

# 研究室紹介

## 東京工業大学 物質理工学院 材料系 中島・磯部研究室

### 1. はじめに

中島・磯部研究室は、東京工業大学物質理工学院材料系に所属しており、大岡山キャンパスの南7号館に研究室があります。本研究室は、本学無機材料工学科で第4番目の講座として開設され、当初は「地学教室」と呼ばれていました。その後、故山田久夫教授の時代に「地質鉱物学講座」、小坂丈予教授の時代に「鉱産原料講座」、大津賀望教授の時代に「セラミックス原料講座」、岡田清教授と中島章教授の時代以降は「地球環境材料分野」という名称になっています。当初は地質鉱物の分野を研究対象としてきましたが、現在は無機材料科学や固体表面科学の視点から資源・環境・エネルギーに関連する幅広い研究内容に取り組んでいます。本稿は、本研究室に2021年度より助教として着任した、計算材料科学が専門の望月が主に書いております。色々な立場からみた研究室紹介になること、ご了承頂ければと思います。

### 2. 研究室での生活と研究環境

令和5年度の本研究室は、中島章教授、磯部敏宏准教授、そして望月の3名の教員と、博士研究員2名、博士課程学生1名、修士課程学生16名、学士課程学生6名で構成されています(図1)。コアタイムはなく、フレックス制をとっており、自主性を重んじ、切り替えの早さと集中力を出すことをモットーにしています。



図1 令和5年4月時点における研究室メンバーの集合写真。

毎年8月には、研究内容で関連の深い東京理科大と山梨大の研究室と無機材料合同研究会を行うほか、全学生が卒業までに学会発表を必ず行います。8、9月頃に学生同士で研究室旅行に行き、10月には工大祭で研究室公開を行っています。年度初、年末、年度末には、歓迎会、忘年会、追いコンが行われます。教員と学生がフラットに接することで、コミュニケーションが円滑に進む雰囲気になっています。

毎週実施される研究室ゼミでは、学生の基礎学力、研究者・技術者としての社会性と国際性を養うため、日本語、英語での進捗報告、自身の研究に関連する論文の紹介をしています。3名の教員の背景知識が異なる(表面科学、セラミックスプロセス、物性物理学など)ことから、ゼミは小さな学会のようで、活発に議論が進んでいます。教員と学生の研究の打合せは、毎週実施するか、学生に週報を提出してもらっています。研究の話だけでなく、就職や人生の悩みなども親身になって聞いています。特に、望月が研究室に着任して驚いたこととして、先生方がセラミックスの焼き方、ガスボンベの外し方といったことを直接学生に教える(OJT)が多かったことです(当然望月も、自分から指導しています)。計算にせよ、実験にせよ、基礎背景知識や注意事項の把握、問題解決能力、長年の勘と経験(特に実験では大事!)といったことが重要であり、丁寧に指導されるに連れて学生が進化していく姿が見られることから、本研究室における研究と教育には、やり甲斐があると感じます。

研究室には、20台ほどのさまざまな電気炉、温度変化XRD測定装置、紫外可視分光測定装置、FT-IR測定装置、ボールミル、TG-DTA、ガスクロマトグラフィなど、セラミックスを研究するために必要な装置の多くが揃っています(図2)。計算材料科学のテーマを実施する学生は、本学のTSUBAME3.0に遠隔で接続して計算を実行し、得られた膨大な容量の計算結果を24インチのiMacを使って解析しています(図2)。

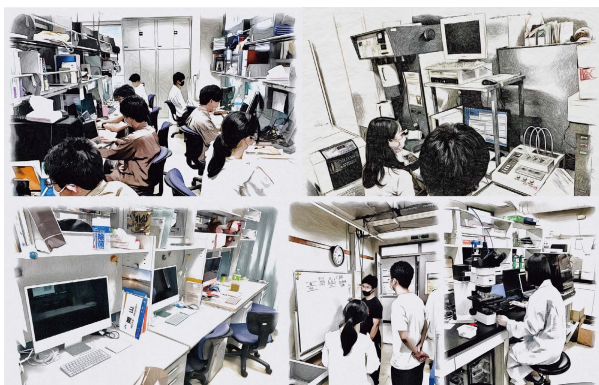


図2 居室(左), 実験室(右)での研究・議論の様子。

### 3. 研究内容

研究内容は非常に多岐に渡るため、この短い紙面ではそのごく一部しかご紹介することができません。詳細はどうか、私たちの研究室のHP(最後に記載)をご覧ください。

#### [高性能環境浄化材料, 抗菌抗ウイルス材料の開発]

抗菌抗ウイルス材料は、菌やウイルス由来のさまざまな被害の予防や拡大抑制の上で重要です。特に、光が当たらない場所において長期間、安定して高い抗ウイルス活性を発現する材料は、新型インフルエンザや豚コレラの対策上、必須です。従来の材料には、このような性能を十分に満足するものがなかった中、近年、当研究室では、モリブデン酸複合酸化物が、暗所で長期に亘りTiO<sub>2</sub>光触媒並みの抗ウイルス活性を発現することを見出しました<sup>1)</sup>。本研究の成果は、人類の近未来の脅威であるウイルス関連被害への対策技術となるとともに、大規模自然災害の被災地等における衛生環境の確保にも貢献できると考えています。

