

# 環境エネルギー材料研究拠点

コーディネーター  
鍋島達弥教授(化学)

物質変換材料研究部門  
部門長:  
中村潤児教授

エネルギー変換・貯蔵物質部門  
部門長:  
守友 浩教授

説明者: 守友 浩

使命: 持続可能な社会の構築に向け、高効率な物質変換やエネルギー変換およびエネルギー貯蔵、さらには再生可能エネルギーの高効率利用を可能にする革新的物質・素材・材料を開発する。

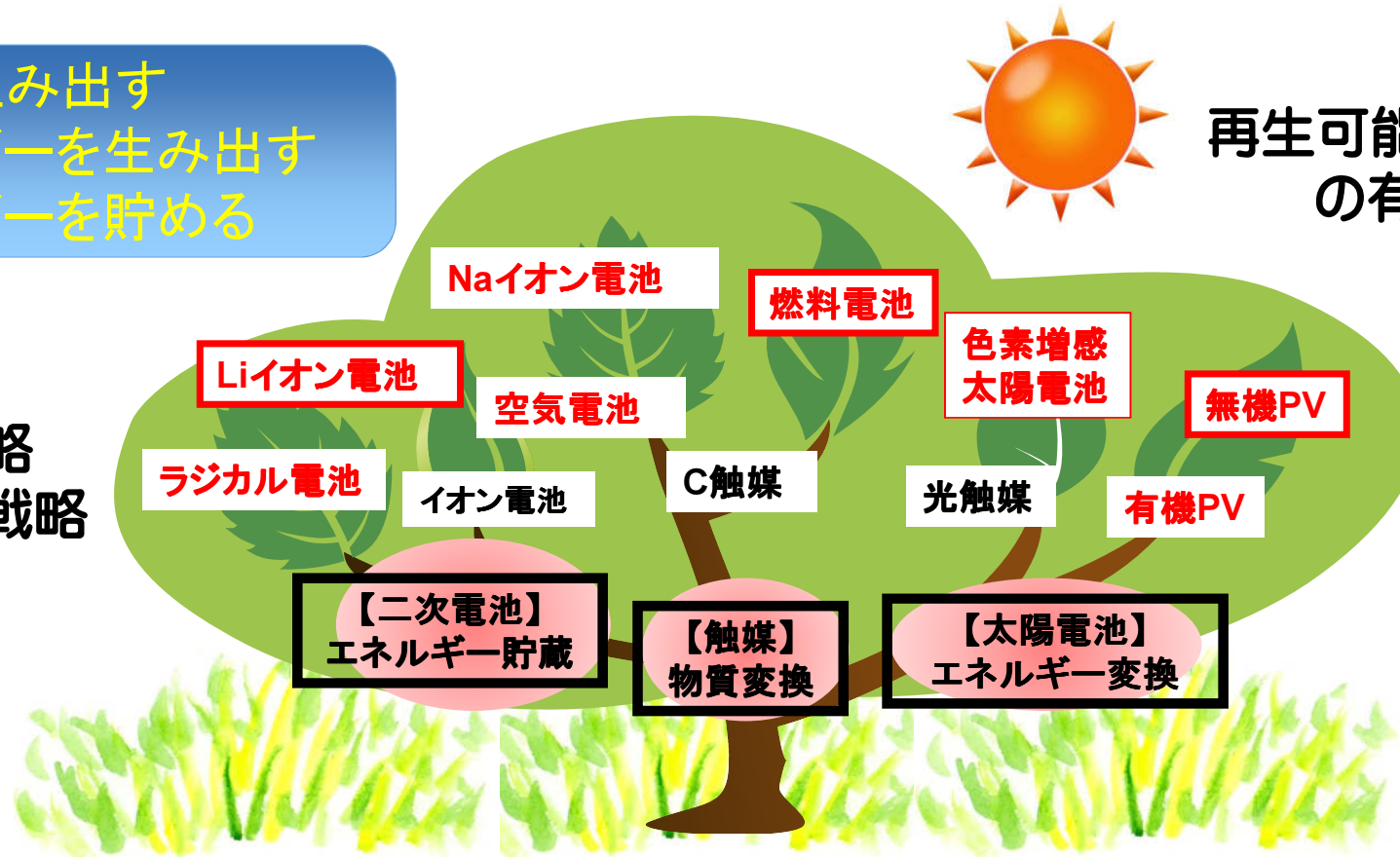
# 環境エネルギー材料研究拠点

物質を生み出す  
エネルギーを生み出す  
エネルギーを貯める



再生可能エネルギー  
の有効利用

代替元素戦略  
代替同素体戦略



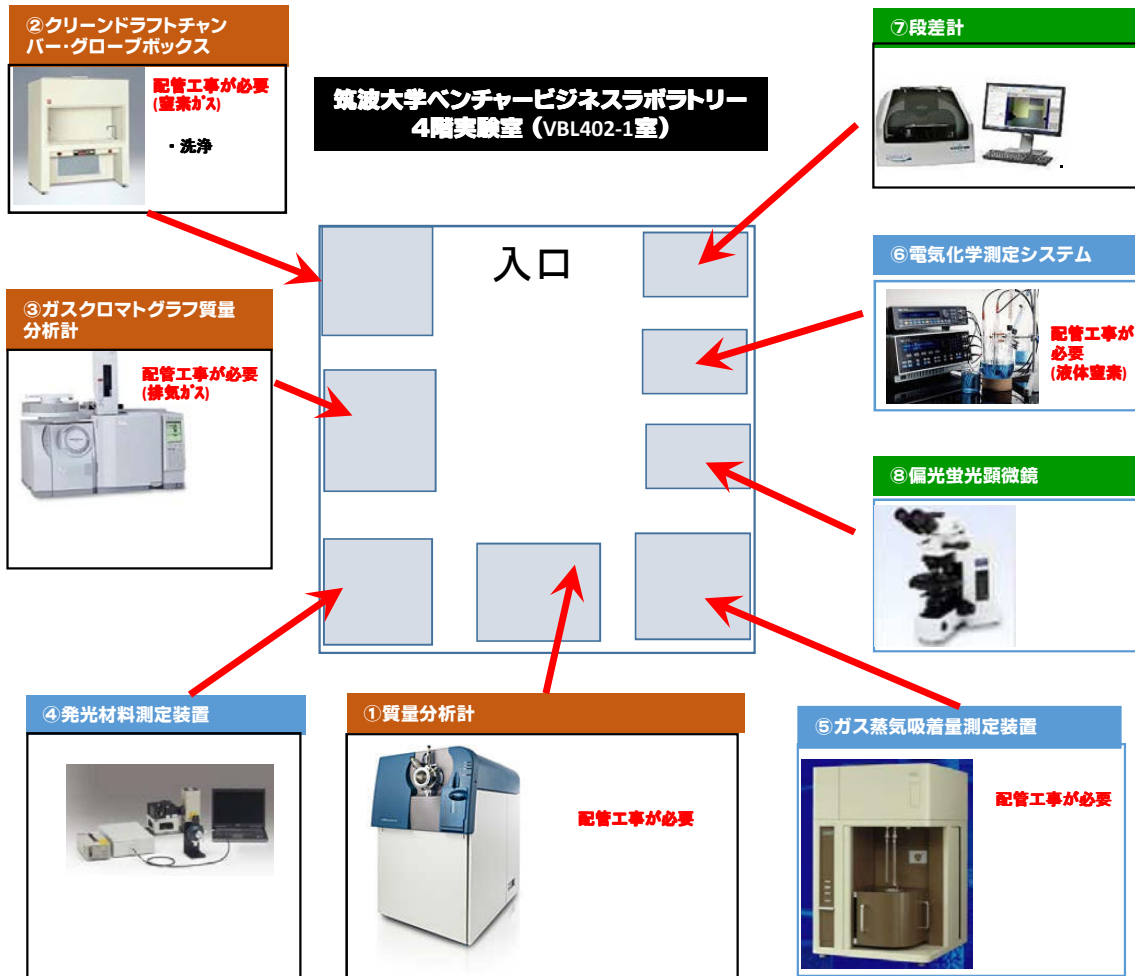
新エネルギーと新物質が作るエネルギー系統樹



# 学際物質科学研究セから 数理物質科学融合セへ

- 2003年11月：学際物質科学研究センター開所（4研究コア）
- 2004年10月：融合物質生命コアが加わる（5研究コア）
- 2006年6月：アトミックテクノロジー創出事業スタート
- 2008年10月：台湾・国立清華大学学長の表敬訪問
- 2011年4月：学際物質科学研究センター新体制スタート（9研究コア）
- 2012年12月：TIMS客員研究員として新たに5名採用
- 2013年8月：TIMS客員教員として新たに10名の教授・准教授を採用
- 2013年8月：筑波大学開学40 + 101周年事業を共催
- 2014年9月：数理物質科学融合セに2部門を開設

# 学内共用実験設備 (VBL402-1)



TIS関連予算でナノグリーン  
分野の装置群を整備

TIMSが管理

# エネルギー変換・貯蔵物質部門

部門長: 守友 浩

1. 物性物理学の視点から、エネルギー物質とエネルギープロセスを原理的かつ俯瞰的に理解する。(エネルギーデバイス→サイエンス)
2. 革新的発想で、高効率エネルギー変換物質と高容量エネルギー貯蔵物質を創製を目指す。(サイエンス→エネルギーデバイス)

## これまでの主な活動

|                            |               |
|----------------------------|---------------|
| 「ナノ分子磁性体の化学・物理・応用」         | 2008/11/28-29 |
| 「プルシャンブルー類似体の電子構造と構造物性」    | 2009/8/21     |
| 「先端光計測と光応答性材料」             | 2009/3/13-14  |
| 「筑波大学と KEK との連携を目指して」      | 2009/8/27-28  |
| 「筑波大学と KEK との研究連携を目指して」    | 2009/11/2-3   |
| 「XAFS と機能性物質」              | 2009/12/21-22 |
| 「筑波大ーKEK 連携の在り方とその広がりー」    | 2010/1/20     |
