モデル電気化学反応場を用いたエネルギー貯蔵・変換電極過程の微視的機構の理解

（物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点）○坂牛　健

Unveiling Microscopic Mechanism of Energy Storage / Conversion Electrode Processes by using Model Electrochemical Systems

(*Center for Green Research on Energy and Environmental Materials, National Institute for Materials Science*) ○Ken Sakaushi

This *Lecture* summarizes recent attempts aiming to understand complicated microscopic electrode processes by using a variety of model electrode systems, such as porous π-conjugated frameworks. This *Lecture* is constituted of following two themes:

(1) Porous π-conjugated frameworks as model electrochemical energy storage systems. [1-4)]

(2) On unveiling microscopic multielectron/multiproton transfer electrode processes by using model electrocatalysts. Especially, this *Lecture* focuses on experimental-computational collaboration to understand highly active mechanism of nitrogen-doped carbons. [5-8)]

Keywords : Electrode Process; Porous π-conjugated Framework; Multielectron/Multiproton Transfer Reaction; Electrochemical Energy Storage/Conversion

本講演は、燃料電池や二次電池など電気化学デバイスの特性を支配する要因の一つである電極反応場において進行する、複雑な反応過程の微視的・基礎的機構の更なる理解を志向した、多孔性π共役高分子構造体などをモデル電極とした研究に関する内容である。具体的には、以下に示す２つの主題について講演する：

（１）有機分子と金属を自在に組み合わせて構築されるπ共役高分子構造体をモデル反応場とし、それらの場が創発する電気化学的エネルギー貯蔵機構について。[1-4)]

（２）多電子・多プロトン移動電極過程における微視的機構のより深い理解を志向したモデル電極触媒の合成と、それを用いた反応機構解析について。特に、窒素含有炭素電極触媒による酸素還元反応について、実験と計算科学の協働によって説明付けられる電極過程と高効率化機構を解説する。[5-8)]

1) K. Sakaushi, M. Antonietti, *Acc. Chem. Res.*, **2015**, *48*, 1591.
2) K. Sakaushi, G. Nickerl, F. M. Wisser, D. Nishio-Hamane, E. Hosono, H.S. Zhou, S. Kaskel, J. Eckert, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, *51*, 7850.
3) K. Sakaushi, E. Hosono, G. Nickerl, T. Gemming, H.S. Zhou, S. Kaskel, J. Eckert, *Nat. Commun.* **2013**, *4*, 1485.
4) K. Wada, K. Sakaushi, S. Sasaki, H. Nishihara, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 8886.
5) K. Sakaushi, A. Lyalin, S. Tominaka, T. Taketsugu, K. Uosaki, *ACS Nano* **2017**, *11*, 1770.
6) K. Sakaushi, M. Eckardt, A. Lyalin, T. Taketsugu, R. J. Behm, K. Uosaki, *ACS Catalysis* **2018**, *8*, 8162.
7) M. Eckardt, K. Sakaushi, A. Lyalin, M. Wassner, N. Hüsing, T. Taketsugu, R. J. Behm, *Electrochim. Acta* **2019**, *299*, 736.
8) K. Sakaushi, T. Kumeda, S. Hammes-Schiffer, M. M. Melander, O. Sugino, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2020**, *22*, 19401.

© The Chemical Society of Japan