#### [ガス分離用, 水浄化用セラミックフィルタの作製]

膜によるガス分離は省エネルギーな方法として期待されていますが、エネルギー・化学産業の省エネルギーに広く資する特性を満たしていません。アモルファスカーボン膜は、その優れた特性から新規な膜材料として期待されているため、ガス分離用、水浄化用のフィルタの作製を行っています<sup>2)</sup>。また、アモルファスカーボン膜の性能向上とともに、低コスト化が見込める作製プロセスの構築にも取り組んでいます。

#### [負の熱膨張を有するセラミックスの合成]

負の熱膨張率を有する材料(負熱膨張材料)は、IoTや5Gなどに用いられるスマートデバイスに必要な材料です。広い温度域で巨大な熱収縮を示し、可能な限り安価で安全な組成であることが求められています。近年、当研究室では、負熱膨張材料の2つの収縮メカニズムであるフレームワークモデル(広い温度域が特長)と相転移モデル(巨大な熱収縮が特長)を併

せ持つ材料Zr<sub>2</sub>SP<sub>2</sub>O<sub>12</sub>を発見しました<sup>3)</sup>。2つの収縮メカニズムを併せ持つことで、これまで達成できなかった広い温度域と巨大な熱収縮を両立できると期待されます。

#### [熱物性, バルク/表面の安定構造探索の第一原理計算]

近年の計算機性能の向上により、高精度な理論予測が可能になりました。熱物性の学術は発展途上にあり、第一原理計算と擬調和近似に基づくフォノン計算、機械学習された原子間ポテンシャルを組み合わせた第一原理分子動力学計算により、物質・材料における熱膨張係数を予測し、その支配因子を探る研究を行っています。虚数振動フォノンを用いて勘や経験に基づかないバルクの安定構造探索を行い、その構造変化による物性変化と機構解明も行っています。量子力学・固体物理学・群論・結晶学の知識を基に構造と物性の関係性を明らかにする研究も遂行しています。また、最表面の安定構造探索を行い、表面構造による電子バンドの位置(価電子帯上端, 伝導帯下端)の変化も、第一原理計算により調べています<sup>4)</sup>。

#### 文 献

- 1) T. Matsumoto, K. Sunada, T. Nagai, T. Isobe, S. Matsushita, H. Ishiguro and A. Nakajima, *J. Hazard. Mater.*, **378**, 120610 (2019).
- 2) T. Isobe, S. Sano, M. Inada, S. Matsushita and A. Nakajima, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **128**, 918 (2020).
- 3) T. Isobe, Y. Hayakawa, Y. Adachi, R. Uehara, S. Matsushita and A. Nakajima, *NPG Asia Mater.*, **12**, 80 (2020).
- 4) Y. Mochizuki, H.-J. Sung, T. Gake and F. Oba, *Chem. Mater.*, **35**, 2047 (2023).

#### 筆 者 紹 介

望月 泰英(もちづき やすひで)

東京工業大学物質理工学院材料系助教。2021年東京工業大学物質理工学院材料系博士課程修了。博士(工学)。同年4月より、現職。専門は計算材料科学。

磯部 敏宏(いそべ としひろ)

東京工業大学物質理工学院材料系准教授。2006年東京工業大学理工学研究科材料工学専攻博士課程修了。博士(工学)。同年産業技術総合研究所研究員。2010年東京工業大学助教を経て、2019年4月より現職。専門はセラミックスプロセスング。

中島 章(なかじま あきら)

東京工業大学物質理工学院材料系教授。1987年日本鋳業株式会社(現JX日鉱日石エネルギー)入社後、1997年ペンシルバニア州立大学材料科学専攻博士課程修了(Ph. D.)。1998年東京大学先端科学技術研究センター寄附研究部門教官。2000年株式会社先端技術インキュベーションシステムズ取締役。2003年東京工業大学助教授を経て、2009年10月より現職。専門は表面機能材料。

[連絡先] 〒152-8550 東京都目黒区大岡山2-12-1  
E-mail: nakajima.aa@m.titech.ac.jp  
研究室HP: <http://www.rmat.ceram.titech.ac.jp/>