

【基盤研究(S)】

理工系 (化学)



研究課題名 固体電気化学プロセスから発現する新しいエネルギーおよび情報変換

名古屋大学・大学院理学研究科・教授 あわが くにお
阿波賀 邦夫

研究課題番号：16H06353 研究者番号：20202772

研究分野：機能物性化学

キーワード：電子物性、表面・界面、電気化学

【研究の背景・目的】

ユビキタスな物質や手法による新しいエネルギー変換や情報変換の実現は急務の課題である。2次電池や色素増感太陽電池などを研究対象としてきた固体電気化学だが、近年、電気2重層トランジスタや分子性2次電池の研究が急速に進展し、ますますその存在感を増している。本研究では、レドックス変化と電子およびイオン輸送が複合化された電気化学プロセスを、分子物性科学や有機エレクトロニクスに展開することによって、新しいエネルギー変換や情報変換の方法論を確立する。

【研究の方法】

本研究では、以下の3テーマを実行する。

（研究A）分子物性科学と固体電気化学の双方型研究：

対イオンのドーピング・脱ドーピングサイクルの下でも、ポーラス構造のために構造と結晶性を保持する「構造耐性」をもつ金属有機構造体（MOF）や共有結合構造体（COF）を合成し、2次電池の正極活物質あるいは正極活物質担持材としての特性を探る（図1）。物性科学で培われた物質群を固体電気化学にもち込む。その一方、固体電気化学を利用した新しい物性科学を展開する。すなわち、MOFや分子結晶、有機無機層状物質など、さまざまな系において電気化学的なバレンス制御を行い、これによって常磁性⇄強磁性スイッチングなどの新物性を開拓する。

（研究B）有機エレクトロニクスへの展開：固液界面電気2重層が生み出す巨大電場は $\sim 10^9$ V/m ほどにも達する。本項目では、このような巨大局所電場を有機エレクトロニクスに応用して、トランジスタ機能や高効率光電変換を追及する。具体的には、イオン液体や有機強誘電体を絶縁層とする電気2重層トランジスタや、分極電流を生み出す新しい光電セルを発展させる。後者は、我々が独自に研究を進め

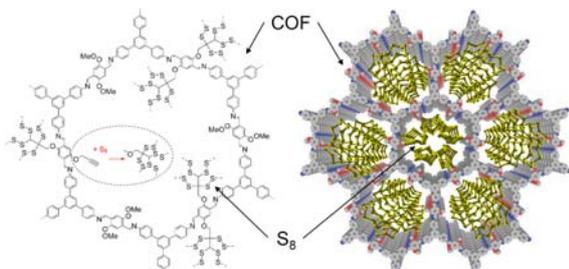


図1 COF骨格中にS₈分子を取り込み、硫黄2次電池の正極活物質として利用する。

ているもので、[電極1(M) | 電荷分離層(S) | 絶縁分極層(I) | 電極2(M)] (MISM光電セル)なる構造から、パルス光、チョップ光や変調光が、S層の電荷分離を経てI層の分極Pを時間変化させるときに生じる分極電流を高効率で取り出し、新しいエネルギーおよび情報変換機構として発展させる。

（研究C）固体電気化学 operando 計測と理論の発展：

研究A, Bを、足元を照らしながら計画的に進めるため、さまざまな固体電気化学 operando 計測と理論を発展させる。XAFS、XRD、固体NMR、磁化、電気伝導度を、電気化学反応進行下において試料を系外に取り出すことなく観測する。分子動力学(MD)法と量子化学計算を組み合わせることによって、固体電気化学プロセスを理解する理論を構築する。

【期待される成果と意義】

ユビキタス元素を用いた新しい分子性2次電池の発展、電気化学磁石や超伝導体、過渡光電流を用いたエネルギー変換や情報変換の発展が期待される。分子物性科学で培われたさまざまな物質を固体電気化学に新材料として提供する一方、電気化学の方法論によって新しい物性や有機エレクトロニクスを実現する。両者にWin-Winの関係を構築しながら、新しいエネルギー変換や情報変換の手法を確立する。

【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- "Discovery of a "Bipolar Charging" Mechanism in the Solid-State Electrochemical Process of a Flexible Metal-Organic Framework," Z. Zhang, H. Yoshikawa and K. Awaga, *Chem. Mater.*, 2016, **28**, 1298.
- "Organic optoelectronic interfaces with anomalous transient photocurrent", L. Hu, X. Liu, S. Dalgleish, M.M. Matsushita, H. Yoshikawa and K. Awaga, *J. Mater. Chem. C*, 2015, **3**, 5122.

【研究期間と研究経費】

平成28年度-32年度 143,000千円

【ホームページ等】

<http://advmat.chem.nagoya-u.ac.jp/>
awaga@mbox.chem.nagoya-u.ac.jp