

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	Ba7Nb4MoO20系材料の発見と二量体を介した 超高速イオン伝導機構
Title(English)	
著者(和文)	作田祐一
Author(English)	Yuichi Sakuda
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12644号, 授与年月日:2024年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:八島 正知,腰原 伸也,河野 正規,谷口 耕治,植草 秀裕
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12644号, Conferred date:2024/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	要約
Type(English)	Outline

博士学位論文

$\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ 系材料の発見と二量体を介した
超高速イオン伝導機構

東京工業大学

理学院化学系化学コース

作田 祐一

指導教員 八島正知 教授

2024 年 1 月 30 日

目次

第一章 序論	4
1.1. イオン伝導体の概要	4
1.2. 酸化物イオン伝導体	5
1.3. プロトン伝導体	7
1.4. デュアルイオン伝導体	7
1.5. イオンの移動機構について	9
1.6. 酸化物イオンの移動機構	11
1.7. プロトンの移動機構	14
1.8. 六方ペロブスカイト関連構造と四面体	16
1.9. $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ 系材料	19
1.10. 本研究の目的	24
1.11. 参考文献	25
第二章 $\text{Ba}_7\text{Nb}_4\text{MoO}_{20}$ 系材料の Cr^{6+} ドーピングによる酸化物イオン伝導度の向上とプロトン伝導度の抑制	34
2.1. 概要	34
2.2. 序論	35
2.3. 研究手法	36
2.4. 結果・考察	38

2.5. 結論	54
2.6. 参考文献	55
第三章 六方ペロブスカイト関連酸化物における超高速イオン伝導の二量体を介した協同機構	59
3.1. 概要	59
3.2. 序論	60
3.3. 研究手法	63
3.3. 結果・考察	68
3.4. 結論	135
3.5. 参考文献	136
第四章 総括	142
4.1 本研究の概要と将来展望	142
4.2 主な研究業績	146
4.3 謝辞	149

4.3 謝辞

本研究を遂行し博士論文をまとめるにあたって、多くの方々からご助力を頂きましたことをこの場を借りて心より感謝申し上げます。特に、指導教員の八島正知教授からは日々の研究の御指導、打ち合わせでの論文の作成、ゼミ等を通しての進捗の確認や今後の研究の方針を相談していただきました。多くの場面で大変お世話になりました。

本博士論文を審査していただくにあたり、腰原伸也教授、河野正規教授、谷口耕治教授、植草秀裕准教授にご指導いただきましたことを厚くお礼申し上げます。

藤井孝太郎助教からは結晶構造解析や計算の相談、さらには学外施設での測定実験で数々のご助力を頂きました。村上泰斗特任助教には論文や申請書の作成にあたり、様々なご指導を頂きました。お二人には感謝申し上げます。

インペリアル・カレッジ・ロンドンの Mudasir.A. Yattoo 博士と Stephen. J. Skinner 教授には共同研究並びに多くのディスカッションの機会を設けていただきました。お二人には感謝申し上げます。

また、本研究を遂行するにあたり、非常に多くの方々に実験・計算・解析等のご助力を頂きました。AIMD 計算を手伝ってくださった ANSTO の Maxim Avdeev 博士、中性子回折測定を手伝ってくださった ANSTO の James R. Hester 博士、高エネ研の萩原正人博士、東北大学の池田陽一博士・南部雄亮博士、TG-MS 測定を手伝ってくださった東工大オープンファシリティーセンター分析部門の須田勝美氏、ラマンスペ

クトル測定を手伝ってくださった東工大オープンファシリティーセンター分析部門の多田大博士、計算を行うにあたり多くの助言をいただいた株式会社モルシスの千葉貢治博士、巾崎潤子研究員、本研究で解析を行うにあたりソフトをご提供くださった物質・材料研究機構・物質研究所の泉富士夫博士・門馬綱一博士、高エネルギー加速器研究機構の神山崇博士・富安亮子博士・米村雅雄博士。

卒業された先輩方を含む全ての八島研究室メンバーの皆さまには、研究室内での解析や実験、ゼミを通しての様々な議論に加えて、研究室外での研究発表や実験施設等多くの場面で大変お世話になりました。感謝申し上げます。