| 「筑波大-KEK 連携事業キックオフ・シンポジウム」 | 2010/5/26     |
| 「熱電変換材料と新規機能物質」            | 2010/12/17-18 |
| 「有機太陽電池の基礎と応用」             | 2011/1/28-29  |
| 「二次電池と燃料電池の科学と技術」          | 2011/11/18-19 |
| 「物性物理学の視点からの二次電池研究」        | 2012/10/22    |

# これまでの主な活動

KEK連携支援事業第一期(2009-2011)

代表:守友 浩

KEK連携支援事業第二期(2012-2014)

代表:守友 浩

2013.3-

リサーチユニット「量子ビーム」

固体物性G:3名

分子物性G:6名

トポロジカル物性:7名

先端評価・計測G:11名

2014.3-

光量子産業応用イニシアチブ

(TIA-ACCELERATE)

光量子発生技術スクエア  
(光量子発生技術開発)

(主なテーマ)

- SiC半導体を用いた高性能加速器電源開発
- 超小型加速器開発

光量子ナノ材料スクエア  
(光量子ナノ材料構造解明)

(主なテーマ)

- 構造材料
- 環境・エネルギー
- エネルギー材料
- 基礎物性

光量子センシングスクエア  
(光量子計測技術開発)

(主なテーマ)

- SOI技術
- 超伝導検出器
- 大型環境イメージング

エネルギー変換・貯蔵部門



筑波大学  
University of Tsukuba



KEK  
大学共同利用機関法人  
高エネルギー加速器研究機構



独立行政法人  
物質・材料研究機構



産総研  
独立行政法人産業技術総合研究所

# 照準デバイスと構成員

## 照準デバイス

変換：有機系太陽電池、熱電変換…

貯蔵：ナトリウムイオン二次電池…

守友 浩 教授：

配位高分子材料、有機薄膜太陽電池、ペロブスカイト型太陽電池

西堀英治 教授：

電子レベル構造解析、金属間化合物、コヒーレントX線応用、

(小林 航 助教)

層状酸化物材料、酸化物系熱電変換材料

2014.9.1現在、段階的に補強予定

# コンセプト

基礎研究

応用研究

実用研究  
(市場)

有機系太陽電池



熱電変換



二次電池



イオン貯蔵



.....

~2018

~2023

# エネルギー分野には、 真理探究に値する課題はないのか？

有機薄膜太陽電池：日本応用物理学会「有機太陽電池セッション」

疑問、または、物理屋のこだわり

「有機物の励起子の束縛エネルギーは数千度である。それにもかかわらず、どうして、電荷生成効率が100%ちかいのか？」

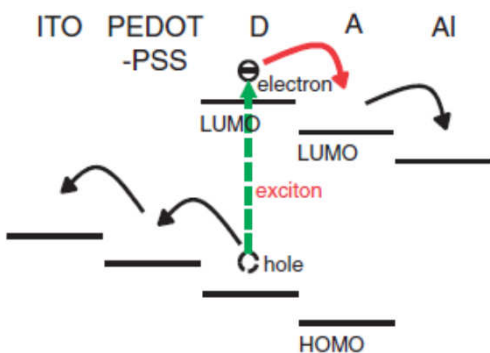
リチウムイオン二次電池：電池討論会

疑問、または、物理屋のこだわり

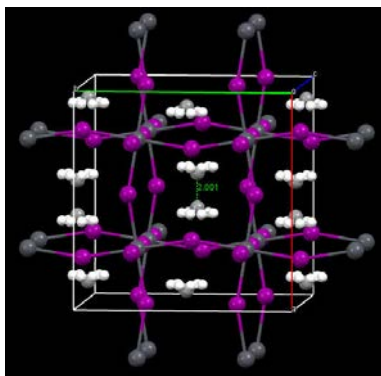
「 $\text{LiCoO}_2$ は最密充填構造である。それにもかかわらず、どうして、Liの可逆的な出入りが可能なのか？」

