久・高活性な水素発生反応触媒に向けた階層的多孔質 Ni-Mo 化合物の微細調整

本年度の結果を踏まえ、今後は触媒効率をさらに高めるべく、界面構造およびポーラス構造の最適化に注力する。まず、反応プロセスにおける酸化物や水酸化物相の形成・分布を制御することで、高い耐酸化性を備えた触媒構造を開発する。具体的には、厚さと組成を調整可能な Ni-Mo/酸化物ハイブリッド界面を設計し、金属活性点と含酸素種との相乗効果を活用することで、HER 活性と耐久性の高度な両立を目指す。これと並行して、リガメントサイズと細孔の連結性を独立して制御することにより階層構造をさらに洗練させ、活性表面積の最大化と物質輸送性の最適化を図る。その際、傾斜脱合金法などの新たなアプローチも積極的に取り入れ、検討を深めていく。最終的には、理論モデリングやデータ駆動型分析を導入して触媒設計の指針を確立し、最適な構造および組成パラメータを特定する。以上を通じて、高活性、効率的な物質移動、そして優れた長期安定性を同時に実現するナノ多孔質触媒システムを目指す。

【論文リスト】

1. D.V. Louzguine-Luzgin, Y. Hamasaki, M. Mori, K. Yamanaka, R. Umetsu, H. Kato, Y. Miyajima
Strain-induced and thermally-reversible BCC to FCC phase transformation in a heavily deformed Fe-Mn-Co-Ni-Cu-Al-C alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 927. 147991. (2025)
2. Peyman Asghari-Rad, Yongju Kim, Gang Hee Gu, Hidemi Kato, Hyoung Seop Kim
Exploring the impact of hard-to-soft domain ratios in a heterostructured multi-principal element alloy. *Materials Science and Engineering: A*. 927. 148024. (2025)
3. Munsu Choi, Gang Hee Gu, Jongun Moon, Jae Wung Bae, Hidemi Kato, Seung Zeon Han, Hyoung Seop Kim, Yongseok Choi, Soo-Hyun Joo
Development of 3D interconnected heterogeneous high-entropy alloy composites with enhanced multifunctionality via liquid metal dealloying. *Journal of Materials Research and Technology*. 37. 5672-5685. (2025)
4. J. B. Cui; G. H. Xing; G. J. Lyu; Y. J. Wang; T. Wada; H. Kato; E. Pineda; J. C. Qiao
Experimental observation and theoretical modeling of multi-stage power-law creep in metallic glass. *Acta Mechanica*. 236. 5079-5097. (2025)
5. Y. Mori, A. Iwase, Y. Kaneno, T. Matsui, R. Yamada, T. Wada, H. Kato, N. Ishikawa, F. Hori
Amorphization process of two-phase Ni₃₀Zr₇₀ alloy by high-energy heavy ion irradiation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 565. 165732. (2025)
6. An, Wanying, Liang, Shuyi, Zhang, Langting, Kato, Hidemi, Qiao, Jichao
Deformation characteristic and rejuvenation mechanism of amorphous alloy during the mechanical cycling. *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences*. 74. 166101. (2025)
7. Shiyao Jin, Xujin Han, Yanhui Li, Li Jiang, Hidemi Kato, Wei Zhang
Self-supported heterointerface-engineered nanoporous CoNiFePCBO electrocatalysts derived from dealloying for efficient bifunctional water splitting. *Journal of Materials Science & Technology*. 261. 171-183. (2025)
8. Yusuke Ohashi, Takeshi Wada, Hidemi Kato
Dissimilar joining of Ti-6Al-4V with ZK60 and AZ31 by eutectic-melting-induced liquid metal dealloying. *Materials & Design*. 258. 114685. (2025)
9. Yeon Beom Jeong, Takeshi Wada, Jihye Seong, Gang Hee Gu, Hyoung Seop Kim, Soo-Hyun Joo & Hidemi Kato
Multi-heterostructures synthesized via subsequent alloying of Y or Al into Mg melt using a 3D interconnected FeCr-Mg composite formed through liquid metal dealloying. *Advanced Composites and Hybrid Materials*. 8. 373. (2025)
10. Mikihiya Fukuda, Ying Li, Jing Wei, Koichi Harata, Guoqiang Luo, G. Jeffrey Snyder, Yutaka S. Sato, Hidemi Kato, Eric Jianfeng Cheng
High-Temperature Sintering of Garnet Solid Electrolyte Li₇La₃Zr₂O₁₂: A Comparative Study of Induction Hot Pressing and Spark Plasma Sintering. *Small*. 21. e06257. (2025)
11. Jihye Seong, Jee Eun Jang, Hidemi Kato, Sung Hyuk Park, Soo-Hyun Joo
Effects of alloying elements (X: Zr, Nb, Ta, Mo, and Si) in the (Ti_{47.5}X_{2.5})Cu₅₀ precursor alloy on the microstructure, mechanical properties, and corrosion resistance of 3D interconnected Mg–Ti composites synthesized using liquid metal dealloying. *Journal of Materials Research and Technology*. 39. 4453-4475. (2025)
12. J.B. Cui, G.H. Xing, Guo-Jian Lyu, Yun-Jiang Wang, T. Wada, H. Kato, V.A. Khonik, Y. Yang, J.C. Qiao
Unveiling creep mechanisms in metallic glasses via fractional modeling under coupled thermo-mechanical loads. *International Journal of Plasticity*. 195. 104511. (2025)
13. J.B. Cui, G.H. Xing, Q. Hao, Guo-Jian Lyu, Yun-Jiang Wang, T. Wada, H. Kato, E. Pineda, V.A. Khonik, J.C. Qiao
Thermodynamic-kinetic relationship in Pd-based metallic glasses. *Scripta Materialia*. 270. 116934. (2026)
14. Shinya Hosokawa, Hitoshi Sato, Yasuhisa Tezuka, Jun-ichi Adachi, Kentaro Kobayashi, Koji Ohara, Yuan Tan, Tetsu Ichitsubo, Rui Yamada, Hidemi Kato
Changes in electronic structures of Gd₆₅Co₃₅ metallic glass by cryogenic rejuvenation. *Scripta Materialia*. 270. 116933. (2026)
15. Hosokawa, Shinya; Ohara, Koji; Pusztai, László; Stellhorn, Jens Rüdiger; Blanc, Nils; Boudet, Nathalie; Yamada, Rui; Kato, Hidemi; Ichitsubo, Tetsu
Changes in atomic structures of a Gd₆₅Ni₃₅ metallic glass by cryogenic rejuvenation. *Journal of Alloys and Compounds*. 1050. 185770. (2026)
16. Zhang, Langting; Duan, Yajuan; Wang, Yunjiang; Pineda, Eloi; Yang, Yong; Pelletier, Jean-Marc; Wada, Takeshi; Kato, Hidemi; Crespo, Daniel; Qiao, Jichao
Creep and recovery behavior of metallic glasses in a global strain approach within transition state

