

# 環境エネルギー材料研究拠点の活動

数理物質融合科学センターワークショップ  
2017年10月3日

鍋島 達弥  
(環境エネルギー材料研究拠点長)



# 数理物質融合科学センター

Center for Integrated Research in Fundamental Science and Engineering



## 宇宙史国際研究拠点 Research Core for the History of the Universe

南極天文部門 (南極天文台)  
Division of Antarctic Astronomy  
[Antarctic Observatory of Astronomy]

素粒子構造部門  
Division of Elementary Particles

クォーク・核物質部門  
Division of Quark Nuclear Matters

逆問題研究推進室  
Laboratory for Inverse Problems

光量子計測器開発推進室  
Laboratory for Development of  
Photon and Particle Detectors

## 環境エネルギー材料研究拠点 Research Core for Developing Energy and Environment-friendly Materials

エネルギー貯蔵・変換物質部門  
Division of Materials for  
Energy Storage and Conversion

バイオエネルギー研究チーム  
Research Team for Bioenergy

物質変換材料部門  
Division of Materials for  
Chemical Conversion

計算科学研究センター (CCS)

学際物質科学研究センター (TIMS)

...

# 環境エネルギー材料研究拠点

ミッション: 持続可能な社会の構築に向け、高効率なエネルギー変換や物質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。

拠点長(コーディネータ): 鍋島達弥教授

## 新電池と新物質が作る エネルギー系統樹



再生可能エネルギー  
の有効利用

エネルギーを生み出す  
エネルギーを輸送する  
エネルギーを貯める  
別のエネルギーに変える

Naイオン電池

燃料電池

Liイオン電池

色素増感  
太陽電池

無機PV

空気電池

ラジカル電池

イオン電池

C触媒

光触媒

有機PV

【二次電池】  
エネルギー貯蔵

【触媒】  
物質変換

【太陽電池】  
エネルギー変換

代替元素戦略  
代替同素体戦略



# 環境エネルギー材料研究拠点

TIMS改革に向けて

エネルギー材料研究を先導する拠点+つくば地区のHUB機能

TIMSとの  
連携

TIMSの  
再編成

物質変換材料研究部門  
(中村、神原、山本、近藤)

エネルギー変換・貯蔵物  
質部門(守友、西堀、笠  
井、岡田)

TIMSとの  
融合

## 拠点のミッション

Energy Materials Scienceの創出

電子・原子・分子レベルでの構造制御と機能  
に関する学理の確立

設計・合成・計測・計算の融合と連携

TIMS改革

生体物質を利用した新エネルギーシステムの実現

バイオエネルギー研究チーム

鍋島(チームリーダー)

北、加納、辻村

(次世代の拠点・部門形成に向けて)

機能性生体物質の  
構造を決める  
働きを見る  
再構成する

生命機能をモチーフとした  
次世代エネルギー産生

北 将樹: 資源天然物化学、生命エネルギーに関わる機能性物質の発見

加納英明: バイオ関連非線形フォトニクス、生細胞・生体内の現象を非染色可視化・計測

辻村清也: 電気化学バイオデバイス、生体触媒の電極反応系を構築

バイオエネルギー物質の作用機序を解明し(学理を構築)、新機能材料を創出する

2017年前半の拠点の活動

# 物質変換材料研究部門

## 学理に基づく環境エネルギー材料の創成

PI: 中村潤児

共同研究者: 神原教授、山本准教授、近藤准教授

他連携研究員14名

### 1. 研究部門のミッション

触媒反応、有機化学、高分子化学など**化学反応を最大限に利用して**環境エネルギー材料を創成する

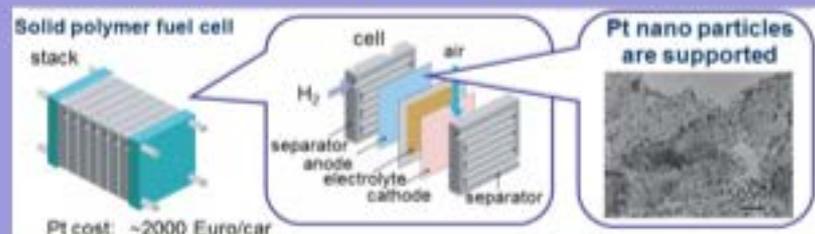
### 2. 重点研究

- ・白金代替カーボン燃料電池触媒(中村)
- ・化学的CO<sub>2</sub>転換(メタノール合成)(中村)
- ・有機薄膜太陽電池、有機EL(神原)
- ・レーザー共振器、マイクロ波共振器(山本)

### 3. 特長

- ・メカニズムを原子レベル・電子レベルで研究すると同時に材料設計を行う

PI: 触媒による環境エネルギー分野への貢献  
白金を代替する燃料電池触媒



Nano Lett (2009) 715回被引用、  
Nature Comm.(2012), Sci.Rep.(2014),  
Sci.Rep.(2015), Science (2016) 124  
二酸化炭素のメタノールへの転換

JST ACT-Cプロジェクト進行中 平成24~29年  
総額3億円 (代表:中村) Angew.Chem. (2017)

排ガス中のCO<sub>2</sub>を化学的に転換する最有力手法

# 物質変換材料部門の研究内容

## 1. CO<sub>2</sub> のメタノールへの転換

CO<sub>2</sub> 活性化機構解明、グラフェン触媒の応用、計算科学(阪大)と放射光実験(物性研)の共同研究

## 2. 燃料電池用カーボン触媒の開発

炭素/白金界面相互作用の解明、カーボンアロイ触媒の機能と設計

## 3. 触媒機能の学理構築

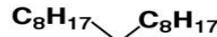
グラファイト系炭素の酸塩基性の起源、担体効果の解明、物性物理と反応性の橋渡し

## 4. 藻類産生油の触媒的転換

C<sub>30</sub> - C<sub>40</sub> 化学の構築、クラッキング、異性化、重合、ハイブリッド化

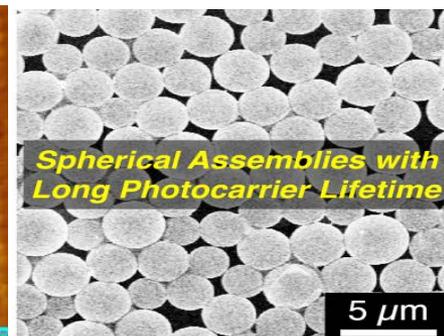
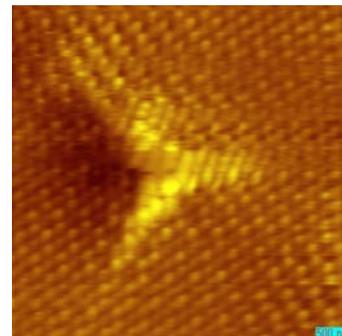
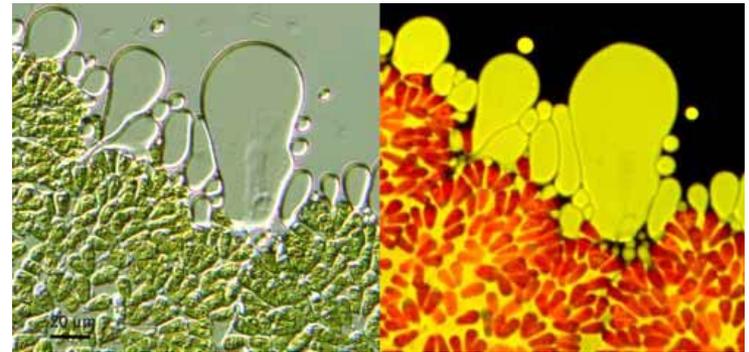
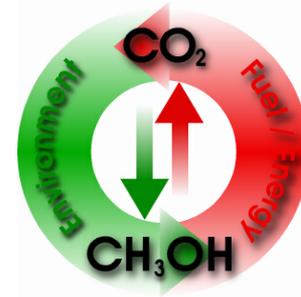
## 5. 光デバイスのための材料合成

ポリマーやグラフェンを用いた発光・レーザー、太陽電池材料



## 6. 新分光法と新物質

ヘテロダイン分光法のSTSへの応用、新二次元物質の創出



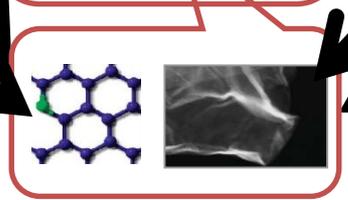
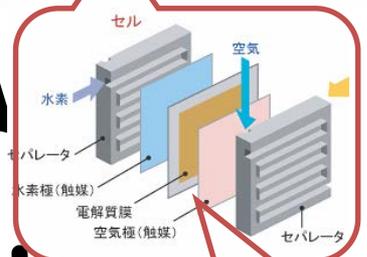
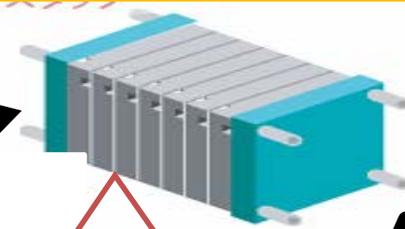
# 白金フリー燃料電池カーボン触媒イノベーション

燃料電池自動車の本格普及のための白金フリー触媒開発には、多角的連携研究が必要不可欠。本研究では、白金フリーカーボン触媒開発を軸として、つくば地区の特色・強みを生かして基礎研究および工学研究をフルに連携し、材料研究から実用化までを繋ぐ戦略を立てる。

**AIST**  
炭素材料の化学設計、第一原理計算による触媒設計、カーボン触媒の特性評価、産業界の動向調査  
児玉、羽鳥、曾根田、加登、大谷、藤谷

**筑波大**  
触媒分子のボトムアップ化、触媒活性分子の有機合成 神原、岡田、鍋島、近藤、中村

目標: 白金フリー触媒技術確立



**NIMS**  
電極触媒の性能評価、触媒の高耐久化、産業界の動向調査  
森、有賀、Hill

**東大**  
放射光実験による電極触媒の解析 原田、松田、山本

**KEK, SLAC**  
放射光実験による電極触媒の解析 間瀬、阿部、近藤、小笠原

提案先; JST, NEDO, 自動車会社

高活性・高耐久性の窒素ドーパカーボン触媒の候補材料・構造の選定、実用化戦略の立案後、本格研究拠点構築へ

オールジャパン「白金フリー触媒研究拠点」の構築

Science(2016年)で発表した研究を発展させるプロジェクト(ピリジン型窒素に着目)

CiRfSE研究者として、神原、近藤、岡田、鍋島が参加



# Eley-Rideal型機構による新しい 反応ダイナミクス

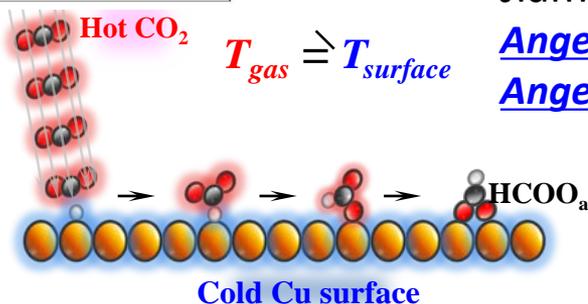
固体実用触媒系では初めてのERメカニズムを立証

Jiamei Quan, Takahiro Kondo, Guichang Wang, and Junji Nakamura

[Angew. Chem. Int. Ed. 56 \(2017\) 3496-3500.](#) Selected as a **front cover picture**

[Angew. Chem. 129 \(2017\) 3550-3554.](#)

Selected as a **Hot Paper**

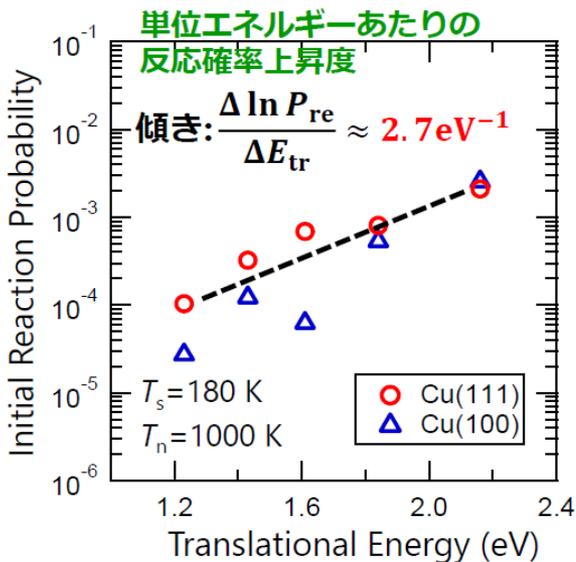


O=C=Oの変角によってCO<sub>2</sub>の反応性が極めて向上  
LUMOのエネルギー準位が選択的に低下

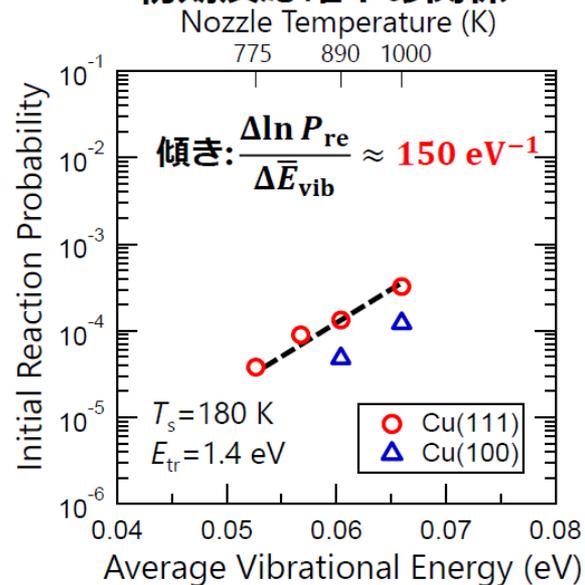
触媒の熱は反応に効かない

表面反応ダイナミクスの基礎研究は数多くあるが、**応用に適用可能な貴重な成果**

CO<sub>2</sub>並進エネルギーと初期反応確率の関係



CO<sub>2</sub>振動エネルギーと初期反応確率の関係



**振動エネルギーのほうが反応促進により効果的**

# 燃料電池の白金代替となる炭素触媒の活性点を特定した

RESEARCH | REPORTS

## ↓筑波大学HPの注目の研究

ELECTROCHEMISTRY

### Active sites of nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction clarified using model catalysts

Donghui Guo,<sup>1</sup> Riku Shibuya,<sup>2</sup> Chisato Akiba,<sup>2</sup> Shunsuke Saji,<sup>2</sup> Takahiro Kondo,<sup>1\*</sup> Junji Nakamura<sup>1\*</sup>

Nitrogen (N)-doped carbon materials exhibit high electrocatalytic activity for the oxygen reduction reaction (ORR), which is essential for several renewable energy systems. However, the ORR active site (or sites) is unclear, which retards further developments of high-performance catalysts. Here, we characterized the ORR active site by using newly designed graphite (highly oriented pyrolytic graphite) model catalysts with well-defined  $\pi$  conjugation and well-controlled doping of N species. The ORR active site is created by pyridinic N. Carbon dioxide adsorption experiments indicated that pyridinic N also creates Lewis basic sites. The specific activities per pyridinic N in the HOPG model catalysts are comparable with those of N-doped graphene powder catalysts. Thus, the ORR active sites in N-doped carbon materials are carbon atoms with Lewis basicity next to pyridinic N.

