



氏名	鈴木 達夫 / SUZUKI Tatsuo	職名	教授	学位	博士 (理学) 東京大学
所属	情報通信工学コース / 荒川キャンパス	E-mail	tatsuo(at)metro-cit.ac.jp		
シーズ キーワード	グリーン水素、水分解光触媒、原子層物質、第一原理計算、半導体				

相談可能なテーマ	講座・講演会のテーマ例
<ul style="list-style-type: none"> ・グリーン水素製造に向けた水分解光触媒の合成 ・第一原理計算による物性予測と物質探索 ・第一原理分子動力学計算による物質合成法探索 	<ul style="list-style-type: none"> ・グリーン水素を製造するための革命的な水分解光触媒の理論的提案：リン化ホウ素の単原子層膜 (研究開発者向け)

研究・教育内容の紹介

<テーマ> 気候危機に立ち向かい脱炭素化を加速するために、太陽光エネルギーをダイレクトに利用して、グリーン水素を製造するための、革命的な水分解光触媒「リン化ホウ素の単原子層膜」の研究

化石燃料や原子力エネルギーに代わる、クリーンでサステナブルなエネルギー資源として、水分解光触媒を用いたグリーン水素製造が注目されています。水分解光触媒とは、光を当てるだけで、水を水素と酸素に分解することのできる物質です (図 1)。水分解光触媒を用いた水素製造システムは、太陽電池や風力発電などと電気分解を結合したシステムよりも、はるかにシンプルで、安価であり、そして、大規模な展開が容易です。しかし、現状では、水分解光触媒による水素製造は、エネルギー変換効率が良くありません。

私は、HSE06 汎関数を用いた大規模かつ高精度な第一原理計算を実施することで、安定で高効率の水分解光触媒として、リン化ホウ素の単原子層膜が有望であることを発見しました[1]。リン化ホウ素の単原子層膜は、約 1.4eV のエネルギーギャップの直接遷移型半導体であり、約 890nm 未満の波長の太陽光(紫外線、可視光、近赤外光)を吸収し、適切な pH 条件下で、水から水素ガスと酸素ガスの両方を生成します(図 2)。水素化社会の実現に向けて、リン化ホウ素の単原子層膜の効率的な合成手法などの研究を進めています。

【参考文献】

[1] Tatsuo Suzuki, Applied Surface Science **598**, 153844 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.153844>

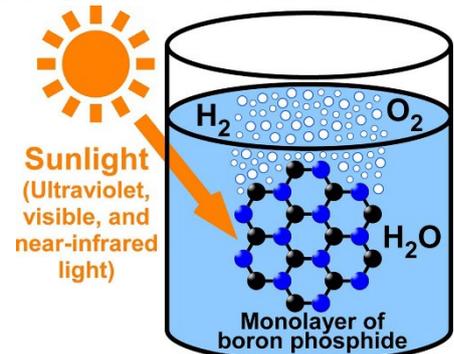


図 1 光触媒による水分解の概要

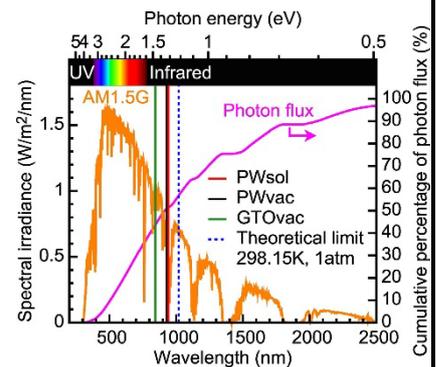


図 2 太陽光スペクトルとエネルギーギャップ値

利用可能な機器/施設	所属学会/協会
<ul style="list-style-type: none"> ・ワークステーション、パーソナルコンピュータ ・第一原理計算用ソフトウェア(VASP, Gaussian) 	<ul style="list-style-type: none"> ・日本物理学会 ・日本物理教育学会 ・応用物理学会 ・日本工学教育協会
その他の情報は私のホームページをご覧ください。 https://www2.metro-cit.ac.jp/~tatsuo/	