

エネルギー変換・貯蔵物質部門

部門長: 守友 浩
構成員: 西堀英治
岡田 晋
笠井秀隆
小林 航
丹羽秀治

準構成員
丸本一弘 (物質工學域)
櫻井岳暁 (物理工學域)
柳原英人 (物理工學域)
末益 崇 (物理工學域)
小島隆彦 (化学域)
関口 章 (化学域)

部門の使命

- 【エネルギーサイエンスの推進】 エネルギー現象を電子論的・微視的に解明
- 【エネルギーイノベーションの実現】 サイエンスに基づき革新的エネルギー技術を創出
- 【国際エネルギー研究拠点の構築】 エネルギー科学の国際拠点を構築

2016/1/18-19

第二回CIRFSEシンポジウム

1

本部門の位置づけ (二次電池を例として)



2016/1/18

4

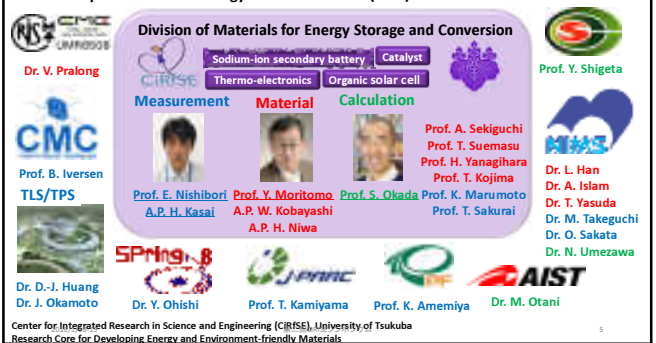
部門の使命

2016/1/18-19

第二回CIRFSEシンポジウム

2

Mission: Exploration of the energy materials science (EMS) for the sake of innovative device



5

エネルギーサイエンスの必要性



3

部門の実績：新聞報道等



国際連携
- 放射光物質科学 -

2016/1/18-19

第二回CIR+SEシンポジウム

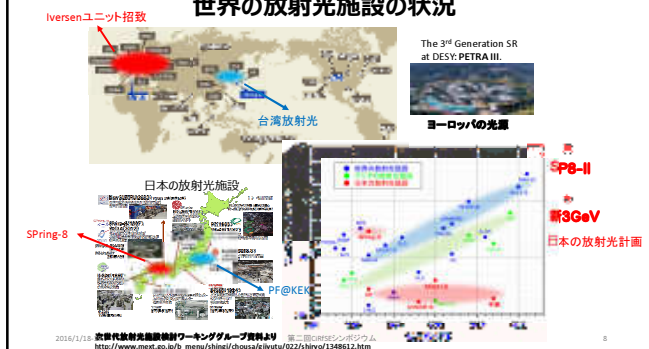
7



2016/1/14

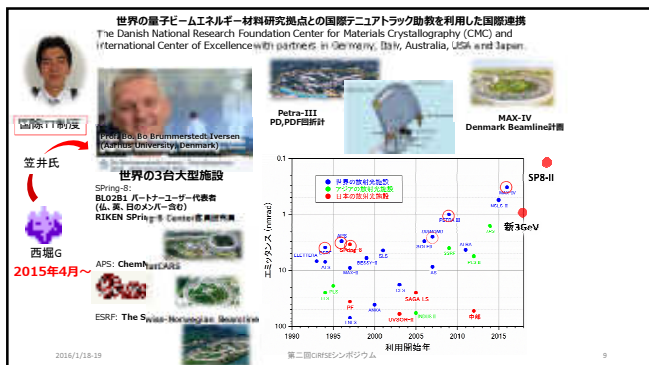
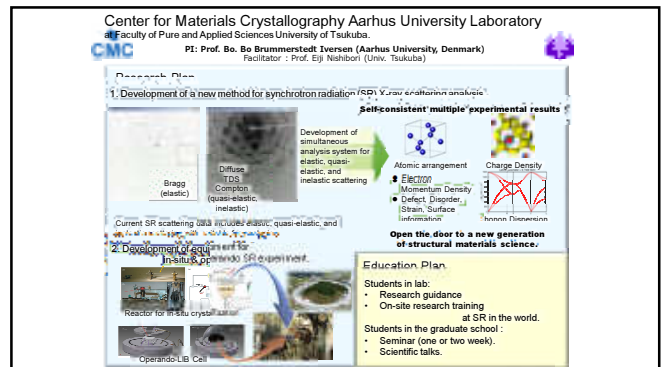
10

