

TREMS 2023 年度成果報告会 エネルギーハーベスタ部門

部門のミッション

本部門の使命は、SDGsの実現や社会の発展に資する革新的エネルギーハーベスタ物質・技術およびその関連技術を開発することです。エネルギーハーベスタとは、熱、振動・回転、光、生体関連物質、空といった身の回りから取り出しやすい電気エネルギーを得ることです。

- エネルギーハーベスタの学理開発と高度化、
- 学理開発の進展と実証、
- 関連物質の開発・開発、

本部門では、産学連携や民間企業との共同研究を通じて、創出された技術の社会実装も目指します。



関連技術 注村
モバイル、ウェアラブル、IoT、センサ

守友、丹羽
エネルギー源
熱、振動・回転、光
生体関連物質、空

エネルギーハーベスタ

関連物質
磁性化合物、超伝導、ナノ粒子

円錐形磁気異方性を示すNiCo₂O₄薄膜のホール効果とゼーベック効果

エネルギーハーベスタ部門
物産工学城
柳原真大

まとめ

- ✓ Co²⁺、Co³⁺が伝導に寄与しているため、大きな熱電効果を期待したものの、全く観測されず。
- ✓ NiCo₂O₄薄膜において、電流方向に依存した構造磁石(p₁)を導出
- ✓ p₁は磁気トロイダル磁石に起因

革新的な(理し)ホール効果は超伝導トロイダル磁石と磁石双極子の磁・時間反転に対して対称(偶)

- 磁気トロイダル磁石の存在を初めて確認
- 磁気トロイダル磁石と電流双極子は異なる磁場依存性を示す
- 一結晶内に異なる磁気的曲線(秩序変数)が存在
- 時間反転に対して偶の磁石(p₁)はNiCo₂O₄がプレーナーホーン構造

マテリアル分子設計部門

ミッション

- 触媒反応、有機化学、有機光化学など化学の学際を最大限に活用
 - 元素精選の活用、環境エネルギー材料開発へと繋ぐ。
- 社会のニーズの高い環境エネルギー材料開発の学術基盤構築
 - 企業が実現できないような基礎研究に注力し、イノベーションを達成。
- 材料開発や作問メカニズムを、原子レベル、電子レベルで研究
 - 社会からの要望に、適切・迅速に応える材料設計・物質開発。

部門長：菅原素智 (化学) 元農科学、元東海電機
副部門長：岡田晋 (物理学) 量子科学に立脚した計算物理学
大谷実 (計算科学研究センター) 映画・異色の世界的な物理現象の計算物質化学
近藤剛弘 (物質工学) 水素社会・カーボンニュートラルに貢献する新物質開発
石塚智也 (化学) 資源枯渇問題解決のための革新的触媒開発

原子層物質複合構造による 新しい電子系の予言

Suzumo Ohno

Mina Maruyama
Yanlin Gao



Open-IR for Transnational Research (OpenIR)
Science of 2.5 Dimensional Materials
Paradigm Shift of Materials Science toward Future Social Innovation

Concluding remark(s)

Electronic properties of 2D materials and their complexes ...

strongly depend on
network geometries, stacking arrangement,
carrier density, external electric field,

電子状態計算と古典溶液論の融合による 電気化学界面シミュレーション

筑波大学計算科学研究センター
太谷 実

共同研究者:
(筑波大)近藤剛弘、萩原聡、長谷川太祐 (北大)新田博

まとめ

- ESM-RISM以前は難しかった電気化学反応のシミュレーションが可能になった。
- 電極電位を定義することが可能になり、実験と定量的に比較可能になった。
- 反応の平衡電位、溶解和構造、活性化エネルギーなどを計算可能。
- 未期の反応の場合も、反応路自動探索法を用いて反応経路を系統的に探索可能。

サブナノ領域評価部門

西堀 英治
上殿 明良
丸本 一弘
羽田 真樹
笠井 秀隆

TREMSアーキテクチャオンライン、2024年2月28日

放射光その場観察の開発

笠井 秀隆

筑波大学 数理工学系 物理工学城
エネルギー物質科学研究センター (TREMS)



まとめ

ポールミルソの帰観察
 Mater. Adv. 2023
 Materials Advances

大気圧~33 MPa下での
 精密な回折データ計測
 Symposium No. 2023



⇒ メカノケミカル反応機構の解明

- 次世代ヒーターを用いた加熱
- RTで溶けない固体反応物から開始する水熱合成

基礎融合グループ
 部門の紹介

メンバー

- 山本洋平 数理解析系 物質工学域 教授
- 桑原純平 数理解析系 物質工学域 准教授
- 中村貞志 数理解析系 化学域 助教
- 武安光太郎 数理解析系 物質工学域 助教



ミッション

基礎融合グループ部門は、自己組織化による機能材料設計や超分子化学など独自の基礎研究を進展させます。加えて触媒反応の表面科学による理解など社会ニーズの高い基礎研究も推進する。他の部門の研究者との有機的な連携により、新しい分野の創成を目指します。



窒素ドーパカーボン触媒の反応機構と新規触媒の開発

$\text{pyr-N} \rightarrow \text{pyr-N}^{\ominus}$ promoted by
 Oxygen adsorption / Adsorption

Role of Pyridinic Nitrogen in the Mechanism of Electrochemical Nitrogen Reduction on Carbon Electrodes

K. Takeyasu*, J. Nakamura* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 60, 5321 (2021).
 S. K. Singh*, K. Takeyasu*, J. Nakamura* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 61, e202212506 (2022).



研究概要

表面科学 / 固体物理学の視点
 不均一系触媒反応と生物学的反応の相乗的理解

メタルフリー燃料電池触媒
 混合電位駆動触媒反応 (CO₂ 変換)
 触媒設計へ
 速度論、工学的一掃
 乳剤
 ミトコンドリア
 O₂
 H₂O₂

表面化学の基礎



