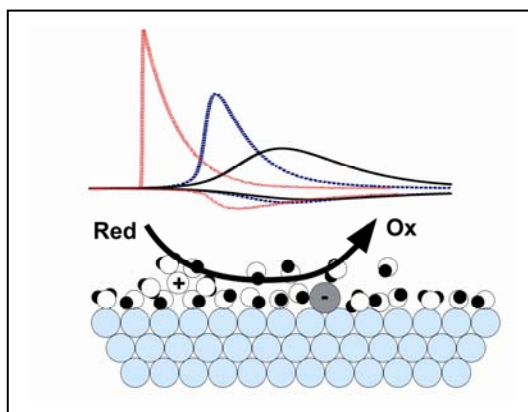


ディビジョン番号	11
ディビジョン名	電気化学

大項目	4. 電気化学計測／電気化学反応
中項目	4-1. 電気化学計測
小項目	4-1-9. 解析電気化学

概要（200字以内）

解析的電気化学は、電極反応の定量的な把握、理解を対象とする電気化学の一分野である。現在では、複雑な電気化学系の挙動を定量的に説明することが出来るようになり、電極表面の複雑な形状や反応拡散系、吸着現象の包含など、より具体的な電気化学系へと、進化を続けている。電気二重層の存在を考慮した、大きな帯電不均一系の巨視的振る舞いを原子、分子レベルから説明することが、これからの挑戦的課題である。

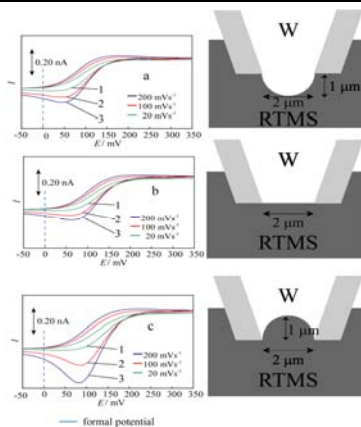


現状と最前線

解析的電気化学は、電極反応の定量的な把握、理解を対象とする電気化学の一分野である。特に1950年代から60年代に大きく進歩を見た解析的電気化学の中心は、ポーラログラフイーにおける電流－電圧曲線の挙動の定量的説明であった。そこで確立された不均一電子移動反応の平衡論と速度論に物質輸送を組み合わせた現象論的理論の枠組みは、現代電気化学のもっとも重要な基礎をなす。

近年、複雑な境界条件を有する電気化学系で、それを記述する微分方程式の解析解が得られない場合でも、それを数値的に解く計算手法が発達した。これにより、複雑な電気化学系の挙動を定量的に説明することが出来るようになってきている。この現象論的なアプローチは、電極表面の複雑な形状や反応拡散系、吸着現象の包含など、より具体的な電気化学系へと、現在も進化を続けている。

図1は、微小ガラスピペットの先端に形成されたイオン液体(RTMS) | 水(W) 界面を横切るイオン移動のボルタモグラムが、ピペットと界面の形状、および電位掃引速度の詳細に依存することを示す。



一方、1960年代から始まった金属単結晶電極の電気化学の展開、表面分光法や操作プローブ顕微鏡など表面解析手法の発達と、計算機科学の進歩、量子力学及び統計力学の進歩は、原子レベル、分子レベルでの電気化学の道を開いた。しかし、解析的電気化学の本来の関心事である電流—電圧曲線の意味づけ、すなわち巨視的観察結果との間には、まだ、相当の距離がある。両者をつなぐ統計力学の進歩、とくに電気化学不均一系が複雑である大きな要因である電気二重層の存在を考慮した理論の発展によって、大きな帯電系の巨視的振る舞いを原子、分子レベルで説明することがこれからの、息の長い、挑戦である。

この成果は、電気化学にとどまらず、生体における酸化還元過程やイオン移動—電子移動共役の定量的把握や、新しい電気化学系の創成に大きく貢献すると期待される。

将来予測と方向性

・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

解析的電気化学に携わる科学者が減少する一途の中で、この分野で5年後に大きな進展があるとは考えられない。しかし、電気化学分析の異分野への展開が急な中であって、定性的理解から定量的理解へのニーズの増大が必然である。関連する科学諸分野での学術的、技術的展開も見込まれるので、小数の解析電気化学の専門家集団により、電気化学を専門としない科学者・技術者がより容易に電気化学系を理解するツールが発達する。

・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

きわめて高度な数値計算を容易とする計算機科学の進展と、in-situ 計測法の小型化、低価格化によって、電極表面における電気化学過程がリアルタイムで把握できる、すなわち、擬似的ではあるが、電極過程の可視化が出来るようになるであろう。生物の細胞内における酸化還元過程、イオン移動を基軸とするエネルギー変換プロセスの定量的な把握が可能となり、それを利用した新しいデバイスの開発が進展するであろう。

キーワード

電気化学過程のリアルタイム解析

帯電不均一複雑系の理論

電流—電圧曲線の微視的理論

(執筆者：垣内 隆)