世界の放射光施設の状況



2016/1/18: 次世代放射光施設検討ワーキンググループ資料より 第二回CRFSEシンポジウム
http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/chousa/gijyutu/022/shiryo/1348612.htm

2



2016/1/18-19

第二回CIR+SEシンポジウム

2



2016/1/18-19

12

つくば連携

2016/1/18-19

第二回の研究会

13

研究成果
- 西堀G、岡田G -

- 1611-1620: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1611C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1621-1630: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1621C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1631-1640: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1631C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1641-1650: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1641C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1651-1660: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1651C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1661-1670: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1661C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1671-1680: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1671C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1681-1690: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1681C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1691-1700: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1691C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1701-1710: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1701C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1711-1720: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1711C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1721-1730: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1721C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1731-1740: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1731C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1741-1750: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1741C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1751-1760: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1751C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1761-1770: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1761C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1771-1780: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1771C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1781-1790: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1781C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1791-1800: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1791C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1801-1810: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1801C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1811-1820: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1811C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1821-1830: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1821C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1831-1840: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1831C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1841-1850: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1841C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1851-1860: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1851C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1861-1870: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1861C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1871-1880: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1871C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1881-1890: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1881C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1891-1900: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1891C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1901-1910: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1901C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1911-1920: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1911C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1921-1930: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1921C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1931-1940: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1931C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1941-1950: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1941C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1951-1960: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1951C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1961-1970: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1961C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1971-1980: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1971C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1981-1990: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1981C エネルギー材料 (産学連携部門)
- 1991-2000: 「ナノ構造精密制御によるエネルギー材料科学」
西堀 吉 1991C エネルギー材料 (産学連携部門)

詳細は、明日、報告@総合研究棟8112号室

2016/1/18-19

第二回の研究会

16

Nanotech Research Professional (NRP)

小林 航
『電池材料の原子レベル構造解析とナノ電池デバイスによるSEM/TEMその場計測』
(平成27年4月～平成32年3月)

柴田 義幸
『ナノポーラス材料におけるイオン分布の空間・時間変化の可視化』
(平成28年12月～平成32年3月)

受け入れ先
NIMS 電子顕微鏡ステーション
三石 竹口

2016/1/18-19

第二回の研究会

14

岡田Gの全体構想 ← つくば連携

NIMS: 梅澤
新しい光電変換材料の第一原理物質設計

AIST: 大谷
固液界面化学反応シミュレーション

筑波大: 岡田
機能性ナノ構造の第一原理物質設計

$H\Phi = E\Phi$

新しいエネルギーデバイスの設計
エネルギー創成
エネルギー輸送
エネルギー蓄積
エネルギー変換

2016/1/18-19

第二回の研究会

14

有機系太陽電池

有機薄膜太陽電池

ペロブスカイト型太陽電池

共同研究者: 安田 剛
NIMS太陽電池ユニット

共同研究者: 韓 礼元
NIMS太陽電池ユニット長

有機薄膜太陽電池の研究で培われた計測・解析技術を活用

エネルギー部門
守友G-NIMS 韓G

2016/1/18-19

第二回の研究会

15

岡田Gの研究成果

Graphene dot@h-BN

Magnetism of Decaorgano[60] fullerene

$J_{\text{intra}} = 44 \text{ meV}$
 $J_{\text{inter}} = 11 \text{ meV}$

N/C border

B/C border

Spin polarization on graphene dots embedded in h-BN
M. Maruyama and S. Okada, J. Phys. Chem. C (2016)

AP state within and between molecules
K. Narita and S. Okada, Chem. Phys. Lett. (2015)
K. Narita and S. Okada, Chem. Phys. Lett. (2015)

