17-2-5 結晶物性研究室

最近の研究課題とその取り組みの概要

本研究室では、量子ビーム回折・分光、第一原理計算、物性測定により、物質の機能を利用したエネルギー関連の研究に取り組んでいる。また鉱物の研究も行っている。以下研究内容について記す。

(1) 海洋資源ナトリウムを有効利用する強誘電体設計と合成

本研究室においてペロブスカイト強誘電体固溶体の分子軌道計算を行ったところ、豊富な海洋資源であるナトリウムを含む結晶は、高い機能を有する強誘電体である可能性が示唆された。よって現在、その実証実験、合成法の開発、ならびに素材作製に取り組んでいる。

(2) 強誘電体単結晶直方体微細粒子の合成と集積化

酸化物強誘電体は直方体の単結晶微細粒子として合成できる。微細粒それぞれの機能は微小であるが、それらを多数並べて一体に集積させると集積体の機能は大きくなる。本研究では並べ方に規則性や周期性を与える技術開発と、それらを制御する技術開発、ならびに開発した技術による強誘電体の機能開拓の研究を行っている。

(3) 強誘電体ナノキューブのポリマーとの複合化

酸化物強誘電体は脆いので、外場がする圧電作用により容易に破損することが危惧される。本研究では、酸化物を柔軟な強誘電ポリマーと複合化して、圧電性を損なうことなくフレキシブルに圧電応答する複合体を開発する。

(4) 液体ナトリウムナノ流体中のコアシェル構造を持つ金属ナノ粒子の研究

新型原子炉である高速増殖炉では、熱伝達媒体として液体ナトリウムが用いられる。その 伝達過程における外気との高活性化反応は大変危険なので、液体ナトリウムの機能を損なう ことなく活性を抑制する必要がある。そのために、液体ナトリウム中に金属ナノ粒子を分散 させ、ナトリウムと粒子を粒子表面で事前に反応させて活性を抑制した。このようにしてで きた流体はナノ流体と呼ばれる。本研究では、金属ナノ粒子の表面の合金化と修飾により、 液体ナトリウム中における粒子の分散状態を制御し、ナノ流体の化学活性を徹底的に抑制す る。

(5) 金属中の水素の透過チャンネルの統一的理解

水素はクリーンなエネルギーとして注目されているので、水素を貯蔵する物質や、混合ガスから水素をフィルタリングするための物質が盛んに研究されている。本研究では、金属の基本的な結晶構造に着目し、結晶構造中における水素を透過させやすいチャンネルを探索して、結晶構造と水素透過能との関係を、統一的に理解する。

(6) ペロブスカイト太陽電池

ペロブスカイト太陽電池は、よく知られるシリコンベースの太陽光発電パネルより、力学的にフレキシブルで軽いので、ハンドリングしやすく実装が容易であると言われている。本研究室では、シミュレーションと実験を組み合わせて、新エネの大規模化に資するペロブスカイト太陽電池を開発する。

(7) 鉱物の微細組織解析

Ca-Mg-Fe 輝石と呼ばれる一連の鉱物は、固溶体を形成しているため、温度の低下に伴い微細組織を形成することが知られている。また、これらの鉱物群は地球だけでなく、アポロ宇宙船が持ち帰った月の岩石や火星の隕石からもその存在が見出されている。したがって、Ca-Mg-Fe 輝石の研究は固体地球惑星の成因の解明のための基礎データを提供してきた。このように広範囲の起源の中で、我々は特に南極大陸に産出する変成岩中の輝石に着目した研究を行っている。これらの変成岩の中でも特に超高温変成岩と呼ばれるグループは、数億年前にゴンドワナ大陸をはじめとする超大陸の離散集合を経験したと考えられているため、その解析は大陸地殻の形成史を紐解く上で重要な基礎データとなると考えられる。そのような Ca-Mg-Fe 輝石が示す微細組織からは地質温度計と呼ばれる手法を用いて岩石が経験した温度を推定することができる。ただし、その中でイオンの席占有率については、仮定のもとで推定が行われているのが現状である。そこで、アルケミ法と呼ばれる手法を用いて席占有率を実測する試みを行っている。現在は、近年、目覚ましい発展を遂げている収差補正透過型走査透過電子顕微鏡を用いた原子マッピングによるデータが、重要な指標になると考え、そのデータ収集に重点的に取り組んでいる。

