

令和 7年 5月 23日

理事長 殿

令和6年度 特定課題研究費研究報告書

研究代表者	所属	情報通信工学コース	職	教授	氏名	鈴木達夫
研究分担者	所属		職		氏名	
	所属		職		氏名	
	所属		職		氏名	
研究課題名	(和文) 第一原理分子動力学法を用いた、高効率水分解光触媒「リン化ホウ素の単原子層膜」の合成手法の探索 (英文) Exploration of synthesis method for highly efficient water-splitting photocatalyst "monolayer of boron phosphide" using ab initio molecular dynamics					
研究種目	重点課題研究					
研究実績の概要						
高効率な水分解光触媒として有望なリン化ホウ素の単原子層膜を効率良く合成するための合成手法を、第一原理分子動力学計算を用いて探索しました。特に、原材料から直接、リン化ホウ素の単原子層膜が合成可能かどうかを、原料比や温度等の条件を変更して探索しました。化学気相成長(CVD)を用いた合成について、その基板と原料ガスとの相互作用を、大規模な数値計算によって研究を進めました。研究の過程において、青色LEDの発明でノーベル物理学賞を受賞された名古屋大学教授の天野浩先生から、結晶成長の権威である東京大学名誉教授、元豊橋技術科学大学学長の西永頌先生を紹介していただき、結晶成長の合成方法について、有意義なアドバイスを得ることができました。そのアドバイスに従って、研究を一所懸命に進めています。現時点においては、まだ公表するにいたる研究成果は得られていませんが、次年度も引き続き、研究を進めていく所存です。						
研究発表（論文、著書、講演等）						
なし						
その他（教育活動・OPCへの貢献、特許等）						
画期的な合成手法が発見された場合には、名古屋大学の天野浩研究室にて合成に挑戦していただけるかもしれません。 リン化ホウ素の単原子層膜の合成に成功し、水分解光触媒として理論通りの性能が得られた場合には、エネルギー革命が起きて、水素社会が実現することとなります。						