

八島研究室

URL <http://www.chemistry.titech.ac.jp/~yashima/>

E-mail yashima@cms.titech.ac.jp

見学は大歓迎です！ e-mailで希望日時をご連絡ください。



八島 正知 教授

原子配列とその動き、電子を調べ、新物質を探索して世界を変えよう！

原子・電子レベルでエネルギー材料・環境材料・バイオ材料・電子材料、触媒をデザインしよう！

1. 研究のアプローチと特徴：高温構造物性と新物質探索

現代社会には、エネルギー、環境、バイオなどの分野に多くの課題が山積みです。これらの課題の解決には優れた物質・材料を開発することが必要ですが、そのためには材料の結晶構造（原子配列）と電子の状態を調べ、新しい材料を開発することが鍵となります。当研究室では、近年発展が著しい精密結晶構造解析技術を駆使して、実用材料の結晶構造と電子を調べ、**材料特性の発現機構を解明し、新物質を探索**しています。材料の多くは高温で使用/合成するので、高温下に試料を保持したまま結晶構造を実況中継（その場観察）して材料特性との関係を明らかにする「**高温構造物性**」にも力を入れています。結晶構造を基に次世代の「**新物質・材料のデザイン・開発**」し、**エネルギー・環境問題の解決**を目指しています。八島研では**周期表の安全な元素殆どすべて（72種類以上）を駆使した多彩な材料開発**を行います。

2. 研究室の構成と特徴：多彩な分野の出身者で新分野を開拓

【メンバー】 八島教授、藤井助教、村上特任助教、Avdeev客員研究員、秘書1名、博士課程院生2名、修士課程院生6名、学部4年生2名

【出身分野】 化学、材料、物理、セラミックス、応用物理、電気、金属等

【就職先】 東工大、ラシャヒ大、福島大、東京ガス、リガク、京セラ、昭和電工、パナソニック、日立製作所、東芝、三菱マテリアル、GC、日本軽金属、NTT、大同ホールディングス、JR東日本、三菱重工、トヨタ、NEC、シャープ、オリンパス、横河電気、TDK、三菱自動車、YKK、マツダ、キーエンス、日本原燃、コニカ、ポッシュ、富士電機、住友化学 等49社

【共同研究】 国内約20大学、国立研、民間企業、欧米・アジアの大学

【学会】 セラミックス協会、結晶学会、化学会、金属学会、国際結晶学連合IUCr、固体イオニクス国際会議、中性子科学会など

【使用装置群】 中性子回折装置（6台）、**（放射光）X線回折装置**（5台）、**高温回折測定用試料加熱装置**（6台）、**高温電気伝導・誘電特性測定システム**（4台）、熱分析装置（DSC、TG-DTA、熱膨張）、紫外-可視分光光度計、試料合成用高温電気炉（12台）、水熱合成装置、ボールミル、ガスクロ、顕微鏡、ドラフト（2台）、**パソコン・机・椅子（1人1つ以上）**等

【受賞】 この2年間で**26件**。化学会学術賞・ポスター発表賞2名、結晶学会学術賞・進歩賞・ポスター賞5名、セラミックス協会学術賞・進歩賞2名・発表賞14名・学生論文賞、金属学会功績賞・奨励賞、熱測定学会奨励賞、田川賞、PACRIM発表賞4名、触媒工業協会技術賞、Spriggs賞他



3. 教育方針：世界的な研究者・科学技術者を育てる

世界トップレベルの研究（**ビジョン：高い目標と大きな夢**）を学生自身が（1）**立案**する、（2）**実施**する、（3）**発表**する能力を磨きます。研究室のセミナーでは文献の紹介や英語での研究報告を行っています。研究成果は、**国内外の会議・学会で積極的に発表**しています（スペイン、英国、香港、ハワイ、沖縄で開催される学会に参加）。**学生自身が試料の合成、回折測定と精密構造解析、物性測定、量子力学計算などを行い、材料開発に必要な実力と幅広い研究スキルを身につけます**。1年の内10～60日程度**国内外の最先端の大型施設**（英国、豪州、韓国、SPring-8、つくば、東海）を使って高温放射光X線中性子回折実験を行います。個々の学生が独立性を持って研究を行います。外部の大型施設では全員が協力して実験を行います。学生が出す研究成果は大きく**新聞や総説・教科書、国際一流誌**に掲載され、**物質構造特許**に繋がることもあります。