(14). Thus, it is difficult to determine which type of nitrogen creates the active site for the C comparing samples subjected to treatm pyrolysis at different temperatures becau size of the  $\pi$ -conjugated system is also depn on the annealing temperature.

To determine the active site conclu we develop four types of model catalyst well-defined  $\pi$  conjugation based on high ented pyrolytic graphite (HOPG): (i) pyr N-dominated HOPG (pyrr-HOPG); (ii) gr: N-dominated HOPG (grap-HOPG), and fo parison, (iii) edges patterned on the surfac out N (edge-HOPG); and (iv) clean-HOF supplementary methods and fig. S1). The sites and adsorption properties of the nit doped carbon surfaces are examined by post-ORR x-ray photoelectron spectroscopy and CO<sub>2</sub> temperature programmed desc (TPD) measurements.

Of the four types of prepared HOPG catalysts, preparation of the pyridinicN-dom HOPG model catalyst is the most challeng cause pyridinic N atoms are preferentially



筑波大学 University of Tsukuba

[本学で学びたい方へ](#)
[在学生の方へ](#)
[卒業生の方へ](#)
[一般・研究者の方へ](#)

[大学案内](#)
[学群・大学院](#)
[教育](#)
[研究](#)
[キャンパスライフ](#)
[社会連携](#)
[国際交流](#)

HOME > お知らせ・情報 > 注目の研究 > ビリジン型窒素が炭素触媒の活性点を形成する ～レアメタル白金に代わる燃料電池触媒開発への大きな発見～



### お知らせ・情報

#### ビリジン型窒素が炭素触媒の活性点を形成する ～レアメタル白金に代わる燃料電池触媒開発への大きな発見～

2016/01/22

筑波大学数理工学系 中村潤児教授、近藤剛弘准教授、郭東暉 (Donghui Guo) 研究員らは、レアメタルの白金に代わる燃料電池炭素触媒の活性点を形成する窒素種を特定しました。

これまで窒素ドーパド炭素材料が、燃料電池のカソード電極反応である酸素還元反応に対して高い触媒性能を示すことは広く知られていましたが、どの部位で触媒反応が起きているかという触媒活性点については様々な提案が出されており、明らかにされていませんでした。本研究では特定の窒素種だけを持つモデル触媒を複数調製し、それらの触媒特性を比較・解析することにより、触媒活性点を形成する窒素種がビリジン型窒素と呼ばれる窒素種であることを特定しました。また、ビリジン型窒素が炭素材料に導入されると、ビリジン型窒素の隣のn共役系を形成している炭素原子に局在化した電子準位が形成され、これがルイス塩基として機能できるようになることが、二酸化炭素の吸着実験などから示されました。以上の結果より、窒素ドーパド炭素材料の酸素還元反応に対する触媒活性点は、ビリジン型窒素の隣のルイス塩基となっている炭素原子であると結論付けられました。

nature nanotechnology

CARBON CATALYSTS  
Active sites revealed

Orlain Vaughan  
Nature Nanotechnology | doi:10.1038/nnano.2016.36  
Published 03 March 2016

Subject terms: Electrocatalysis • Fuel cells • Graphene

Reaction scheme showing the oxygen reduction reaction (ORR) on a nitrogen-doped carbon catalyst. The scheme illustrates the adsorption of O<sub>2</sub> and its subsequent reduction to H<sub>2</sub>O, involving various intermediates and electron/proton transfers. A photo shows the research team in their laboratory.

### レアメタル白金に代わる燃料電池炭素触媒の活性点を形成する窒素種を特定



### ← Nature Nanotechnology, Research highlightsに選出される

## 現在、441回の引用

論文 D. Guo, R. Shibuya, C. Akiba, S. Saji, T. Kondo, J. Nakamura, **Science 351 (2016) 361.**

Active sites of nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction clarified using model catalysts  
D Guo, R Shibuya, C Akiba, S Saji, T Kondo... - ..., 2016 - science.sciencemag.org  
Abstract Nitrogen (N)-doped carbon materials exhibit high electrocatalytic activity for the oxygen reduction reaction (ORR), which is essential for several renewable energy systems. However, the ORR active site (or sites) is unclear, which retards further developments of high-performance catalysts. Here, we characterized the ORR active site by using newly designed graphite (highly oriented pyrolytic graphite) model catalysts with well-defined  $\pi$  ...  
引用元 196 関連記事 全 9 パージョン Web of Science: 120 引用 保存

Science 355, 1296 (2017)

Cu/ZnOメタノール合成触媒の活性点に関して表舞台に立って論争中

CATALYSIS

# Active sites for CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts

Science 357, 6354 (2017)

Shyam Kattel,<sup>1</sup> Pedro J. Ramírez,<sup>2</sup> Jingguang G. Chen,<sup>1,3\*</sup>  
José A. Rodríguez,<sup>1,4\*</sup> Ping Liu<sup>1,4\*</sup>

The active sites over commercial copper/zinc oxide/aluminum catalysts for carbon dioxide (CO<sub>2</sub>) hydrogenation to methanol on ZnO-Cu interfacial sites, have recently been the subject of a direct comparison between the activity of ZnCu and ZnO/Cu synthesis. By combining x-ray photoemission spectroscopy, and kinetic Monte Carlo simulations, we can identify and compare each catalyst. Both experimental and theoretical results agree on surface oxidation under the reaction conditions so that surface ZnCu and allows ZnCu to reach the activity of ZnO/Cu with the same rate. This highlights a synergy of Cu and ZnO at the interface that facilitates the reaction via formate intermediates.

## Response to Comment on “Active sites for CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts”

Shyam Kattel,<sup>1</sup> Pedro J. Ramírez,<sup>2</sup> Jingguang G. Chen,<sup>1,3\*</sup>  
José A. Rodríguez,<sup>1,4\*</sup> Ping Liu<sup>1,4\*</sup>

In their Comment on our recent Report, Nakamura *et al.* argue that our x-ray photoelectron spectroscopy (XPS) analysis was affected by the presence of formate species on the catalyst surface. This argument is not valid because the reactant gases were evacuated at temperatures from 525 to 575 kelvin, conditions under which formate is not stable on the catalyst surface. An analysis of the XPS results obtained after exposing zinc

## TECHNICAL COMMENT

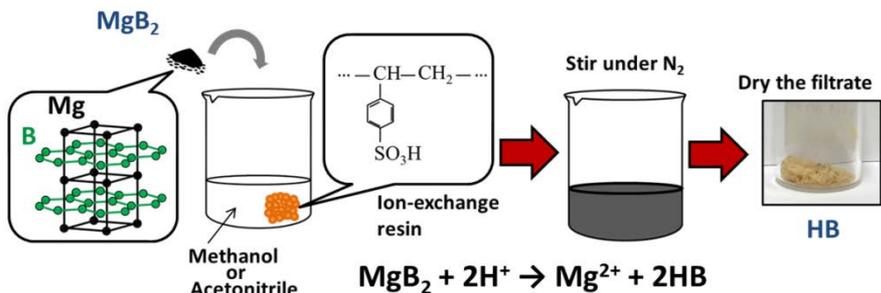
CATALYSIS

# Comment on “Active sites for CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts”

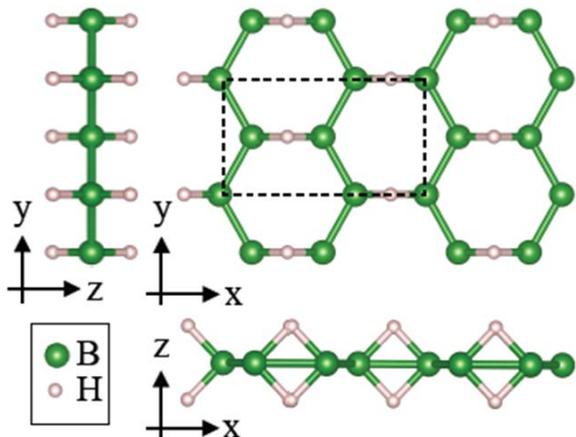
Junji Nakamura,<sup>1\*</sup> Tadahiro Fujitani,<sup>2</sup> Sebastian Kuld,<sup>3</sup> Stig Helveg,<sup>3</sup>  
Ib Chorkendorff,<sup>4\*</sup> Jens Sehested<sup>3\*</sup>

24 March 2017, p. 1296) report that a zinc on copper (Zn/Cu) catalyst is active for the hydrogenation to zinc oxide/copper (ZnO/Cu) during carbon dioxide hydrogenation to methanol and conclude that the Cu-ZnO interface is the active site for synthesis. Similar experiments conducted two decades ago by Fujitani *et al.* demonstrated that Zn is attached to formate rather than being

# MgB<sub>2</sub>からイオン交換によりホウ化水素二次元シートが生成することを見出した

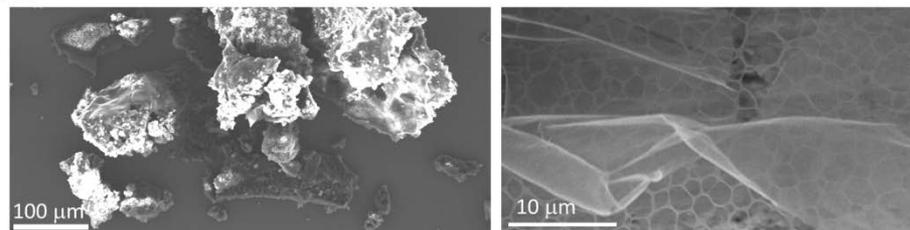


Local HB structure (XPDF and DFT)

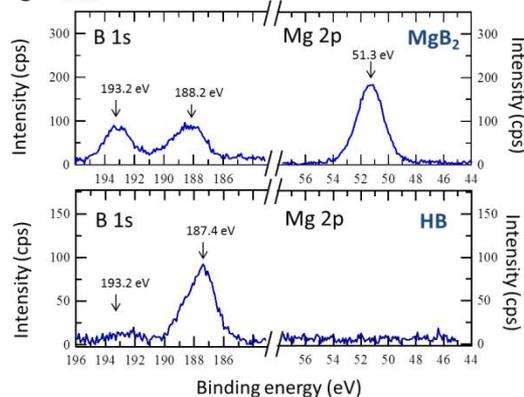


理論計算で存在が予測されていた  
ボロファンと呼ばれる物質の生成を実現

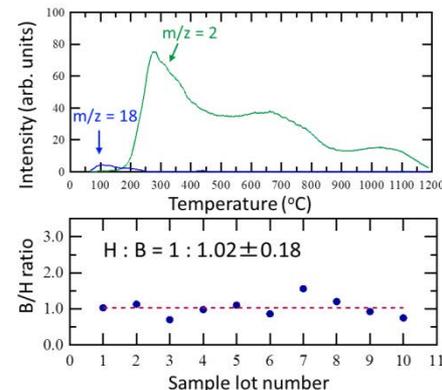
B SEM



C XPS



D TDS



特許

・ 近藤剛弘, 中村潤児, 西野弘晃, 藤野朝日, 藤森智博, 細野秀雄, 宮内雅浩,  
二次元水素化ホウ素含有シート、二次元ホウ素化合物含有シートの製造方法,  
特願2016-204477, 出願日: 2016.10.18

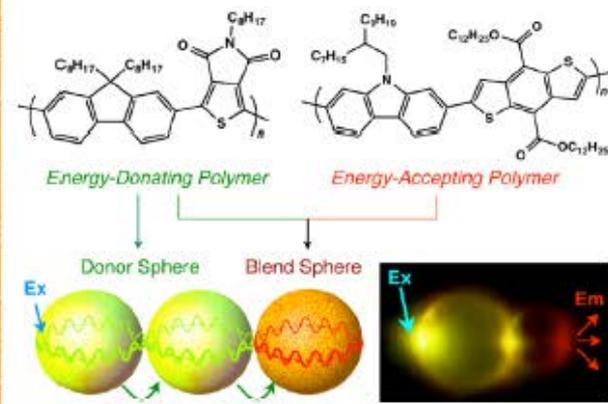
論文

H. Nishino, T. Fujita, N. T. Cuong, S. Tominaka, M. Miyauchi, S. Imura, A. Hirata, N. Umezawa, S. Okada, E. Nishibori, A. Fujino, T. Fujimori, S. Ito, J. Nakamura, H. Hosono, T. Kondo  
*J. Am. Chem. Soc.* (2017) in press. DOI: 10.1021/jacs.7b06153

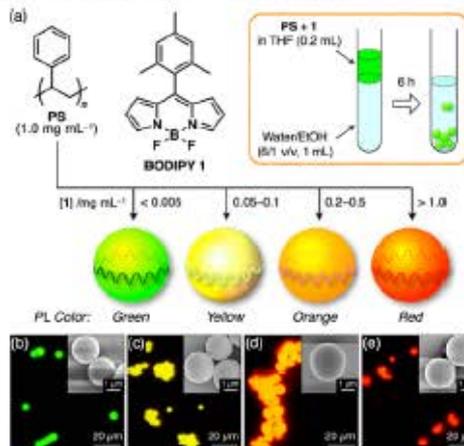
(筑波大、東工大、東北大、NIMSで共同プレスリリース(9月26日14時))

# 共役ポリマーマイクロ共振器に関する最近の発表 山本G

## 【キャビティを介した長距離エネルギー移動】

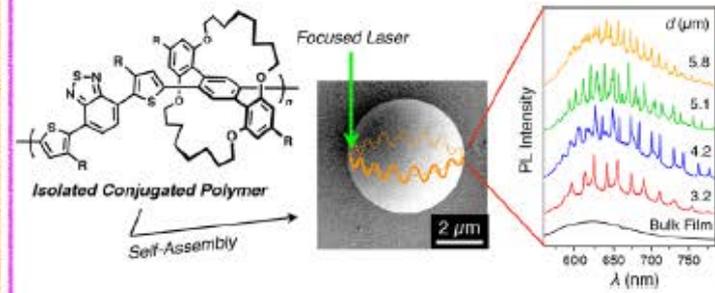


ACS Nano 2016, 10, 5543.



