



水電解と物理計算

東京大学 小畑 圭亮

東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻助教の小畑と申します。私は企業で半導体光電極の研究に従事し始め、King Abdullah University of Science and Technology (KAUST) の PhD コースで水電解を中心とした電気化学に本格的に取り組み、ベルリンの Helmholtz センターでは博士研究員として Solar fuel のデバイス設計などに携わりました。今回、寄稿の機会をいただき、PhD から勉強を開始した電気化学反応のための物理計算について、私が感じる素晴らしさ、楽しさを伝えさせていただきます。

私はもともと実験が好きで、計算や数式と向き合うことが苦手でした。実験結果の解析を行うにあたり、先行文献を参考にして微分方程式を解くようになり、「見えないものが見えるようになる。」「物理式を感じ取れるようになる。」「必要な物理現象をいかに上手く組み合わせるか？」といった楽しさを感じるようになりました。

「見えないものが見えるようになる。」

実験に導入するインプットと結果のアウトプットの関係は容易に得られますが、化学反応を実際に観察することは難しく、何故そのような結果が得られるか、にアクセスすることは難しいです。確立された物理式や反応速度式を組み合わせることで、イオン・キャリア濃度の分布などが可視化される美しさがあります。さらに、損失を具体的な数値で表し、議論に深みを増すことを出来る点も魅力です。実際の実験結果との整合、フィッティングで悩むこともありますが、少なくとも確立した理論から説明出来ることは胸を張って主張できます。

「物理式を感じ取る」

微分方程式も様々なものがありますが、化学工学(物質・キャリア輸送、熱輸送、流体力学)で扱う式はどれも良く似ています。式を覚える必要はなく、一度、理解できれ

ば、今まで論文で読み飛ばしていたモデルの記述も、式を見て、何を考慮しているのか、簡略化しているのか、など推測できます。また、ベクトルの微分方程式を扱う流体力学では、テンソルも登場しますが、何故テンソルが必要なのか、何を意味するのか、イメージできるようになりました。授業では、式を追うことで精一杯でしたが、自分の研究に落とし込むことで、理解が進みました。

「必要な物理現象をいかに上手く組み合わせるか」

化学工学では、複数の物理現象がかみ合って、生産性が決まります。一つの物理現象が、別の物理現象に影響を与えることや、双方に影響しあうカップリングも起こります。このような複雑な現象に取り組むときには、往々にして計算が収束しない、などのエラーが発生します。初期条件や計算の順序などと向き合い、パズルを解くように問題解決する楽しさがあります。

私が計算を始めた時は、MATLAB を使って、複数の微分方程式、境界条件などを入力していました。そもそもプログラミングの知識もなく、エラーの連続でしたが、一つ一つ問題箇所を探り、フィッティングまで完成したときには感動いたしました。最近はいち早くパッケージされたソフトもありますが、高い自由度で工夫するには、必要なのは自分でアレンジするスキルも必要でしょう。

計算以外では、筆者自身は分光には強くなかったですが、最近では SPring-8 などの放射光施設も利用したオペランド分光にも、学生と挑戦しています。自分の研究を通して、基本原理を抑えて、必要な情報を得ることに邁進する。計算にせよ、分光にせよ、自分で触り、工夫し、解析することほど、理解を助けるものは無いでしょう。