

イオンの拡散制御による新規物質開発

Materials design through the control of ion diffusion

北大電子研¹, 茨城大², 東北大金研³ AGC⁴ ○藤岡 正弥¹, 岩崎 秀¹, Zagarzuem Khurelbaatar¹,

小峰 啓史², 森戸 春彦³, Melbert Jeem¹, 小野 円佳^{1,4}, 西井 準治¹

RIES Hokkaido Univ.¹, Ibaraki Univ.², IMR Tohoku Univ.³, AGC Inc.⁴

○Masaya Fujioka¹, Suguru Iwasaki¹, Zagarzuem Khurelbaatar¹, Takashi Komine², Haruhiko Morito³,

Melbert Jeem¹, Madoka Ono^{1,4}, Junji Nishii¹

準安定物質の合成は、単純な熱処理だけでは困難であるため、現代においても広大な未踏領域が残されており、新たな機能の宝庫として期待されている。この領域を開拓するには、新規合成手法の開発と準安定物質を創出するための方法論を確立する必要がある。一般の無機材料合成は、原料を熱処理し、各構成元素が相互拡散することで、その温度における最安定な物質を形成する。一方、準安定物質の創出には、このように元素の相互拡散が許される合成環境ではなく、特定のイオン種のみが異方的に拡散するような環境が有効であると考えられる。

我々のグループではこれまでに、NASICON 材料、リン酸塩ガラス、層間化合物、ゼオライト、クラスレート化合物等、図 1 で示されるような構造骨格とそこに内包されたイオンから構成される化合物を対象として、イオンの挿入や抜去、別のイオン種との交換による物質合成を推進してきた[1, 2]。このような物質は、「結晶内で強固に結合し、深いポテンシャルに束縛された元素と、簡単に飛び出せる浅いポテンシャルにトラップされた元素が混在する系」と言い換えることができる。結晶を構成する各元素は、共有結合やイオン結合、ファンデルワールス力等の複雑な結合状態に由来したポテンシャルを形成しており、本研究ではこのポテンシャルを DFT 計算から見積もり、イオン拡散を利用した物質合成の可否を判定するプロセスを開発している。さらに、計算科学から見出された候補物質に対して、独自に研究開発を行ってきた固体電気化学的合成手法(プロトン駆動イオン導入法、高圧固体電気化学法)を利用し、新規物質の開発を実際に行っている。

講演では、プロトン駆動イオン導入法、および高圧固体電気化学法の詳細を示すと共に、これらの固体電気化学的合成手法により得られた物質群について報告する予定である。

参考文献

[1] M. Fujioka et al., *J. Am. Chem. Soc.* **139** 17987-17993 (2017).

[2] M. Fujioka et al., *J. CERAM. SOC. JPN* **126** 963-967 (2018).

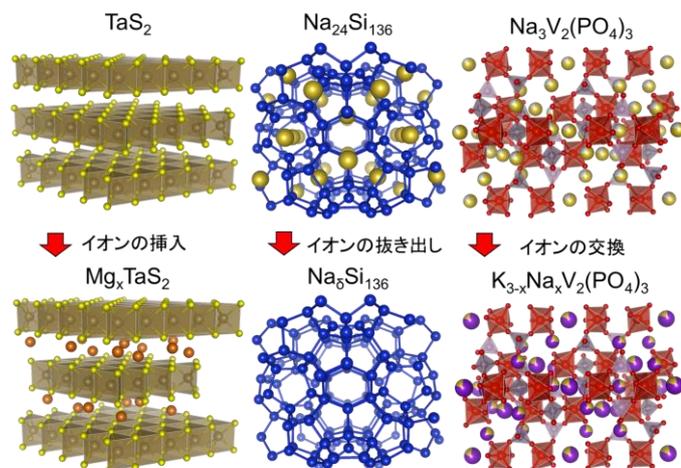


図 1. イオンの異方的拡散による物質開発