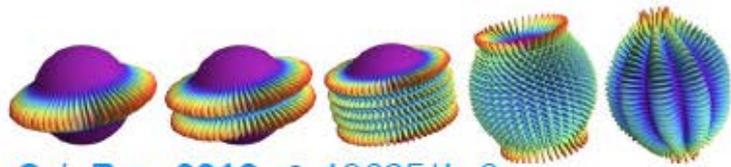
ACS Nano 2016, 10, 7058.

## 【孤立共役ポリマー共振器】



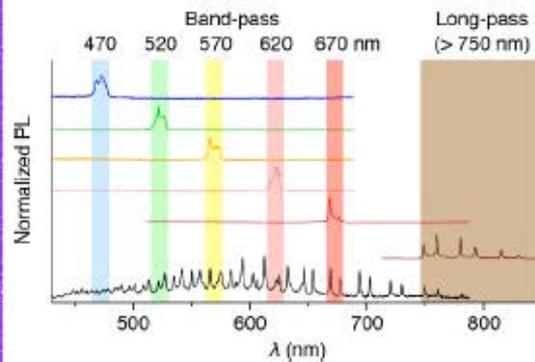
Macromolecules 2015, 48, 3928.

## 【光誘起モード分裂】



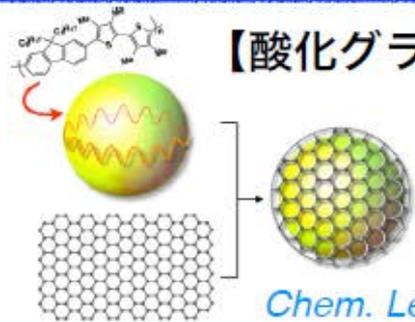
Sci. Rep. 2016, 6, 19635/1-6.

## 【白色WGM共鳴発光】



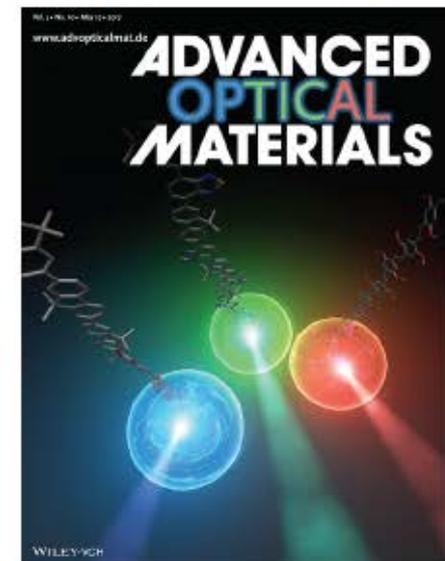
RSC Adv. 2016, 6, 52854.

## 【酸化グラフェン被覆】



Chem. Lett. 2016, 45, 1024.

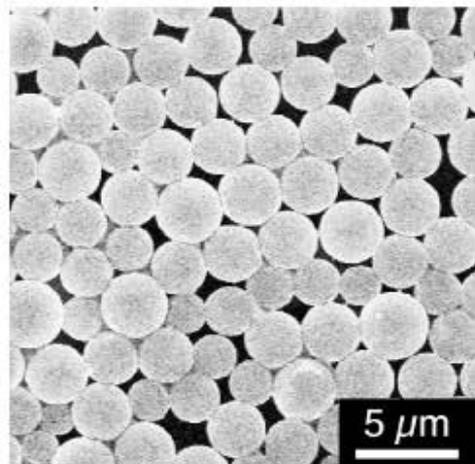
## 【WGMLレーザー発振】



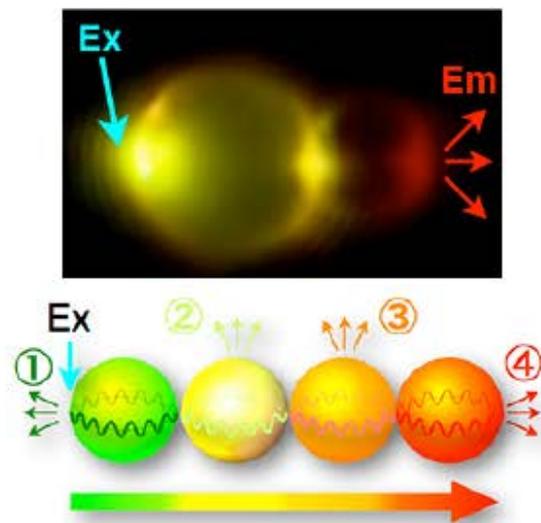
Adv. Opt. Mater. 2017.

# WGM共振器を用いた現在進行中の研究 山本G

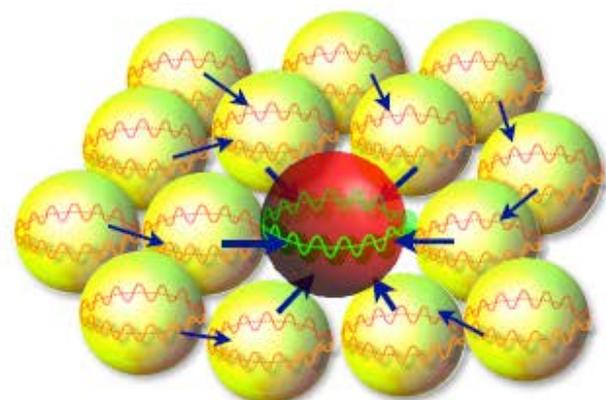
## 自己組織化メカニズム



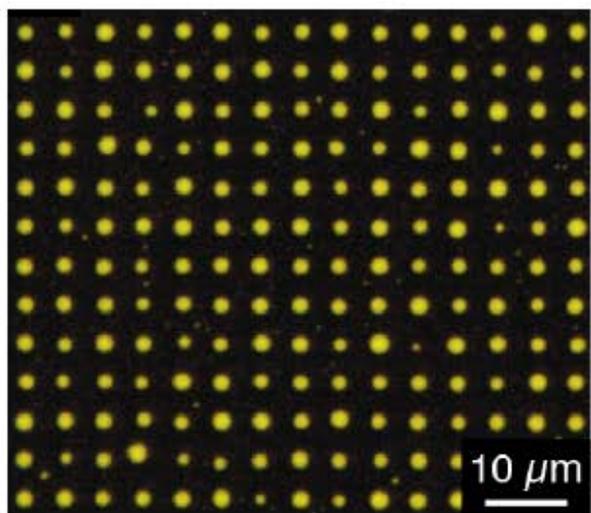
## エネルギーカスケード



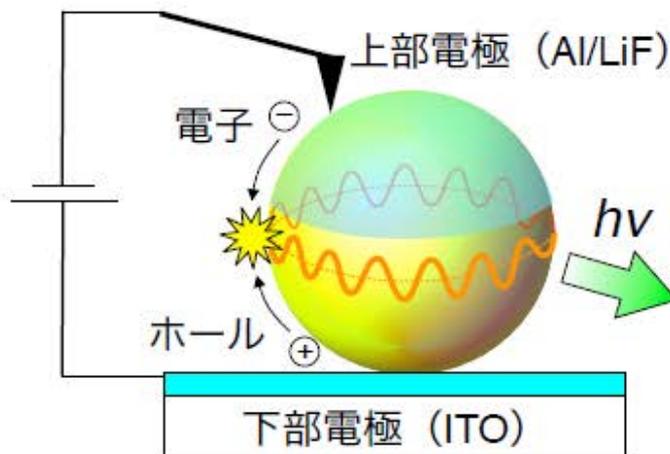
## 超広域光捕集



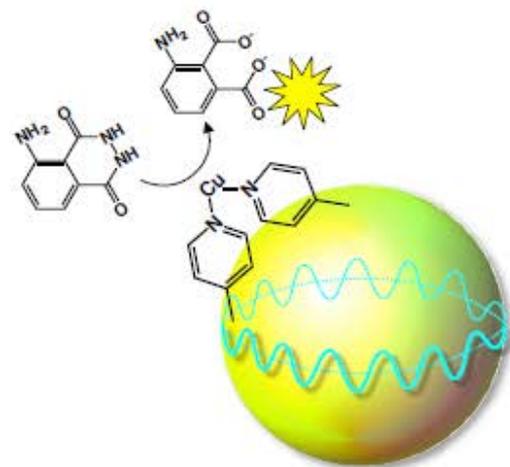
## メモリー・ディスプレイ



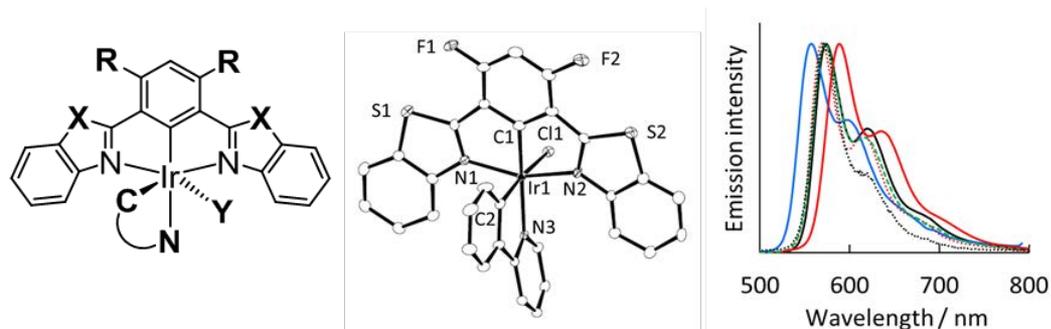
## 電界発光・レーザー



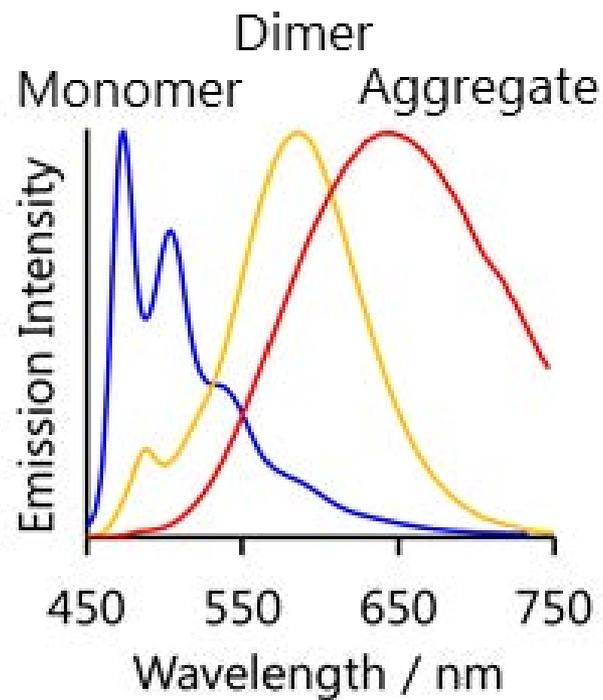
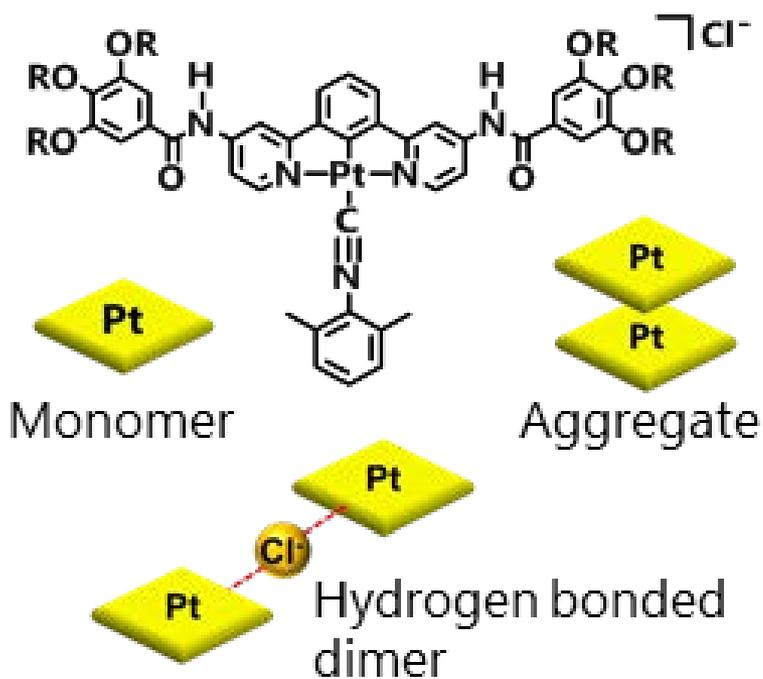
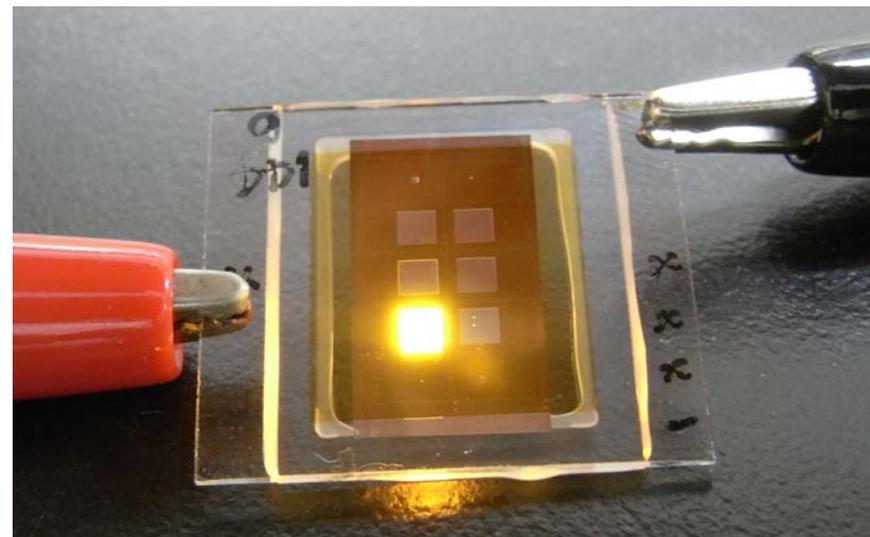
## 化学発光閉じ込め



# りん光発光性金属錯体の設計



*J. Organomet. Chem.*, **2017**, 845, 189-195.



*Inorg. Chem.* 2017, 56, 8726–8729.