- theory. *Acta mechanica Sinica*. 42. 425311. (2026)
17. Zhang Langting, Liang Shuyi, Kato Hidemi, Qiao Jichao
STUDY ON STRUCTURAL REJUVENATION OF A METALLIC GLASS DURING HIGH-TEMPERATURE DEFORMATION. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*. 58. 143-152. (2026)
 18. Tianle Li, Renhao Wu, Jiabao Liu, Sang-Ho Oh, Xiang Wu, Hyojin Park, Byeong-Joo Lee, Hidemi Kato, Hyoung Seop Kim, Xiaochun Liu, and Xifeng Li
Dual-Array Nano Configuration for High-Performance Metastable β Titanium Alloys. *Advanced science*. 13. e07383. (2026)
 19. Mikiyoshi Fukuda, Ying Li, Run-Zi Wang, Shin-ichi Orimo, Yutaka S. Sato, Hidemi Kato, Eric Jianfeng Cheng
Ultrasonic Welding of Garnet Solid Electrolytes to Lithium Metal: Achieving Intimate Interfacial Contact in Seconds. *Small Structures*. 7. e202500866. (2026)
 20. Munsu Choi, Hogeun Cho, Jae Hyuk Lee, Akira Takeuchi, Hidemi Kato, Hyoung Seop Kim, Soon-Jik Hong, Yongseok Choi, Seung Zeon Han, Soo-Hyun Joo
Formation of 3D interconnected multiphase heterostructures from CoCrFeMnNi high-entropy alloy via liquid metal dealloying using Cu–Ag melts. *Journal of Materials Research and Technology*. 41. 2105-2114. (2026)
 21. Jae Hyuk Lee, Jihye Seong, Soo-Hyun Joo, Hidemi Kato
Nanoporous high-entropy alloys fabricated by liquid metal dealloying and surface anodizing for enhanced electrochemical performance in capacitors. *Journal of Materials Research and Technology*. 41. 6866-6875. (2026)
 22. Saki Kudo, Tomoyuki Yamasaki, Issei Suzuki, Arunkumar Dorai, Rafael Costa-Amaral, Soungmin Bae, Yu Kumagai, Hiroshi Tanimura, Tetsu Ichitsubo, Takahisa Omata
Role of hydrogen in the n-type oxide semiconductor MgIn₂O₄: Experimental observation of electrical conductivity and first-principles insight. *APL Materials*. 13. 041118. (2025)
 23. Naoya Ishida, Keigo Kubota, Toshikatsu Kojima, Toshihiko Mandai, Shin Kiyohara, Yu Kumagai, Tetsu Ichitsubo
Cathode properties of MgV₂O₄ spinel for magnesium rechargeable batteries: effect of synthesis route on structure and electrochemical performance. *JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A*. 14. 11057-11064. (2026)
 24. Riku Nakahara, Naoto Tanibata, Hayami Takeda, Masanobu Nakayama, Kohei Shimokawa, Tetsu Ichitsubo
Zn-Assisted Mg Ion Transport in Spinel Oxide Cathodes: Insights From Neural Network Simulations. *CHEMISTRY-AN ASIAN JOURNAL*. 21. e00908. (2026/1/28)
 25. Kei Nishikawa, Akitoshi Hayashi, Kazunori Takada, Yukiko Matsui, Masashi Ishikawa, Masayoshi Watanabe, Shuji Nakanishi, Kohei Shimokawa, Toshihiko Mandai, Tetsu Ichitsubo, Kiyoshi Kanamura
Research and development of next generation batteries in the ALCA-SPRING project (JST). *Journal of the Korean Ceramic Society*. None. <https://doi.org/10.1007/s43207-025-00557-3>. (2025)
 26. Florian Brumbauer, Norihiko L. Okamoto, Philipp Materna, Glen J. Smales, Tetsu Ichitsubo, Wolfgang Sprengel, Martin Luckabauer
Elastic modulus engineering in β -titanium alloys: Tuning the precipitation kinetics using Sn. *Materials & Design*. 259. 114711. (2025)
 27. Tomoya Kawaguchi, Hikari Sakurai, Shusuke Fukui, Xiatong Ye, Hongyi Li, Toshihiko Mandai, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo
Amorphous oxide cathode enabling room-temperature rechargeable magnesium batteries. *Communications Materials*. 6. 203. (2025)
 28. Yuyang Zhang, Norihiko L. Okamoto, Tetsu Ichitsubo
Crystal Structure of Cu₂– δ Te with van der Waals-like Interlayer Te-Te Interaction Revealed by Scanning Transmission Electron Microscopy. *Chemistry of Materials*. 37. 5365–5377. (2025)
 29. Hiroki Yoshisako, Norihiko L. Okamoto, Kazuya Tanaka, Tetsu Ichitsubo
Utilizing surface water adsorption on layered MnO₂ nanosheets for enhancing heat storage performance. *Communications chemistry*. 8. 169. (2025)
 30. Shoki Kishida, Norihiko L. Okamoto, Ryoji Katsube, Akira Nagaoka, Isshin Sumiyoshi, Kensuke Nishioka, Tetsu Ichitsubo, Yoshitaro Nose
Enhancing Power Factor in n-type Chalcopyrite CdSnAs₂ Thermoelectrics via Supercooled Solidification. *ACS Applied Energy Materials*. 8. 7475–7482. (2025)
 31. Hongyi LI, Tetsu ICHITSUBO
Volume Strain Mitigation and Durability Enhancement of Aluminum-Foil Anodes for Rechargeable Lithium Batteries. *DENKI KAGAKU*. 93. None. (2025)

【主な国際会議】

1. 宋瑞瑞. Temperature-dependent Formation of Nanoporous Intermetallic Compounds in Liquid Metal Dealloying. 2025/7/5-8
2. Ruirui Song, Bowen Tang, Pierre-Antoine Geslin, Takeshi Wada, Hidemi Kato. Microstructure Evolution of Nanoporous Fe₇Mo₆ Intermetallic Compounds Fabricated via Liquid Metal Dealloying. 2025/10/6-8
3. H. Kato, Y. Ohashi, K. Kurabayashi, T. Wada. Immiscible Dissimilar Material Joints using Liquid Metal Dealloying. 2025/10/6-8
4. 加藤秀実. Liquid metal dealloying: Introduction and applications. 2026/1/23
5. Tetsu Ichitsubo. The Development of Room-Temperature Rechargeable Magnesium Batteries with Oxide Cathodes. 2025/12/15-20

【主な国内会議】

1. R. Song, P. Geslin, T. Wada, H. Kato. Temperature-dependent Formation of Nanoporous Fe₇Mo₆ Intermetallic Compounds in Liquid Metal Dealloying. 2025/5/28
2. 宋 瑞瑞、唐 博聞、加藤 秀実. 金属溶湯脱成分法による不混和性 Cu/Mo 複合材料の力学特性および熱特性. 2025/9/17-19
3. 加藤秀実. 元素間相互作用差を利用した機能性多孔質金属、相分離系複合材料と、相分離系異種金属接合. 2025/10/28
4. 市坪哲. 資源制約フリーを実現する電池開発・マグネシウムイオン電池. 2026-03-17-20

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： マグネシウム蓄電池における酸化物正極・電解液界面の反応機構解明

構成員 李 弘毅（金属材料研究所・助教）

1. 目的

マグネシウム蓄電池は、資源量が豊富で高い体積容量を有するMg金属を負極として利用できることから、次世代蓄電池として期待されている。一方、 Mg^{2+} は二価であるため酸化物結晶中で強い静電相互作用を受け、固体内拡散が遅いことが、酸化物正極の実用化を妨げる大きな要因となっている。特に、 Mg^{2+} が結晶構造中のどの位置を占有し、その局所構造変化が粒子内部へのイオン輸送や電極劣化にどのようにつながるかについては、十分に明らかになっていない。

申請者らはこれまで、 α 、 β 、 γ 、 δ 、 λ 型 MnO_2 のMg挿入挙動を比較し、 Mg^{2+} 拡散を促進した高温条件では多くの MnO_2 がスピネル型、さらに岩塩型構造へ変態する一方、ホランダイト型 α - MnO_2 は比較的高い構造安定性を示し、反応量を制御することで結晶骨格を維持した Mg^{2+} 挿入が可能であることを明らかにしてきた[1]。さらに室温においても、 α - MnO_2 は Mg^{2+} を受け入れる有望なホスト構造であることが示されている[2]。

そこで本研究では、一次元の 2×2 トンネル構造を有する α - MnO_2 をモデル材料として、 Mg^{2+} の占有位置、粒子内分布、および Mg^{2+} 挿入に伴う局所的な構造・電子状態変化を原子スケールで明らかにすることを目的とした。 Na^+ および Ca^{2+} の挿入挙動と比較することで、 Mg^{2+} に特徴的な局所構造変化と、その電気化学反応・劣化機構との関係を検討した。

2. 主要成果の概要

α - MnO_2 への Na^+ 、 Mg および Ca^{2+} 挿入について、電気化学測定、原子分解能走査透過電子顕微鏡（STEM）および軟X線吸収分光（XAS）を組み合わせで解析した[3]。電気化学測定の結果、 Na^+ では粒子内部への拡散を伴う反応の寄与が大きいのに対し、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} と多価・大型のカチオンになるにつれて表面反応の寄与が増大することが明らかとなった。放電後の組成はそれぞれ $\text{Na}_{0.20}\text{MnO}_2$ 、 $\text{Mg}_{0.10}\text{MnO}_2$ 、 $\text{Ca}_{0.07}\text{MnO}_2$ 程度であり、いずれについてもXRDではホランダイト型骨格が維持された。

原子分解能STEM観察により、挿入カチオンによって 2×2 トンネル内の占有位置と粒子内分布が大きく異なることを明らかにした。 Na^+ は主としてトンネル中心位置を占有し、粒子内部まで比較的均一に分布した。一方、 Mg^{2+} はトンネル中心位置だけでなくオフセンター位置にも存在し、特に粒子表面近傍でオフセンター占有が顕著となった。これに対し Ca^{2+} は主として粒子表面近傍に局在し、内部への侵入は限定的であった。この結果から、カチオン種に応じて、均一な中心サイト占有から、 Mg^{2+} における中心・オフセンター混合占有、さらに Ca^{2+} の表面局在へ