(8) 化合物半導体の構造解析

化合物半導体はLEDなどのデバイスの材料として期待されている。本研究では結晶欠陥の詳細な構造解析を目指した研究を行なっている。具体的には結晶化条件の違いにより生じる X 線回折パターンの特徴がどのような結晶構造を反映しているかを解明することを目的とし透過型分析電子顕微鏡による微細構造解析ならびに化学分析を行なっている。現在のところ、目的とする原子マッピング像の取得には至っていないものの、高倍率のエネルギー分散型分光分析によるマッピング像からは、結晶欠陥中に、当初、予想した酸素原子は存在せず、空孔となっている可能性がある。そこで現在はその点を突き止める研究を進めている。

キーワード:結晶学・量子ビーム・回折・散乱・分光・相転移・物性・強誘電体・圧電体・ ナノ粒子・ナノ流体・第一原理計算・エナジーハーベスティング・圧電ポリマー・複合材・ 水素・鉱物

研究室の構成員

武末 尚久 (教授) · Ph.D.

藤 昇一(助教)・博士(理学)

2022年度の大学院生および卒論生の人数と研究テーマ

D1:1名 M3:1名 M1:2名 4年次生:4名

教員の担当科目

武末 尚久:(学部)物理学基礎ゼミナール、振動波動論 I、振動波動論 I、結晶物理学、 物理科学研究 I、物理科学研究 II、卒業論文、物理学 A、力学 B (大学院) X線結晶学特論、物性物理学講究 I·II、物性物理学実験