# 平成29年1月～研究費(括弧内は総額)

- 平成24-30年度 JST ACT-C 研究代表者 中村潤児 (1億2000万円、グループ全体3億円)
- 平成24-30年度 東京応化 中村潤児 (350万円)
- 平成29年度 TIA 連携プログラム探索推進事業「かけはし」 研究代表者 中村潤児 (40万円)
- 平成29-31年度 日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤研究A 研究代表者 中村潤児 (1470万円)
- 平成28-32年度 日本学術振興会 科学研究費補助金 基盤研究A 研究代表者 山本洋平 (3220万円)
- 平成28-30年度 日本学術振興会 科学研究費補助金 国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化) 研究代表者 山本洋平 (1110万円)
- 平成28-29年度 筑波大学・ドイツ学術交流会(DAAD)パートナーシッププログラム 研究代表者 山本洋平 (222.3万円)
- 平成27-29年度 旭硝子財団 研究助成 若手継続グラント 研究代表者 山本洋平 (600万円)
- 平成29年度 TIA 連携プログラム探索推進事業 かけはし「最先端光材料・光テクノロジー国際研究拠点形成に向けたTIA連携」研究代表者 山本洋平 (150万円)
- 平成29-30年度 文部科学省 科学研究費補助金 新学術領域 (公募研究: π造形科学) 「様々な励起プロセスを介したπ電子球体への発光閉じ込めと共鳴発光の変調」研究代表者 山本洋平 (590万円)
- 平成28-30年度 平成28年度プレ戦略イニシアティブ (研究拠点提案型) 「光と物質・生命科学のアンサンブルによる新現象の発掘と解明」研究代表者 山本洋平 (100万円)
- 平成29-32年度 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究(B) 研究代表者 神原貴樹 (1781万円)
- 平成28-29年度 文部科学省 科学研究費補助金 新学術領域 (公募研究: 原子層科学) 研究代表者 近藤剛弘 (470万円)
- 平成28-30年度 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究(B) 研究代表者 近藤剛弘 (1940万円)
- 平成28-29年度 文部科学省 科学研究費補助金 挑戦的萌芽研究 研究代表者 近藤剛弘 (360万円)
- 平成28-29年度 東京工業大学元素戦略センター 特定准教授 (600万円)
- 平成28-29年度 第28回公益財団法人江野科学振興財団研究助成 研究代表者 神原貴樹 (500万円)
- 平成28-30年度 産総研からの委託研究 (NEDOプロジェクト再委託研究) 研究代表者 神原貴樹 (1550万円)
- 平成29-31年度 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究(A) 研究分担者 近藤剛弘 (150万円)

**18報 主な学術誌 (If 10以上とNature系、ACS系)**

**Science 1報、Angewandte Chemie 1報、JACS 1報、Scientific Reports 1報、ACS系雑誌 3報**

**山本、神原、中村、近藤、鍋島との共著論文多数(6報) 部門内部の共同研究が強力に推進 次ページ論文リスト中、青字が共同研究**

顕著な引用回数 Science (2016年1月発表): 436回、Nano Letters(2009)は909回

**国内共同研究:** 東大: 吉信淳教授(CO<sub>2</sub>活性化)・松田巖(ボロンシート)、阪大: 森川良忠教授(CO<sub>2</sub>活性化)、北大: 郷原一寿教授(Ptシングルアトム触媒)、慶応大: 近藤寛(燃料電池放射光解析)、東工大: 細野秀雄教授(ボロンシート)・宮内雅浩教授(光触媒)・真島豊教授(FET特性)・北野政明准教授(触媒特性)・原亨和教授(酸塩基特性)、東北大: 藤田武志准教授(TEM解析)・平田秋彦准教授(TEM解析)、NIMS: 谷口尚博士(高压合成)・宮川仁博士(磁化率測定)・富中悟史博士(XPDF、プロトン伝導)・Nguyen Thanh Cuong博士(DFT計算)・森利之(燃料電池電極)、東工大: アルブレヒト建・山元公寿先生(デンドリマー合成)、福島孝典先生(有機材料合成)、大阪大学: 佐伯昭紀先生(マイクロ波計測)、武田洋平先生(ポリマー合成)、立教大学: 森本正和先生(フォトクロミック分子合成)、理研: 河東田道夫博士(MD計算)、神奈川大学: 辻勇人先生(有機材料合成)、関西学院大学: 畠山琢治先生(有機材料合成)、東工大: 真島豊教授(FET特性)東北大: 藤田武志准教授(TEM、STEM、EELS、EDS)、農工大: 山本明保准教授(MgB<sub>2</sub>の生成)、東工大: 竹内大輔准教授、小坂田耕太郎教授(バイオプラスチック、重合触媒)、小泉武昭准教授(錯体触媒) 富山大: 加賀谷重浩教授(微量分析)、NIMS: 長尾忠昭博士・石井智博士・Thang Dao博士(顕微分光)・田代健太郎博士(ペプチド合成)・三成剛生博士(マイクロパターンニング)、AIST: 佐々木史雄博士(フェムト秒レーザー分光)、東工大: アルブレヒト建助教・山元公寿教授(デンドリマー合成)・福島孝典教授(有機材料合成)、大阪大学: 佐伯昭紀准教授(マイクロ波計測)・武田洋平准教授(ポリマー合成)、立教大学: 森本正和教授(フォトクロミック分子合成)、理研: 河東田道夫博士(MD計算)、神奈川大学: 辻勇人教授(有機材料合成)、東京大学: 中村栄一教授(有機材料合成)、関西学院大学: 畠山琢治教授(有機材料合成)

**国際共同研究**: Duisburg-Essen大学AxelLorke先生(顕微分光、マイクロファブリケーション)、Stephan Barcikowski先生・Gakina Marzun博士(金属ナノ粒子合成、光触媒)、Heidelberg大学Uwe Bunz先生(有機材料、ポリマー合成)、Jer-Shing Huang博士(プラズマモニクス)、台湾:国立清華大学 堀江正樹先生(ポリマー合成)  
中国:南開大学 Wang Guichang教授(DFT計算)、中国科学院上海有機化学研究所 Li Wei-Shi(李維実)教授(有機材料合成)、Xike Gao教授(ポリマー合成)、清華大学 He Yanning(有機材料合成)、重慶師範大学 盧葦(Lu Wei)准教授(機能性高分子)、Aachen大学Alexander Kühne博士(高分子マイクロ共振器)、Strasbourg大学 Thomas Ebbesen教授(光-物質強結合系)、Cambridge 大学Richard Friend教授(高分子半導体)、Malaga大学M. Carmen Ruiz Delgado教授(ラマン分光)、Eindhoven University of Technology, E. W. (Bert) Meijer教授(円偏光発光分光)

**産学連携**: NEC、東京応化、日立化成、住友精化、JSR

**つくば連携**: ・かけはしで白金代替燃料電池のプロジェクトが進行中

- ・TIAかけはし「最先端光材料・光テクノロジー国際研究拠点形成に向けたTIA連携」
- ・TIAかけはし「TIAかけはしプロジェクト:白金フリー燃料電池カーボン触媒イノベーション」
- ・藻類研究で中村、神原が産総研と協力を共同研究を展開中(クロスアポ:藤谷教授、崔准教授)
- ・NIMS:長尾忠昭先生(顕微蛍光分光)、田代健太郎先生(ペプチド合成)、塚越一仁先生(有機半導体)、三成剛夫先生(有機半導体)、竹内正之先生・杉安和憲先生(ポリマー合成)、谷口尚先生(高圧合成、超伝導特性)、梅澤直人先生(DFT計算)、安田剛先生(有機デバイス)、中尾秀信先生(バイオプラスチックの応用展開)
- ・AIST:佐々木史雄先生(フェムト秒顕微蛍光分光)、石井則行先生(TEM)

1. Jiamei Quan, Takahiro Kondo, Guichang Wang, Junji Nakamura, “Energy Transfer Dynamics of Formate Decomposition on Cu(110)”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 56, 3496-3500 (2017), *Angew. Chem.*, 129, 3550-3554 (2017). Selected as a front cover picture. Selected as a Hot Paper.
2. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Akiyasu Yamamoto, Tomohiro Fujimori, Asahi Fujino, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo, “Formation Mechanism of Boron-Based Nanosheet through the Reaction of MgB<sub>2</sub> with Water” **J. Phys. Chem. C**, 121, 10587-10593 (2017).
3. Tsukasa Mizutaru, Galina Marzun, Sebastian Kohsakowski, Stephan Barcikowski, Dachao Hong, Hiroaki Kotani, Takahiko Kojima, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, and Yohei Yamamoto “Peptide Crosslinkers: Immobilization of Platinum Nanoparticles Highly Dispersed on Graphene Oxide Nanosheets with Enhanced Photocatalytic Activities”, **ACS Appl. Mater. Interfaces**, 9 (11), 9996-10002 (2017).
4. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Akiyasu Yamamoto, Tomohiro Fujimori, Asahi Fujino, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo “Formation Mechanism of Boron-Based Nanosheet through the Reaction of MgB<sub>2</sub> with Water”, **J. Phys. Chem. C**, 121, 10587-10593 (2017).
5. Junji Nakamura, Tadahiro Fujitani, Sebastian Kuld, Stig Helveg, Ib Chorkendorff, Jens Sehested, “Comment on “Active sites for CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol on Cu/ZnO catalysts”” **Science**, 357, 6534 (2017).
6. Hiroaki Nishino, Takeshi Fujita, Nguyen Thanh Cuong, Satoshi Tominaka, Masahiro Miyauchi, Soshi Iimura, Akihiko Hirata, Naoto Umezawa, Susumu Okada, Eiji Nishibori, Asahi Fujino, Tomohiro Fujimori, Shin-ichi Ito, Junji Nakamura, Hideo Hosono, Takahiro Kondo “Formation and characterization of hydrogen boride sheets derived from MgB<sub>2</sub> by cation exchange”, **J. Am. Chem. Soc.** (2017) in press.
7. Jun-ichi Fujita, Takaki Hiyama, Ayaka Hirukawa, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, Shin-ichi Ito, Ryosuke Araki, Yoshikazu Ito, Masaki Takeguchi, and Woei Wu Pai “Near room temperature chemical vapor deposition of graphene with diluted methane and molten gallium catalyst”, **Scientific Reports** (2017) in press.
8. Takahiro Kondo “Recent progress in boron nanomaterials”, **Science and Technology of Advanced Materials** (special issue) (2017) 印刷中
9. 近藤 剛弘, 中村潤児 “窒素ドーピンググラフェンの触媒活性点”, 二次元物質の科学 グラフェンなどの分子シートが生み出す新世界, 日本化学会編 化学同人, 94-100 (2017).
10. Soh Kushida, Osamu Oki, Hitoshi Saito, Junpei Kuwabara, Takaki Kanbara, Motomichi Tashiro, Michio Katouda, Yutaka Imamura, Yohei Yamamoto, “From Linear to Foldamer and Assembly: Hierarchical Transformation of Coplanar Conjugated Polymer into Microsphere” **J. Phys. Chem. Lett.** accepted (Sept. 6, 2017)
11. Yusuke Wakikawa, Tadaaki Ikoma, Yohei Yamamoto, Takanori Fukushima, Kimio Akiyama, “Temperature Dependence of Magnetophotoconductance in One-dimensional Molecular Assembly of Hexabenzocoronene” **ACS Omega** 2017, 2, 3260–3266.
12. Soh Kushida, Daichi Okada, Fumio Sasaki, Zhan-Hong Lin, Jer-Shing Huang, Yohei Yamamoto\*, “Low-Threshold Whispering Gallery Mode Lasing from Self-Assembled Microspheres of Single-Sort Conjugated Polymers” **Adv. Opt. Mater.** 2017, 5, 1700123. (Selected as ‘Inside Front Cover’)
13. Tsukasa Mizutaru, Galina Marzun, Sebastian Kohsakowski, Stephan Barcikowski, Dachao Hong, Hiroaki Kotani, Takahiko Kojima, Takahiro Kondo, Junji Nakamura, Yohei Yamamoto, “Peptide Cross-linkers: Immobilization of Platinum Nanoparticles Highly Dispersed on Graphene Oxide Nanosheets with Enhanced Photocatalytic Activities”, **ACS Appl. Mater. Interfaces** 2017, 9, 9996–10002.
14. Toru Nakayama, Kentaro Tashiro, Toshiaki Takei, Yohei Yamamoto, ” Controlled Self-Assembly of Oligopeptides Bearing Electron Donor and Acceptor Units on the Side Chains to Form  $\beta$ -Sheets with Selective  $\pi$ -Stacking Configuration”, **Chem. Lett.** 2017, 46, 423–425.
15. Kosuke Shibasaki, Takeshi Yasuda, Yohei Yamamoto, Masashi Kijima, “Dual Substitution at 4,9-Positions of Carbazole in Donor- $\pi$ -Acceptor Copolymer Enhances Performance of Bulk-heterojunction Organic Solar Cells”, **Polymer** 2017, 108, 305–312.
16. Hitoshi Saito, Jieran Chen, Junpei Kuwabara, Takeshi Yasuda, and Takaki Kanbara, “Facile One-pot Access to  $\pi$ -Conjugated Polymers via Sequential Bromination/Direct Arylation Polycondensation” **Polym. Chem.**, 8, 3006-3012 (2017).
17. Junpei Kuwabara, Tomomi Namekawa, Eiko Sakabe, Masa-aki Haga, and Takaki Kanbara, “Luminescent Ir(III) complexes bearing benzothiazole or benzoxazole-based pincer ligand” **Organomet. Chem.**, 845, 189-195 (2017).
18. Junpei Kuwabara, Kaho Yamaguchi, Kazuma Yamawaki, Takeshi Yasuda, Yoshinobu Nishimura, and Takaki Kanbara, “Modulation of the emission mode of a Pt(II) complex via intermolecular interactions” **Inorg. Chem.**, 56, 8726-8729 (2017).

## 招待講演 H29

- Junji Nakamura, “Fuel cell catalysts using graphene”, The 18th International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM2017), Toyama International Conference Center (Toyama, Japan), June 7, 2017. (Invited).
- 中村潤児、「モデル触媒の活性サイトと反応メカニズム」2017年真空・表面科学合同講演会、横浜市立大学金沢八景キャンパス(神奈川)、2017年8月18日。(学会賞受賞記念講演)
- 中村潤児、「白金フリー燃料電池の実用化前進:炭素触媒の活性点解明」2017年真空・表面科学合同講演会、横浜市立大学金沢八景キャンパス(神奈川)、2017年8月18日。(招待講演)
- 中村潤児、「酸素還元反応に対する窒素ドーピング炭素触媒の活性点」第120回触媒討論会、愛媛大学城北キャンパス(愛媛)、2017年9月12日。(特別講演)
- Takahiro Kondo, “Active sites, Lewis basic sites and local electronic structure of nitrogen-doped graphitic carbon catalysts”, International union of materials research society-International conference of advanced materials (IUMRS-ICAM 2017), Univ. Kyoto (Japan), Aug 28, 2017.
- Takahiro Kondo, “Active sites in nitrogen-doped carbon materials for oxygen reduction reaction”, TGSW 2017, Univ. Tsukuba (Tsukuba), Sep 27, 2017.
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in University of Strasbourg (University of Strasbourg), May 22, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in University of Heidelberg (Heidelberg, Germany), June 1, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in DWI (Aachen, Germany), June 13, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in Eindhoven University of Technology (Eindhoven, Netherland), June 14, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in University of Malaga (Malaga, Spain), June 23, 2017. (招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Whispering Gallery Mode Lasing from Self-Assembled Conjugated Polymer Microsphere Resonators”. XXXVI Reunión BIENAL de la Real Sociedad Española de QUÍMICA (BIENAL2017) (Sitges, Spain), June 25-29. 2017.(招待講演).