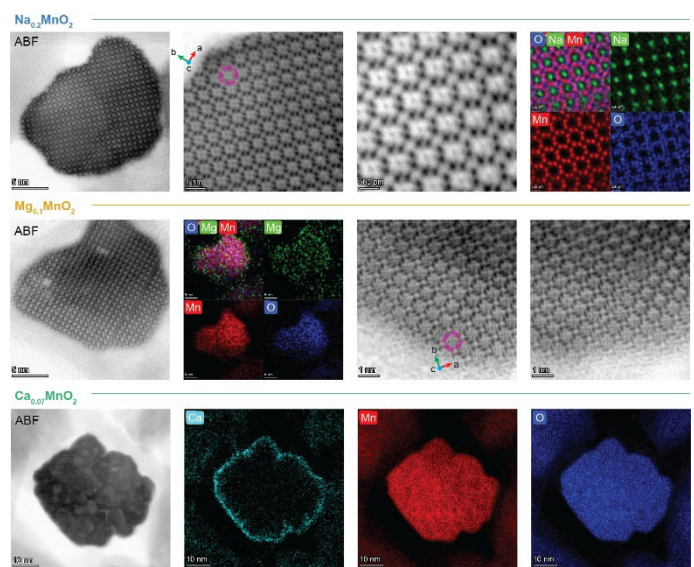


図 1 カチオン挿入 α - MnO_2 の STEM 観察結果。 Na^+ 、 Mg^{2+} 、 Ca^{2+} はそれぞれ異なる空間分布が示された。

と、挿入様式が系統的に変化することを直接示した。

さらにSTEM像から2×2トンネルの局所寸法を評価したところ、 Na^+ 挿入ではMn-Mn間距離の変化が小さいのに対し、 Mg^{2+} 挿入ではトンネルが明瞭に膨張し、その変形はオフセンター Mg^{2+} が多く存在する粒子表面近傍で特に大きいことが分かった。すなわち、 Mg^{2+} は単にトンネル内部へ挿入されるだけでなく、その局所的な占有位置のずれによってホスト骨格に不均一な歪みを誘起することが明らかとなった。

この構造変化とMnの電子状態との関係を知るため、Mn L_{2,3}-edge軟X線XASを、バルク敏感な部分蛍光収量 (PFY) 法と表面敏感な全電子収量 (TEY) 法で測定した。PFYでは放電後の変化が比較的小さい一方、TEYではより大きな低エネルギー側への変化が観測され、特に Mg^{2+} 挿入後には表面近傍で Mn^{3+} 成分の増加が顕著であった。この結果は、 Mg^{2+} のオフセンター占有とトンネル膨張が集中する粒子表面近傍でMn還元も優先的に進行することを示している。

さらに Mg^{2+} の繰り返し挿入・脱離を30サイクルまで行った結果、初期には約80 mAh g⁻¹の可逆容量を示し、平均クーロン効率も約98 %を維持した。30サイクル後の充電状態では残留Mg量は $\text{Mg}_{0.02}\text{MnO}_2$ 程度と小さく、 Mg^{2+} の不可逆的なトンネル内トラップは限定的であった。一方、サイクルに伴って活物質量が徐々に減少したことから、容量低下の主因は不可逆な Mg^{2+} 蓄積ではなく、表面近傍で繰り返される局所的なトンネル変形がホランドイト骨格を徐々に不安定化し、構造崩壊および活物質脱落を引き起こすことにあると考えられた。

以上より、 $\alpha\text{-MnO}_2$ への Mg^{2+} 挿入では、トンネル内のオフセンター占有、粒子表面近傍に局在した骨格変形、およびMnの局所還元が相互に関連しながら進行することを明らかにした。 Mg^{2+} は粒子内部まで可逆的に挿入可能である一方、表面近傍に集中する局所構造変化が長期的な電極劣化の起点となる。したがって、Mg蓄電池用トンネル型酸化物正極の高耐久化には、平均結晶構造の安定化だけでなく、 Mg^{2+} 占有位置と表面近傍の局所歪みを抑制する材料・界面設計が重要であることが示された。

3. 参考文献

- [1] T. Hatakeyama, H. Li, T. Ichitsubo et al, Chem. Mater. 2021, 33, 6983-6996.
- [2] X. Ye, H. Li, T. Ichitsubo et al, ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 56685-56696.
- [3] H. Li, T. Ichitsubo et al, *submitted*.

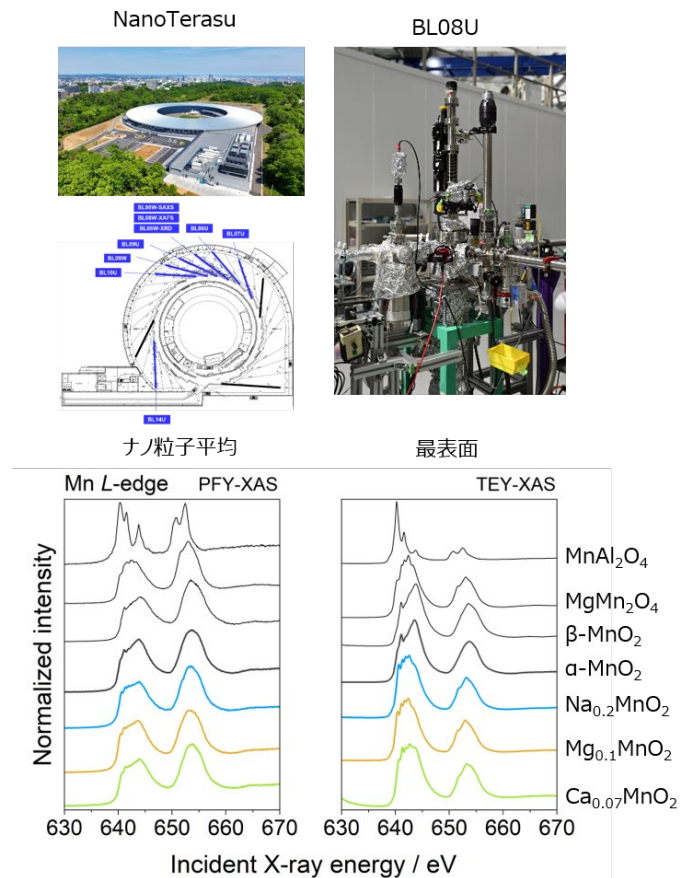


図2 カチオン挿入 $\alpha\text{-MnO}_2$ の XAS スペクトル。バルク敏感の PFY スペクトルと表面敏感の TEY スペクトルの比較により、 $\alpha\text{-MnO}_2$ ナノ粒子の表面はより顕著に還元反応が進行したことが示された。

3-2. 実施課題名 : Screening High-Performance Energy-Harvesting Semiconductors

構成員 Vu Thi Ngoc Huyen (金属材料研究所・助教)

1. 目的

The development of high-performance semiconductor materials is important for energy conversion and energy-efficient electronic applications. However, identifying suitable materials remains challenging because their performance is determined by several interconnected properties, including electronic structure, carrier transport, defect formation, and dopability.

The objective of this project is to identify promising semiconductor materials for energy applications using first-principles calculations and high-throughput screening. By systematically evaluating the electronic and defect properties of a large number of candidate materials, we aim to clarify the key factors that control their performance and establish practical guidelines for the design and discovery of new functional semiconductors.

2. 主要成果の概要

One of the main focuses of this project was the search for *p*-type oxide semiconductors. Developing *p*-type oxides remains challenging because the valence-band maximum (VBM) of most oxides is dominated by O $2p$ orbitals. This electronic structure often results in heavy holes and strong compensation by donor-type defects, particularly oxygen vacancies. A common approach to improve *p*-type dopability is to raise the VBM through hybridization between O $2p$ and cation orbitals. However, whether hole doping is possible in oxides whose VBM remains predominantly O $2p$ in character had not been systematically investigated.

To address this question, we performed a high-throughput first-principles screening of 845 stable oxides. The materials were screened based on oxygen-vacancy formation energies and the O $2p$ contribution to the VBM, reducing the number of candidates from 845 to 152 and then to 27. For the remaining candidates, detailed defect calculations were performed using the HSE06 hybrid functional to evaluate acceptor dopants and native defects. These calculations further narrowed the candidates to five oxides with potential for *p*-type doping.

Among these candidates, CaCdO_2 was identified as the most promising material. Our calculations show that hole doping can be achieved without significant compensation by native donor defects. CaCdO_2 also has a predicted optical band gap of 3.48 eV and nearly isotropic hole effective masses of approximately 1.8-1.9 m_0 . Analysis of its electronic structure indicates that even though the VBM is mainly composed of O $2p$ states, weak hybridization with Cd 4d states plays an important role in improving its *p*-type dopability.