これらの明快な回答が得られるならば、物質設計くらいは簡単に思える

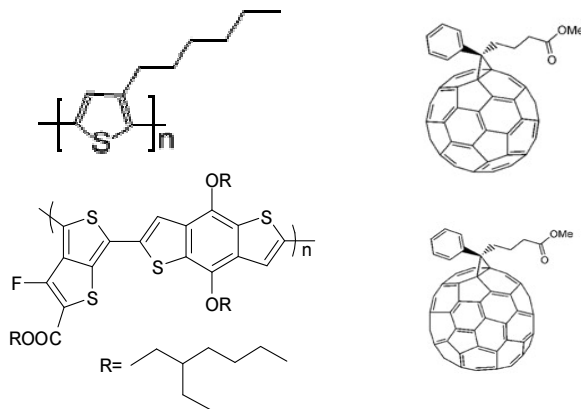
## 電荷生成プロセスの解明



## ペロブスカイト材料の構造決定



# 有機系太陽電池



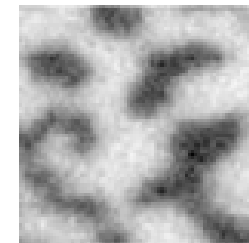
# 材料基礎物性とデバイスプロセスの理解



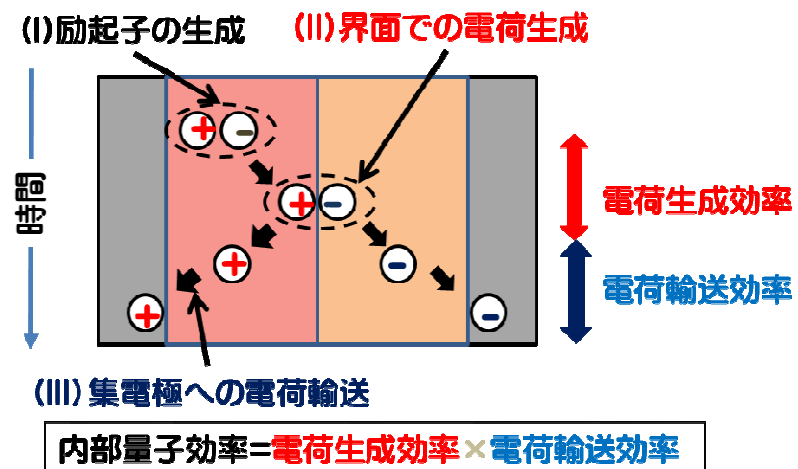
# 新発想素子



# 軟X線顕微鏡による 分子混合の観測



## 電荷生成効率の決定



**内部量子效率=電荷生成效率×電荷輸送效率**

# 電荷生成効率の決定

2014/8/19: APLによるリリース

**PHOTONICS.com**  
The latest on light research and applications from Photonics Media

Subscribe Advertise

Search

Register Login

Photonics.com BG Buyers' Guide PS Photonics Spectra Bio BioPhotonics EP EuroPhotonics Ind Industrial Photonics

Menu News Products Video Webinars White Papers EDU

g+ 0 Tweet 0 Like 0

**Our new range of CCD cameras**  
Ultimate sensitivity for Fluorescence

Raptor photonics

PS Bio EP Ind

Now available as FREE mobile apps for subscribers

Previous: Laser Cooling Enhances Atomic-Force Microscopy

Next: High-Speed Camera

PHOTONICS.COM

2014 2013 2012 2011 2010

AUGUST

BUSINESS

RESEARCH & TECHNOLOGY

PRODUCTS

**PhotonControl**  
Spectrometers & Accessories

more info

1.855.5.PHOTON (746866)

**Spectroscopy Tests for Best Organic Photovoltaics**

TSUKUBA, Japan, Aug. 19, 2014 — Spectroscopy may provide a way to identify materials for organic photovoltaics based on their charge formation efficiency.

In a recent study of organic solar cells, a team at the University of Tsukuba and the National Institute for Materials Science employed photo-induced spectroscopy and electrochemical spectroscopy, methods which, respectively, determine the change in absorption after femtosecond excitation and charge injection.

"By qualitative analysis of the spectral change, we can deduce how many charges are produced by one photon — its charge formation efficiency," said professor Yutaka Moritomo.

Researchers develop method to screen organic materials for organic photovoltaic cells by charge formation efficiency. Courtesy of Yutaka Moritomo/University of Tsukuba.

Studying one type of organic polymer film, the team discovered that the charge formation efficiency remained high (0.55) even at low temperatures (80 K).

Positive and negative charges are strongly bound in an organic photovoltaic device as an exciton. This charge formation was thought to be difficult without a thermal activation process.

"But our work shows that the charge formation process of an organic photovoltaic device is purely quantum mechanical, and any theoretical model should explain the high charge formation efficiency at low temperatures," Moritomo said.

PHYS.ORG

Sign In Register

Physics Nanotechnology Earth Astronomy & Space Chemistry Biology Technology Other Sciences Medicine & Health

Home > Physics > Condensed Matter > August 19, 2014

**Organic photovoltaic cells of the future: Charge formation efficiency used to screen materials**

22 hours ago

Researchers develop method to screen organic materials for organic photovoltaic cells by charge formation efficiency. Credit: Yutaka Moritomo/University of Tsukuba

Organic photovoltaic cells—a type of solar cell that uses polymeric materials to capture sunlight—show tremendous promise as energy conversion devices, thanks to key attributes such as flexibility and low-cost production.

ペンション コリス

楽天トラベル

4,100円から/磐梯山ジオパークと猪苗代湖。そし

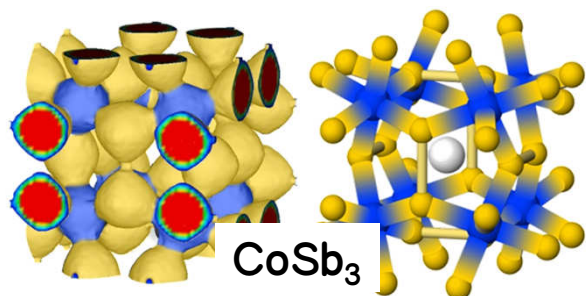
>

Featured Popular Most shared

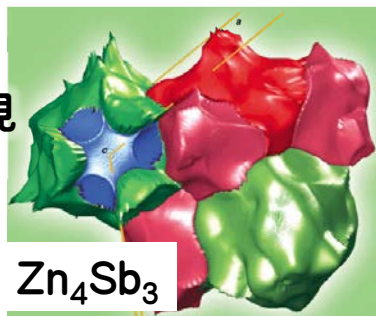
Bone chemistry reveals royal lifestyle of Richard III Aug 17, 2014 0