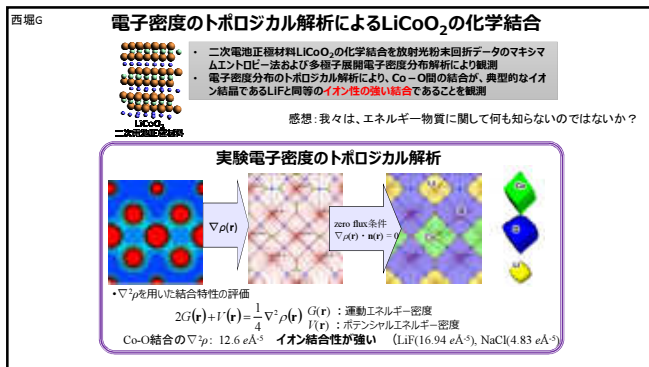
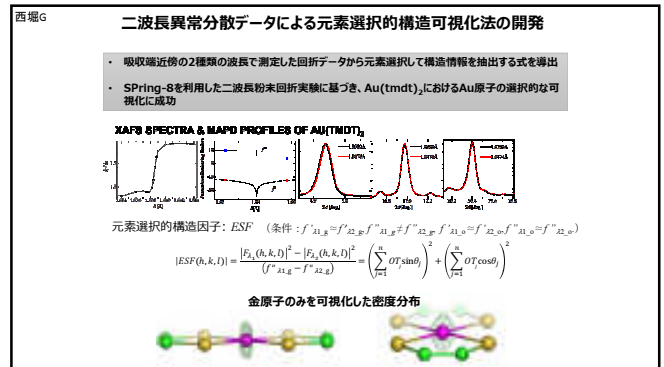
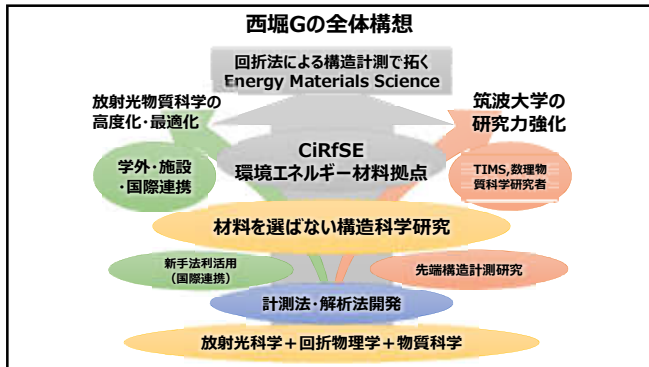
GNR under an Electric Field

Design of Nano-saturon

New conducting channels in vacuum region outside the GNR

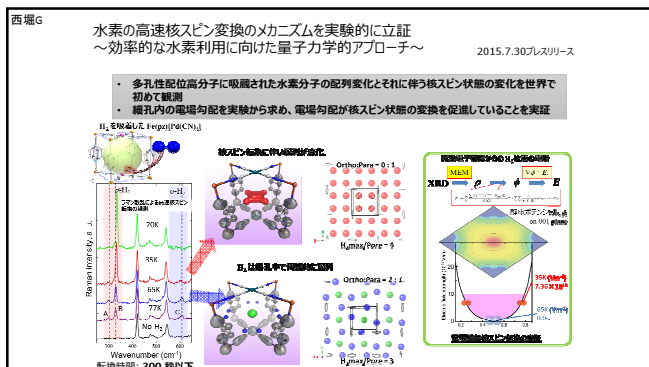
A. Yamanaka and S. Okada, J. Phys. Chem. C (2016)
A. Yamanaka and S. Okada, Appl. Phys. Exp. (2015)