藤 昇一:(学部)物理科学実験 I、物理科学実験 II、物理学基礎ゼミナール

教員の所属学会

武末 尚久:日本セラミック協会、日本金属学会、日本物理学会

藤 昇一:日本鉱物科学会、日本顕微鏡学会

最近5年間の学術論文

- Chenxu Yu, Jiwen Xu, Yiming Zhang, Zhaowen Zhang, Chanatip Samart, <u>Naohisa Takesue</u>, Pengyuan Fan, Haibo Zhang, Hua Tan, "Flexible piezoelectric sensor based on ATO/BNT multi-layers with high sensitivity, thermal healing and driving performance", J. of Alloys and Compounds volume 985, 170509: https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2023.170509 (査読あり)
- Ya Lu, Haibo Zhang, Huabin Yang, Pengyuan Fan, Chanatip Samart, <u>Naohisa Takesue</u> and Hua Tan, "SPS-Prepared High-Entropy (Bi_{0.2}Na_{0.2}Sr_{0.2}Ba_{0.2}Ca_{0.2})TiO₃ Lead-Free Relaxor-Ferroelectric Ceramics with High Energy Storage Density", Crystals 2023, 13(3), 445: https://doi.org/10.3390/cryst13030445 (査読あり)
- Kai Liu, Fafu Liu, Wu Zhang, Zhanming Dou, Weigang Ma, Chanatip Samart, Naohisa Takesue, Hua Tan, Pengyuan Fan, Zuo-Guang Ye, Haibo Zhang", Design and development of outstanding strain properties in NBT-based lead-free piezoelectric multilayer actuators by grain-orientation engineering", Acta Materialia Volume 246 (2023): https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.118696 (査読あり)
- Shuaikang Huang, Kai Liu, Wu Zhang, Bing Xie, Zhanming Dou, Zilin Yan, Hua Tan, Chanatip Samart, Suwadee Kongparakul, Naohisa Takesue and Haibo Zhang, "All-Organic Polymer Dielectric Materials for Advanced Dielectric Capacitors: Theory, Property, Modified Design and Future Prospects", Polymer Reviews 62 (2022): https://doi.org/10.1080/15583724.2022.2129680 (在読あり)
- K. Liu, Y. Liu, W. Ma, <u>N. Takesue</u>, C. Samart, H. Tan, S. Jiang, Z. Dou, Y. Hu, S. Zhang, H. Zhang, "Realizing Enhanced Energy Density in Ternary Polymer Blends by Intermolecular Structure Design", Chemical Engineering Journal (2022): https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.136980 (査読あり)
- Lian Cheng, Kai Liu, Huayun Gao, Zhongming Fan, Naohisa Takesue, Heming Deng, Haibo Zhang, Yongming Hu, Hua Tan, Zilin Yan, Yang Liu, "Energy storage performance of sandwich structure composites with strawberry-like Ag@SrTiO3 nanofillers", Chemical Engineering Journal 435, 135064 (2022): https://doi.org/10.1016/j.cej.2022.135064 (査読あり)
- H. Tan, Z. Yan, S. G Chen, C, Samart, <u>N. Takesue</u>, D. Salamon, Y. Liu, H. Zhang, "SPS prepared NN-24SBT lead-free relaxor-antiferroelectric ceramics with ultrahigh energy-storage density and efficiency", Scripta Materialia 210(15), 114428 (2021): https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.114428 (査読あり)
- L. Li, P. Fan, M. Wang, <u>N. Takesue</u>, D. Salamon, A. N. Vtyurin, Y. Zhang, H. Tan, B. Nan, Y. Lu, L. Liu, H. Zhang, "Review of lead-free Bi-based dielectric ceramics for energy-storage applications", Journal of Physics D: Applied Physics 54(29), 293001 (2021): https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6463/abf860 (査読あり)
- N. Takesue, J. Saito, "Molecular Orbital Calculation of Lead-Free Perovskite Compounds for Efficient Use of Alkaline and Alkaline Earth Metals", *Crystals* 2020, 10(11), 956; https://doi.org/10.3390/cryst10110956 (査読あり)
- J. Fujitani, K. Watanabe, J. Saito, and <u>N. Takesue</u>, "Molecular orbital calculation on lead-free perovskite dielectrics for effective utilization of ubiquitous alkaline and alkaline-earth metals", *Fukuoka Univ. Sci. Rep.* Special issue to commemorate the 50th anniversary of faculty of science 50(2), 69-77 (2020): ISSN 0386-118X:

 <a href="https://fukuoka-u.repo.nii.ac.jp/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=5112&item_no=1&page_id=13&block_id=57 (査読あり)
- Karol Golasiński, Elżbieta Pieczyska, Michał Maj, Sławomir Mackiewicz, Maria Staszczak, Zbigniew Kowalewski, Leszek Urbański, Maciej Zubko and <u>Naohisa Takesue</u>, "Anisotropy of Gum Metal analysed by ultrasonic measurement and digital image correlation", *Materials*

Science and Technology 36(9), 996-1002 (2019): https://doi.org/10.1080/02670836.2019.1629539 (査読あり)

最近5年間の学術著書

武末 尚久, 斉藤淳一, 「エレクトロニクス用セラミックスの応用、開発と評価手法」, 第2章第3節, 分筆, 技術情報協会(2020年8月出版).