These results show that a purely O 2*p*-dominated valence band is generally unfavorable for *p*-type doping and that some degree of hybridization with cation states is important for achieving *p*-type conductivity in oxide semiconductors. The high-throughput screening approach developed in this project provides a systematic way to identify promising materials and to understand the relationship between electronic structure, native defects, and dopability. These results provide useful guidelines for designing *p*-type oxide semiconductors for energy applications [1].

[1] Vu Thi Ngoc Huyen and Yu Kumagai, “Investigation of hole dopability in Oxygen 2*p*-Dominated Bands” , Chemistry of Materials **37**, 9505-9514 (2025).

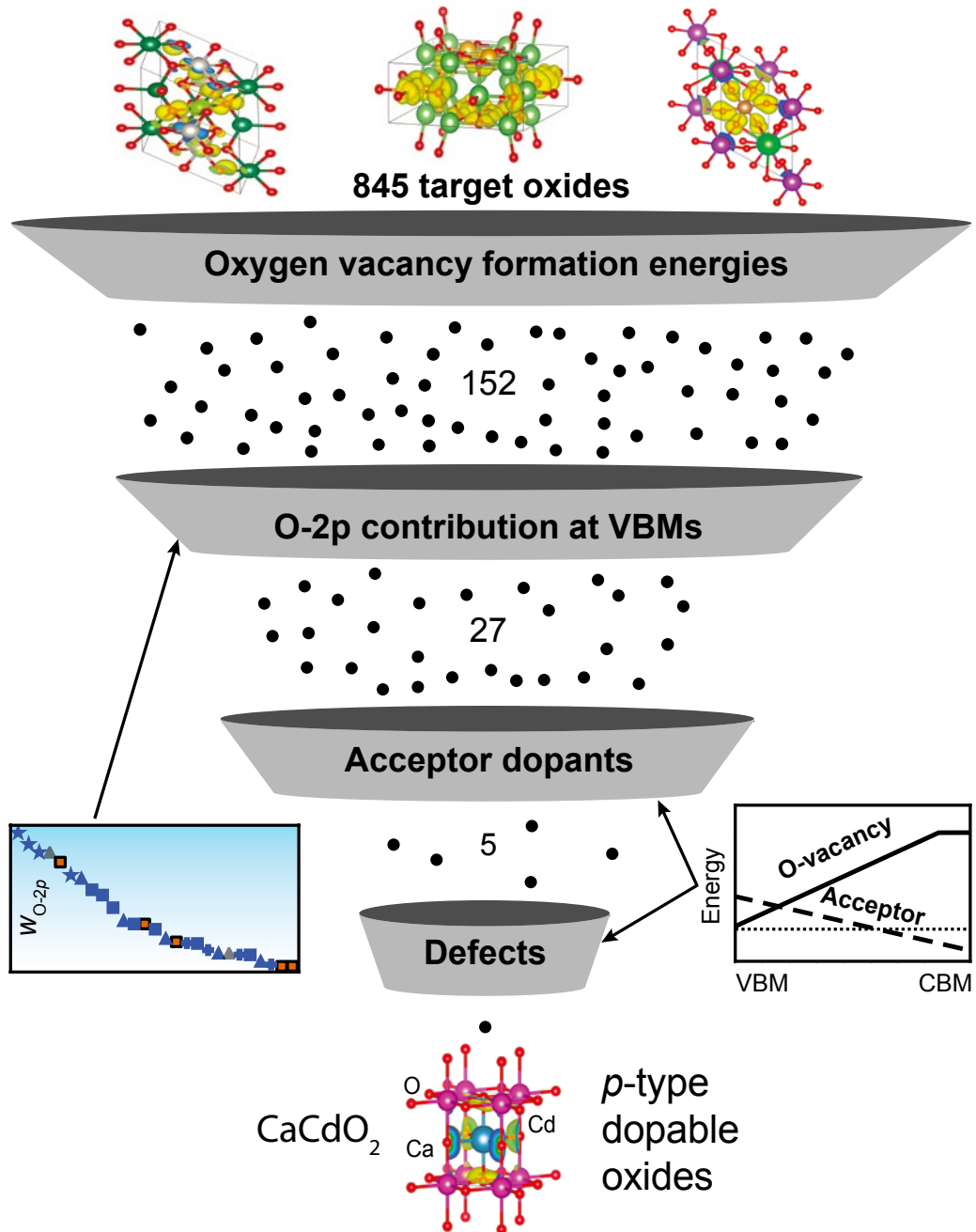


Figure 1: High-throughput screening oxides for *p*-type dopability.

3-3. 実施課題名：導電性と物質輸送が協奏する多孔性金属錯体格子の創出と光誘起キャリアによる制御

構成員 西山 智貴（金属材料研究所・助教）

1. 目的

本研究課題では半導体特性を有する分子性の多孔性金属錯体格子の創出を行い、それらの物質輸送(ガス応答)と電気伝導性の協奏をはかり、なおかつ光誘起キャリアによって伝導性とガス選択性・応答性・応答の回復速度の制御を行うことを目的とした。

近年、IoT社会の進展に伴い、省エネルギー型センサーや環境応答型デバイス、次世代スイッチング素子の開発が求められている。中でも、外部刺激に応答して物性が変化する多孔性材料が注目されており、特に電気伝導性はゲスト分子の吸着やホスト-ゲスト相互作用による構造・電子状態の変化に敏感に反応し、微小な変化でも信号が大きく変調される。さらに、多孔性による物質輸送と電荷輸送の協奏はセンサー用途にとどまらず、エネルギー変換や貯蔵を担う電極触媒や電池材料などへの応用展開も期待される。一方で、シリカゲルや活性炭、多孔性金属材料なども多孔性を有するものの、分子レベルで構造を調整可能な格子に電子的・磁氣的機能を付与し、それを物質輸送と協奏させる設計が可能なのは、MOF (Metal-Organic Framework) などの多孔性分子材料に限られる。しかしながら、そのように電荷輸送と物質輸送が協調的に機能する材料を自在に構築できる例は、現時点ではごくわずかに留まっている。特に、ガス吸着や特異ゲストの認識には構造の柔軟性が求められる一方で、伝導性の発現には分子配列の秩序性や剛直性が不可欠であり、相反する構造要件を両立し、分子性材料と無機材料の中間的性質を示す系においては、報告例・応用研究ともに極めて乏しいのが現状である。そこで本研究事業期間内において、以下の2点を明らかにするとともに、新たに単結晶伝導測定システムを立ち上げることができた。

- I. 新規な半導体特性を有する分子性の多孔性金属錯体格子の合成を行い、それらの構造同定および基礎物性の評価を行った。
- II. 上記で新たに合成された多孔性金属錯体格子の伝導度測定に向けて、ガス雰囲気下での測定が可能な温度可変単結晶伝導度システムを立ち上げた。電気伝導性ガス応答の測定には至らなかったものの、温度可変条件下における単結晶伝導度の軸異方性を確認した。

2. 主要成果の概要

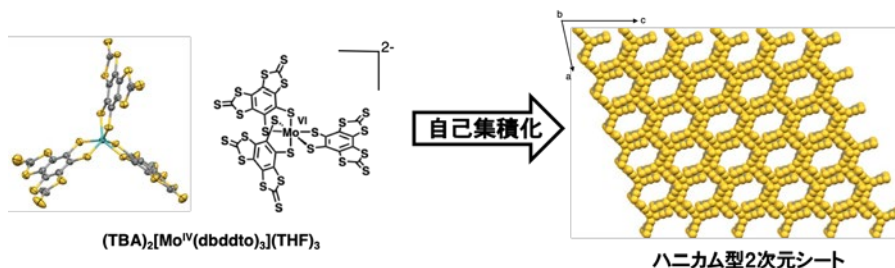


図1 本研究におけるターゲット分子

- I. 準備実験において Mo(IV)を用いた八面体配座のトリス錯体は、平面性の高いジチオレン配位子同士が強い $\pi-\pi$ 相互作用によって積層し、自発的に自己集積化することで細孔を有する構造を形成することを明らかにした（図 1）。これらの錯体は約 10^{-5} S/cm の電気伝導性と光応答性を兼ね備えた多孔性半導体として期待さ

れている。本研究では、このような半導体特性を有する分子性多孔性金属錯体格子を創製し、物質輸送（ガス応答）と電気伝導性を協奏させるとともに、光誘起キャリアによって伝導性やガス選択性、応答性および回復速度を制御できる新たな機能性材料の開発を目的とした。具体的には、Mo(IV)八面体配座トリス錯体に対して電界酸化を適用し、カウンターカチオンの脱離を伴う結晶化および細孔形成を目指した。サイクリックボルタンメトリー（CV）測定の結果、電界酸化が可能な電位領域に酸化還元活性を有することを確認したものの、研究期間内には目的とする多孔性金属錯体格子の結晶化には至らなかった。そのため、本研究では前駆体である細孔を持たない金属錯体格子の合成と構造解析、基礎物性評価を中心に検討を進めた。また、電界酸化条件や結晶化条件、合成経路についても検討を重ねたが、目的構造の形成には至らなかった。