Why global warming is taking a break 22 hours ago 60

## ホスト骨格構造の立証



## Bader解析と第一原理計算

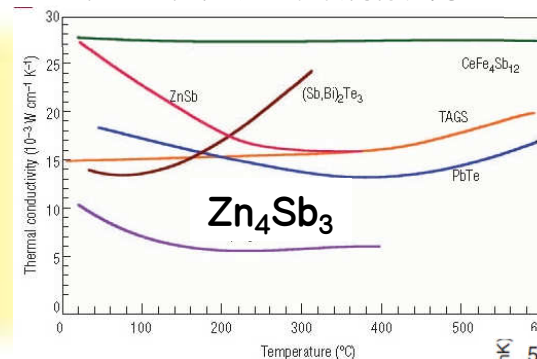


## 材料基礎物性とデバイスプロセスの理解

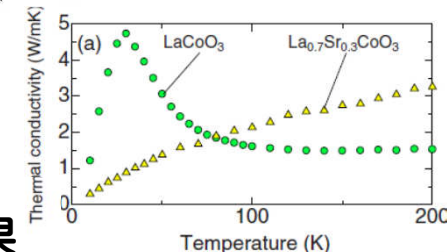


## 新発想素子

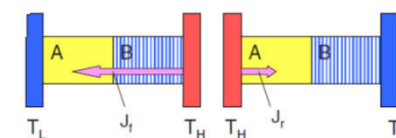
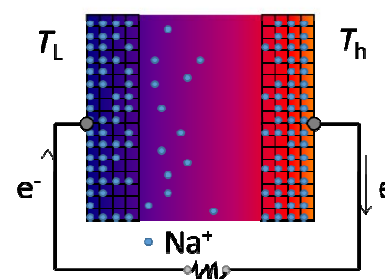
## 低熱伝動の機構解明



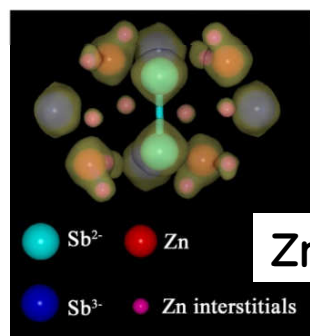
## 熱整流効果



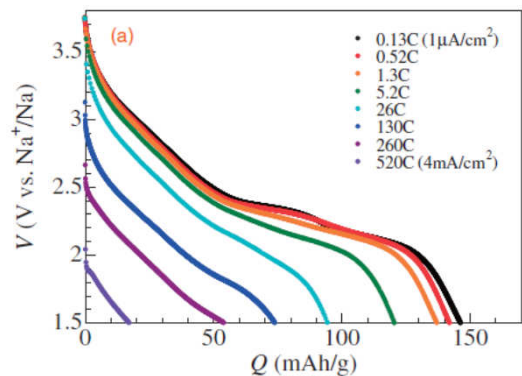
## 電気化学ゼーベック効果



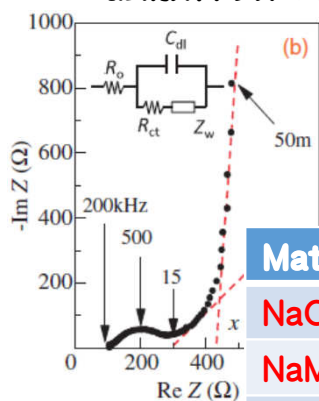
## Disorder構造の発見



## 薄膜電極で理想性能の評価

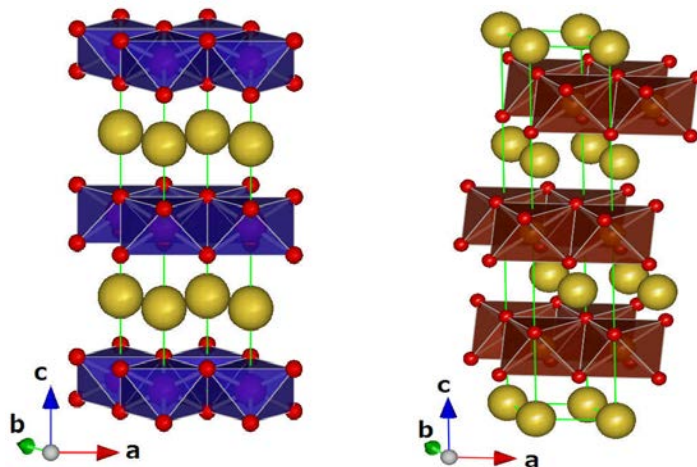


## 拡散係数の決定



| Material           | D ( $10^{-10}\text{cm}^2/\text{s}$ ) |
|--------------------|--------------------------------------|
| NaCoO <sub>2</sub> | 0.1-0.2                              |
| NaMnO <sub>2</sub> | 1.0-1.4                              |
| LiCoO <sub>2</sub> | 0.1-0.001                            |

# 層状酸化物

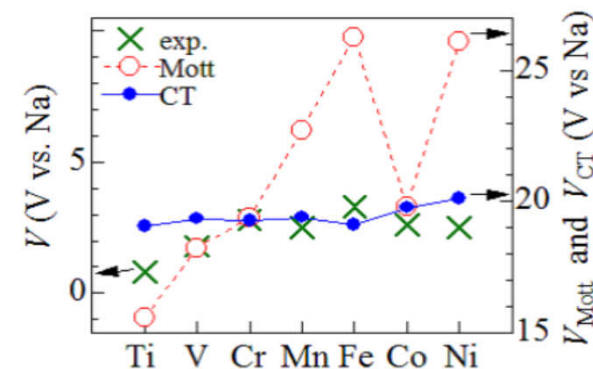


## 材料基礎物性とデバイスプロセスの理解

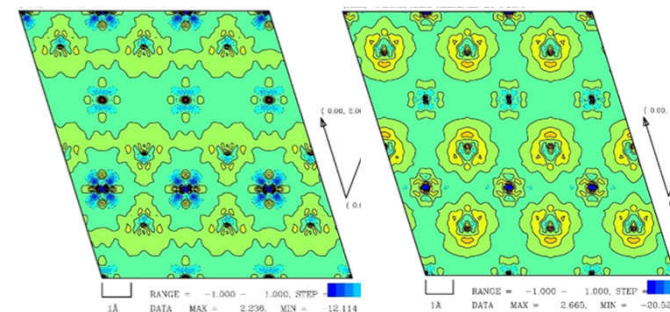


## 材料設計 新発想素子

## Ion modelで電位の理解

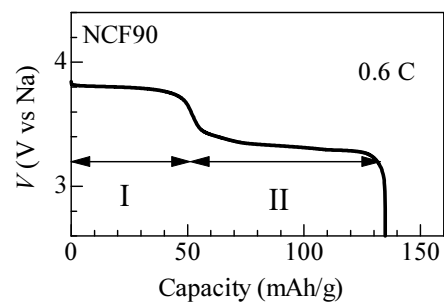
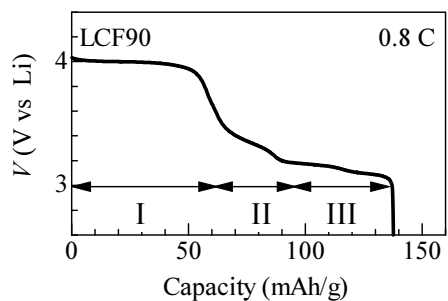