- Yohei Yamamoto, “Whispering gallery mode lasing from self-assembled conjugated polymer microspheres”, Electrical and Related Properties of Organic Solids (ERPOS2017) (St. Andrews, UK), July 9-13, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-assembled microcavities from conjugated macromolecules and polymers for optical and laser applications”, 13th International Conference on Materials Chemistry (MC13) (Liverpool, UK), July 10-13, 2017.(招待講演).
- Yohei Yamamoto, “Self-Assembled Conjugated Organic/Polymer Microcavities for Optical Resonators and Lasers”, Seminar in Technical University München (Munich, Germany), July 18, 2017.(招待講演).
- 神原貴樹、「有機EL討論会」第24回例会、NHK放送技術研究所内技研ホール、2017年6月15日-16日.
- 神原貴樹、高分子学会関東高分子若手研究会 春の講演会、理化学研究所、2017年6月24日.

# 顕著な研究成果 H29

- ・CO<sub>2</sub>のメタノールへの転換に関する基礎研究として、CO<sub>2</sub>の活性化ダイナミクスの詳細が明らかになった。銅触媒表面において、気相CO<sub>2</sub>分子と吸着水素原子の反応では、CO<sub>2</sub>分子の並進エネルギーが0.1eV程度を要し、他に0.45eV程度の振動エネルギーを供給すれば、吸着水素原子との反応が容易に進むことがわかった。
- ・CO<sub>2</sub>からのメタノール合成触媒の活性点に関してコメントがScience誌掲載された。これはCu/ZnO触媒の活性点に関して重要な結果(1996)を再度世に示すことになった。現在、さらに詳細なCuZn活性点の研究を遂行している。
- ・窒素ドープカーボン触媒の活性点を解明し2016年にScience誌で報告した。これをさらに発展させ自己組織化によってボトムアップ合成したカーボン触媒が高い活性を示すことを発見した。
- ・共役ポリマーマイクロ球体からのレーザー発振を実現した。また、球体形成のメカニズムに関する考察を行った。酸化グラフェン-ペプチド-白金ナノ粒子複合材料を用いた光触媒効果と水素発生を実現した。 $\pi$ 共役分子部位を有するペプチドの自己組織化による光誘起電荷分離状態の形成を実現した。
- ・高分子半導体合成のためのワンポット合成技術を開発した。この手法では、基質を反応容器に順に投入することで、有機金属のみならず、有機ハロゲン化物の事前調製も必要とせず、2種類の芳香族化合物を出発原料として利用して $\pi$ 共役高分子を合成できることから、従来法よりもさらに高分子半導体合成の省ステップ化が達成できる。
- ・電子材料や水素吸蔵材料として利用できる優れた特性を持つ物質として理論的にその存在が予想されていた二次元物質「ホウ化水素シート(ボロファン)」を生成することに成功した。ホウ素と水素の組成比が1:1のホウ化水素シートが室温・大気圧下という温和な条件で生成することを見出した。

## その他

中村潤児 日本表面科学会 学会賞  
桑原純平 高分子学会日立化成賞  
青木英晃 第66回高分子学会年次大会 優秀ポスター賞

# 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

連携教員

丸本一弘（物質工学域）

櫻井岳暁（物理工学域）

柳原英人（物理工学域）

末益 崇（物理工学域）

小島隆彦（化学域）

関口 章（化学域） 3月退

職

## 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

# 本部門の位置づけ (二次電池を例として)



新しい構造評価技術の開拓 → 現象の量子力学的理解 → **新しい科学、革新デバイス**

# 海外教育研究ユニット オーフス大学材料結晶学センター研究室（～平成32年3月31日）



PI: Prof. Bo. Brummerstedt Iversen (Aarhus University, Denmark)

世話人: 西堀英治 (数理工学系・物理学域)

## 海外教育研究ユニット

海外の研究者を含めた研究室（海外教育研究ユニット）を招致し、世界トップレベルの拠点を実現する。

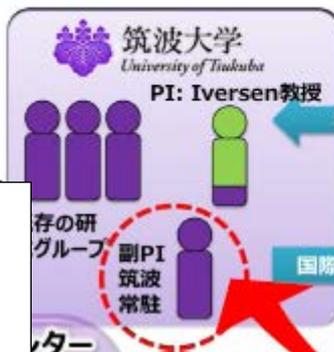
- PI : 委嘱期間中の一定期間、筑波大にて活動 手当 : ¥ 200万/月
  - 副PI : 筑波大に常駐。任期を付して筑波大で雇用 給与 : ¥ 600~800万/年
  - 世話人 : PI, 副PIと連携しユニットを運営
  - 国際TT(オプション) : 筑波大より海外研究室へ派遣※本招致では既に国際TTを派遣済み
  - 必要面積 : PI居室 20m<sup>2</sup>, ユニット研究室 100m<sup>2</sup>
- 人件費 : 計 ¥ 1000万/年  
研究費 : 計 ¥ 1000万/年  
(研究戦略イニシアティブ推進機構)

### 学内関連研究科・センター

Venkatesha R. Hathwar  
助教 2016.5 -

科  
ces

University of T 放射光物質科学コース等



Hidetaka Kasai  
国際TT 2015.4 -

for Materials Crystallography  
Director: Bo. Brummerstedt Iversen

研究者・教員(教授等) : 18名  
博士研究員 : 13名  
テクニカルスタッフ : 8名  
博士課程学生 : 54名



CMCの国際連携：日米欧豪をカバー



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT  
GÖTTINGEN




数理工学  
環境工  
エネルギー

センター  
拠点  
部門

PI  
Bo Brummerstedt Iversen  
2014 - 2014 Grundfos Prize

SPRING 8

RIKEN

DESY

世話人

# H29年度プレ戦略採択

1 申請者 (代表者)	所属・職	数理物質系・教授		
	ふりがな	もりとも ゆたか		
	氏名	守友 浩		
	連絡先	Tel:029-853-4337 e-mail:moritomo.yutaka.g@u.tsukuba.ac.jp		
2 申請分野	<input type="checkbox"/> <生命科学> <input type="checkbox"/> <医学系> <input type="checkbox"/> <化学、材料科学> <input type="checkbox"/> <数学、物理学、地球科学> <input type="checkbox"/> <情報、電気、電子> <input type="checkbox"/> <機械、土木、建築、その他工学> <input type="checkbox"/> <人文科学> <input type="checkbox"/> <社会科学> <input checked="" type="checkbox"/> <学際、複合、新領域>			
3 プレ戦略イニシアティブ名称 (英訳名)	次世代物質・デバイス戦略開発拠点 Strategic Development Center of Next generation Material & Device			
研究分野及びキーワード	研究分野：物質・デバイス分野 キーワード：(太陽電池) (熱変換) (生体物質)			
4 組織 (中核教員には氏名の前に*印を記載)	ふりがな	所属部局・職名	分野	役割分担
	氏名 (年齢)			
	*末益 兼 (49)	数理物質系・教授	応用物理学	太陽電池
	都甲 薫 (34)	数理物質系・助教	応用物理学	太陽電池
	*榎井 岳隆 (44)	数理物質系・准教授	応用物理学	太陽電池
	*西郷 英治 (45)	数理物質系・教授	回折結晶学	評価技術
	笠井 秀隆 (32)	数理物質系・助教	放射光科学	評価技術
	Verkatesha R Hathwar (33)	数理物質系・助教	回折結晶学	評価技術
	*伊藤 良一 (34)	数理物質系・准教授	エネルギー	熱変換
	*柳原 英人 (46)	数理物質系・准教授	応用物理学	評価技術
	*守友 浩 (52)	数理物質系・教授	エネルギー	熱変換
	小林 航 (38)	数理物質系・助教	エネルギー	熱変換
	丹羽 秀治 (32)	数理物質系・助教	エネルギー	熱変換
	*初貝 安弘 (54)	数理物質系・教授	物性物理学	計算科学
	*都倉 康弘 (56)	数理物質系・教授	物性物理学	計算科学
	*岡田 晋 (47)	数理物質系・教授	物性物理学	計算科学
	*神田 晶申 (51)	数理物質系・教授	物性物理学	評価技術
	*大塚 寛紀 (63)	数理物質系・准教授	化学	生体物質
	二瓶 雅之 (42)	数理物質系・助教	化学	生体物質
	志賀 拓也 (40)	計算科学セ・教授	生命分子化学	計算科学
	*重田 晋昭 (44)	数理物質系・教授	化学	生体物質
	*山本 泰彦 (60)	数理物質系・特任助教	化学	生体物質

<拠点形成計画の概念図>

## 次世代物質・デバイス戦略開発拠点



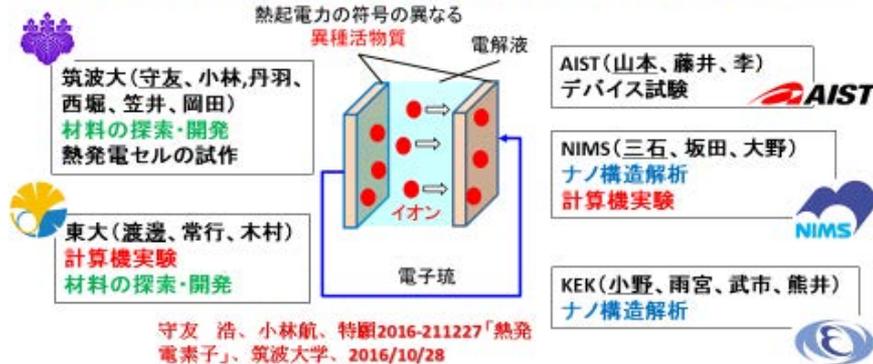
平成29年度第一回かけはし研究会  
 日時：8月28日（月） □ 13：00-16：40  
 場所：筑波大学自然科学系棟 04 13 セミナー室

# H29年度かけはし採択

## 新規 温度変化で発電するモバイル発電器

数理物質系 CIRFSE エネルギー貯蔵・変換物質部門長 守友 浩

【概要】温度変化を電気エネルギー変換するモバイル発電器は、地球上温度のあらゆる場所で使用でき、真のスマート社会を実現します。我々は、二次電池の電極材料を熱起電力の大きなものに置き換えた『熱発電セル』を提案(特許申請済)しています。本事業の目的は、『熱発電セル』の科学基盤の構築とその実現の見通しをたてることです。



- 13：00-□受付開始
- 第一部：13：20-15：00
- 13：20-13：40 □守友 浩（筑波大・TIMS）  
「レドックス材料を用いた熱電変換」
- 13：40-14：00 □藤井孝博（産業技術総合研究所）  
「アルカリ金属熱電変換」
- 14：00-14：20 □山本淳（産業技術総合研究所）  
「サーマルプローブ法による熱電材料の高速組成スクリーニング」
- 14：20-14：40 □北原功一（東大・新領域・物質系）  
「準結晶および金属間化合物の熱電材料としての可能性」
- 14：40-15：00 □増田秀樹（NIMS 先端材料解析研究拠点）  
「ケルビンプローブフォース顕微鏡を用いた全固体型リチウムイオン電池の内部電位計測」
- 第二部：15：20-17：00
- 15：20-15：40 □佐賀山基（KEK 物質構造研究所）  
「層状ビスマスカルコゲナイド物質における格子不整合と多彩な物性」
- 15：40-16：00 □常行真司（東大・理・物理）  
「非調和格子振動の高精度モデリングと熱伝導率計算」
- 16：00-16：20 □渡邊聡（東大・工・マテリアル）  
「ナノ構造の熱伝導および熱電特性の計算、ナノカーボン材料を例に」
- 16：20-16：40 □岡田晋（筑波大・数理・物質）  
「2次元物質ヘテロ構造の電子物性」

# 熱発電セルのデモに成功！

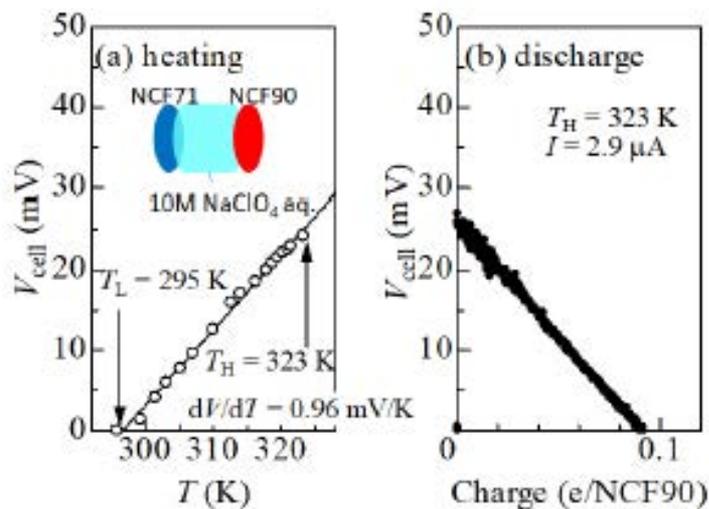


Fig. 3. (a) Cell voltage ( $V_{\text{cell}}$ ) of the battery-type thermocell against temperature ( $T$ ).  $T_L$  and  $T_H$  are the lowest and highest temperatures, respectively. Inset shows schematic picture of the thermocell. (b) The first discharge process at  $T_H$  with constant current ( $I = 2.9 \mu\text{A}$ ). The moved charge was normalized by NCF90.

