

2023 年第 84 回応用物理学会秋季学術講演会 分科企画シンポジウム
「トータルバイオミメティクス研究会」企画

表面・界面における電子・イオン移動に基づくエネルギー変換の

最前線

Frontiers of Energy Conversion Based on Electron and Ion Transport at Surfaces and Interfaces

開催日：2023 年 9 月 22 日(金)

場所：熊本城ホール（ハイブリッド開催）

世話人：土屋敬志（物質・材料研究機構）、神吉輝夫（大阪大学）

本シンポジウムは、世界的なエネルギー問題を背景として近年ますます高まっているエネルギー変換技術の重要性を背景として、人工光合成によるエネルギー変換の研究や、触媒・太陽電池の表面・界面反応メカニズムの計算科学、原子レベルでの微視的反応ダイナミクス研究において最前線に立つ研究者 4 名を講師に迎え、次世代型エネルギー変換技術の方向性についての議論を目的として開催された。シンポジウムには会場 60 人程度、オンラインを合わせて最大 100 人程度と多くの方に参加頂き、大変活発な議論がなされた。以下に各招待講演、およびパネルディスカッションの概要を紹介する。

豊田中央研究所の森川健志シニアフェローからは「人工光合成：光励起電子と酸化・還元反応を調和させた二酸化炭素の変換」と題して、半導体と金属錯体の組み合わせを利用して太陽光と水(H_2O)と二酸化炭素(CO_2)を用いて有機物等を合成する「人工光合成」について紹介された。半導体は光増感剤及び H_2O を酸化する光触媒であり、金属錯体は CO_2 を還元する触媒の役割を担う。これらを含む素子(人工の葉)で、可視光照射下で水溶液中での一酸化炭素(CO)やギ酸($HCOO^-$)の合成を、競合する水素(H_2)生成を抑制しつつ、90%を超える生成物選択率をもって実現し、また太陽光エネルギーの化学エネルギーへの変換効率 4.6%を実現したことが述べられた。半導体-金属錯体複合系の反応において、半導体の可視光励起で生じる伝導帯電子の、金属錯体の配位子との連結部を経由する反応活性点への(電荷)移動の重要性が指摘された。



東京工業大学の中村龍平教授からは「深海底におけるイオン輸送制御とエネルギー変換」と題して、光が届かない海底に存在する熱水噴出孔で見出される選択的イオン輸送、およびそれに誘起される化学浸透発電について紹介された。熱水噴出孔付近で採取された沈殿物の結晶構造解析より、板状の $\text{Mg}(\text{OH})_2$ ナノ結晶が熱水流路に直行して規則配列し、これらが重なり合うことでナノチャンネルが形成されることが示された。このナノチャンネル内の表面電荷によって正電荷、もしくは負電荷を有するイオンの選択的透過が起こり、イオン勾配から電気エネルギーを取り出す化学浸透圧発電につながるメカニズムが述べられた。こうした選択的イオン輸送は生体内の細胞膜を介して行われているが、驚くべきことに同様の機構が天然の鉱物にも備わっていることが指摘された。

東京大学の瀬川浩司教授からは「ペロブスカイト太陽電池:その常識破りの物理化学と再エネ利用のパラダイムシフト」と題して、次世代太陽電池の本命と目される有機金属ハライドペロブスカイト太陽電池(Perovskite Solar Cells, PSC)の最新の研究動向について紹介された。PSCの基本的な動作機構や26%を超える高い変換効率、国産材料を使って塗布製造できる実用上の長所などについての説明に加え、 MAPbI_3 の価電子帯、および伝導帯が反結合性軌道からなることに起因してイオン欠陥が励起電子の再結合準位にならない欠陥寛容性や、構造欠陥に存在する超格子構造に起因して単結晶よりも多結晶で強く発光するなど、 MAPbI_3 が有する特殊な物理化学的性質について述べられた。構成要素のうち発電層については詳細な研究が進み、ペロブスカイト(MAPbI_3 など)の組成が変換効率を向上に寄与することが判っている一方、電子輸送層、正孔輸送層、成膜方法などについては、まだバリエーションが少なく、PSCの課題である耐久性の改善に向けて研究開発の余地があることが指摘された。

物質・材料研究機構の館山佳尚センター長からは「電池内の電子・イオン移動に関する計算科学」と題して、密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を用いた蓄電池メカニズム研究の最近の成果について紹介された。蓄電池は通常の電気化学の描像と異なり、電極-電解液・電解質界面をイオンが移動するため、電極材料は充電・放電過程で常に変化すること、特に「充電」は電極中の電子の電気化学ポテンシャルを相対的に変化させることで、電極間のイオン輸送を駆動し、蓄電池全体として高エネルギー状態(励起状態)を実現することが述べられた。「ヘテロ界面 CALYPSO 法」による計算結果をもとに、全固体電池の固固界面において電子移動が動的Liイオン欠乏、界面反応層形成を引き起こし固体電解質劣化・抵抗増加の要因となるのに対し、コート層はその電子移動を抑制することで劣化・高抵抗を軽減することが示された。また、新しいDFT計算手法によって得られるLiイオンのポテンシャルプロファイルに基づいて全固体電池界面の様々な電子・イオン挙動を無理なく説明できることが

述べられた。

パネルディスカッションでは、招待講演者をパネラーとして「表面・界面における電子・イオン移動に基づくエネルギー変換の課題とその未来」について議論した。パネラーそれぞれの視点から見た表面・界面でのエネルギー変換に関する研究の問題点が指摘され、これを乗り越え革新的な技術を生み出すための方策について聴講者を含めた活発な議論が行われた。

今回、表面・界面における電子・イオン移動を基本的な動作機構に含むエネルギー変換デバイスを総合的に俯瞰・理解し、飛躍的に高性能な次世代型技術として具現化するための学理構築に向けたビジョンを共有する分野横断的コミュニティの形成を目的として本シンポジウムを企画した。エネルギー変換を直接研究対象とする研究者のみならず、材料科学を中心に幅広い分野の研究者を交えた議論によって、高効率なエネルギー変換技術の実現に向けては、デバイス内部におけるイオン・電子の電気化学ポテンシャルおよび電子構造に基づく電荷担体の移動・輸送やイオン・電子混合伝導性、材料の熱力学的安定性への理解が必要不可欠であり、電気化学、物質・材料科学、ナノ構造学、計算科学などの多角的な視点からとらえる横断的かつ統合的な議論の重要性が改めて確認された。本シンポジウムをきっかけとして種々のエネルギー変換デバイスに共通する学理、課題についてさらなる活発な議論へと発展し、深刻さを増すエネルギー問題のゲームチェンジャーとなる革新的技術の創出につながることを期待する。

文責：土屋敬志（物質・材料研究機構）、神吉輝夫（大阪大学）