

トピックス

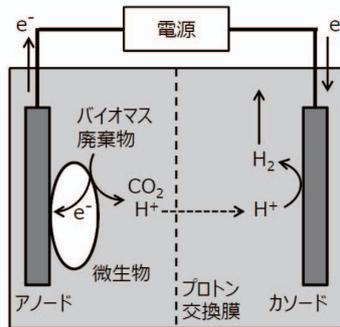
発電微生物を利用した水素生産

東京薬科大学生命科学部生命エネルギー工学研究室では、発電微生物を利用したバイオマス廃棄物等から水素を生産する技術「微生物電気分解、microbial electrolysis cell (MEC)」の効率化研究を行い、水素回収効率を向上させることに成功した。

近年、地下資源の枯渇や地球温暖化等の問題への取り組みが行われるなか、環境にやさしいエネルギーとして水素が注目されている。しかし現在、大部分の水素は化石燃料から製造されている。また、水の電気分解による水素生産には比較的多量の電気エネルギーが必要になる。

そこで、生ごみ等のバイオマス廃棄物をエネルギー源として水素を生産する技術の検討が行われ、MECに期待が寄せられるようになった。

MECにおいては、発電する微生物（または微生物集団）がバイオマスを分解して電気を発生し、それを使ってプロトンを還元することで水素を生産させる（下図）。従来の発酵法による水素生産と比べ、3倍の理論収率で水素生産が可能である。また、MECにおいては外部からの電力供給が必要になるが、一定量の水素生産に必要な電力



MECの構造

は水の電気分解の5分の1程度と試算されている。MECは、廃棄物を処理しながら水素生産を行うグリーンエネルギー技術と言われている。

MECを実用化するためには、水素収率や生産速度の向上、装置の大型化等が課題と言われている。また、生産された水素が槽内に自然発生するメタン菌によりメタンに変換されてしまうことも問題となっている。そこで本研究室では、MECに用いる電極の部材や構造の検討を行い、モデルバイオマス廃棄物からの水素生産効率を向上させることに成功した。また、メタン発酵に関する研究において見いだされたカーボンブラックを利用したメタン菌抑制技術をMECに応用し、安定して水素が生産できることを確認した。今後さらに研究が進められ、廃棄物処理技術兼バイオエネルギー生産技術としてMECが実用化されることが期待されている。

(東京薬科大学生命科学部 名古屋美紗・渡邊一哉 連絡先 〒192-0392 東京都八王子市堀之内1432-1, E-mail : kazuyaw@toyaku.ac.jp) URL <http://logos.ls.toyaku.ac.jp/~bioenergy/> [2019年4月16日]

コバルトケイ素において 質量ゼロ新粒子発見

東北大学大学院理学研究科の佐藤宇史教授らの研究グループは、高輝度放射光を用いた光電子分光実験により、コバルトケイ素(CoSi)の内部に、質量ゼロの新型粒子が存在していることを明らかにした。

グラフェンにおいて、電子があたかも質量ゼロの粒子として振る舞う「ディラック粒子」が発見されたのを皮切りに、ディラック粒子をもつ新しい物質の開拓とそれを利用した電子デバイスの開発が盛んに行われている。最近、このディラック粒子の質量が完全にゼロとなったワイル粒子を持つ物質「ワイル半金属」が発見され、注目を集めている。ディラック粒子やワイル粒子は、宇宙空間（真空状態）において存在する素粒子として提案されたものだが、最近、固体

物質において、ディラックやワイル粒子とも違う、真空状態では存在し得ないような新型粒子の存在が理論的に予言され、その実証が待ち望まれている。これらの粒子には、トポロジカル(位相幾何学的)な性質があり、物質の対称性が崩れるような大きな変化がない限り極めて安定に存在し、不純物や格子欠陥により運動が阻害されにくいという優れた特徴がある。また、これらの粒子にはディラック・ワイル粒子にはない物性や機能が予想されており、機能性物質の探索に大きな広がりを与えるものと期待されている。

