

八島研究室

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

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



八島 正知 教授

結晶構造と電子を調べてエネルギー・環境・バイオ・電子材料、触媒をデザインする：新物質探索と構造物性

1. 研究の特徴：高温精密構造物性と新物質探索

現代社会にはエネルギー問題、環境問題、高齢化社会など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・材料を開発する必要があります。材料の結晶構造（原子配列）と電子の状態を調べ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構造解析技術を駆使し、**実用無機セラミック材料の結晶構造と電子を調べ、機能発現機構を解明しています。**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と電子状態を実況中継（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**」に力を入れています。そのために世界で唯一の高温構造解析システムをいくつか開発して、我々にしかできない研究を行っています。結晶構造を基にした独自のアイデアで、「**次世代の新物質・材料を設計・探索・開発**」しており、**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）**を駆使して**多彩な材料を開発**します。以上のように、基礎（理学）である化学と応用（工学）である材料学を融合した境界領域で新分野を開拓しています。

2. 八島研の特徴：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、丹羽特任助教、秘書1名、博士課程院生3名、修士課程院生7名、学部4年生2名
【出身分野・大学】 化学、材料、物理、セラミックス、応用化学、応用物理、電気、金属等 東工大、北大、理科大、横国大、岡山大、他18大学/高専
【就職先】 東工大、ラシャヒ大、日本原燃、ジーシー、日本軽金属、デンソー、NTT、同和ホールディング、JR東日本、三菱重工、リガク、トヨタ自動車、NEC、シャープ、横河電気、TDK、三菱自動車、YKK、マツダ、キーエンス、コニカ、昭和電工、福島大、中央大、パナソニック 等約42社
【共同研究】 国内約15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、国際結晶学連合IUCr、固体イオニクス国際・国内会議、金属学会、中性子科学会など
【充実した使用装置群】 中性子回折装置（5台）、放射光X線回折装置（5台）、単結晶X線回折装置、高温回折用加熱装置（7台）、高温ガス雰囲気下で電気伝導度と誘電率を測定するシステム（4台）、熱分析装置（DSC、TG-DTA、熱膨張計）、紫外可視分光計、高温電気炉（10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（1人1台以上）等
【受賞】 3年間で延べ13名受賞！結晶学会学術賞、同進歩賞、同ポスター賞4名、セラミックス協会学術賞、同進歩賞、同ポスター賞5名、金属学会功績賞、同奨励賞、触媒工業協会技術賞、東工大教育賞、Spriggs賞、AONSAポスター賞、物構研サイエンスフェスタ学生奨励賞 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。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20～80日程度国内外の最先端の大型施設を使って放射光および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が、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ています。



4. 研究テーマ：構造と電子を調べて新材料を探索

(1) 独自に開発した高温での精密構造解析システムを活用

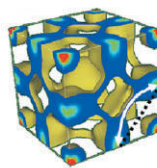
当研究室では、「**高温での精密構造解析システム**」をいくつも開発しました（右図）。その結果、原子、イオン、電子の広がりや構造を、空気中1900 Kという高温に試料を加熱したまま正確に求めることができ、「**高温での精密構造物性**」という**新分野を切り拓く**ことに成功しました。



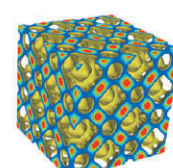
放射光粉末回折計PF4B2 中性子回折計HERMES
高温測定システム 高温測定システム

(2) イオン・原子の位置と動きを調べて新材料・新物質を探索する：中性子回折法、物質構造特許の取得

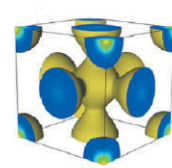
エネルギー・環境問題解決の鍵を握るのは固体中をイオンが流れるイオン伝導体です。**イオン伝導体**における**イオンの位置と動き**を中性子と放射光で調べています。当研究室では、世界に先駆けて燃料電池材料ランタンガレート、最も酸素イオン伝導度が高い酸化ビスマス、リチウムイオン電池材料とプロトン伝導体におけるイオンの位置と拡散経路を決定することに成功しました。また、**触媒材料などのナノ物質、強誘電体**等における結晶構造と相転移も次々に明らかにして材料開発に生かしています（**構造物性**）。また、結晶構造に基づいて新しいイオン伝導体や光触媒などの材料設計（**新物質探索**）を行い、八島研学生、教員および企業が共同で広い範囲をカバーする**物質構造特許**を出願し、2015年には2件公開されました。八島研で発見したBaNdInO₄は新聞5紙で取り上げられ、2014年の代表的な研究として雑誌パリティ2015年1月号「物理学この1年」に選ばれました。



ランタンガレートにおける酸素イオンの伝導経路（白抜き矢印、1392℃）



酸化ビスマス固溶体における酸素イオンの伝導経路ネットワーク（738℃）



ペ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℃）

(3) 化学結合/共有結合：高分解能放射光X線回折で複雑な先端材料を調べる～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。このような化学結合は、**精密な電子密度**で明らかにできます。例えば上右図のペロブスカイト（CaTiO₃）では、1401℃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。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、光触媒が可視光に応答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。