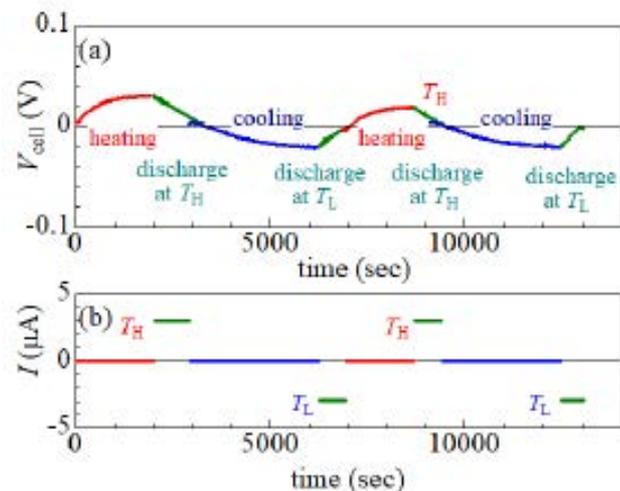


Fig. 4. (a) Cell voltage ( $V_{\text{cell}}$ ) and (b) current ( $I$ ) in the battery-type thermocell against heat cycle. The heat cycle consists of four processes: (i) heating from  $T_L$  to  $T_H$ , (ii) discharge at  $T_H$ , (iii) cooling from  $T_H$  to  $T_L$ , and (vi) discharge at  $T_L$ . The discharge processes were performed with constant current ( $I = 2.9 \mu\text{A}$ ).

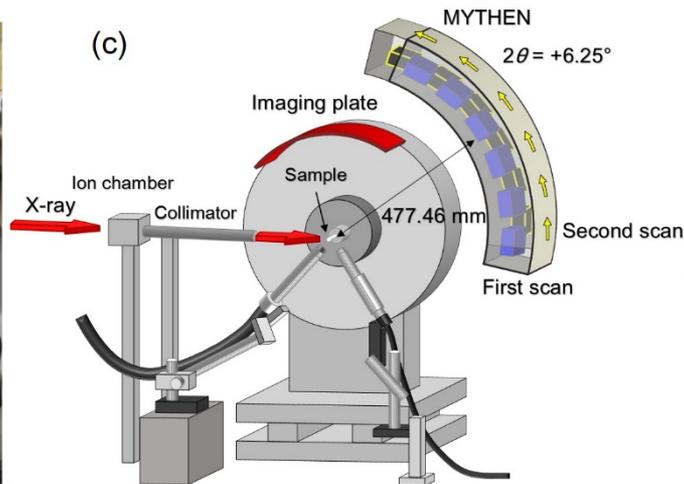
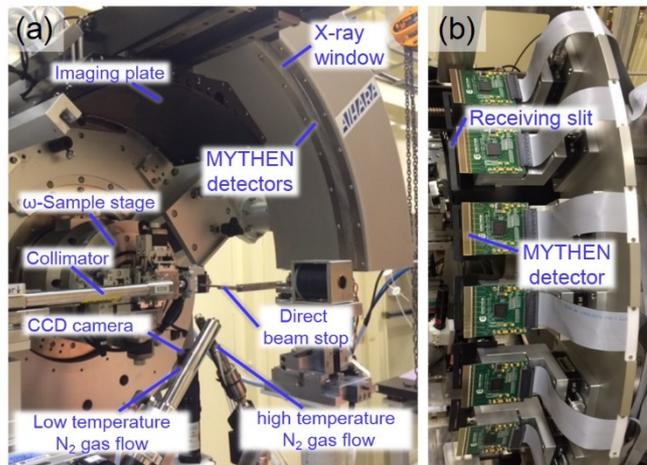
熱サイクルから電力を取り出す。  
熱効率（1%）はカルノー効率の11%！

# 2017.1以降の外部資金等

1. 西堀、挑戦的萌芽、2016- 70万
2. 西堀、新学術領域、2017- 150万
3. 西堀、日本学術振興会二国間交流、29万
4. 西堀、日本学術振興会二国間交流、280万
5. 守友、基盤A、2017- 580万
6. 守友、かけはし、2017、90万
7. 守友、高地雅光(D3)、2016、数理物質科学研究科長表賞
8. 守友、福住勇矢(M2)、2016、数理物質科学研究科長表賞
9. 守友、福住勇矢(M2)、2016、TGSWポスター一賞
10. 守友、Magnusson(M2)、2015、IWP2015ポスター一賞
11. 守友、APEnergy2016、2016、Best Oral Paper Award

# High-throughput powder diffraction measurement system consisting of multiple MYTHEN detectors at beamline BL02B2 of SPring-8

Kawaguchi S, Takemoto M, Osaka K, Nishibori E, Moriyoshi C, Kubota Y, Kuroiwa Y, Sugimoto K. *Rev. Sci. Inst.* 88, 08511, 2017.

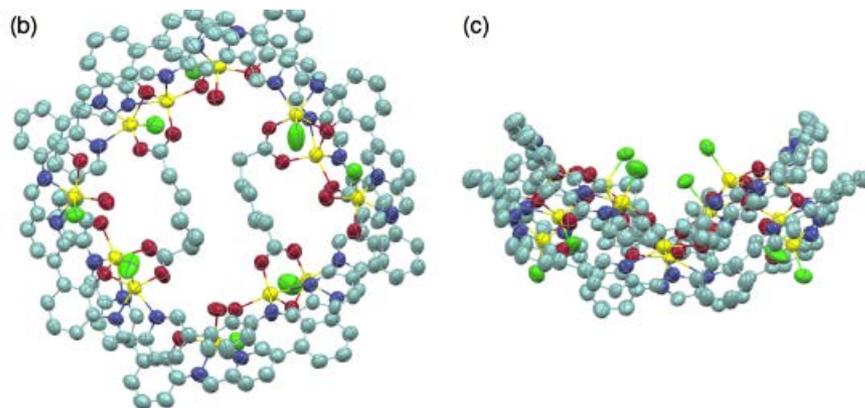
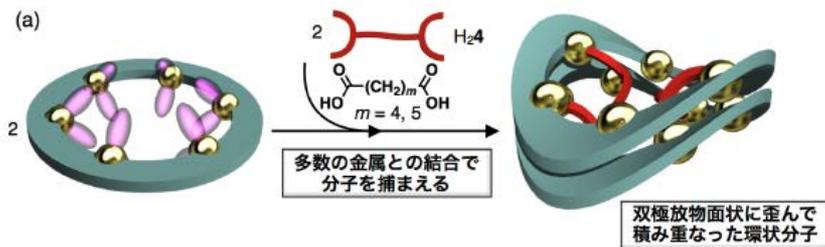


2015年度より活動が続けてきたSPring-8粉末回折BLパートナーユーザーとしての成果  
 検出器開発（光量子計測開発推進室と関連）  
 既に多くのユーザーの利用実績あり

## 多数の金属で分子を捕まえる大環状分子を開発(7/25 筑波大、SP8プレスリリース)

Molecular recognition by multiple metal coordination inside wavy-stacked macrocycles

T Nakamura, Y Kaneko, E Nishibori, T Nabeshima. *Nature Communication* 8. 129, (2017)



鍋島拠点長とのセンター内共同研究の成果

# Predicting the Position of the Hydrogen Atom in the Short Intramolecular Hydrogen Bond of the Hydrogen Maleate Anion from Geometric Correlations

L. A. Malaspina, A. J. Edwards, M. Wońska, D. Jayatilaka, M. J. Turner, J. R. Price, R. Herbst-Irmer, K. Sugimoto, E. Nishibori, and S. Grabowsky. *Cryst. Growth Des.* 17, 3812, 2017

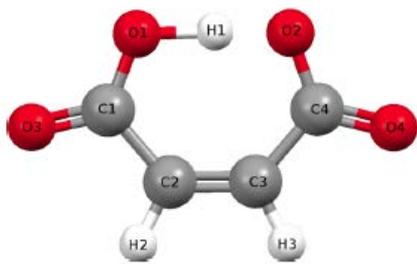
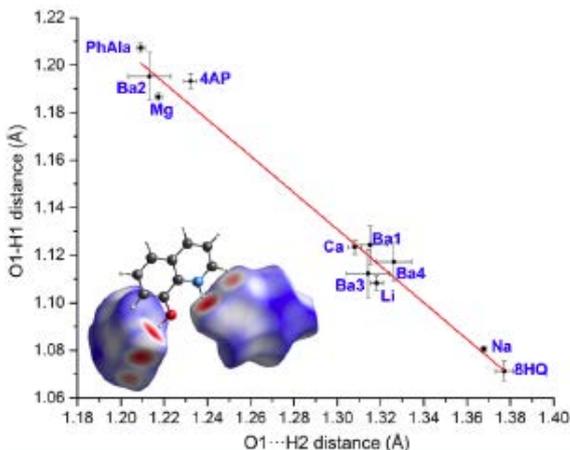


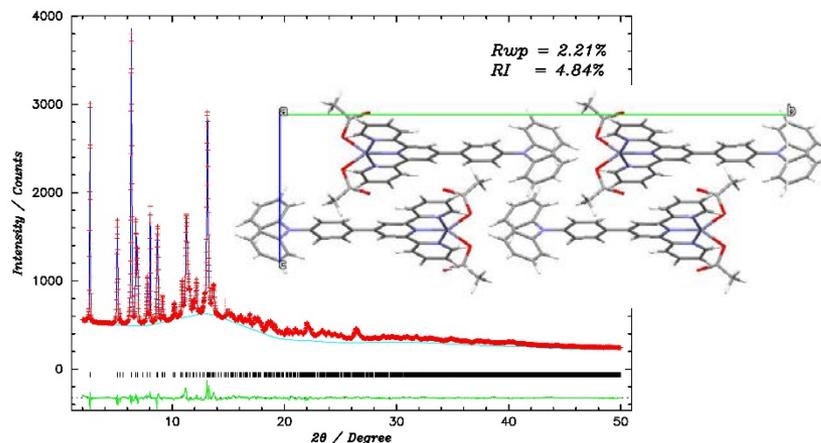
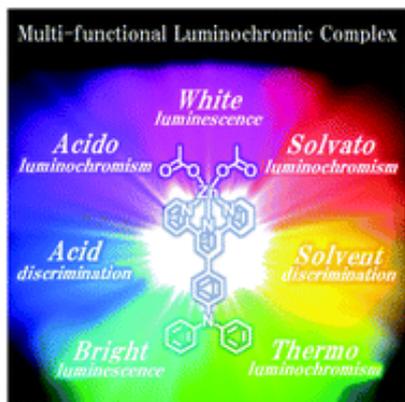
Figure 1. Hydrogen maleate structure and labeling scheme.



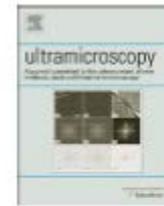
2016年の筑波大でのWSや複数回の国際共同放射光実験の成果。Hydrogen maleateを対象に水素結合の整理にHAR精密化法を利用。HARの有用性を実証

# A simple zinc(II) complex that features multi-functional luminochromism induced by reversible ligand dissociation

T Tsukamoto, R Aoki, R Sakamoto, R Toyoda, M Shimada, Y Hattori, M Asaoka, Y Kitagawa, E Nishibori, M Nakano and H Nishihara. *Chem. Commun.* 53, 3657, 2017.



多色発光特性を示すZn錯体の結晶構造を放射光粉末回折+遺伝的アルゴリズムによる構造決定法で決定



Effects of dynamic diffraction conditions on magnetic parameter determination in a double perovskite  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  using electron energy-loss magnetic chiral dichroism

Z.C. Wang<sup>a</sup>, X.Y. Zhong<sup>a,\*</sup>, L. Jin<sup>b</sup>, X.F. Chen<sup>a</sup>, Y. Moritomo<sup>c</sup>, J. Mayer<sup>b,d</sup>

国際共同研究: TEMの新しい磁気測定手法を開発。この後の論文が、ほぼ、Nature Materialsに掲載予定。

AIP ADVANCES 7, 045002 (2017)

## Temperature effect on redox voltage in $\text{Li}_x\text{Co}[\text{Fe}(\text{CN})_6]_y$

Rögnvaldur Línvaldur Magnússon,<sup>1</sup> Wataru Kobayashi,<sup>1,2,3</sup> Masamitsu Takachi,<sup>1</sup> and Yutaka Moritomo<sup>1,2,3,a</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Pure and Applied Science, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan

<sup>2</sup>Faculty of Pure and Applied Science, University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan

<sup>3</sup>Tsukuba Research Center for Interdisciplinary Materials Science (TIMS), University of Tsukuba, Tsukuba 305-8571, Japan

(Received 3 February 2017; accepted 24 March 2017; published online 4 April 2017)

PBAの熱起電力を決定し、その支配要因を解明した。熱発電素子実現に向けての基盤研究。

OPEN

## Local structures around the substituted elements in mixed layered oxides

Received: 28 October 2016

Accepted: 30 January 2017

Published: 02 March 2017

Shota Akama<sup>1</sup>, Wataru Kobayashi<sup>1,2,3,4</sup>, Kaoru Amaha<sup>1</sup>, Hideharu Niwa<sup>1,2,3</sup>, Hiroaki Nitani<sup>5</sup> & Yutaka Moritomo<sup>1,2,3,4</sup>

EXAFS解析により層状酸化物の局所構造を系統的に調べ、統一描像を提案した。

*Applied Physics Express* **10**, 051101 (2017)

<https://doi.org/10.7567/APEX.10.051101>

### Local distortion around the guest ion in perovskite oxides

Shota Akama<sup>1</sup>, Wataru Kobayashi<sup>1,2,3</sup>, Hideharu Niwa<sup>1,2</sup>, Tomoki Uchiyama<sup>4</sup>, and Yutaka Moritomo<sup>1,2,3\*</sup>

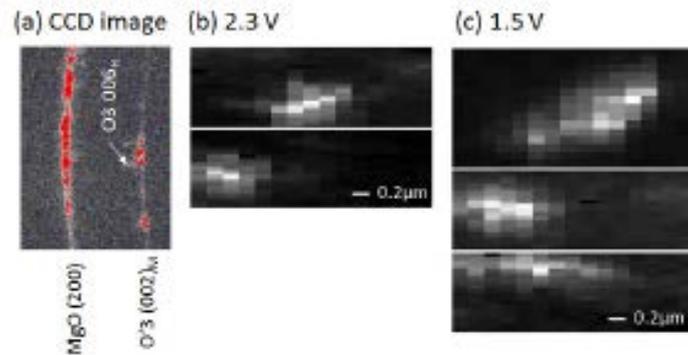
EXAFS解析によりペロブスカイト型酸化物の局所構造を系統的に調べ、統一描像を提案した。

Article

## Domain Size of Phase-Separated $\text{Na}_x\text{CoO}_2$ as Investigated by X-Ray Microdiffraction

Hideharu Niwa <sup>1,2,\*</sup>, Takayuki Shibata <sup>1,3</sup>, Yasuhiko Imai <sup>4</sup>, Shigeru Kimura <sup>4</sup> and Yutaka Moritomo <sup>1,2,\*</sup>

