

トピックス

ルビジウムを含む初めての 酸化物イオン伝導体 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ を発見

酸化物イオン伝導体は、酸化物イオン (O^{2-}) 伝導を示す物質であり、固体酸化物形燃料電池 (SOFCs) などに幅広く応用できる。実用化されている酸化物イオン伝導体 YSZ (イットリア安定化ジルコニア) の伝導度は 600°C 以下で低く、 600°C 以下で高い酸化物イオン伝導度を示す新型材料が望まれていた。安井雄太博士と八島正知教授らの研究グループは今まで検討されてこなかったユニークな元素である Rb を含む酸化物に着目した。Rb⁺ は陽イオンの中で Cs⁺ に次いで 2 番目に大きいので、Rb を含む酸化物には格子体積と空隙 (自由体積) が大きく、活性化エネルギーが低い材料があると期待されるからである。495 の結晶学データと結合原子価法を用いたコンピュータスクリーニングで選定した候補材料について、元素置換した $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ 試料を実際に合成し、輸送特性 (酸素濃度電池を用いて測定した輸率、広い電解質

領域、無視できるプロトン伝導) を評価した。その結果、ルビジウムを含む初めての高酸化物イオン伝導体 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ を発見した。 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ は 300°C で YSZ の 29 倍に及ぶ高い酸化物イオン伝導度 (0.14 m S cm^{-1}) を示した。KEK/J-PARC の森一広教授と協力して J-PARC の回折装置 SuperHRPD で $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ の高温中性子回折データを測定し、結晶構造解析を行った。 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ はパルミエライト (palmierite) 型構造を有することがわかった。結晶構造における大きな空隙によりイオン伝導の活性化エネルギーが低いことや、酸素原子の極めて大きな異方性熱運動と MoO_4 四面体の回転運動、酸素原子を挟んでいる陽イオン間距離が長いことが高い伝導性の原因と考えられる。また、 $\text{Rb}_5\text{RMo}_4\text{O}_{16}$ 材料 (R: La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb, Eu) も顕著な導電性を示すことを明らかにした。

研究成果・文献: Y. Yasui, K. Kojima, K. Fujii, K. Mori and M. Yashima, High Oxide-Ion Conduction in Rb-Containing Oxides. *Chemistry of Materials*, 37 (3), 1231-1243 (2025).

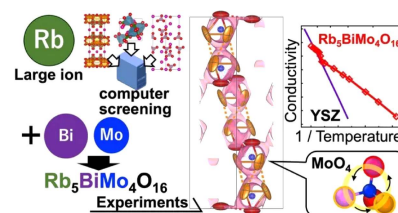


図1 サイズが大きな Rb を含む酸化物 495 個の結晶学データについて、コンピュータスクリーニングを行い、選定したパルミエライト型酸化物 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ 試料を合成した。 $\text{Rb}_5\text{BiMo}_4\text{O}_{16}$ は既存の材料 YSZ より高い酸化物イオン伝導度を示した。その原因は、 MoO_4 の回転、酸素の大きな異方性熱運動、 MoO_4 の配列と酸化物イオンの拡散経路の形成、酸素原子を挟む陽イオン間距離が長いことにある。©文献の著者ら (2025)。

東京科学大学 教授、八島正知、連絡先 〒152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W4-17, E-mail: yashima@chem.sci.sct.ac.jp HP: <http://www.yashima.chem.sci.sct.ac.jp/index.php>

[2025 年 5 月 23 日]

ガラス中の中距離秩序がボゾンピークを規定 —弾性不均一性の相関長が FSDP スケールに一致—

ガラスは一見無秩序な原子集団であり、結晶のような明確な周期構造を持たないが、実際には中距離スケールの構造秩序が存在し、「第一尖鋭回折ピーク (FSDP)」として観察される。一方、ガラスには、テラヘルツ (THz) 帯域において結晶の音波のモデルでは説明できない過剰な振動モード「ボゾンピーク (BP)」の存在が知られている。BP はガラス特有の低い熱伝導性や特異な機械的特性、さらに THz 帯域の光学特性など、多くの物性に密接に関与しているが、その起源は長年明らかでなかった。特に、FSDP に代表される中距離秩序と BP の具体的な関係性は不明確であった。

この問題に対し、筑波大学数理工学系の森龍也助教授らの研究グループは、ガラス内部の弾性率の空間的なゆらぎに着目し、不均一弾性体理論に基づく理論解析を行うことで、BP の振動特性を定量的に説明することに成功した。その結果、BP の発生はガラスの最大構造相関長である FSDP と密接に関連していることがわかった。

た。特に、ガラス内の弾性不均一性の空間相関長が、FSDP で示される構造秩序のスケールとよく一致し、そのスケールが BP の振動周波数を決定づける重要な要因となることを明らかにした。

