

日本ーフランス 国際共同研究「分子技術」 平成 27 年度 年次報告書	
<b>研究課題名（和文）</b>	分子設計に基づく生体適応型高耐久性 3 次元グルコースバイオ燃料電池の創出
<b>研究課題名（英文）</b>	Molecular design of biocatalytic 3D nanocarbon architectures for long-lasting glucose fuel cells
<b>日本側研究代表者氏名</b>	仁科 勇太
<b>所属・役職</b>	岡山大学異分野融合先端研究コア・准教授
<b>研究期間</b>	平成 27 年 11 月 1 日 ~ 平成 31 年 3 月 31 日

## 1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
仁科 勇太	岡山大学・異分野融合先端コア・准教授	研究の総括

## 2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

電子メディエーターの候補となる分子を効率よく探索するために、理論計算を用いる。従来の研究で、還元電位が $-0.3 \sim -0.2$  V (vs Ag/AgCl) の分子がメディエーターとして優れているとされている。計算によって抽出されるメディエーター候補化合物を合成し、酸化還元電位を測定し、計算の妥当性を評価する。

酵素やメディエーター分子を固定化する電極として、グラフェン類を用いる計画である。グラフェンは 2 次元材料であるが、層間に望みのサイズの分子やカーボンナノチューブを入れると、空隙を有する 3 次元電極を作成する。欠陥量を制御した酸化グラフェンを複数種類合成し、酵素を固定化して電極としての性能を評価する。

### 3. 日本側研究チームの実施概要

電子メディエーターの酸化還元電位を理論計算により求めた値と実験的に得られた値を比較し、計算方法の妥当性を確認した。計算値と実験値で一致した値を得ることはできていないが、相関のある結果が得られたため、理論計算から実験値の推測が可能となった。

これまでナフトキノン系メディエーターの開発が進んでいるが、安定性が低いという問題があった。そこで、安定なアントラキノン骨格に着目したが、アントラキノンには酸化還元電位が $-0.5\text{ V}$  (vs Ag/AgCl)であり、そのままではメディエーターに適していない。目的とする $-0.3\sim-0.2\text{ V}$ の酸化還元電位を有するアントラキノンを経験計算から抽出した。その結果、2-cyanoanthraquinone（理論値： $-0.421\text{ V}$  vs Ag/AgCl）を見出した。実際に合成し、サイクリックボルタンメトリーを測定したところ、 $-0.416\text{ V}$  (vs Ag/AgCl)と理論計算から推測した値と近い値が得られ、本手法の妥当性を確認できた。

電極材として、酸素含有量を約 5%刻みで制御した酸化グラフェンを合成した。これらのGOをフランス側に送付し、電極としての性能評価を行っている。また、3次元構造を有する電極を作成するために、GOの表面電位を負から正に変える方法を開発した。