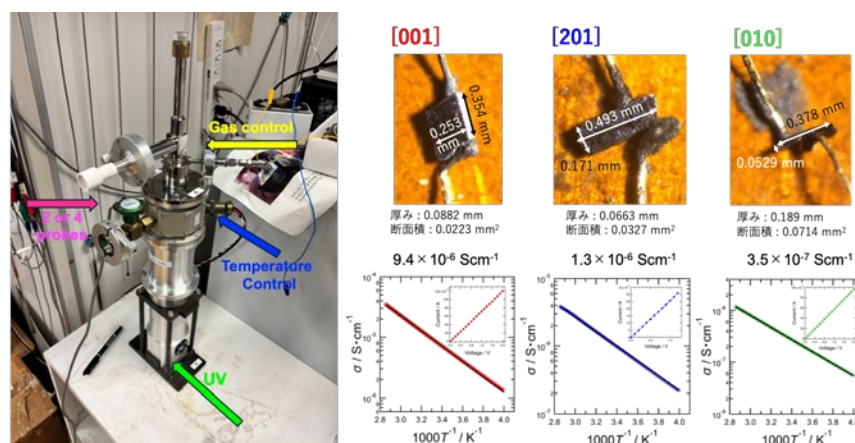


図2 温度依存性単結晶伝導度の軸異方性

- II. 予備実験で明らかにした電気伝導度はペレット試料を用いて測定された値であり、電極との接触抵抗や結晶粒界抵抗、さらに結晶内の伝導異方性などの影響を含んでいる。そのため、本質的な電荷輸送機構を解明するには、単結晶を用いた軸異方性を考慮した温度可変電気伝導度測定が不可欠であると考えた。当該研究室には PPMS を用いた電気伝導度測定装置を保有しているものの、液体 He 供給停止に伴い装置は休止状態となっていた。そこで本研究では、新たに温度可変単結晶電気伝導度測定システムを構築し、将来的なガス雰囲気下での測定にも対応可能な評価基盤を整備した。このシステムを用いて前駆体金属錯体格子の単結晶電気伝導度を測定した結果、明瞭な軸異方的伝導を示すことが明らかとなった（図 2）。さらに、温度依存性測定と結晶構造解析を組み合わせることで検討した結果、電荷輸送は分子間の強い π - π 相互作用に沿った特定方向で優先的に進行していることが示唆された。これらの成果は、分子配列および分子間相互作用が電気伝導特性を支配する重要な因子であることを示すものである。また得られた金属錯体格子は半導体特性を有するため光応答性を示し、光照射による伝導性変化が観測された。今後、電界酸化によって細孔構造を導入することができれば、「空間（細孔）」「伝導」「光」の三つの機能を統合した新たな分子性金属錯体格子へと発展できる可能性を示す重要な成果である。以上の成果を基盤として、学生が第 75 回錯体化学討論会においてこれらの研究成果をポスター発表し、ポスター賞を受賞した。

3-4. 実施課題名：ヘリカルスピнкаロリトロニクス現象の開拓

構成員 山崎 匠（金属材料研究所・助教）

増田 英俊（金属材料研究所・助教）

1. 目的

電子のスピン自由度を活用して熱流・電流・スピン流を相互に変換する「スピнкаロリトロニクス現象」は、熱流と電流が直交する横型熱電変換や絶縁体ベースの熱電変換など、従来のゼーベック効果では実現できない新たなエネルギーハーベスティング手法として注目を集めている。その研究対象は、強磁性体からコリニア反強磁性体、ノンコリニア反強磁性体へと、近年急速に広がってきている。

本研究では、磁気モーメントがらせん状にねじれた「ヘリカル磁性体」におけるスピнкаロリトロニクス現象の観測を通して、「ヘリカルスピнкаロリトロニクス」という新領域の開拓を目指す。代表研究者の所属する関研究室では、バルク単結晶の作製が困難なヘリカル磁性金属 MnAu_2 の単結晶薄膜成長を実現し、共同研究者の増田助教とともに、らせندメイン（カイラリティ）の制御と検出、およびヘリカル磁性金属に特有の電流－スピン流変換の観測に成功している[H. Masuda *et al.*, Nat. Comm. (2024)]. この変換効果では電流とスピン偏極の方向が揃っており、らせんの巻き方に応じてスピン偏極の平行／反平行が切り替わる [図1(b), (c)]。これは両者が直交する従来のスピントール効果 [図1(a)] とは異なる対称性であり、新たな熱－スピン変換の舞台となることが期待される。

本研究では、ヘリカル磁性由来のスピン流が誘起する「スピントルチェ効果」 [図2(a)]、および理論的に予言されながら未観測の「スピントッチングスハウゼン効果」 [図2(b)] の2種類のスピン流－熱流変換効果の観測を最終目標とする。

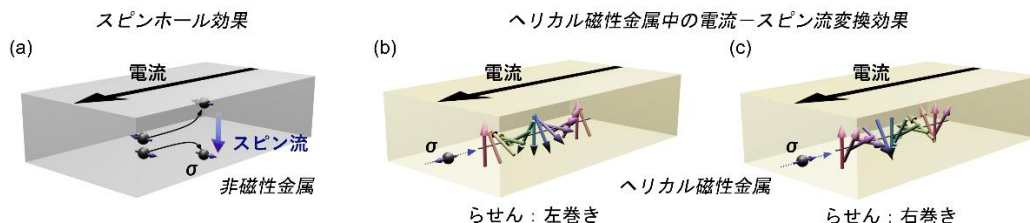


図 1 (a)スピントール効果と(b, c)ヘリカル磁性金属中の電流－スピン流変換効果の概念図。ヘリカル磁性金属中の電流－スピン流変換では、らせんの巻き方が左巻き(b)か右巻き(c)かでスピン偏極 σ の方向が変化する。

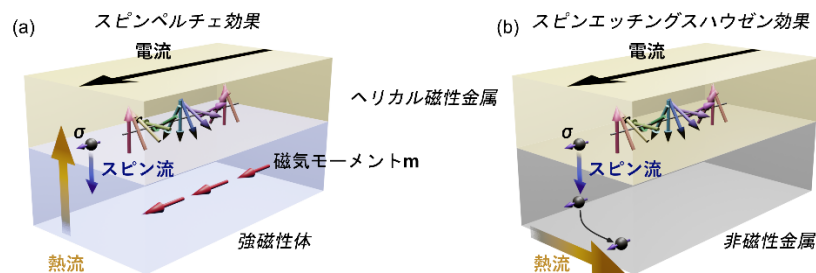


図 2 (a)スピントルチェ効果と(b)スピントッチングスハウゼン効果の概念図。ヘリカル磁性金属で生成されたスピン流が熱流へと変換される。

2. 主要成果の概要

本研究期間では、図2の現象を正確に評価するための測定基盤の確立に焦点を当て、以下の2項目を実施した。

(A) MnAu_2 単結晶薄膜における異方性熱電効果の観測

マグネトロンスパッタリング法により成膜した $\text{MnAu}_2(110)$ 単結晶薄膜に対し、マスクレスフォトリソグラフィとイオンミリングにより、熱電効果を測定可能なU字型デバイス〔図3(a)〕を作製した。このデバイスに矩形波電流および磁場を印加し、電流印加に対応した温度分布を物質・材料研究機構 内田グループのロックインサーモグラフィによりイメージングした。熱電効果の起源を明らかにするため、 x , y 方向 (x 方向: $\text{MnAu}_2[001]$) にそれぞれ磁場を印加して測定を行った。

取得した熱画像（温度振幅像、位相像）から、磁場に対する偶成分〔図3(b, c)〕と奇成分〔図3(d, e)〕を抽出した。偶成分像では、U字型デバイスの角部と矩形部エッジに局在した明瞭な温度分布が観測された。磁場を x , y 方向のいずれに印加しても位相分布（温度変化の符号に対応）が変化しなかったことから、この温度分布は MnAu_2 の磁性起源ではなく、結晶方位に依存したペルチェ係数に起因する異方性熱電効果に由来することが明らかとなった。さらに異方性熱電効果の縦応答・横応答がもつ対称性から、縦応答成分が角部に、横応答成分が矩形部エッジにそれぞれ局在して現れることを解明した。これらはスピンペルチェ効果・スピンエッチングスハウゼン効果の測定における寄生成分となり得るため、本結果を基に、その寄与を低減・分離するデバイス構造および測定条件の設計指針を確立した。

