



革新材料の開発を目指して

東京工業大学 小川幹太

東京工業大学の小川と申します。京大で阿部竜教授のもと学位を所得後、第一原理計算の習得のため Imperial College London の Aron Walsh 研で研究を行い、本年度から東工大の大場史康研究室に所属しています。いわゆる実験系の研究室から理論系へ移った人は、そう多くないと思いますので、私の考えとこれまでの研究を簡単に紹介させていただきます、何かの参考となれば幸いです。

唐突ですが、自然科学とは“世界に新しい解釈を与えること”だと考えています。その意味で、私は“なぜ”を追求することを大事にしています。例えば、何か活性が向上した場合、その理由を根本から解明し、一般的な設計指針、つまり新たな“解釈”を提示できれば、単なる性能向上に留まらず、次の物質設計の足掛かりが得られます。

私の目標は、そのような“なぜ”の追求の積み重ねにより、半導体光触媒を理解し、それに基づき革新材料を開発することです。

半導体光触媒を用いる光エネルギー変換は、非常に複雑なプロセスから成り、特に、半導体粒子と助触媒によるシステムは、太陽電池と電気化学システムが一粒子に凝集された究極のデバイスとも言え、様々な分野の知識が求められます(図1)。例えば、化学反応場である表面の特性制御には、触媒分野の知識が必要な一方、半導体の設計には、固体物理的観点からの電子構造理解が必要です、最終的には、それらを統合した設計が必要です。

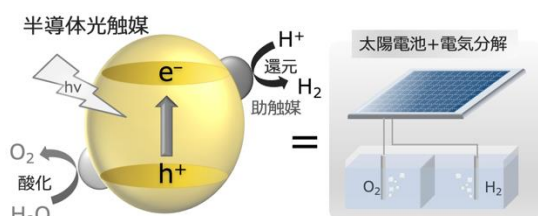


図1. 半導体光触媒による太陽光エネルギー変換

研究を始めた当初は、実験のみを行っていましたが、次第に新規光触媒材料の開発を目指すようになり、この壁に直面しました。例えば“なぜ”バンドギャップが異なるのか、“どうしたら”バンド位置を制御できるのか、といった問いに答えるには、半導体の電子構造理解が必要となります。これが第一原理計算を取り入れるきっかけとなり、これにより物質の電子構造の比較、“なぜ”の追求が可能になりました。

様々な物質の電子構造を見ていく中で、私は、特に、ポスト遷移金属化合物に着目するようになりました。Bi³⁺、Pb²⁺、Sb³⁺、Sn²⁺等のns²np⁰という電子配置は、物質に特異な電子構造をもたらします。Pb²⁺を含むペロブスカイト材料が次世代太陽電池として台頭しているように、光触媒においても、ポスト遷移金属化合物がブレイクスルー材料となり得ると考えています。

これまで、これら化合物の電子構造と結晶構造との関係を理解することで、その制御法を確立することを目指してきました。例えば、Biの部分電荷制御によるバンドギャップ狭窄化[1]、Bi³⁺の配位環境による価電子帯制御[2]、層間Bi 6p-Bi 6p軌道相互作用による伝導帯制御[3]などを実証し、電子構造の成り立ちを軌道相互作用まで分解して理解することで、ある特定の物質の物性制御だけでなく、光触媒にとらわれない汎用的な設計指針の確立を達成しました。

現在は、特に、欠陥に着目し研究を行っております。半導体において、欠陥の生成は、エントロピー的に不可避ですが、数%の欠陥種の実験的な分析は困難であり、第一原理計算による理解が必須となります。また、いずれは計算と実験を掛け合わせながら、半導体の電子構造の根本的理解を軸として、革新的材料の開発はもちろん、分野にとらわれない一般的設計指針の確立、自然科学の発展への貢献を目指して研究に邁進していく所存です。

[1] K. Ogawa, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 8446.

[2] K. Ogawa, et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 5806.

[3] K. Ogawa, et al., *Chem. Mater.* **2023**, *35*, 5532.