## 電子分布解析と結合様式の決定

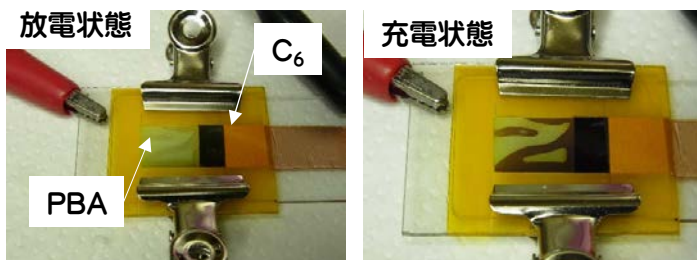


## 劣化の理解

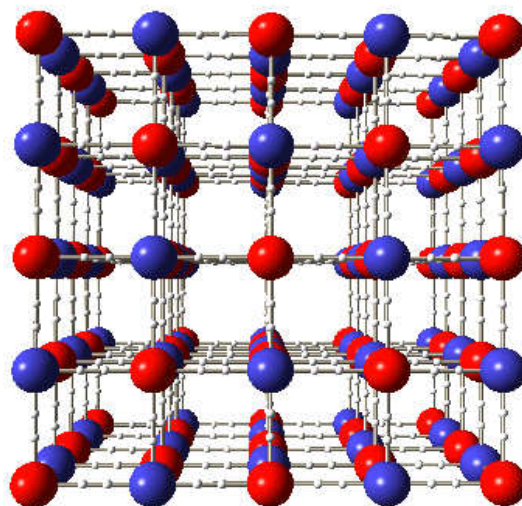
## Li<sup>+</sup>/Na<sup>+</sup>二次電池正極材



## Colored full cell



## 配位高分子材料



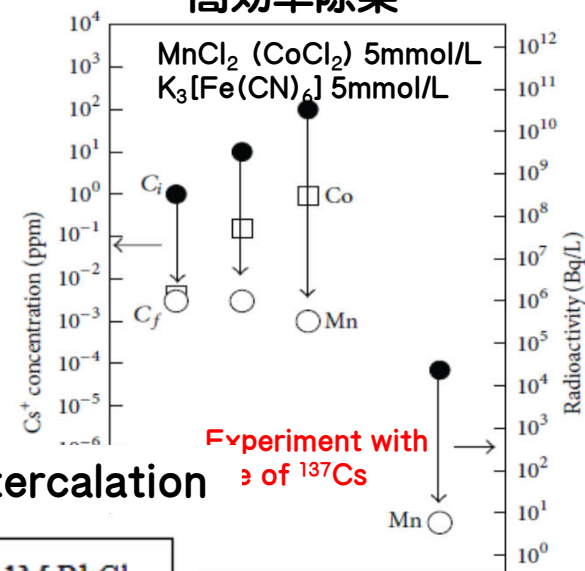
二次電池材料を超えて、  
イオン貯蔵体へ



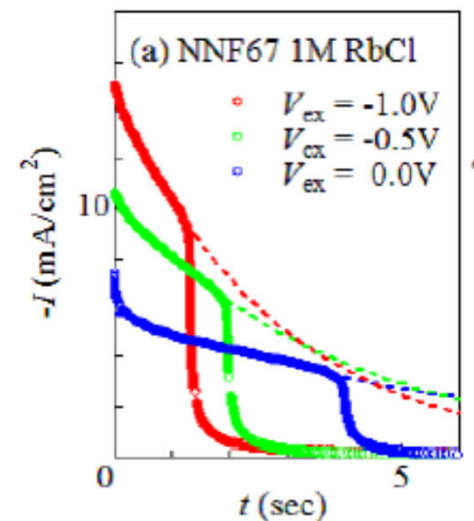
応用展開へ

SPRING 8

## 高効率除染



## Ultrafast intercalation



# 研究の広がり

EU:デンマーク



Center Leader  
Prof. B. B. Iverson  
国際PI candidate

No1の材料構造研究センター:  
国際共同研究、人材交流を通じてサイエンスを深化

台湾:新竹

No1の3eV級の光源施設(2013年完成予定):国際共同  
研究でエネルギー材料の軟X線領域のサイエンスを深化



02

名称: 台湾光子源施設 (TPS)  
場所: 国立シンクロトロン放射線研究センター (NSRRO)  
(新竹市)  
運転開始年: 2013年予定  
タイプ: 電子シンクロトロン  
エネルギー: 3 GeV

エネルギー変換・貯蔵物質部門

ナトリウムイオン二次電池・等

熱電変換

有機系太陽電池

理科大:  
荒川裕則(客員)  
駒場慎一(客員)

千葉大:  
中山隆史

東邦大:  
北澤孝史

民間会社  
実用化研究

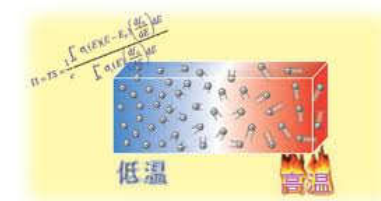
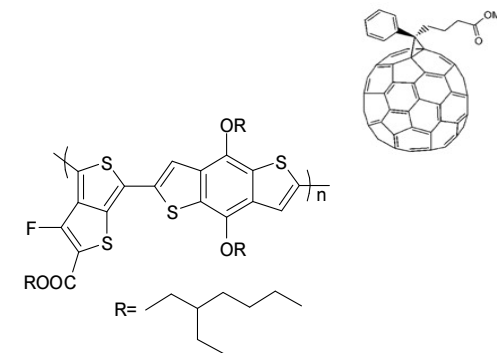
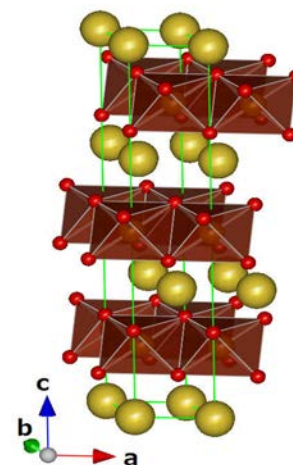
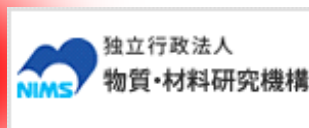
KEK:  
小野寛太  
間瀬一彦  
武市泰男  
熊井玲児  
仁谷浩明  
雨宮健太(客員)

AIST:  
吉田郵司  
宮寺哲彦

NIMS:  
韓 礼元  
安田 剛(客員)  
森 孝雄(連携)

# 研究会予告 -新しい流れを作る-

## 「基礎科学の視点からのエネルギー変換・貯蔵技術」



二次電池、有機系太陽電池、熱電変換

(予定)

主催：数理物質科学融合センター環境エネルギー材料拠点

共済：学際物質科学研究センター

TIA-ACCELERATE

KEK連携支援事業

# 物質変換材料研究部門

部門長：中村潤児 研究者：神原貴樹教授, 山本洋平准教授

1. **触媒作用の学理を構築する。**すなわち, 最先端の物質解析および第一原理計算によって触媒作用機構を物理・化学的に解明する。  
特に, ナノカーボン触媒や高分子合成触媒の研究を推進する。
2. **触媒学理に基づき, 環境エネルギー材料開発を行う。**  
具体的には, 燃料電池電極触媒, 二酸化炭素の有用化合物への変換触媒, 光変換デバイス創成, 藻類産生油の変換触媒の研究を行う。