(B) 熱イメージング用デバイスにおけるカイラリティの制御と検出

項目(A)と並行して、熱イメージングに適した線幅の太いデバイスを用い、超伝導マグネット中での電流・磁場印加によるカイラリティ制御と、非相反抵抗測定によるカイラリティ検出を行った。その結果、低温下で電流と磁場を同時に印加することにより、 MnAu_2 のヘリカル磁性の転移温度（約 360 K）を超えない条件でカイラリティを制御できることを実証した。

以上の成果により、 MnAu_2 におけるヘリカルスピンカロリトロニクス現象の観測に不可欠な測定基盤を確立した。今後は、本研究で得られた設計指針に基づくデバイスを用いて、ヘリカル磁性由来のスピン流がもたらすスピンペルチェ効果およびスピンエッチングスハウゼン効果の直接観測に挑み、ヘリカルスピンカロリトロニクスという新領域の確立を目指す。

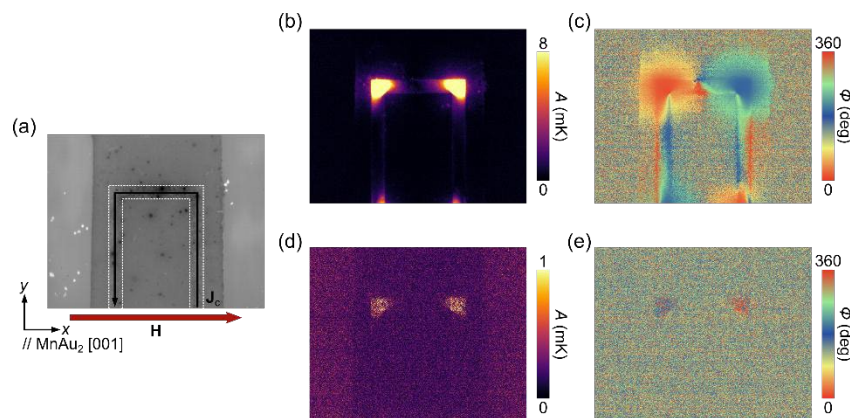


図3 (a)ロックインサーモグラフィにより取得した定常熱画像。白破線で囲われたU字型デバイスに電流 J_c および磁場 H を印加。(b, c)磁場に対する偶成分の(b)温度振幅像および(c)位相像。(d, e)磁場に対する奇成分の(d)温度振幅像および(e)位相像。

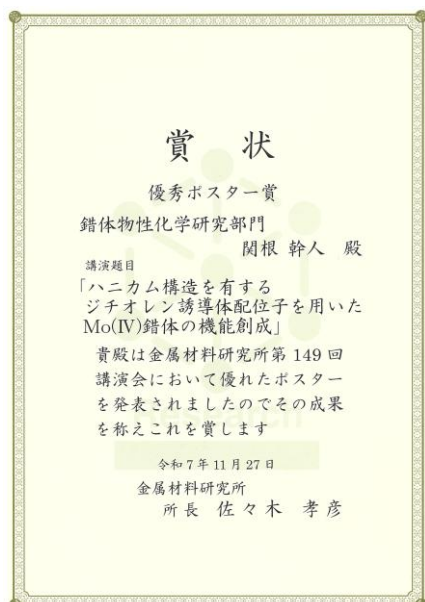
3-5.受賞リスト

関根幹人

金属材料研究所第 140 回講演会

優秀ポスター賞

2025 年 11 月 27 日



関根幹人

錯体化学会第 75 回討論会

ポスター賞

2025 年 9 月 16 日



4. 新聞発表等

4-1. プレスリリース

1. 強磁性窒化鉄において磁気ひずみの巨大変調を実証フレキシブルなスピントロニクス素子のための新材料として期待
2025 年 4 月 3 日
〔プレスリリース本文〕 # 関研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1727.html>
2. 室温に近い温度でスルフィドからスルホンを選択的に合成 ―高性能な六方晶ペロブスカイト酸化物ナノ粒子触媒を開発―
2025 年 4 月 7 日
〔プレスリリース本文〕 # 熊谷研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1729.html>
3. 結晶多形の選択機構をコロイド結晶により解明 ―創薬や新材料開発で結晶多形の制御への貢献に期待―
2025 年 4 月 10 日
〔プレスリリース本文〕 # 藤原研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1735.html>
4. 新物質を見つけるための地図を機械学習で開発して公開 3 元素の反応可能性をまとめた「元素反応性マップ」80 枚から、有望な元素の組 3,000 種類を提案
2025 年 4 月 15 日
〔プレスリリース本文〕 # 藤原研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1739.html>
5. 機械学習が解き明かす新たな水素化反応メカニズム ―超高密度水素貯蔵材料開発への画期的突破口―
2025 年 6 月 2 日
〔プレスリリース本文〕 # 折茂研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1751.html>
6. 100°C以下の熱も高密度で蓄えられるナノシートを開発低温廃熱の回収・再利用によりカーボンニュートラル実現貢献へ
2025 年 6 月 24 日
〔プレスリリース本文〕 # 市坪研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1755.html>

7. 硫化物系電池材料の特性を巡る長年の謎を解明 規則・不規則構造の硫化物系材料の充放電反応機構の詳細解析
2025 年 7 月 16 日
〔プレスリリース本文〕 # E-IMR
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1760.html>
8. 層状物質への小分子の吸脱着で磁気フラストレーション相の可逆的切り替えに成功わずかな外部刺激で動作する分子デバイスへの応用に期待
2025 年 8 月 8 日
〔プレスリリース本文〕 # 宮坂研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1766.html>
9. ガラスは温度の上下を繰り返すと若返る？ ―電子状態の変化―
2025 年 8 月 29 日
〔プレスリリース本文〕 # 市坪研 # 加藤研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1770.html>
10. 固体電解質の従来の 2 大焼結法で特性に差異がでないことを確認 ―電気自動車などに用いる全固体電池の早期実用化に道―
2025 年 9 月 16 日
〔プレスリリース本文〕 # 加藤研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1777.html>
11. 室温作動する高起電力マグネシウム蓄電池を試作資源豊富なマグネシウムを用いて資源制約フリーを目指す
2025 年 9 月 18 日
〔プレスリリース本文〕 # 市坪研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1778.html>
12. AI 時代を支える新磁性体、二酸化ルテニウム薄膜の「交代磁性」を実証 ～AI・データセンター向け高速・高密度メモリ開発に期待～
2025 年 9 月 25 日
〔プレスリリース本文〕 # 関研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1780.html>
13. 酸素の吸着で磁石の変遷を観る 酸素の電子スピンを利用した分子デバイスへの応用に筋道
2025 年 10 月 2 日
〔プレスリリース本文〕 # 宮坂研
<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1784.html>
14. 電子スピンのトルクを 2 重にして磁壁移動を実現 次世代スピントロニクスメモリの省エネルギー・高速動作に道
2025 年 10 月 20 日

〔プレスリリース本文〕 # 関研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1790.html>

15. 材料に潜む「欠陥」を予測する新 AI 技術を開発 ―新材料探索の新たな基盤技術として期待―
2025 年 12 月 12 日

〔プレスリリース本文〕 # 熊谷研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1820.html>

16. モアレ量子材料における新たなブレイクスルー
2026 年 1 月 16 日

〔プレスリリース本文〕 # E-IMR

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1828.html>

17. 科学論文の図表を読み解き、有効に利活用する AI ワークフローDIVE を開発―水素貯蔵材料等の研究を加速―
2026 年 2 月 4 日

〔プレスリリース本文〕 # 折茂研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1836.html>

18. 圧縮試験時の接触状態が金属ガラスに伸びをもたらすメカニズムを解明 ―脆性改善に向けた材料設計の新たな指針を提示―
2026 年 2 月 19 日

〔プレスリリース本文〕 # 加藤研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1841.html>

19. 次世代「ナトリウムイオン電池」の充電メカニズムを世界で初めて直接観測！ ― 中性子散乱を用いたマルチスケール観測で、ハードカーボンの謎を特定 ―
2026 年 2 月 27 日

〔プレスリリース本文〕 # 藤田研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1842.html>

20. 電流印加によってエネルギー的に不安定な方位にスピンを安定化させることに成功 ―大きなスピンのゆらぎを使った新原理コンピューティングに道―
2026 年 3 月 5 日

〔プレスリリース本文〕 # 関研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1847.html>

21. 室温かつ短時間で、リチウム金属とガーネット型酸化物固体電解質の界面形成に成功 ―全固体電池の実用化を後押しする新しい手法―
2026 年 3 月 24 日

〔プレスリリース本文〕 # 加藤研

<https://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/news/results/detail---id-1864.html>