SPring-8のX線マイクロビームを活用し、電池材料のマクロな相分離を観察した。



Article

## Low Voltage Charge/Discharge Behavior of Manganese Hexacyanoferrate

Takayuki Shibata <sup>1,2</sup>, Masamitsu Takachi <sup>3</sup> and Yutaka Moritomo <sup>1,3,4,\*</sup>

PBAでは低電圧における充放電が報告されていた。我々は、放射光XRDと放射光XASを駆使して、その起源を解明した。

# SCIENTIFIC REPORTS

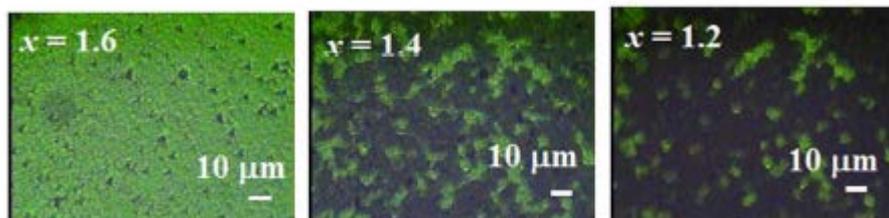
OPEN

## *In situ* observation of macroscopic phase separation in cobalt hexacyanoferrate film

Received: 22 July 2016

Masamitsu Takachi<sup>1</sup> & Yutaka Moritomo<sup>1,2,3,4</sup>

顕微分光で、二次電池材料のマクロな相分離ダイナミクスを観測した。(筑波大プレスリリース)



xはLi濃度、黒と緑の相にマクロに相分離が起こっている。

## バイオエネルギー研究チーム

メンバー： 加納英明

辻村清也

北 正樹

(4月に名古屋大学に転出)

## 石油を産生する藻類のCARSイメージング ～細胞内スクアレン&トリアシルグリセロールの可視化に成功～



Journal of  
**RAMAN SPECTROSCOPY**

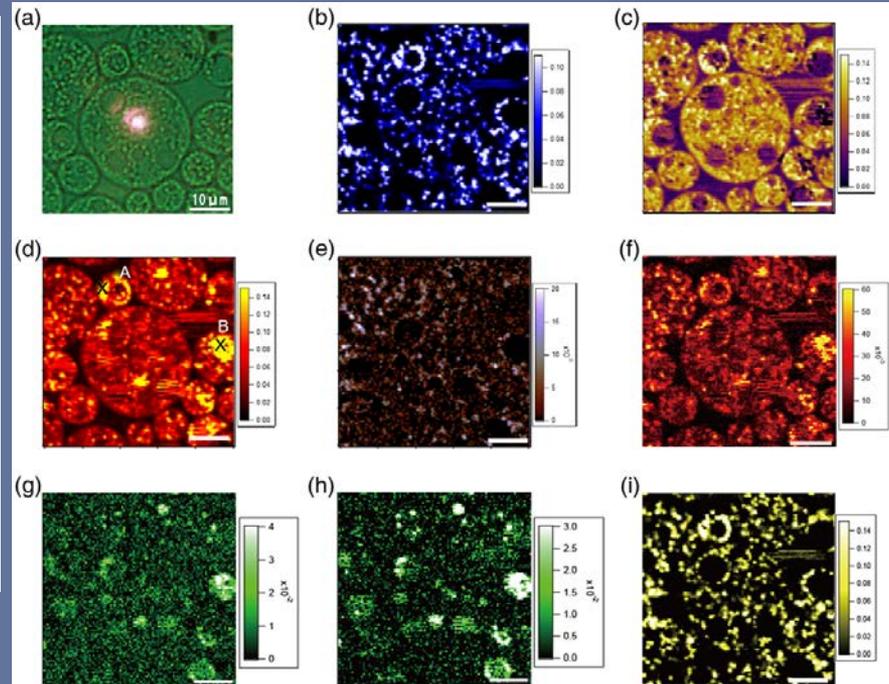
[Explore this journal >](#)

Research article

Identification of intracellular squalene in living algae, *Aurantiochytrium mangrovei* with hyper-spectral coherent anti-Stokes Raman microscopy using a sub-nanosecond supercontinuum laser source

Kei Ishitsuka, Masahiro Koide, Masaki Yoshida, Hiroki Segawa,  
Philippe Leproux, Vincent Couderc, Makoto M. Watanabe,  
Hideaki Kano ✉

**48(1) 8-15 (2017)**



藻類オーランチオキトリウムの光学像(a). 明るいスポットは照射したレーザー; CARSイメージ@ 2996(b), 2914(c), 2840(d), 1738(e), 1439(f), 1379(g), 1324(h), 1265(i)  $\text{cm}^{-1}$



(今年度、社会人博士(早期修了コース)受け入れ)

## 先端フィルム材料の評価

Chemistry Letters

Search Citat  
Enter word

TOP List of Issue Advance

Home > Chemistry Letters > List of Issues > Volume 46, Issue 1 > Effect of a Stretching Proced...

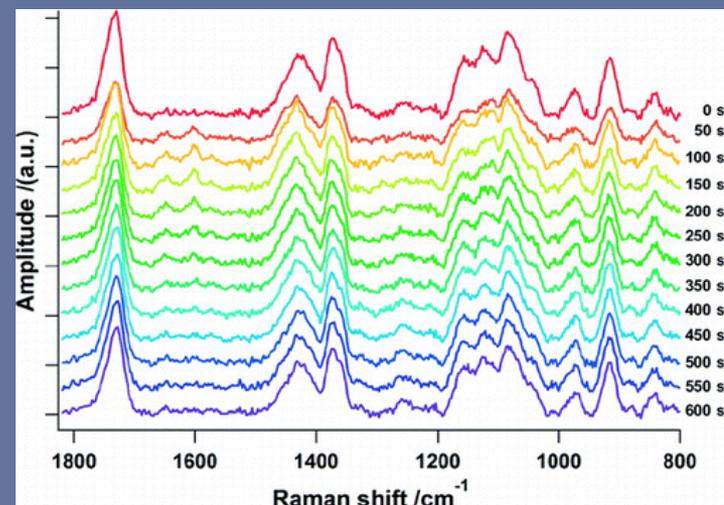
Article - 2017, Vol.46, No.1

92-94

**Effect of a Stretching Procedure on the Penetration Process of Water into a Cellulose Acetate Film by Coherent Anti-Stokes Raman Scattering (CARS) Microspectroscopy**

Rie Fujisawa,<sup>1</sup> Tomoya Ohno,<sup>2</sup> Philippe Leproux,<sup>3</sup> Vincent Couderc,<sup>3</sup> Kiyoshi Fukusaka,<sup>1</sup> Hiroshi Kita,<sup>1</sup> and Hideaki Kano<sup>\*2,4,5</sup>

<https://doi.org/10.1246/cl.160765>



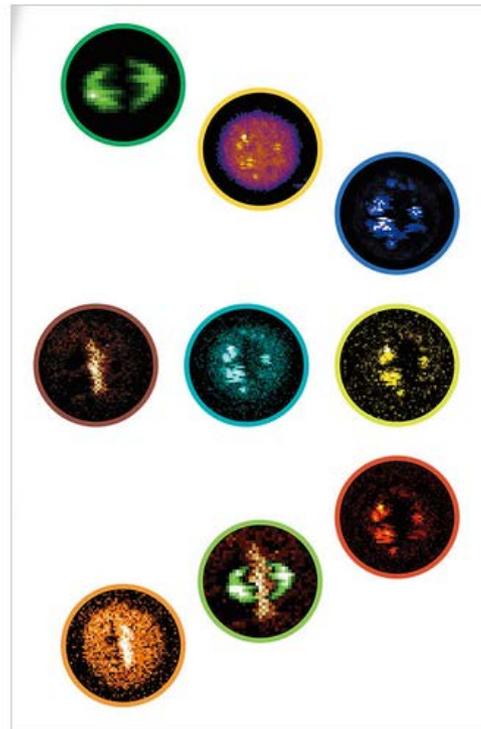
液晶ディスプレイ等で用いられている透明フィルム材料(セルロースアセテート)の含水過程をリアルタイム追跡

## 総説記事の雑誌表紙掲載

**OYO  
BUTURI**  
Vol.86  
No.3  
2017  
**3**

応用物理 第86巻 第3号 (2017)

### 最先端計測技術・計算機科学が拓(ひら)くバイオ・エネルギー・エレクトロニクス



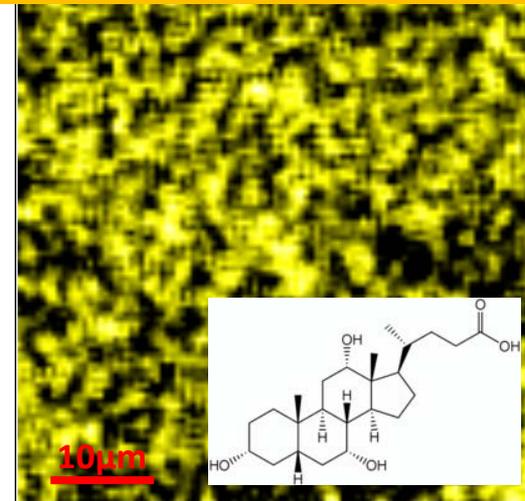
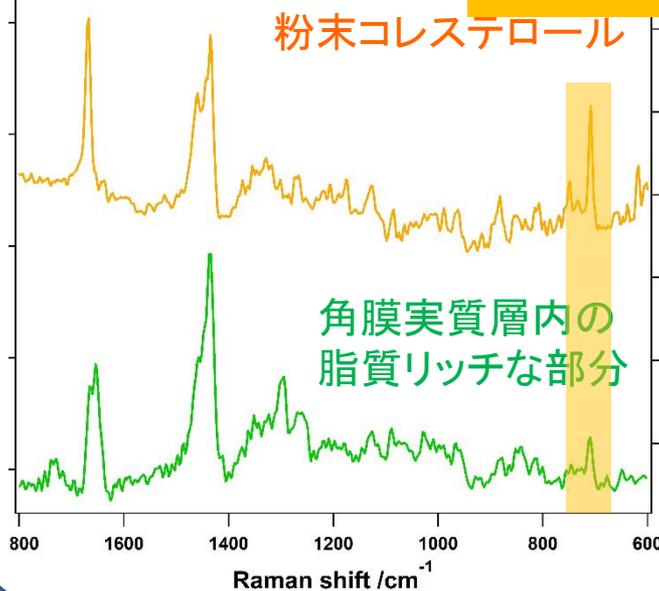
スーパーコンティニューム光を用いて細胞分裂時のHeLa細胞（細胞提供：理研バイオリソースセンター）を非染色・非標識にて多色イメージングした結果。広帯域なスペクトル成分をもつ本光源により、複数の非線形光学効果（コヒーレント・アンチストークス・ラマン散乱，第2高調波発生，第3高調波発生など）を同時に発生させることができるため，それぞれの信号特有のイメージ・コントラストで生細胞を可視化することができる。（p.186参照）

## 角膜老人環 (*ex vivo*)



- 40～60歳の約 $2/3$ 、80歳以上のほぼ全例
- 視力への影響はない  
(特別な治療の必要なし)

体内脂質のモニタリングに応用可能？



岩村ら  
ICO-24(2017)  
国際会議  
口頭発表

# 印刷型バイオ燃料電池



電池を紙に印刷  
↓  
用途に応じた多様な  
デザイン



## アレイ型電池

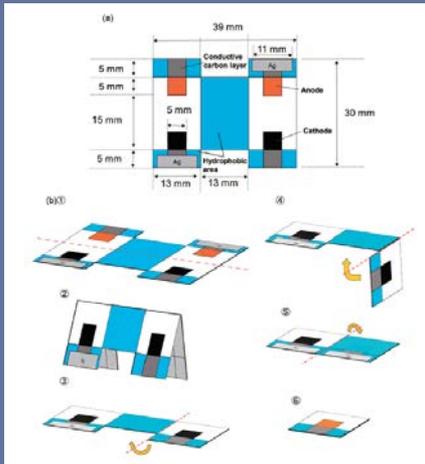
5つの電池を直列



J Power Sources, 2017  
j.jpowsour.2017.06.043



## Origami型電池



Chem. Lett., 2017  
10.1246/cl.170047

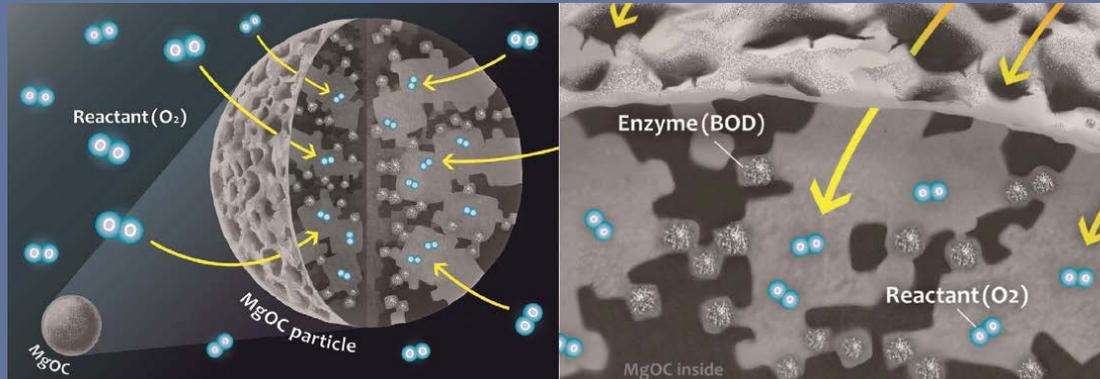


1mWの出力  
センサ+無線通信

ChemElectroChem, 2017  
10.1002/celc.201700561

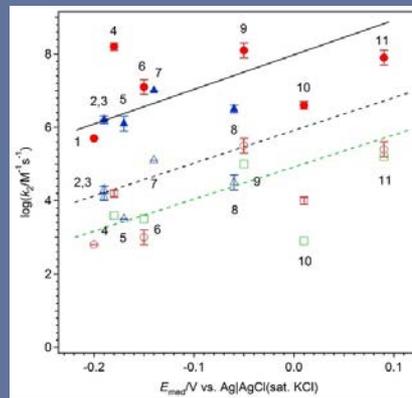
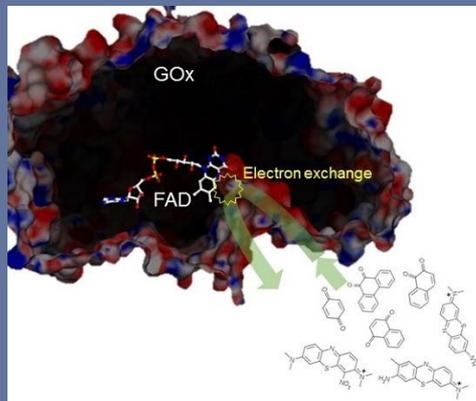
+PCT出願

