

研究タイトル：電子貯蔵型半導体光電極による高効率な水素生成機構の解明



氏名：	平井 誠／Makoto Hirai	E-mail：	mhirai@nagaoka-ct.ac.jp
職名：	准教授	学位：	博士
所属学会・協会：			
キーワード：	超親水・撥水、半導体光電極、水素エネルギー、太陽電池		
技術相談 提供可能技術：	<ul style="list-style-type: none"> 医療応用に向けた近赤外光応答型光触媒材料の開発 海洋汚染の除去に向けた酸化亜鉛（ZnO）光触媒ナノワイヤの成長制御 複合型半導体光電極による高効率な水素生成に向けた研究 HTM-Free ペロブスカイト太陽電池の高効率化 		

研究内容：

我が国におけるエネルギーの供給を取り巻く状況が厳しくなる昨今、新たなクリーンエネルギー源として水素 (H_2) の活用が大きな広がりを見せており、地球上で豊富に存在する水素を用いた発電は、燃料電池を介した酸素 (O_2) との化学反応によって進行し、水のみが排出される。しかし、従来の化石燃料改質による水素生成法では、その生成過程で大気汚染の原因となる二酸化炭素 (CO_2) が排出する。従って、低コストかつ環境負荷の少ない水素生成法の確立が緊急の課題となっている。図 1 は研究者らが予備調査において、DV-X α 分子軌道計算から求めた単斜晶系の三酸化タンクステン (WO_3) の状態密度 (DOS) であり、 $W_{36}O_{156}$ のクラスターモデルで計算を行った。結晶は、八面体型の WO_6 がつくる三次元構造に歪みが生じて単斜晶系となる。 WO_3 の E_C と E_V は、それぞれ W 5d と O 2p 軌道によって主に形成されている。 WO_3 はバンドギャップが $E_g = 2.5$ [eV] と小さいため可視光活性がある。 WO_3 の場合、電解質溶液中の水素イオン (H^+) が格子内に取り込まれ、その電荷補償として一部の励起電子が局在することで H_xWO_3 になる [図 2 の式 (1.1) 参照]。 H_xWO_3 はタンクステンプロンズと呼ばれ、格子の中心に H^+ が位置する。格子を出入り可能な H^+ はイオン半径が小さいことから可逆性が高い一方で、結晶格子に歪みをもたらす。そして、 H_xWO_3 は酸素に触れることで式 (1.2) に示すように再び WO_3 へと戻ることが確認されており、その際に水素イオンと励起電子を放出する。この放出された励起電子が外部回路に流れ、Pt 対極に到達することで水素が生成する。また、予備実験で (002) 配向した WO_3 光電極において、光遮断時でも水素生成が続いたことから、光電極に貯蔵された水素が暗黒中で放出されることを着想した。

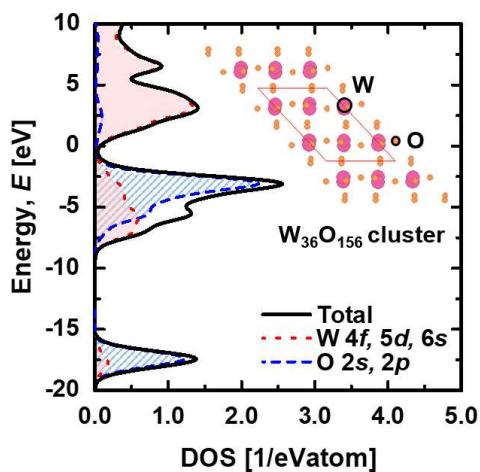


図 1 単斜晶系 WO_3 の E_F 近傍の DOS

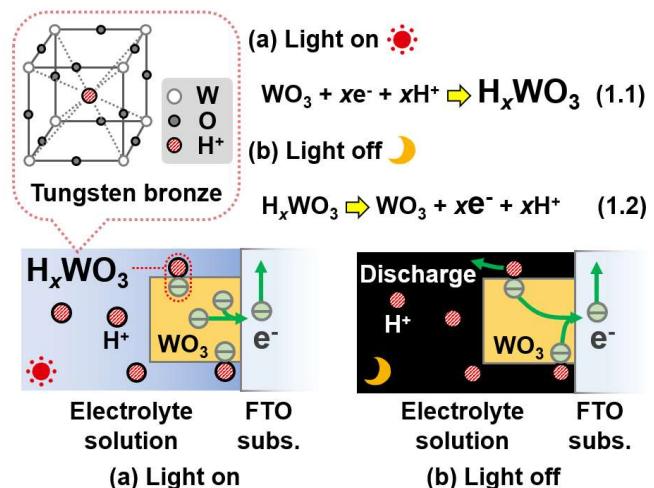


図 2 ナノ構造体 WO_3 光電極による電子貯蔵機構
(a) 光照射時 と (b) 光遮断時

提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)