佐藤らの研究グループは、カイラルな結晶構造を持つCoSiに着目し、高輝度放射光施設を用いた角度分解光電子分光を用いて、その電子状態を精密に観測した。その結果、この物質が「スピン1粒子」と「2重ワイル粒子」と呼ばれる、新しい粒子を内包した特殊な電子状態を持つことを明らかにした。研究チームはさらにCoSiの表面電子状態についても調べ、この二種類の粒子

をつなぐ表面フェルミアーキ電子状態の観測にも成功した。

今回の研究は、宇宙空間（真空状態）では存在し得ない新しい粒子が、現実の固体物質内に存在することを示したものである。今回発見した「スピン1粒子」は、ディラック・ワイル粒子と全く異なる粒子で、その基礎的な性質に大きな興味を持たれる。また、CoSiに類似したカイラルな結晶構造を持つ物質は数多く存在しており、今回の発見を契機にして、新しい粒子をもつ物質の探索が大きく進展すると期待される。さらに、新しい粒子を用いた次世代の電子デバイス材料の開発にも大きな弾みがつくものと期待される。

(東北大学 教授 佐藤宇史 連絡先 〒980-8577 仙台市青葉区片平2-2-1 東北大学材料科学高等研究所) URL <https://arpes.phys.tohoku.ac.jp/> [2019年4月20日]

量子コンピュータを用いた材料開発

量子コンピュータ理論の興り

近年「量子コンピュータ」が話題にあげられる事が多くなった。量子コンピュータとは原子や光子(光の粒子)といったミクロな物理を記述する「量子力学」の原理を利用した計算機で、1981年に理論物理学者 Feynman によって提唱された。当時、量子力学に従う物理系を古典計算機でシミュレーションすると、必要なメモリや計算時間が物理系のサイズに対して指数的に大きくなっていく問題が浮き彫りとなっていた。自然は量子力学に従っているのだから、自然を効率的にシミュレートするためには従来の古典力学に従った計算原理ではなく量子力学の原理に従う計算機を構築する必要があると彼は指摘したのである。

理論の進展

純粋な理論的研究の対象であった量子計算科学であるが、1995年に素因数分解を多項式時間で可能にする Shor のアルゴリズムが発見されて以降、注目を集める事となった。現在世界中で広く用いられている暗号方式(RSA)は、素因数分解を古典計算で解くには指数時間必要であるとの予想をその安全性の担保としている。量子計算機の実用化が現実となった際の影響の大きさがわかるであろう。

技術の進展

量子計算を実現するハードウェアの面では、

1998年に世界で始めて超電導量子ビットが当時 NEC 在籍の中村泰信先生と蔡兆申先生によって実現された。量計算機が多大な注目を集めるようになったのは、2014年に米国 UCSB の Martinis グループが、超電導量子ビットをチップに並べ超高精度で制御するという究極のエンジニアリングを実現してからである。この事は大規模な量子コンピュータの実現可能性を意味していたからである。

このような理論・技術両面での進展を背景に、Google や IBM といった巨大企業をはじめ、Rigetti Computing といったベンチャー企業によるハードウェア開発が劇的に進んでいる。また米国や中国をはじめとした国々が巨大な国家予算を量子コンピュータの研究開発へ投資している。

古参の IBM は、2016年に同社が開発した量子コンピュータをクラウド上で利用可能な環境の提供を開始した。現在世界中から誰でも実機上でプログラムを実行する事ができる。このように量子コンピュータは確実に我々の身近な存在になりつつある。

産業への応用

ハードウェアは現在も大規模化の途上であり、今後数年で利用可能と予想される計算機は Noisy (ノイズのある) Intermediate Scale (中規模スケールの) Quantum (量子)、頭文字をとって NISQ デバイスと呼ばれている。その効果的な活用法の研究が産学連携が進められており、特に古典計算機に対する優位性を示す実社会へ

応用可能な問題の一例として、量子化学計算が活発な研究対象となっている。古典計算機では計算が困難な励起状態の性質を解明したり量子ダイナミクスをシミュレートすることがその有望な一例である。産業への応用先の事例としては、有機EL等の物質の励起エネルギーの高精度計算による発光色や分極率という基本的な特性の解明、自動車に搭載するリチウムイオン電池設計等が検討されている。他にも BASF がさまざまな手法による化学計算に必要な量子コンピュータのリソース推定を行っている。