K. Kiguro, H. Omachi, H. Shinohara and S. Okada, J. Phys. Chem. C (2015)

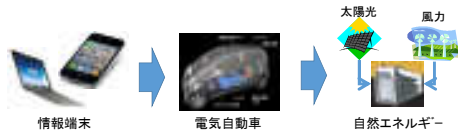


研究成果(2015.1~2016.1) 西堀 G

1 M. Yamashita, T. Saito, H.asegawa, G. Nishihara, T. Nohokawa, *Solid State Ionics*, 2015, 278, 105-110.
2 H. Ogawa*, M. Nakano, Y. Kikuchi, K. Shimokawa, A. Fujiwara, G. Nishihara, M. Takahashi, *Submitted*.
3 M. Yamashita, R. Sakamoto*, M. Shimada, Y. Yamashita, Y. Iatano, K. Sugimoto, G. Nishihara, H. Nishihara*, *Submitted*.
4 K. Iizuka, G. Nishihara, Y. Kikuchi, M. Yamashita, Y. Yamamoto*, E. Nishio, K. Sugimoto, H. Nishihara, *J. Organomet. Chem. Accepted*.
5 T. Nakamura, M. Shimada, Y. Yamashita, M. Yamashita, Y. Yamamoto*, E. Nishio, K. Sugimoto, H. Nishihara, *Submitted*.
6 B. Zhou*, S. Ogura, Q. Z. Lai, H. Katsura, G. Nishihara, H. H. Chu, R. Aoki, K.ohyashi, *Chem. Lett. Accepted*.
7 M. Shimada, M. Yamashita, G. Nishihara, Y. Yamamoto*, E. Nishio, K. Sugimoto, H. Nishihara, *Chem. Lett. Accepted*.
8 H. Tanaka, K. Suenaga, K. Umetsu, Y. Nagasaki, H. Kato, G. Kuroki, G. Nishihara, H. Kato, T. Takahashi, Metal-semiconductor transition in transition metal chalcogenides, *ACS Nano*, 2015, 9, 14793-14798.
9 G. Nishihara, T. Nishikawa, Y. Matsuda, *Resolving nature of LiCoO₂ by topological analysis of electron density from X-ray diffraction*, *Electrochemistry*, 2015, 83, 840-842.
10 T. Kozono, A. Hori, T. Ishibashi, Y. Nakata, A. Mitsuoka, M. Ochiai, H. Tanaka, K. Kato, J. Kim, J. A. Ried, K. Sakaguchi, M. Takahashi*, *Coordination Nucleus-Space as Stage of Hydrogen Orbital-Pair Conversion*, *Roy. Soc. J. Chem.*, 2015, 12, 150696.
11 N. Katsuyama, K. Kameya, Y. Imai, N. Naito, N. Teshima, Y. Nakamura, M. Hatan, Y. Ishiguro, R. Nishihara, M. Nishizawa, T. Nakano, Y. Nozue, Y. Yamashita, M. Yamashita, M. Hagiwara, H. Sato, and G. Nishihara, *Chem. Commun.*, 2015, 12, 1985-1989.
12 G. Nishihara, M. Takahashi, *Visualization of the structure using synchrotron X-ray two-wavelength anomalous powder diffraction data*, *Trans. Alur. Res. Soc. Jpn.*, 2015, 40(2), 145-148.
13 G. Nishihara, H. Itoya, K. Iizuka, K. Iizuka, *Rietveld High-Resolution Charge Density Study of a rhombohedral boron using third-generation X-ray at SPring-8*, *Solid State Sci.*, 2015, 47, 27-31.
14 N. Mizuno, R. Matsuda, K. Ito, J. Tomono, T. Matsui, T. Kamakura, Structural basis for polyphosphoric and solvophobic organophosphorus crystallization, *Chem. Commun.*, 2015, 12, 1990-1992.
15 R. Matsuda, R. Toyoda, R. Sakamoto*, M. Taneyuki, K. Hoshino, Y. Nishikubo, K. Sugimoto, G. Nishihara, T. Kawanishi, Hydrogen-bonded crystalline(1) covalent polymer: Crystallization, exfoliation into nanosheets, *Chem. Commun.*, 2015, 6, 2832-2838.
16 P. Mascher, A. Mungen-Sauer, A. Corbett, P. J. Connor, K. Dawson, T. Silverman, J. Bennett, A. J. Bell, E. Nishihara, M. Takahashi, M. Zundell, M. R. Dalgarno, U. Adachi, A. Wada, M. T. H. Chi, J. Tomono, T. T. Tan, P. S. Halasyi, R. K. Kozumski, *Morphological Phase Boundaries in the Pb-Fe-(x)Bi₂S₃-P₂Se₃-O₃-CaTiO₃ System: Topological Polarization and Enhanced Electrochemical Properties*, *Advanced Materials*, 2015, 27, 3883-3888.
17 M. Shimada, Y. Yamashita*, T. Matsubuchi, T. Kato, G. Nishihara, A. Hatakeyama, K. Sugimoto, H. Nishihara*, *Cyclic Optoelectrics of Diluted-Bridged Dimeric Organic Polymers: Strong Effects of Interactions on Photoexcitation and Non-linear Optical Properties*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, 137(10), 3412-3427.
18 R. Chen, L. Miao*, H. Cheng, G. Nishihara*, C. Y. Lai, T. Anaka, Y. Iwasaki, M. Takahashi, S. Tsunuma, *One-step hydrothermal synthesis of α -O₂-O₂(MOF) nanorods for photocatalytic hydrogen and formic acid production*, *Chem. Commun.*, 2015, 12, 1976-1979.
19 R. Chen, L. Miao*, H. Cheng, G. Nishihara*, C. Y. Lai, T. Anaka, Y. Iwasaki, M. Takahashi, S. Tsunuma, *One-step hydrothermal synthesis of α -O₂-O₂(MOF) nanorods for photocatalytic hydrogen and formic acid production*, *Chem. Commun.*, 2015, 12, 1976-1979.