## 電池に適した多孔質炭素の設計と評価



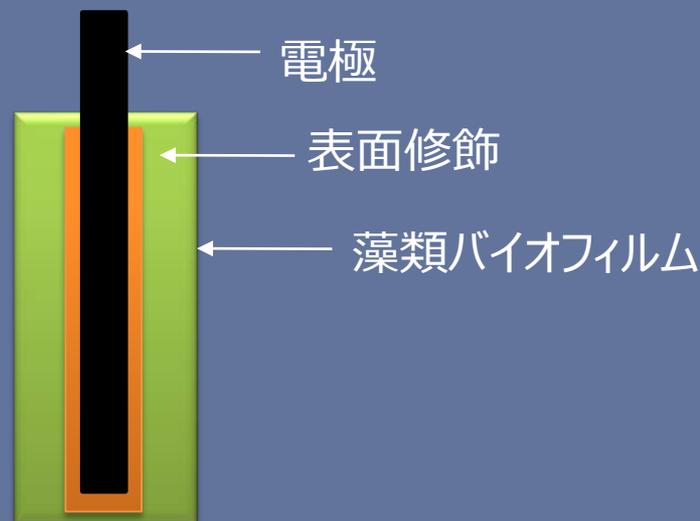
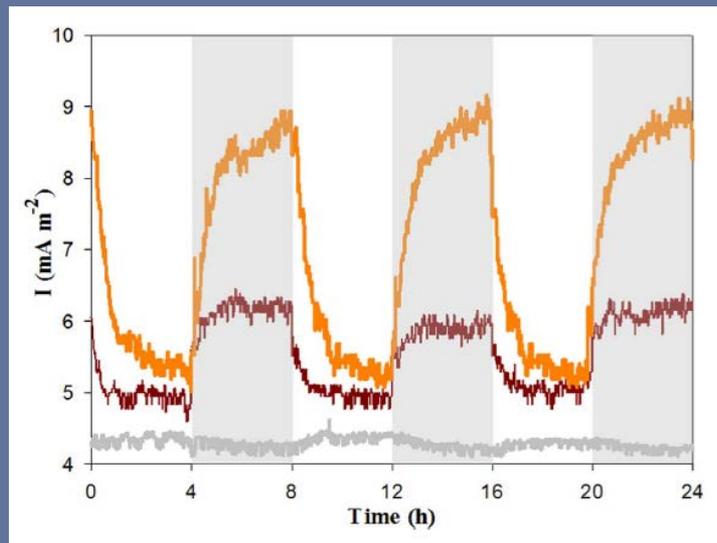
Sci. Rep., 7, 45147 (2017)  
10.1038/srep45147

## 電池に適したレドックスメディエータ設計に向けた反応メカニズム解析



Int. J. Mol. Sci., 2017  
10.3390/ijms18030604

## 藻類代謝機能と電極反応を共役 ～電極表面修飾による高効率化～



The University of Queensland,  
Lund University,  
National University of Ireland, Galway  
との共同研究

*J. Electrochem. Soc.*, 164 (3)  
H3037-H3040 (2017)



国内企業との共同研究が開始  
(2017～)

- ・事業所からの排水処理
- ・微生物代謝機能と表面修飾電極  
反応の共役

## 環境エネルギー材料研究拠点 活動報告 平成26－29年度

### 物質変換材料部門

論文 63

著書・総説等 11

研究成果発表 国際会議 135 国内学会・研究会 246

### エネルギー貯蔵・変換物質部門

論文 133

著書・総説等 4

研究成果発表 国際会議 60 国内学会・研究会 116

### バイオエネルギー研究チーム

論文 40

著書・解説・総説等 12

研究成果発表 国際会議 44 国内学会・研究会 54

物質変換材料部門

競争的資金獲得状況 科研費 12  
受託・共同研究等(外部資金) 15  
その他 16

エネルギー貯蔵・変換物質部門

競争的資金獲得状況 科研費 9  
受託・共同研究等(外部資金) 17

バイオエネルギー研究チーム

競争的資金獲得状況 科研費 12  
受託・共同研究等(外部資金) 9  
その他3



# 学際物質科学研究センター(TIMS)の概要・沿革

センターの理念:

**TIMS**

工学と理学の枠を越えた連携と融合により、未来型機能性物質群の創成と学際物質科学研究の新機軸の構築、社会への還元



白川英樹  
名誉教授

- 2000年10月 白川英樹博士のノーベル化学賞受賞
- 11月 「白川記念学際物質科学研究センター」(仮称)WG発足
- 2001年 9月 「学際物質科学研究センター」WG発足
- 2002年11月 概算要求事項の申請
- 2003年 2月 学際物質科学研究センター設置準備委員会発足
- 4月 学際物質科学研究センターのスタート(数理物質科学研究科)
- 11月 開所式、記念講演会(筑波大学大学会館)
- 2011年 4月 改組(メンバー大幅増員、グリーンイノベーションを中心に)

## TIMS設立時の時限及び人事枠の事情

1. 概算要求(2003年)は5年時限、2004年独法化で改廃は大学の判断となる
2. TIMS教員枠確保のため、4専攻(物理、化学、物性分子、電子物理)から教授、講師(助手)各1名、計**8名**を拠出(水林博物分専攻長(当時)の依頼)  
**合意事項**:それぞれの分野の教育・研究を尊重し、**教員の入れ替え・人事は専攻と協議**(覚え書き取り交わす, 学系長+研究科長)、**廃止の際は枠を専攻に返す**
3. 教授**純増1名**、講師**1名**は学内措置(特別教員配置)、発足時TIMS教員**10名**

# 学際物質科学研究(白川)センター

理念：工学と理学の枠を越えた連携と融合により、未来型機能性物質群の創成と学際物質科学研究の新機軸を構築する

2011年4月改組、3分野9研究コア、ナノグリーンイノベーションを目指し、「 $\pi$ 電子物質科学の基礎と応用」をメインテーマとする

筑波大の中期目標・中期計画、政府の新成長戦略にも合致

目的：筑波大が世界をリードしてきた炭素科学、元素科学の研究者を結集し、新学域と革新的エネルギー技術・素材の開発、つくば連携研究拠点を作る



2003年設立



白川英樹  
名誉教授

TIMSの研究体制

物質創成(分野)

集積物性(分野)

ナノグリーン機能(分野)

ハイブリッド物質  
ナノ構造物性  
量子物性

分子・物質変換  
強相関機能  
機能性高分子

機能性カーボン  
エネルギー変換  
分子光機能

研究推進室  
研究推進会議

学際物質科学拠点形成  
国際基準の人材育成

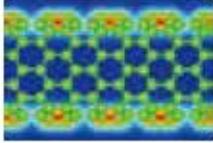
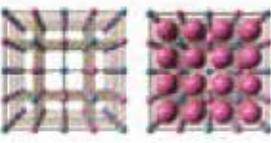
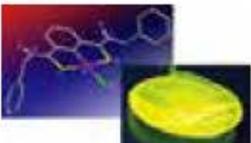
プレ戦略、KEK連携事業、  
元素戦略申請、リーディング大学院  
TIAナノグリーン

客員教員(つくば地区の連携)  
産総研、物材機構、KEK、企業

グローバルな研究者交流  
国際連携共同研究

台湾清華大学、南京大学  
CeNIDE(独)etc.

## 研究分野

物質創成分野		集積物性分野		ナノグリーン機能分野	
ハイブリッド物質コア		分子・物質変換コア		機能性カーボンコア	
ナノ構造物性コア		強相関機能コア		エネルギー変換コア	
量子物性コア		機能性高分子コア		分子光機能コア	

ケイ素化学((関口)、一戸、中本)

グラフェン構造体創成と評価(藤田、加納、小林、村上)

グラフェンの量子物性(初貝、神田)

超分子化学(鍋島、(北)、(山村)、中村)

二次電池(守友、西堀、小林、笠井)

$\pi$ 共役系光機能性高分子(神原、木島、山本、辻村、桑原)

機能性カーボン(中村、後藤、近藤)

太陽電池メカニズム((秋本)、丸本、櫻井)

光反応ダイナミクス(新井、西村、百武)

現在は「環境・エネルギー」テーマとして研究を推進

# 革新的エネルギー貯蔵・変換・節約システムの構築に向けた TIMSの改組（白川センター）

卓越大学院による  
人材育成

生体熱発電シート



低価格燃料電池



車載用インバータ



産業界



つくば連携



学内連携

SPRING-8



国内連携



Stanford University

国際連携

基礎と応用の融合による課題解決と  
新原理・新物質の迅速な応用／展開  
⇒ イノベーションの牽引

開発部門  
基礎部門

実装  
評価  
試作  
探索  
マテリアル  
学理

排熱利用 省エネ  
革新的エネルギー貯蔵・変換・節約システム構築

エネルギー・コンソーシアム  
産業ニーズの受信窓口  
産業界への発信母体



貯蔵

変換

節約

熱発電池

非白金触媒

パワエレ

新分子・新物質・新材料創製



白川センター

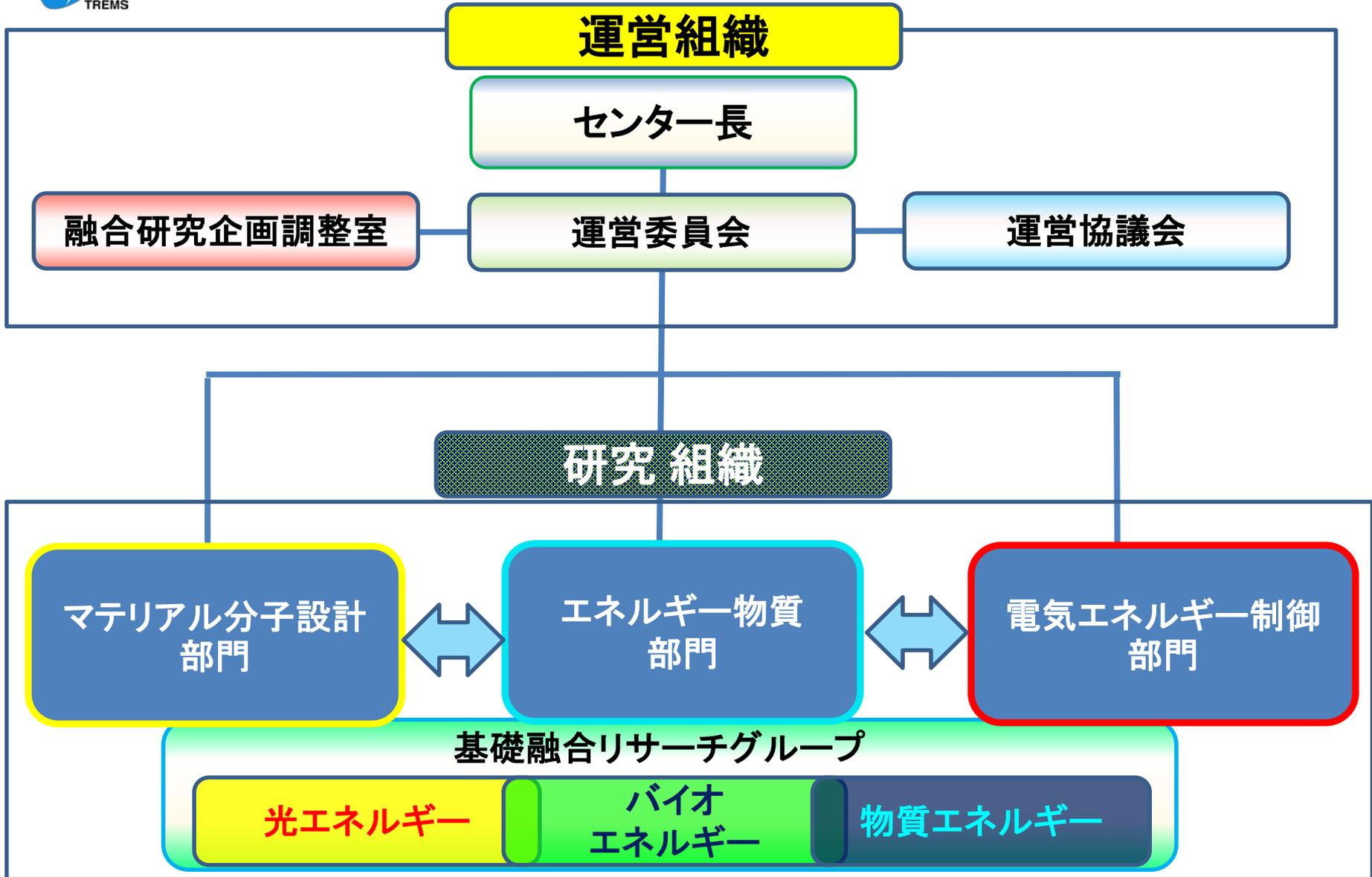


基礎研究レベルでの分野融合

異なるエネルギーデバイス技術の融合：基礎学理を通じて初めて可能



# エネルギー物質科学研究センターの組織



# エネルギー物質科学研究センター (TREMS)

知の創造から生まれるエネルギー材料・デバイスの創製

新学理の社会還元  
革新的エネルギーデバイス  
ダイヤモンドデバイス  
低価格燃料電池  
次世代ロボット, etc

## 国内連携

超精密構造解析  
新材料創製へ向けて



SPring-8

TIAをコアとするつくば連携

かけはし

外部との連携強化により  
つくば地区の研究拠点へ

エネルギーデバイス創製

相互  
フィードバック

つくば連携のハブ

## エネルギー物質科学研究センター

全ての連携先との  
若手研究者・学生の交流  
研究推進と人材育成

グリーンイノベーション  
創出

企業との連携  
(寄付講座・コンソーシアム)

相互  
フィードバック



富士電機

融合研究企画調整室  
TIA連携・グローバル連携を主導

マテリアル分子設計部門

貴金属代替触媒  
元素戦略材料  
ハイブリッド材料

エネルギー物質部門

強相関物質と分子物質  
半導体物質の融合材料

電気エネルギー制御部門

ダイヤモンド材料  
多層構造材料  
デバイス信頼性の評価



学内連携

理論的設計・検証

相互フィードバック

相互  
フィードバック

## 国際連携

研究力強化  
グローバル人材育成  
海外招致ユニット  
国際テニユア



EMC  
energy materials &  
clean combustion center  
UMR6508



CENIDE

基礎融合リサーチグループ  
化学、物理、物質科学の基礎研究によるシーズ発掘  
部門と協働して新学理を構築・共有  
応用研究の課題フィードバック

基礎から応用まで一貫通貫の研究体制