

大学名	横浜国立大学		
University	Yokohama National University		
外国人研究者	モハメド サー ミラン		
Foreign Researcher	Muhammed Shah Miran		
受入研究者	渡邊 正義	職名	教授
Research Advisor	Masayoshi Watanabe	Position	Professor
受入学部/研究科	大学院工学研究院		
Faculty/Department	Faculty of Engineering		

<外国人研究者プロフィール/Profile>

国籍	バングラデシュ
Nationality	Bangladesh
所属機関	ダッカ大学
Affiliation	University of Dhaka
現在の職名	准教授
Position	Associate Professor
研究期間	平成29年10月26日～平成30年1月22日
Period of Stay	From 26-Oct-2017 to 22-Jan-2018
専攻分野	物理化学
Major Field	Physical Chemistry



グローブボックスでサンプル調製するモハメド サー ミラン博士 / Muhammed Shah Miran preparing sample inside the

<外国人研究者からの報告/Foreign Researcher Report>

①研究課題 / Theme of Research
Title: Electrochemical and Rheological Properties of Protic Ionic Liquids Protic ionic liquids (PILs), owing to the competence for proton conduction under anhydrous condition and resemblance to their aprotic counterparts in unique physicochemical properties have shown promise in versatile applications due to the presence of labile proton in the structure. However, the correlation of electrochemical activities and rheological properties with structures and other suitable parameters for PILs still remains a challenge.
②研究概要 / Outline of Research
Effect of acids and bases on the electrochemical properties of PILs were investigated by cyclic voltammetric measurements. Dominance of hydrogen bonding were checked on the rheological properties of colloidal suspensions of PILs and metal oxides such as SiO ₂ and TiO ₂ .
③研究成果 / Results of Research
Neutral bases and acids significantly affected on the potential of hydrogen oxidation reaction (HOR) and oxygen reduction reaction (ORR) of PILs. For instance, poor electrochemical properties were found in presence of pure amines but facile electrochemical activities were observed for the presence of pristine acids. Shear thinning and thickening behavior of response under the application of shear stress were observed depending on the structure of anion of PILs, in other hand, strength of hydrogen bond.
④今後の計画 / Further Research Plan
Further work could be planned to realize the transfer of proton in PILs by calculating the activation energy of the reaction between acid and base by using large-scale first principle MD simulations. Molecular investigation will be carried out to realize the interface and interactions between PILs and solid oxides.

<受入研究者からの報告/Research Advisor Report>

①研究課題 / Theme of Research

「プロトン性イオン液体の電気化学的・レオロジー特性」

Miran博士は、当研究室に国費留学生として平成22-24年度に大学院生として在籍していた。主にプロトン性イオン液体 (PILs)の物理化学的性質の解明に関する研究に従事していた。PILsは酸と塩基の中和反応により得られ、活性プロトンをもつ室温付近で液体状態の物質である。非水条件下でプロトン伝導性を示すことから、様々な電気化学デバイスへの適用が期待されている。しかし現状ではPILsの構造及び他のパラメーターとの電気化学的活性や無機微粒子分散系のレオロジー特性の相関は依然として課題である。今回の滞在ではこれらの課題に関与している当研究室在籍学生と共に、これらの研究を推進することを目的とした。

②研究概要 / Outline of Research

Miran博士は、修了後も本国にてPILsの物性研究を継続している。上述のようにPIL研究は不明な点が多々あり、発展途上の分野である。今回の滞時に、サイクリックボルタンメトリー測定により、PILの電気化学的特性に及ぼす酸および塩基の効果を調べ、それぞれの酸解離定数の差を用いて整理した。PILとSiO₂やTiO₂などの金属酸化物のコロイド懸濁液のレオロジー特性における水素結合の重要性について各種分光測定により調べた。

今回の滞中で、溶液化学の専門家である新潟大学の梅林泰宏教授と、PILの溶液構造についてディスカッションを行った(12/15@茨城県東海村J-PARC)。さらに計算機科学の専門家である産業技術総合研究所の都築誠二 上級主任研究員とPILのシミュレーション結果についてディスカッションを行った(12/19@産総研)。

③研究成果 / Results of Research

Miran博士が当研究室在籍時に研究を進めたテーマは、現在在籍する大学院生2名のテーマへと発展している。3ヶ月という短い期間であったが、学生らの指導も依頼した。その結果、電気的中性の塩基や酸はPILsの水素酸化反応(HOR)や酸素還元反応(ORR)の電位に大きく影響することが明らかになった。例えば、純粋なアミンの存在下では電気化学的特性が不十分であるが、純粋な酸の存在については優れた電気化学的活性が観測された。さらに、PILのアニオン構造、水素結合の強さによって、コロイド分散系のレオロジーが支配されることを明らかにし、せん断応力下でのせん断減粘(shear thinning)およびせん断増粘挙動(shear thickening)がPILの構造に依存するなどを見出した。

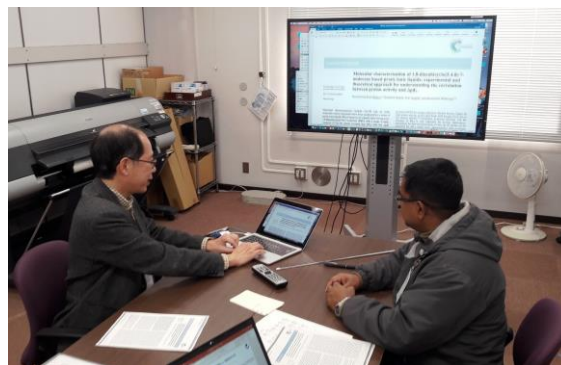
また滞在中に、Miran博士が在籍時に得たデータと、今回訪問した都築博士の計算結果を併せて投稿論文2報をまとめ、近く投稿予定である。

④今後の計画 / Further Research Plan

上述の通り今後論文投稿を控えており、Miran博士とは電子メールにて随時やりとりをする。また当研究室の他に、ディスカッションを行った梅林教授や都築博士と共同して研究を進める。例えば、大規模第一原理MDシミュレーションを用いて、酸と塩基との反応の活性化エネルギーを計算することにより、PILにおけるプロトン移動を実現するための更なる研究を計画している。そしてPILと固体酸化物との界面および相互作用を議論するために分子レベルの調査を行う。これらの結果を踏まえて国際共著論文を投稿する予定である。



J-PARC(茨城県東海村)にて梅林泰宏教授(新潟大学;右)とディスカッションをするミラン博士(中央) / Meeting with Professor Yasuhiro



産業技術総合研究所(つくば市)にて都築誠二 上級主任研究員(左)とディスカッションをするミラン博士(右) / Discussion with Professor Seiji Tsuzuki at National Institute of Advanced Industrial