二次電池

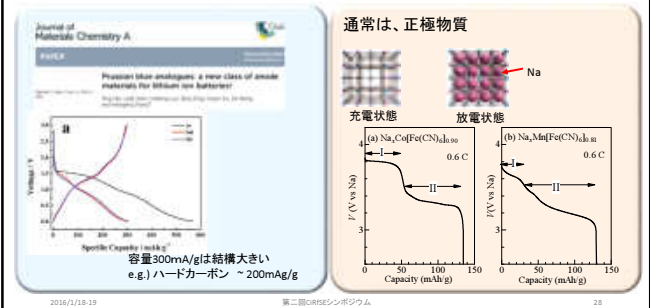


2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

25

プルシャンブルー類似体の負極動作



2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

26

イオンの拡散が電極反応を決定する。一電極反応が電流密度に依存するメカニズムを説明する。

拡散係数 D の単位は cm^2/s である。拡散係数は電極反応の速度に比例する。拡散係数が大きいほど、イオンの拡散が速く、電極反応の速度も速くなる。拡散係数が小さいほど、イオンの拡散が遅く、電極反応の速度も遅くなる。

拡散係数による容量低下



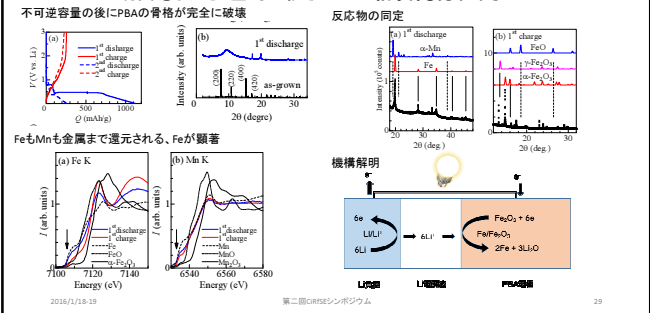
2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

26

放射光を駆使した機構解明

執筆中...

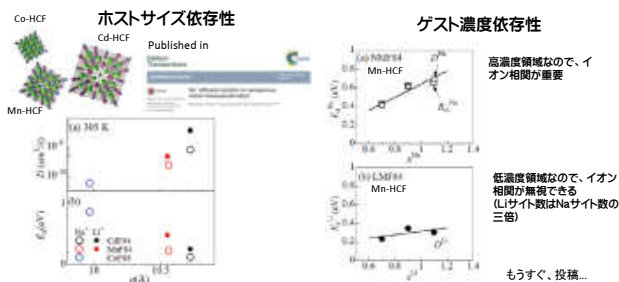


2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

29

プルシャンブルー類似体のイオン拡散



2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

27

守友G 2015年度二次電池関連成果



2016/1/18-19

第二回のセッションプログラム

30

有機系太陽電池

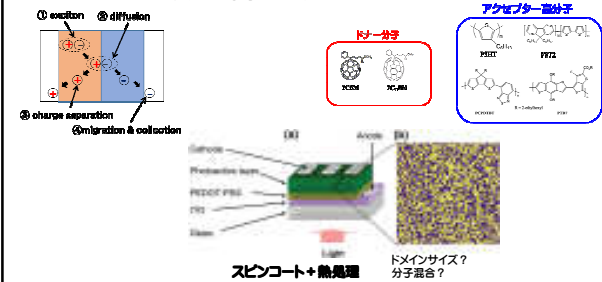


2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

31

有機薄膜太陽電池とBHJ



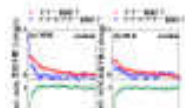
2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