4-2. 新聞等掲載状況

1. 日本経済新聞(電子版) # 関研
2025 年 4 月 3 日 東北大、NIMS と共同で強磁性窒化鉄において磁気ひずみの巨大変調を実証
2. 日本経済新聞(電子版) # 藤原研
2025 年 4 月 9 日 東北大と金沢大、結晶多形の選択機構をコロイド結晶により解明
3. 日刊工業新聞(電子版) # 関研
2025 年 4 月 10 日 東北大、窒化鉄の磁気正負反転 ひずみを変調
4. 日本経済新聞(電子版) # 市坪研
2025 年 6 月 24 日 東北大と原子力機構、100℃以下の熱も高密度で蓄えられるナノシートを開発
5. Tii 技術(電子版) # 高橋研
2025 年 9 月 16 日 コヒーレント X 線により金属材料内部のナノ構造変化を“動画”で観察 —高性能材料開発に繋がる新手法—
6. 日本経済新聞(電子版) # 高橋研
2025 年 9 月 16 日 コヒーレント X 線により金属材料内部のナノ構造変化を“動画”で観察 —高性能材料開発に繋がる新手法—
7. STELLA 通信(電子版) # 高橋研
2025 年 9 月 17 日 ナノテラス使った実験 初の学術論文発表
コヒーレント X 線により金属材料内部のナノ構造変化を“動画”で観察 —高性能材料開発に繋がる新手法—
8. 日本経済新聞(電子版) # 関研
2025 年 10 月 17 日 東北大など、電子スピンのトルクを 2 重にして磁壁移動を実現
9. マイナビニュース(電子版) # 関研
2025 年 10 月 20 日 東北大などが電子スピンの二重トルクで磁壁移動を実証 - 次世代メモリに光
10. EE Times Japan(電子版) # 関研
2025 年 10 月 23 日 省エネで高速動作のスピン트로ニクスメモリ実現へ、東北大ら
11. 日本経済新聞(電子版) # 高橋研
2025 年 11 月 7 日 広帯域 X 線対応タイコグラフィ装置を開発 —ナノテラス活用で高精度な元素・構造分析を実現—

12. アドコムメディアオンライン(電子版) # 高橋研
2025 年 11 月 10 日 広帯域 X 線対応タイコグラフィ装置を開発 ―ナノテラス活用で高精度な元素・構造分析を実現―
13. OPTRONICS ONLINE(電子版) # 高橋研
2025 年 11 月 11 日 軽元素を含む CMOS イメージセンサー内部を非破壊で 3 次元可視化 ―NanoTerasu の高輝度テンダーX 線が拓くナノ構造解析の新展開―
14. OPTRONICS ONLINE(電子版) # 高橋研
2025 年 11 月 12 日 広帯域 X 線対応タイコグラフィ装置を開発 ―ナノテラス活用で高精度な元素・構造分析を実現―
15. 科学新聞(紙媒体) # 高橋研
2025 年 11 月 14 日 広帯域 X 線対応タイコグラフィ装置を開発 ―ナノテラス活用で高精度な元素・構造分析を実現―
16. 日本経済新聞(電子版) # 高橋研
2025 年 11 月 24 日 軽元素を含む CMOS イメージセンサー内部を非破壊で 3 次元可視化 ―NanoTerasu の高輝度テンダーX 線が拓くナノ構造解析の新展開―
17. 日本経済新聞(電子版) # 関研
2026 年 3 月 10 日 低電力「スピントロニクス」日本で進化 AI 向け新型チップも視野
18. EE Times Japan (電子版) # 関研
2026 年 3 月 10 日 低電力電流印加で不安定な方位にスピンを安定化、東北大ら

4-3. 知的財産権

【特許出願】

出願件数・ 4 件 (非公開期間中)

5. 各種受賞・表彰

5.受賞リスト

熊谷 悠

第 22 回日本学術振興会賞

セラミック材料における点欠陥の計算科学研究の推進とデータベースの創成

2025 年 12 月 16 日

https://www.jsps.go.jp/file/storage/j-jsps-prize/kettei/r7/22nd_JSPSprize_reason_jp.pdf

https://www.jsps.go.jp/file/storage/j-jsps-prize/kettei/r7/22nd_JSPSprize_list_jp.pdf



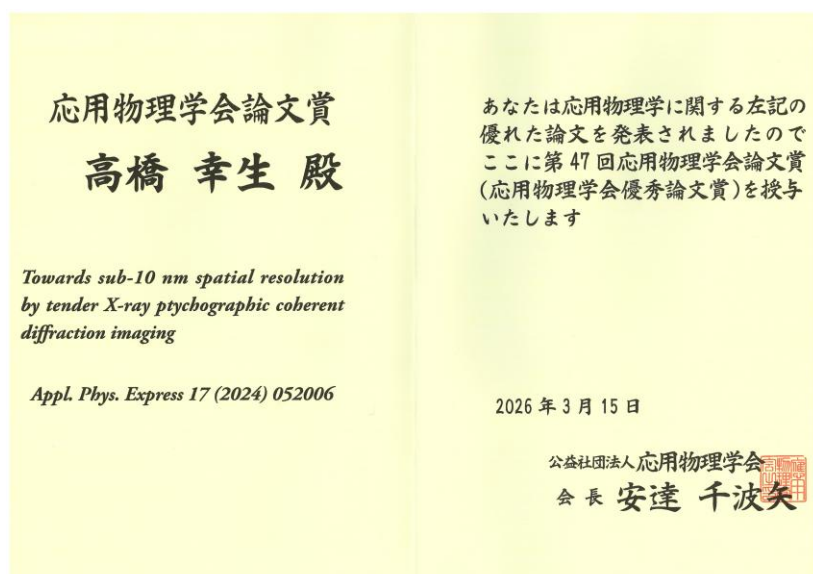
高橋幸生、石黒志、金子房恵、阿部真樹、高山裕貴、吉田純也、星野大樹、高澤駿太郎、上松英司、佐々木雄平、大川成、高橋慧智、滝沢寛之、岸本浩通

第 47 回応用物理学会優秀論文賞

“Towards Sub-10 nm Spatial Resolution by Tender X-ray Ptychographic Coherent Diffraction Imaging”

2026 年 3 月 15 日

<https://www.jsap.or.jp/outstanding-paper-award/recipients47>



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			
塚崎 敦	基盤研究（A）	期間：202204-202703	代表者
電気化学エッチング法で創製するカゴメ金属単原子層の物性科学			
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			
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ー酸化物電極材料の開拓			

6-2. 科研費以外の競争的研究費

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			

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 2025 （エネルギー材料研究会）



2025.6.16 (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 2025
(エネルギー材料研究会)
2025.6.16 (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 市坪 哲 [E-IMRセンター長/金属材料研究所教授]
【研究発表】	
15:35 - 15:55	「室温近傍での水素分子吸着を目指した様々な金属種を有するフタロシアニン系シート型COFの合成」 古川 翔一 [材料科学高等研究所/特任助教]
15:55 - 16:15	「放射光先端顕微分光による電池材料の化学状態イメージング～X線タイコグラフィとその先～」 石黒 志 [国際放射光イノベーション・スマート研究センター/准教授]
16:15 - 16:35	「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」 芳野 遼 [金属材料研究所/助教]
【休憩・10分】	
16:45 - 17:05	「磁性窒化物における磁気弾性特性の巨大変調」 伊藤 啓太 [エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教]
17:05 - 17:25	「コロイドヘテロエピタキシャル成長における多段階結晶化プロセス」 野澤 純 [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]
17:25 - 17:30	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]

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 2025 (エネルギー材料研究会)