さらに、シリカガラスをはじめとする代表的な無機ガラスや、有機ガラスの代表例であるグリセロールなど複数の材料系で同様の関係を検証し、異なる種類のガラス間でも普遍的な関係性が成立することを示した。また、分子動力学シミュレーションによる単純なモデルガラスや空隙を含むゲル状非晶質材料など、多様な系でも同じ機構で説明可能であることを確認した。これらの結果から、FSDP で特徴づけられる中距離構造が弾性不均一性を介して、BP 発生の普遍的な起源となっている可能性が強く示唆された。

本成果は、ガラス特有の振動異常現象である BP の理解を大きく進めるものであり、将来的には BP を積極的に制御した新たなガラス材料の開発につながる可能性がある。

本研究成果は、2025 年 3 月 20 日に英国科学誌「Scientific Reports」誌に掲載された (<https://doi.org/10.1038/s41598-025-94454-8>)。

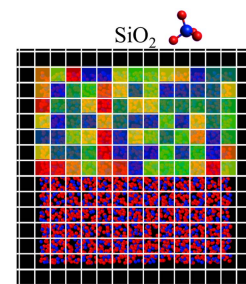


図 シリカガラスの原子構造上に示した弾性不均一性の空間スケールと弾性率の空間的ゆらぎの模式図。

筑波大学・数理工学系・物質工学域、助教、森龍也 連絡先 〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1 E-mail: mori@ims.tsukuba.ac.jp URL: https://www.ims.tsukuba.ac.jp/~mori_lab/index.html

[2025 年 5 月 26 日]

新物質を見つけるための地図を機械学習で 開発して公開

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 (NIMS) の桂ゆかり主任研究員らの研究グループは、新物質を見つけるための地図「元素反応性マップ」を開発・公開した。実験室で利用可能な 80 元素について、3 種類以内の元素の組 (計 86320 組) における化合物の生成可能性を機械学習によって 0-1 の範囲で予測し、3000 組以上の新物質のありかを提案するとともに、例として 2 種類の新規相の合成を報告した。[*Chem. Mater.* 37, 2097-2105 (2025).]

無機化合物は複数元素を反応させることで合成されるが、新物質が見つかる可能性のある元素の組が予想できれば、実験によって効率よく新物質を見つけられる。だが、結晶構造データベースにない元素の組を試すだけでは、研究者が見落としていただけて実際には反応する元素の組と、過去に研究者が試したけれども反応しなかった元素の組を区別することが難しい。

そこで、3 元素を含む結晶相の有無を機械学習することで元素反応性を予測し、これを既知

化合物の有無とともに表示した 80×80 のグリッド状の「元素反応性マップ」80 枚を開発して、インタラクティブな Web システムとして公開した。このマップは、3 万以上の無機化合物の結晶構造データの機械学習によって作成しており、誰でも、無料でアクセスできる。 (<https://erm.starrydata.org/>)

新規相の存在が有望された元素の組について実験を行うと、固溶体を含む数十種類の新規相が合成できた。たとえば反応性スコアが 0.9866 であった Co-Al-Ge の組では、新規相 Co (Al, Ge) や、 Co_2 (Al, Ge)₃ が見つかった。これらの母物質である CoGe, Co_2Ge_3 , Co_2Al_3 はいずれも常圧不安定であり、固溶体化によって初めて常圧で安定化できた。CoGe は磁気スキルミオンや熱電材料としても期待される B20 構造の物質であり、応用可能性が広がった。

またこの元素反応性マップは、反応しにくい元素の組の一覧でもあるため、容器や電極などとして利用できる元素の提案にも利用できる。本マップで採用したグリッド型表示は、「材料特性が実用レベルに達する元素の組」などを機械学習で一覧表示できるので、新材料開発研究

の加速への活用が期待できる。

本研究は、東京大学の稲田祐樹 (2024 年 3 月に博士課程修了)、産業技術総合研究所の藤岡正弥主任研究員、東北大学の森戸春彦准教授、京都工芸繊維大学の菅原徹教授と共同で、科学技術振興機構 (JST) の CREST (JPMJCR19J1) の一環として行われた。

連絡先 (国研) 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター 材料設計分野 材料モデリンググループ 桂ゆかり 〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1 E-mail: KATSURA.Yukari@nims.go.jp URL <https://researchmap.jp/ykatsura> (国研) 産業技術総合研究所 マルチマテリアル研究部門 藤岡正弥 〒463-8560 愛知県名古屋市中山区桜坂 4-205 E-mail: m.fujioka@aist.go.jp URL: <https://researchmap.jp/mfuijoka0928>

[2025 年 5 月 26 日]