最近5年間の学術国際会議での発表

- K. Kiba, J. Kudoh, N. Matsuo, J. Saito, SAITO, S. Toh, N. Takesue, Integration of Barium Titanate Nanocrystals with Stirring in Soft media, PACRIM13(Oct. 27, 2019 Nov. 1, 2019, Okinawa)
- J. Kudoh, K. Kiba, N. Matsuo, J. Saito, S. Toh, N. Takesue, Barium Titanate Nanocrystals SolidSolutionized, PACRIM13(Oct. 27, 2019 - Nov. 1, 2019, Okinawa)
- N. Matsuo, K. Kiba, J. Kudoh, J. Saito, S. Toh, SAITO, N. Takesue, Barium Titanate Nanocrystals SolidSolutionized with Barium Zirconate and Calcium, PACRIM13(Oct. 27, 2019 - Nov. 1, 2019, Okinawa)
- N. Takesue, K. Kiba, J. Kudoh, N. Matsuo, J. Saito, Behavior of Rigid Cubes in Soft Mediums in Agitation or under Compression, Materials Challenges in Alternative and Renewable Energy 2019(August 19-23, Jeju Island, Korea)
- K. Kiba, J. Kudoh, N. Matsuo, J. Saito, <u>N. Takesue</u>, Synthesis and Integration of Barium Titanate Nanoparticles, Materials Challenges in Alternative and Renewable Energy 2019(August19-23, Jeju Island, Korea)
- J. Kudoh, K. Kiba, N. Matsuo, J. Saito, N. Takesue, Synthesis and Solid Solutionaization of Nanoparticles of Barium Titanate with Barium Zirconate, Materials Challenges in Alternative and Renewable Energy 2019(August19-23, Jeju Island, Korea)
- N. Matsuo, K. Kiba, J. Kudoh, J. Saito, N. Takesue, Synthesis and Solid Solutionaization of Nanoparticle of Barium Titanate with Barium Zirconate and Calcium Titanate, Materials Challenges in Alternative and Renewable Energy 2019(August19-23, Jeju Island, Korea)
- Kazuki Asakura, Kazumasa Kiba, Jun-ichi Saito, <u>Naohisa Takesue</u>, Experimental Study of Solid Solutions of ferroelectric Bismuth Sodium Titanate, GREEN2018, APSMR, Dec.21–24 (2018) Taipei.
- Kazumasa Kiba, Kazuki Asakura, Jun-ichi Saito, <u>Naohisa Takesue</u>, Synthesis of Nanocube Crystals of Barium Titanate toward The integnation through Stirring, GREEN2018, APSMR, Dec.21–24 (2018) Taipei.
- Kazuki Asakura, Kazumasa Kiba, Jun-ichi Saito, Naohisa Takesue, Study of Molecular Orbital Calculation on Electric Conduction and Insulation of Bismuth Ferrite and Its Solid Solutions, GREEN2018, APSMR, Dec.21–24 (2018) Taipei.
- Golasiński K., Pieczyska E.A., Mackiewicz S., Staszczak M., Zubko M., <u>Takesue N.</u>, Analysis Gum Metal crystallographic texture and misorientation in correlation to its mechanical behavior, CAC, XXIV CONFERENCE ON APPLIED CRYSTALLOGRAPHY, 2018-09-02/09-06, Arłamów (PL), No.OY1-5, pp.37-38, 2018
- Golasiński K., Pieczyska E., Maj M., Staszczak M., <u>Takesue N.</u>, Superelastic-like behavior of Gum Metal under compression inspected by infrared thermography, ESOMAT 2018, 11th European Symposium on Martensitic Transformations, 2018-08-27/08-31, Metz (FR), pp.84, 2018
- Pieczyska E., Golasiński K., Maj M., Staszczak M., Mackiewicz S., Zubko M., <u>Takesue N.</u>, Gum metal in compression investigation of mechanical anisotropy caused by texture, ICEM 2018, 18TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON EXPERIMENTAL MECHANICS, 2018-07-01/07-05, BRUKSELA (BE), No.454, pp.1-2, 2018
- Pieczyska E., Golasiński K., Maj M., Mackiewicz S., Staszczak M., Zubko M., <u>Takesue N.</u>, Mechanical anisotropy of Gum Metal analyzed by ultrasonic measurements and digital image correlation, SolMech 2018, 41st SOLID MECHANICS CONFERENCE, 2018-08-27/08-31, Warszawa (PL), pp.352-353, 2018

最近5年間の代表者としての学外資金導入実績

最近5年間の代表者としての学内資金導入実績

武末 尚久:

- 理学研究科高度化推進事業タイプ I 外国人研究員等特別招聘「圧電体と圧電ポリマーの低環境負荷応用の研究」・50 万円 (2022 年度)・Haibo Zhang 教授 (華中科技大材料工学科)・コロナ流行のため活動中止
- 領域別研究、「水素エネルギー」・30万円 (2021年度)・2021年4月1日~2024年3月31日 (代表)
- 理学研究科高度化推進事業タイプ I 外国人研究員等特別招聘「エネルギー源となる物質の探索」・50 万円 (2021 年度)・Sungkyun Park 教授 (釜山大学物理学科)・コロナ流行のため活動中止
- 理学研究科高度化推進事業タイプ I「強誘電体固溶体ナノキューブの超高配向高密度集積化の手法の開発と応用」・500万円(2020年度)・2020年度4月1日~2021年3月31日(代表)
- 理学研究科高度化推進事業タイプ I 外国人研究員等特別招聘「エネルギー源となる物質の探索」・50万円 (2019 年度)・2020 年 2 月 19 日~2020 年 2 月 25 日・Sungkyun Park 教授 (釜山大学物理学科)・コロナ流行のため滞在中断
- 理学研究科高度化推進事業タイプ I 外国人研究員等特別招聘「赤外イメージング法を用いたゴムメタルの変形挙動解析」・70万円 (2018年度)・2019年2月24日~2019年3月26日・Elzbieta Pieczyska 教授 (ポーランド科学アカデミー)
- 領域別研究、「エナジーハーベスティング」・30万円 (2018年度)・2018年4月1日~2021年3月31日 (代表)

最近5年間の学会等学術団体における役職など

Guest Editor, Crystals, MDPI, Nov. 2020-, Basel, Switzerland.

Co-organizer and session chair, GREEN2018, APSMR, Dec.21-24 (2018) Taipei.

最近5年間の一般向け論文と著書、行政報告書など

藤 昇一:文部科学省微細構造解析プラットフォーム・九州大学ナノマテリアル開発のため の超顕微解析共用拠点成果報告書、令和2年度 文部科学省微細構造解析プラットフォーム・九州大学ナノマテリアル開発のため の超顕微解析共用拠点成果報告書、令和元年度

最近5年間の一般(非学術)集会での発表論文

該当なし

最近5年間の学術団体以外の団体での啓蒙活動や社会貢献活動とその役職など 該当なし

その他特筆事項

武末尚久 日本原子力機構との共同研究「ナトリウム含有ペロブスカイト型圧電セラミックスに関する基礎的研究共同研究」2022年度-2024年度、共同研究契約締結

武末尚久,原子力産業新聞,2021年7月8日記事掲載,

https://www.jaif.or.jp/journal/japan/9021.html

- 武末尚久 日本原子力機構との共同研究「ナトリウム含有ペロブスカイト型圧電セラミックスに関する基礎的研究共同研究」2019年度-2021年度、共同研究契約締結
- 武末尚久 日本原子力機構との共同研究「ナトリウム含有ペロブスカイト型圧電セラミック スに関する基礎的研究共同研究 | 2018 年度、共同研究契約締結
- 武末尚久 日本原子力機構との共同研究「ナトリウム含有ペロブスカイト型圧電セラミックスに関する基礎的研究共同研究」2017年度
- 武末尚久 ポーランド科学アカデミーProf. E. Pieczyska との共同研究「赤外分光イメージング法を用いたゴムメタルの変形過程」2015年度から2018年度まで
- 多根正和,原昌司,矢野壮,中野貴由,新家光雄,中嶋英雄,倉本繁,武末尚久:グローバル COEプログラム「構造・機能先進材料デザイン教育研究拠点」論文賞受賞(共著)「Low Young's modulus in Ti-Nb-Ta-Zr-O alloys: Cold working and oxygen effects」 大阪大学、大阪、2012年2月14日