34

有機系太陽電池のエネルギー変換効率を向上させるための研究開発

有機系太陽電池は、軽量、柔軟、低コスト製造が可能であるため、次世代太陽電池として期待されている。本研究では、有機系太陽電池のエネルギー変換効率を向上させるための研究開発を行っている。具体的には、有機系太陽電池の構造、材料、製造プロセスを最適化し、エネルギー変換効率を向上させることを目指している。



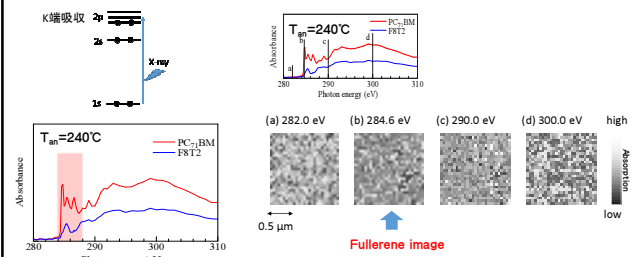
理論予測を実験で検証

2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

32

官能基顕微鏡としてのSTXM



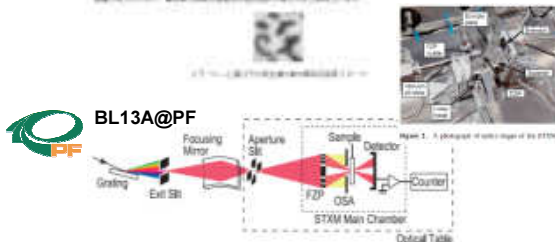
2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

35

有機系太陽電池のエネルギー変換効率を向上させるための研究開発

有機系太陽電池は、軽量、柔軟、低コスト製造が可能であるため、次世代太陽電池として期待されている。本研究では、有機系太陽電池のエネルギー変換効率を向上させるための研究開発を行っている。具体的には、有機系太陽電池の構造、材料、製造プロセスを最適化し、エネルギー変換効率を向上させることを目指している。

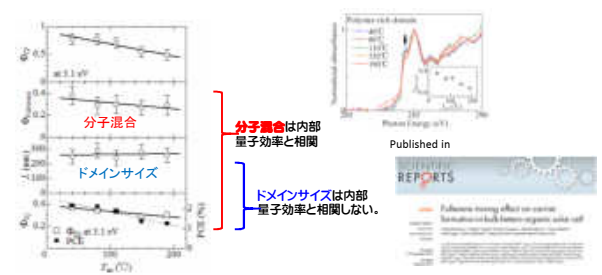


2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

33

ドメイン構造とエネルギー変換効率



2016/1/18-19

第二回有機シンポジウム

36

守友G 2015年度太陽電池関連成果

Carrier injection dynamics in heterojunction solar cells with bipolar molecule

Fullerene mixing effect on carrier formation in bulk hetero organic solar cell

Carrier density effect on recombination in PTB7-based solar cell

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 37

界面を電場によって変えるフリン電極化を用いた有機太陽電池の性能向上

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 40

熱電変換

原理 **物質: 重くて高い**

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 38

Energy Technology

部門拡充と人的資源の投入

Energy Science

相関物性 横造物性 計算物性

FIB-SEM装置 高分辨SEM装置

物質科学(物質) 放射光科学(計測) 計算科学(計算)

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 41

我々の素子: 電池セル型

Seebeck effect in a battery-type thermocell

熱電変換(発電) + 二次電池(蓄電)

温度差印加で発電・充電、温度差をなくすと放電

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 39

2016/1/26-19 第二回OPIESシンポジウム 42