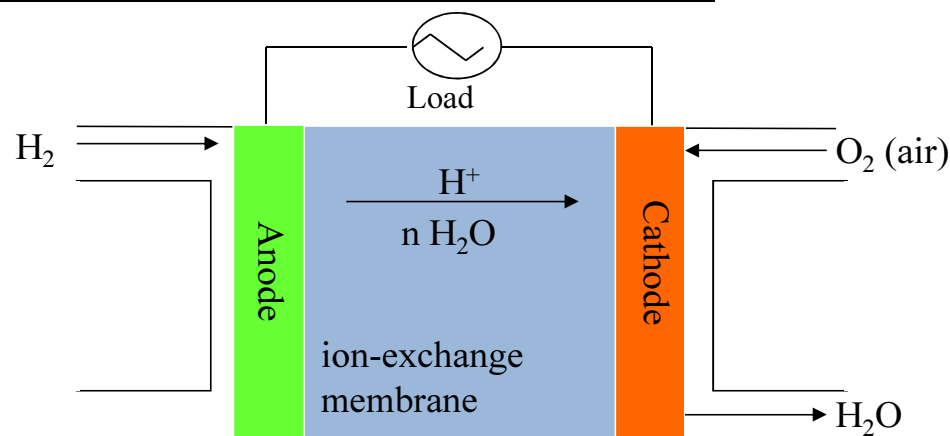
# 燃料電池を使う水素社会への準備が進んでいる

エネファーム



トヨタが2014年度に燃料電池自動車発売

燃料電池には白金触媒が必須



水素ステーションを各地に建設中

課題: 高価な白金を多量に使用  
(4千円/g x 50g = 20万円)

我々の研究成果: (国家プロジェクト)

- 1) 白金触媒使用量を低減させた
- 2) 非白金触媒を開発中

## PIの最近の主な活動

### 最近の研究成果

1. グラフェンの触媒機能研究で世界的トップレベルの研究  
Nano Letters(2009)は引用回数470回以上であり、この分野でトップ
2. カーボンの物性研究でNature Communications(2012)に発表
3. カーボンナノチューブの触媒応用で世界トップレベル  
Chem. Commun.(2004)が引用回数170回、Catalyst Todayが140回
4. 大型プロジェクト JST戦略的創造的研究 平成24-29年 ACT-C 総額2億7千万円

### 継続中の共同研究

1. Science誌などに発表する世界的に著名な研究者Prof. Schlöglとの共同研究 2013～
2. ドイツデュースブルクエッセン大学との共同研究 2013～
3. 中国南開大学との共同研究（メタノール合成触媒）2000～
4. 東京大学物性研吉信教授、大阪大学森川教授とのACT-Cプロジェクト共同研究2012～
5. 産総研周氏（空気電池の第一人者）との共同研究 2012～
6. NIMS森氏（燃料電池）との共同研究 2013～
7. 産総研藤谷氏（触媒化学、表面科学）1994～

### つくば連携, 国際交流, 産学連携, 役職

1. TIAナノグリーン推進会議メンバー2011～
2. 筑波大学プレ戦略イニシアティブ代表 2011～2013
3. デュースブルクエッセン大学とのワークショップ, 交換学生および国際共同研究2011～
4. 企業向けの研究相談窓口設置2012～
5. TIMSセンター長2013～
6. つくばイノベーションフォーラム開催2013～

# 部門の特色： 学理主導の触媒材料設計

メカニズムを解明し、表面素過程の詳細を調べ、それらを再構築して活性触媒を予測する

表面素過程：吸着、解離、表面拡散、会合反応、脱離

触媒表面は極めて複雑

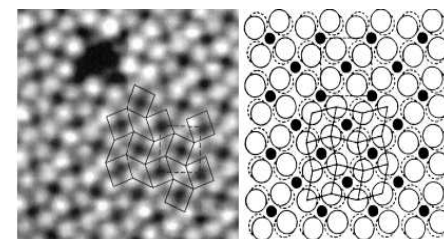
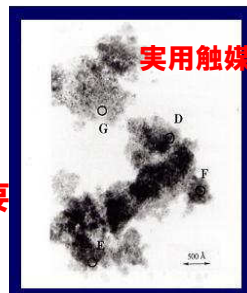
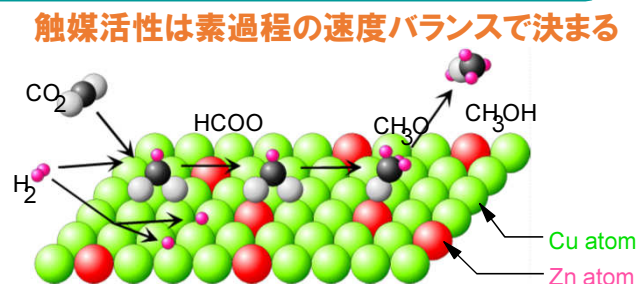
1. 表面では多くの素過程が同時に進行
2. 触媒成分元素も複数、表面構造の変化
3. 反応条件によって速度論が変化

触媒は表面積をかせぐために触媒担体上に微粒子化して使用する

実用触媒そのものを研究しても素過程レベルで  
メカニズム解明は不可能  
したがって

単結晶表面などのモデル触媒を使った表面科学実験が必要

放射光施設を用いた表面科学実験は高度になっている



表面の構造は吸着種の存在によって変化する

不均一系触媒の学理の実験面では表面科学実験が不可欠

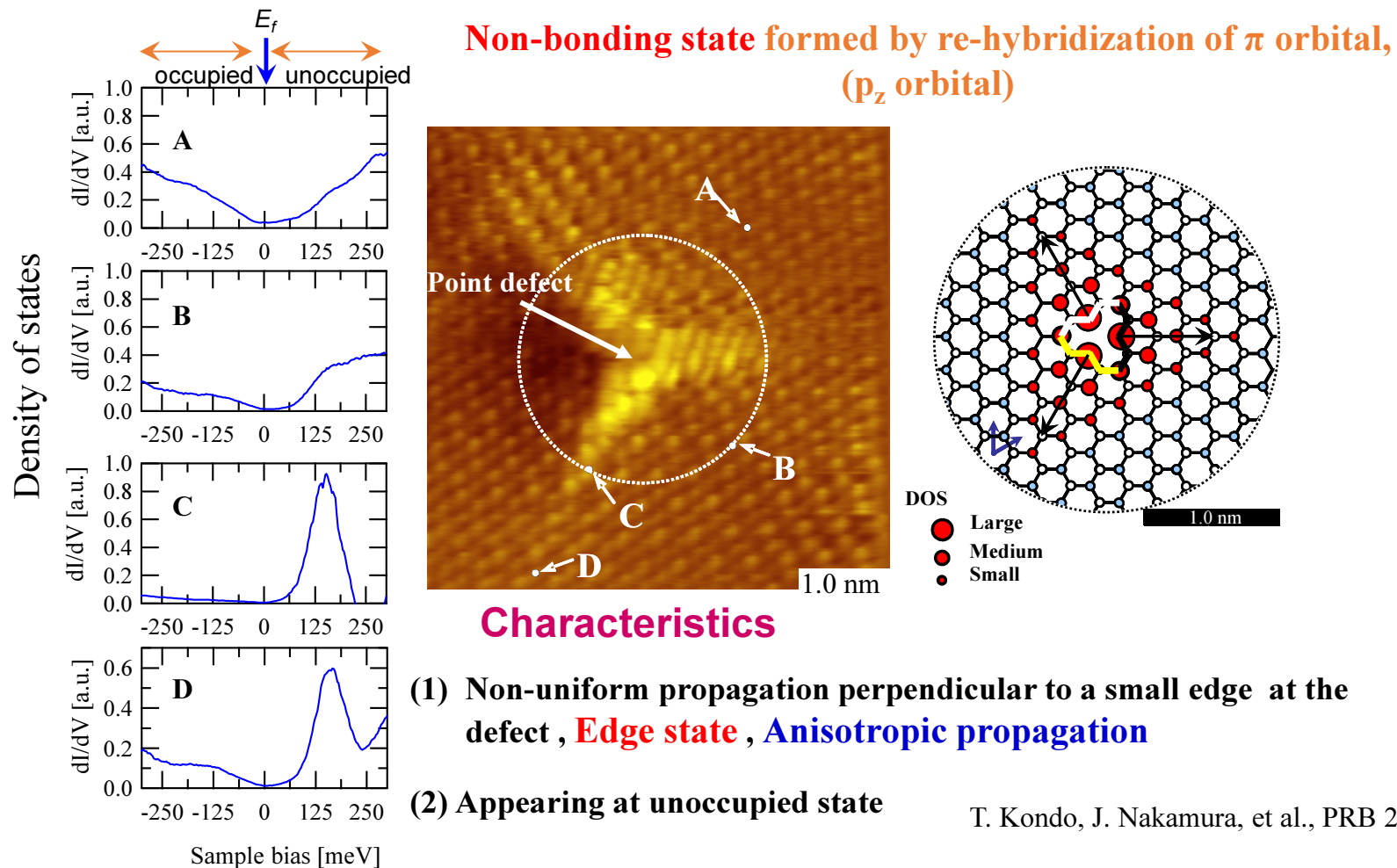
さらに計算科学では、素過程の速度論的・電子的情報を集積し、大規模シミュレーションによって触媒設計