我々の日常を支える現代の科学技術の発展はコンピュータの目覚ましい発展によるところが大きいと言って良いだろう。量子コンピュータが実現により、原子レベルで分子や材料を設計しその性質を第一原理計算によって解明するといった新たな材料開発の手法が発展すると期待されている。Quantum Computer Aided Design (QCAD) によって触媒、創薬、新規材料の開発を加速される可能性を秘めているのである。

QunaSys は量子情報に関する正確な情報を広める事を目的に Qmedia (<https://www.qmedia.jp/>) を運営している。量子コンピュータに関する詳細な情報は記事を参考にされたい。

((株) QunaSys CEO 楊天任 Tenny Yan 連絡先 〒113-0033 東京都文京区本郷5-25-18 ハイテク本郷ビル1F, E-mail : yan@qunasys.com) URL <https://qunasys.com/>

[2019年4月23日]



次世代水素／空気二次電池を開発

FDK (株) は同志社大学の盛満教授らと共に、2012 年から国立研究開発法人科学技術振興機構 (JST)・戦略的創造研究推進事業・低炭素化技術開発 (ALCA) の支援を受け、水素／空気二次電池の開発を行っている。水素／空気二次電池は、正極にガス拡散型電極 (空気極)、電解液にアルカリ水溶液、負極に水素吸蔵合金電極を用い、ニッケル水素電池の水酸化ニッケル正極を空気極に置き換えた、高いエネルギー密度と高い安全性を兼ね備えた次世代二次電池である。また負極活物質に水素吸蔵合金を用いるため、溶解析出反応が起こらない。このため、金属の dendrite 成長による内部短絡や正極内部の空隙を埋めるブラッキングも生じない理想的な空気電池である。図に電池反応を示すが、正極に取り込まれた酸素が還元されて水酸化イオンを生じ、負極は水素が放出し水が生成する。充電時は水の電気分解により正極で酸素が発生し、負極に水素が吸蔵される。

当社においては、同志社大学の盛満研究室が開発した $\text{Bi}_2\text{Ru}_2\text{O}_{7-x}$ 酸化物を用い、空気 (酸素) をセル内部に強制的に供給するアクティブ型電池を開発した。この電池は、放電末期まで安定した空気極の電圧が得られたが、充放電サイクルによる劣化の問題があった。評価前後の BRO 触媒を放射光 XRD と XAS にて分析し、結晶構

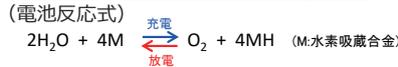
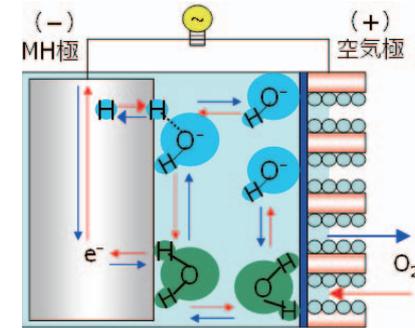


図 電池反応の模式図

造や結合状態に変化なく、高い耐久性を示めしており、電解液と空気極構造に劣化原因があり改善を試みた。電解液は空気中に含まれる CO_2 により、炭酸化し電解液濃度が低下する問題があるため、空気中の CO_2 濃度を低減する方法として、 KOH 水溶液でバブリングを行った。この処理により、 CO_2 濃度を約 1/5 にでき、電解液の劣化速度が緩やかになり、充放電サイクルが改善した。さらに空気極 PTFE 量の適正化により、導電性向上や内部のマクロ孔容積が増加し、充放電サイクル特性が 500 サイクルを達成し、放電電圧も上昇した。

今後、この水素／空気二次電池のエネルギー密度を高めるため、電池の大型化やシステムの最適化を行って行く予定である。この電池を用いた蓄電システムは、太陽光や風力で発電した電力をたくわえ、需要に応じて供給することにより、 CO_2 削減ができ、低炭素化社会の早期実現が期待できる。

(FDK (株) 原田新也 連絡先 〒108-8212 東京都港区港南 1-6-41, E-mail : harashin@fdk.co.jp)

URL <http://www.fdk.co.jp/>

[2019 年 4 月 24 日]