

先端融合研究環 開拓プロジェクト
「階層縦断的アプローチによる革新的光エネルギー変換系の開拓」
第1回シンポジウム

2019年4月16日(火)

神戸大学瀧川記念学術交流会館大会議室

本プロジェクトでは、時間的・空間的スケールの異なる階層構造間における化学反応ネットワークを積極的に設計・構築する階層縦断的アプローチによって革新的な光エネルギー変換系の開拓を目指しています。特に、異なる分野の研究者らが互いに連携することで、従来の階層概念を超えた学理と技術の確立につながる融合型研究を推進していきます。

13:00 受付

13:20 はじめに

13:25 **立川貴士 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 准教授**

「光エネルギー変換における階層とは何か？」

太陽光を利用したCO₂フリー水素製造システムを例に、光エネルギー変換系における「階層」の意味と役割、その制御方法について述べる。特に、ナノからマクロにわたって秩序構造を形成できる独自のナノ粒子構造化技術と単一粒子・単一分子分光法による光エネルギー変換反応の研究例について紹介する。

14:00 休憩

14:15 **杉本敏樹 分子科学研究所 准教授**

「高効率水分解光触媒の実現に向けた触媒表面分光計測の挑戦」

反応活性の創出に直接関与する触媒の表面構造や反応素過程に関する分子レベルでの物理化学・表面科学的理解は極めて不十分である。我々は、粒子形状の異なる種々のTiO₂ナノ粒子光触媒に対する赤外振動分光、及び光誘起電荷の過渡吸収測定を行い、「球状の粒子には、OH伸縮振動が大きく低波数シフトした表面第一層吸着水が特異的に存在し、その吸着水による効率的な光誘起電荷捕捉効果により平坦な粒子よりも反応活性が高くなる」こと等を明らかにしてきた。これらの研究成果を紹介したい。

15:00 **中嶋隆人 理化学研究所 チームリーダー**

「第一原理計算とスーパーコンピュータによる新材料設計」

本発表ではスーパーコンピュータ「京」を利用した第一原理計算による材料設計手法と応用例について紹介する。特に、「京」やポスト「京」の能力を最大限に発揮できる理論分子科学の計算手法とそのため
の計算ソフトウェア「NTChem」について紹介する。また、「京」を使ったハイスループット・コンピューティングに基づいた新材料設計と機械学習に基づいたマテリアルズ・インフォマティクスを使った新材料設計の応用例についても紹介する。

15:45 休憩

16:00 小堀康博 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 教授

「電子スピン分極イメージング法による光エネルギー変換機構の解明」

次世代型太陽光発電や光触媒など、環境負荷のないエネルギー源の構築には、植物を含む種々の系で光エネルギー変換機構を理解することが重要である。しかし次世代型太陽電池が効率的に電荷を生成する分子論的起源は未解明である。今回は光反応中間体の立体構造をオングストローム領域の三次元画像化で明らかにする電子スピン分極イメージング法を紹介し、近年明らかになってきたエネルギー変換機構の一端を紹介する。

16:35 太田薫 神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 特命准教授

「テラヘルツ光で観る有機薄膜太陽電池の電荷キャリアダイナミクス」

有機薄膜太陽電池は低コストや環境調和性の観点から注目を集めている。我々は時間分解テラヘルツ分光法により、テトラベンゾポルフィリンとフラレーン誘導体とのバルクヘテロ接合型有機薄膜の電荷キャリアダイナミクスの研究を行っている。講演では、テラヘルツ分光法の測定原理やこれまでに得た結果について紹介したい。

17:10 狩俣出 神戸大学大学院理学研究科 博士後期課程学生

「有機鉛ハロゲン化物ペロブスカイトのイオン・キャリアダイナミクス」

有機鉛ハロゲン化物ペロブスカイト MAPbX_3 ($\text{MA} = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$, $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$)は、室温で容易にハロゲンイオンの交換・拡散が起こり、ハロゲンの組成に応じた発光特性を示すことが知られている。本研究では、イオンの交換や拡散が誘起するキャリアダイナミクスを明らかにするため、単一粒子蛍光顕微鏡を用いたその場観察を行った。

17:35 おわりに

[お問い合わせ先]

立川 貴士

神戸大学分子フォトサイエンス研究センター 准教授

開拓プロジェクト プロジェクトリーダー

TEL: 078-803-5736

e-mail: tachikawa@port.kobe-u.ac.jp