4. 研究テーマ：構造と電子を調べて新材料の探索・開発

（1）独自の高温での精密構造解析システムの開発

当研究室では、「**高温での精密構造解析システム**」をいくつも開発しました（図1、2）。その結果、原子、イオン、電子の広がりや構造を、空气中1900 Kという高温に試料を加熱したまま正確に求めることができ、「**高温での精密構造物性**」、「**新物質・新材料の構造デザイン**」という新分野を切り拓くことに成功しました（図3、4）。

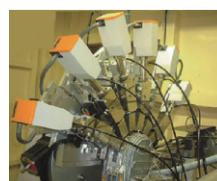


図1 放射光粉末回折計PF4B2高温測定システム



図2 中性子回折計HERMES高温測定システム

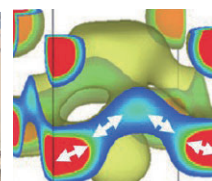


図3 1000°Cで可視化されたイオン伝導経路（矢印）

（2）イオンの位置と動きを調べ、新構造の材料を探索・発見

エネルギー・環境分野の鍵を握るのは固体中をイオンが流れる**イオン伝導体**です。イオン伝導体におけるイオンの位置と動きを中性子と放射光で調べています。八島研では、世界に先駆けて**燃料電池**、リチウムイオン電池などにおけるイオンの位置と拡散経路を決定し、**イオン伝導機構**を明らかにしてきました。また、触媒材料などのナノ物質、強誘電体等における結晶構造、相転移、物性との関係を明らかにしています（**構造物性**）。結晶構造に基づいて新しいイオン伝導体や**蛍光体**などの設計（**新物質探索**）を行い、**物質特許・構造特許**を申請、取得しています（図5、6）。あなたも新物質を発見し、発明者になりましょう。

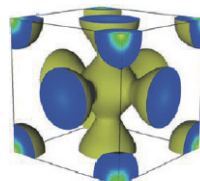


図4 ヘロブスカイトの電子密度分布、Ti-O原子間の共有結合が見える（140°C）

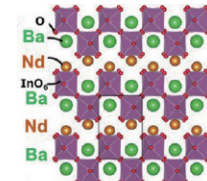


図5 新しい結晶構造を持つ新物質BaNdInO₄を発見して米国・日本特許を取得

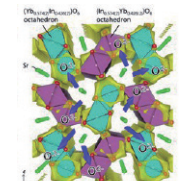


図6 新しい結晶構造を持つイオン伝導体SrYbInO₄を発見

（3）化学結合・共有結合を可視化：放射光X線回折で複雑な構造を調べる～結晶・電子構造による新材料設計～

多くの材料では**イオン結合・共有結合と電荷移動（電荷・軌道・スピン・イオンサイズ）**を自在に組合せて好みの特性をつくります。このような構造中の結合状態は、**精密な電子密度**で明らかにできます。ペロブスカイト（CaTiO₃）では、1401°Cでの放射光X線解析から、Tiと酸素原子の間の共有結合を可視化することに成功しました（図4）。クリーンで再生可能な水素エネルギー源として期待されている**光触媒**と**ナノ材料**における化学結合を調べて、**光触媒が可視光にตอบสนองする構造的要因**も明らかにし、新しい光触媒をデザインしています。また、**密度汎関数理論（DFT）による第一原理バンド計算**を行い、**化学結合と構造、相安定性、光物性、電気的性質、熱物性、生体親和性、機械的性質の本質に迫ります**。その知識を駆使して、**材料の特性と物性を制御し、新物質を探索**します。

一緒に化学（物質の科学）を研究して明るい未来を作りましょう！