日 時：2025(令和 7)年 6 月 16 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】

室温近傍での水素分子吸着を目指した様々な金属種を有するフタロシアニン系
シート型COFの合成

材料科学高等研究所/ 特任助教 古川 翔一

放射光先端顕微分光による電池材料の化学状態イメージング～X線タイコグラフィ
とその先～

国際放射光イノベーション・スマート研究センター/ 准教授 石黒 志

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

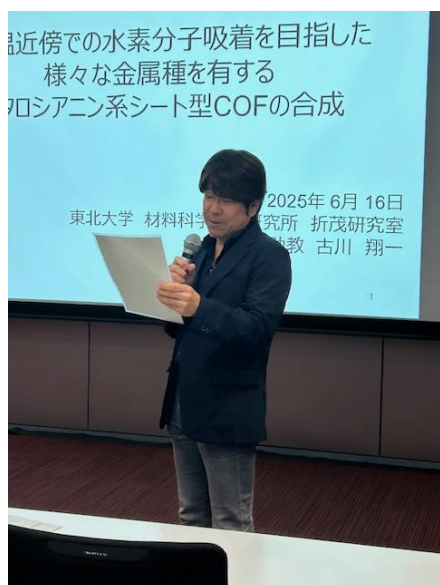
金属材料研究所/ 助教 芳野 遼

磁性窒化物における磁気弾性特性の巨大変調

エネルギー変換材料研究ユニット/助教 伊藤 啓太

コロイドヘテロエピタキシャル成長における多段階結晶化プロセス

エネルギー変換材料研究ユニット/特任助教 野澤 純







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

サテライトワークショップ 2025.12.3 [水] 13:30 – 15:30

「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—」

京都大学工学研究科材料工学専攻
准教授 野瀬嘉太郎先生

本講演では、キャリア再結合の観点から太陽電池の高効率化戦略について議論する。短絡電流密度（J_{sc}）は太陽電池が取り出し得る最大電流を規定し、その値を放射限界に近づけることは重要な課題である。しかし、従来の解析では、動作下（短絡条件下）におけるJ_{sc}損失を体系的に理解する枠組みが十分に確立されていない。まず本講演では、デバイスシミュレーションを援用し、光照射下における余剰キャリアの空間分布と、それが再結合に及ぼす影響について紹介する。

続いて、デバイス効率が理論限界から大きく乖離している新規多元系化合物半導体 ZnSnP₂太陽電池を例に、電流損失の主因となるバルクおよび界面での非放射再結合について検討した成果を紹介する。バルク再結合については、Deep Level Transient Spectroscopy（DLTS）と第一原理計算を組み合わせることで支配的欠陥を同定し、結晶成長時の化学ポテンシャル制御によりその生成を抑制できることを示す。また界面再結合については、最近我々が進めているフォトリフレクタンス（PR）、およびElectrically-biased PR（EBPR）によるpn界面評価の結果を紹介する。PR/EBPRは光学的に界面領域を選択的に検出できるため、動作バイアス条件下における界面電界の推定と界面トラップ密度の定量を非破壊的に実施可能である。

以上の知見に基づき、ZnSnP₂におけるキャリア再結合経路の特定と界面工学による抑制戦略について議論する。本研究は、化合物太陽電池における再結合損失の理解を深化させ、次世代高効率デバイス設計の指針を提供するものである。

会 場

東北大学金属材料研究所
2号館 7階セミナー室



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

7-2. 先端エネルギー材料理工共創研究センター(E-IMR)

サテライトワークショップ

日 時：2025(令和 7)年 12 月 3 日 (水) 13:30－15:30

場 所：東北大学金属材料研究所 2 号館 7 階セミナー室

【講演】

「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—」

京都大学工学研究科材料工学専攻

准教授野瀬嘉太郎先生





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

2025年度ワークショップ

2025.12.4 [木]

13:00 – 17:00



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

ご登録はこちらから

会 場

東北大学金属材料研究所
2号館 講堂
(オンライン併用)

参加無料



<https://docs.google.com/forms/d/e/1FAIpQLSeh61KArwFnwd9z0LvjavOsmNnqDHY0cfz83WcfiSAPP5YHhQ/viewform>



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 2025年度ワークショップ 2025.12.4 (木) 13:00-17:00

時間	コンテンツ・講演者
12:50	開場
13:00 - 13:05	開会あいさつ 市坪 哲 [E-IMRセンター長]
【招待講演】	
13:05 - 13:35	招待講演 1 「題目：国立大学法人等の学術研究を取り巻く状況について」 熊谷 果奈子氏 [文部科学省 研究振興局大学研究基盤整備課 課長補佐]
13:35 - 13:45	質疑応答
13:45 - 14:30	招待講演 2 「題目：大阪公立大学全固体電池研究所における研究開発」 林 晃敏氏 [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 東北大学金属材料研究所教授（兼務）]
14:30 - 14:40	質疑応答
14:40 - 14:50	休憩（10分）
【研究発表】	
14:50 - 15:05	「マグネシウム蓄電池の実現に向けた電極界面設計指針の解明」 李 弘毅 [蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所助教]
15:05 - 15:20	「水素貯蔵材料開発を目指した高圧合成法による新規水素化物の探索」 佐藤 豊人 [蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所准教授]
15:20 - 15:35	「多孔性磁性体の酸素吸着による連続的磁気相変換」 宮坂 等 [蓄エネルギー変換材料研究ユニット長/金属材料研究所教授]
15:35 - 15:50	「Ba-Zr系プロトン伝導体の焼結性とプロトン伝導性に及ぼすCuO添加効果」 高村 仁 [蓄エネルギー変換材料研究ユニット/東北大学工学研究科教授]
15:50 - 16:05	「半導体材料の融液成長」 藤原 航三 [エネルギー変換材料研究ユニット長/金属材料研究所教授]
16:05 - 16:15	休憩（10分）
16:15 - 16:30	「マルチマテリアル化を促進する相分離系異種金属間デアロイング接合」 加藤 秀実 [複合モジュール・社会実装研究ユニット長/金属材料研究所教授]
16:30 - 16:45	「磁性窒化物多層膜におけるスピнкаロリトロニクス機能」 関 剛斎 [エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所教授]
16:45 - 16:50	閉会あいさつ 市坪 哲 [先端エネルギー材料理工共創研究センター長/金属材料研究所教授]

7-3. 先端エネルギー材料理工共創研究センター(E-IMR)

2025 年度ワークショップ

日 時：2025(令和 7)年 12 月 4 日 (木) 13:00－17:00

場 所：東北大学 金属材料研究所講堂（オンライン併用）

【招待講演 1】

国立大学法人等の学術研究を取り巻く状況について

文部科学省 研究振興局大学研究基盤整備課 課長補佐 熊谷 果奈子氏

【招待講演 2】

大阪公立大学全固体電池研究所における研究開発

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

東北大学金属材料研究所教授（兼務）林 晃敏氏

【E-IMR 研究発表】

マグネシウム蓄電池の実現に向けた電極界面設計指針の解明

蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所 助教 李 弘毅

水素貯蔵材料開発を目指した高压合成法による新規水素化物の探索

蓄エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所 准教授 佐藤 豊人

多孔性磁性体の酸素吸着による連続的磁気相変換

蓄エネルギー変換材料研究ユニット長/金属材料研究所 教授 宮坂 等

Ba-Zr 系プロトン伝導体の焼結性とプロトン伝導性に及ぼす CuO 添加効果

蓄エネルギー変換材料研究ユニット/東北大学工学研究科 教授 高村 仁

半導体材料の融液成長

エネルギー変換材料研究ユニット長/金属材料研究所 教授 藤原 航三

マルチマテリアル化を促進する相分離系異種金属間デアロイング接合

複合モジュール・社会実装研究ユニット長/金属材料研究所 教授 加藤 秀実

磁性窒化物多層膜におけるスピントロニクス機能

エネルギー変換材料研究ユニット/金属材料研究所 教授 関 剛斎





8. 職員及び運営委員名簿

令和 7（2025）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）	塚崎 敦
教授（兼）	熊谷 悠
教授（兼 AIMR※1）	Bauer, Gerrit Ernst-Wilhelm
教授（兼 CSIS※3）	紅林 秀和
教授（兼 AIMR※1）	折茂 慎一
教授（兼 工学研究科）	高村 仁
教授（兼 SRIS※2）	高橋 幸生
准教授	Belosludov, Rodion Vladimirovich
准教授（兼）	岡本 範彦
准教授（兼）	佐藤 豊人
准教授（兼）	野澤 純
助教（兼）	伊藤 啓太
助教（兼）	李 弘毅
助教（兼 CSIS※3）	Troy Dion
特任助教	宋 瑞瑞
特任助教	周 子奇
特任助教	楊 凡
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

※3 CSIS：先端スピントロニクス研究開発センター

**令和 7（2025）年度 先端エネルギー材料理工共創研究センター
運営委員会委員**

組織（先端エネルギー材料理工共創研究センター内規第 5 条）：委員長及び次の各号に掲げる委員

（１）研究所（センターを除く。）の教授又は准教授 若干人

（２）センターの教授又は准教授 若干人

（３）研究所の事務部長

（４）その他委員長が必要と認めた者 若干人

任期：第 5 条第 1 号及び第 4 号に掲げる委員 2 年（再任を妨げない）

令和 7（2025）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- R8(2026).3.31	5 条 1 号 所 長
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
金属材料研究所	教 授	笠田 竜太	R6(2024).4.1- R8(2026).3.31	5 条 1 号
工学研究科	教 授	高村 仁	R6(2024).4.1- R8(2026).3.31	5 条 4 号
S R I S※	教 授	高橋 幸生	R6(2024).4.1- R8(2026).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

※ S R I S：国際放射光イノベーション・スマート研究センター

令和 8 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。