コンピュータ「京」の導入によって触媒開発シミュレーションは新たな時代へ突入

表面科学を熟知する計算物理研究者の協力が必須、我々のプロジェクトが先駆けとなる

# 触媒学理の研究例：グラファイトの点欠陥付近の局所的な電子状態を走査トンネル分光法によって原子レベルで解明した

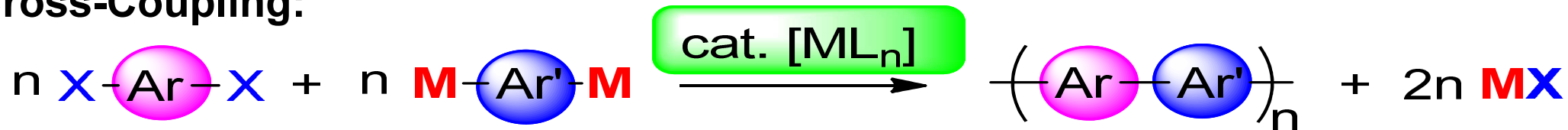
Localized electronic state near  $E_f$  propagating from a point defect



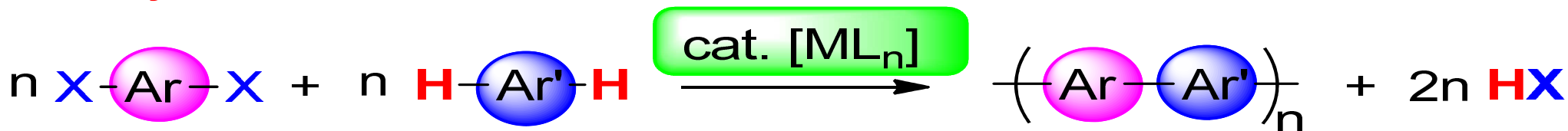
T. Kondo, J. Nakamura, et al., PRB 2009

## 新材料開発とグリーンケミストリーの両立した高分子合成触媒の開発

### Cross-Coupling:



### Direct arylation: Few Steps, High Yield, Little Wase, No Toxic Byproducts

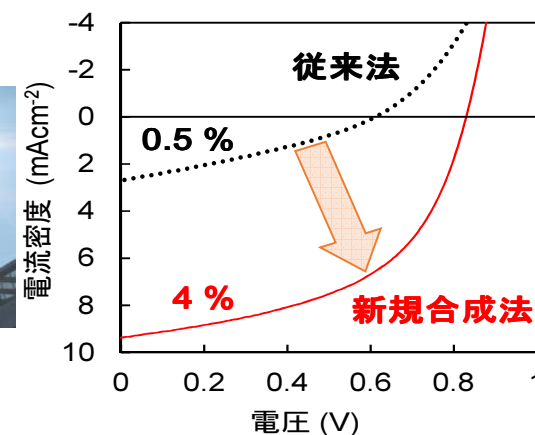


- ✓ 簡便で環境調和性の高い高分子合成技術
- ✓ 簡単な精製で高純度化

π共役高分子  
半導体

ポリマーの純度や分子量が  
デバイス性能に決定的な影響を及ぼすことを実証

J. Kuwabara *et al.*, *Adv. Funct. Mater.*, **24**, 3226 (2014).



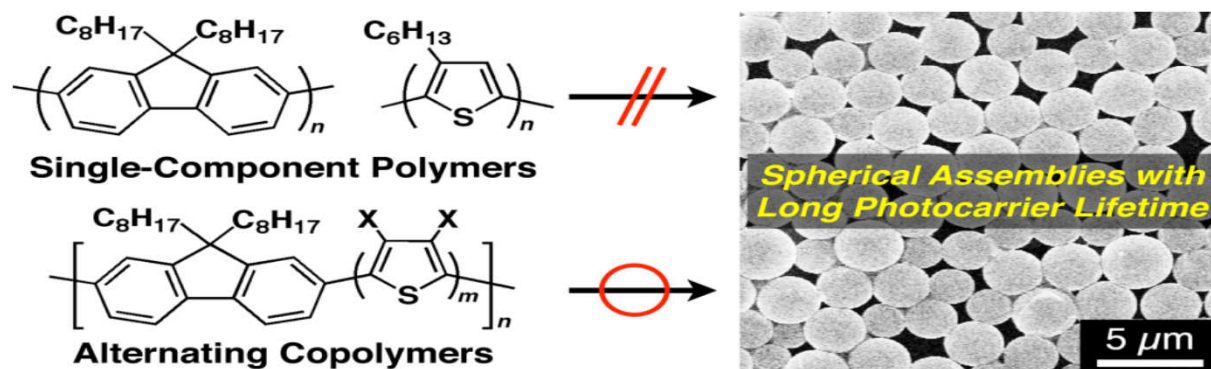
環境・省エネルギー関連有機光電子デバイス実用化の  
根幹を担う素材合成技術

- ✓ 素材の製造プロセスの抜本的改革（原子効率、工程数）
- ✓ 素材の高純度化（精製工程、性能向上）

**触媒開発が重要**

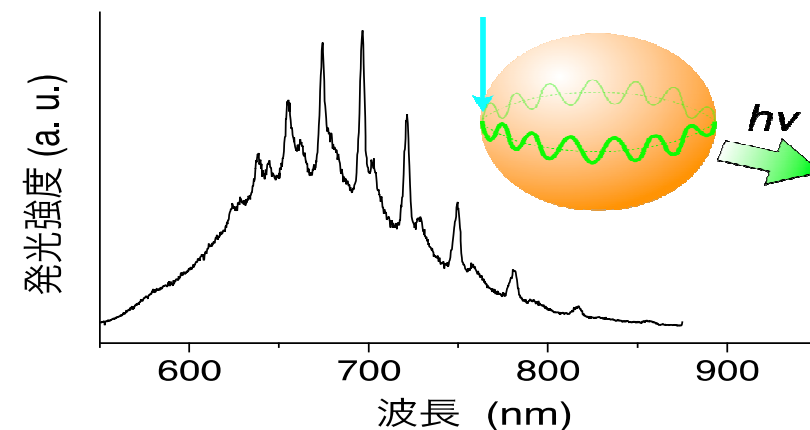
# 高分子マイクロ球体による機能発現（主に発光・レーザー材料）

## ①共役系ポリマーからのマイクロ球体の自己形成



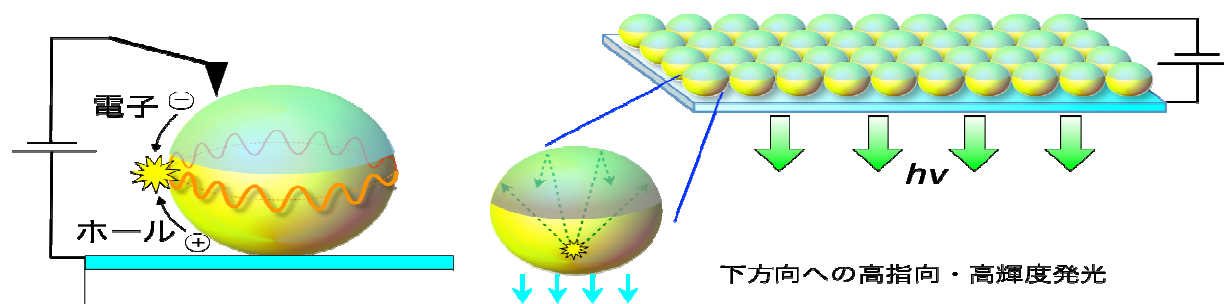
*J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 870-876.

## ②特異な発光特性(WGM発光)

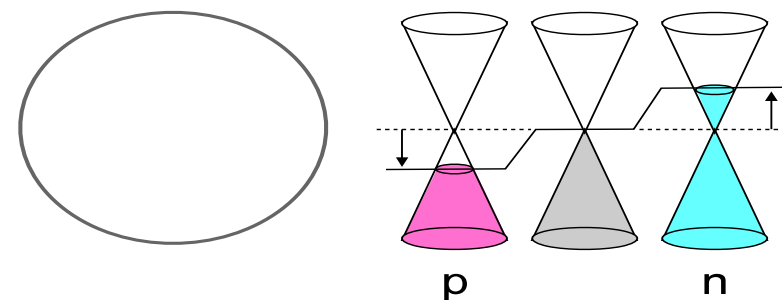


*Sci. Rep.* **2014**, 4, 5902.

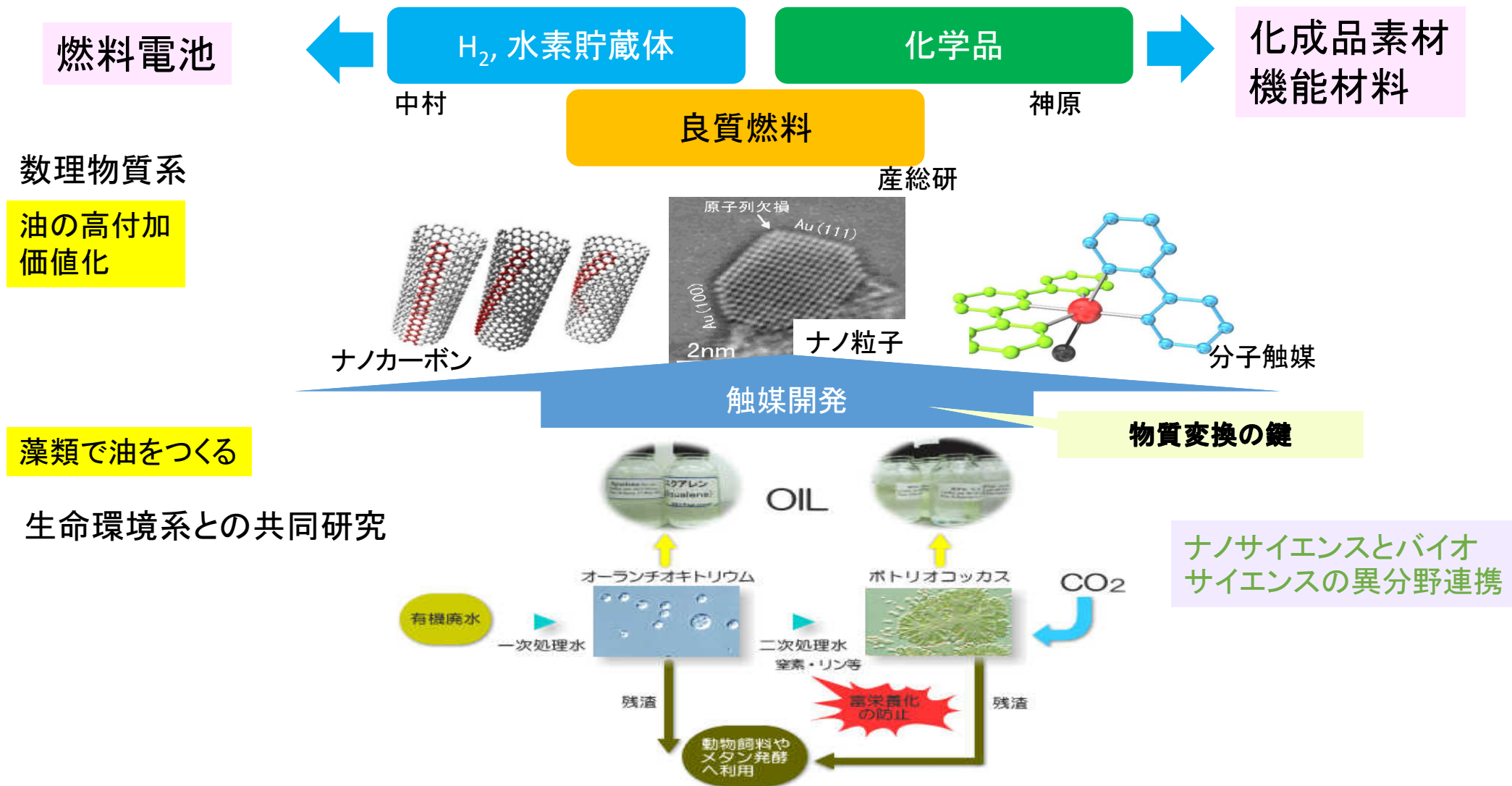
## ③電流駆動によるWGM電界発光と高出力化



## ④ナノカーボンとの複合化



# 藻類産生油を用いた化学品の製造する触媒



## 研究拠点形成

## 国際共同研究, つくば連携, 産学独連携

