

令和元年6月14日現在

機関番号：12608

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2018

課題番号：17K17717

研究課題名(和文) 酸化物イオン伝導体のマテリアルズ・インフォマティクスの開拓

研究課題名(英文) The development of materials informatics on oxide-ion conductor

研究代表者

丹羽 栄貴 (Niwa, Eiki)

東京工業大学・理学院・特任助教

研究者番号：10707962

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：酸化物イオン伝導体は、環境・エネルギー分野の諸問題の解決には必要不可欠であり、新規の高いイオン伝導度を持つ酸化物の開拓は強く望まれている。本研究では、結晶構造データベースに収録されている酸化物の構造情報から結合原子価エネルギー(BVE)計算と密度汎関数理論(DFT)計算を用いて、効率的な新規酸化物イオン伝導体の探索法の開拓を目指す。これらの計算からピックアップした酸化物を実際に作製し、結晶構造や酸化物イオン伝導度などの基礎物性を評価する。提案した計算化学アプローチと実験により数種類の新しい構造型の酸化物イオン伝導体を発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

結合原子価に基づくエネルギー(BVE)計算は、計算手順が単純で1つの結晶構造データ当たりの計算時間が非常に短い。数多く報告されている酸化物の結晶構造データから高いイオン伝導度を有する酸化物をピックアップするのに適している。このイオン伝導体の探索法が開拓できれば、新たなイオン伝導体を効率よく探索できると考えられる。さらに、導電種が酸化物イオンや酸素欠損ではなく、他のイオン伝導体にも活用させることができ、電気化学デバイスの開発に大きな波及効果があると考えられる。

研究成果の概要(英文)：Developments of solid oxide-ion conductors have led to various energy and environmental technologies such as solid oxide fuel cells, oxygen separation membranes and gas sensors. We have explored new structural-type oxide-ion conductors using the bond valence-based energy (BVE) and functional density theory (DFT) calculations. Some oxides were picked up as candidate materials for oxide-ion conductors. These oxides were prepared with solid state reaction method and their characters such as the crystal structure and electrical conductivity were investigated. Optimal dopants of target oxide-ion conductors were also explored and the enhancement of their oxide-ion conductivity was tried. We discovered several kinds of new structure-type oxide-ion conductors using computational chemistry approach and experiments.

研究分野：化学

キーワード：酸化物イオン伝導体 結晶構造解析 電気伝導度 イオン伝導経路 結合原子価法 SOFC

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

酸化物イオン伝導体は、クリーンなエネルギー変換材料や環境負荷低減材料など地球環境における諸問題の解決には必要不可欠であり、高いイオン伝導度を持つ酸化物の新規材料探索及び発見は、大きな需要があると考えられる。これまで報告されている高いイオン伝導度を持つ酸化物は、 ZrO_2 や Bi_2O_3 を母材料とした蛍石型や $(La,Sr)MeO_3$ (Me: Fe, Mn, Co)や $LaGaO_3$ 系などのペロブスカイト型、もしくはこれらの関連構造(パイロクロア型、 K_2NiF_4 型、ダブルペロブスカイト型など)にほぼ限られていた。代表的な酸化物イオン伝導体を利用した電気化学デバイスとして、固体酸化物形燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell, SOFC)の電解質が挙げられるが、既存の候補材料では作動温度が高いことが問題となっている。候補材料の組成制御や電池セルのスタックデザインを工夫することで作動温度の低温化が試みられているが、ここ最近、既存の構造ファミリーの酸化物イオン伝導体の組み合わせではこれ以上の性能向上は難しく、何かしらのセレンディピティーが必要な段階にきているといっても過言ではない。本研究室では、これまでイオン伝導性が検討されてこなかった構造型の酸化物について ICSD(Inorganic Crystal Structure Database)などの結晶構造データベースに収録されている構造情報から結合原子価に基づくエネルギー(Bond Valence-based Energy, BVE)計算を用いて、過去に酸化物イオン伝導性が報告されていない新しい結晶構造型を効率的に発見できるか検討してきた(K. Fujii et al., *J. Mater. Chem. A* **3** (2015) 11985.)。BVE計算とは、2011年にAdamsとRaoによってBond Valence Sumを応用させた計算手法である(*Phys. Status Solidi A* **208** (2011) 1746.)。Bond Valence Sumは、結晶構造内のあるイオンの実効的な酸化数を近接するイオンの価数と結合距離から見積もる手法である。しかしながら、酸化物イオンのBond Valence Sumから見積もるポテンシャルは、近接するカチオンとのクーロン相互作用から実効的な酸化数を見積もっているが、酸化物イオン同士のクーロン反発は考慮されていない。BVE計算では、これらの考慮し、さらに経験的なパラメータを導入することで、結晶構造全体のあらゆる位置での酸化物イオンの存在のしやすさ(ポテンシャル)を見積もっている。この計算手法を用いて見積もった結果のエネルギー等値面を描画するによって、結晶構造内にエネルギー障壁の低い酸化物イオンの伝導経路が存在するか否かを確認することができる。Fig. 1に例として2種類の結晶構造図と同じ結晶投影面からのエネルギープロファイルを示す。どちらの物質についても、最安定エネルギー(完全結晶での酸素サイトのBVE)から+1.5eVにおけるエネルギー等値面を示した。(a)の $NaBaScSi_2O_7$ では、エネルギー等値面として示した図形が結晶構造内で連結しており、障壁高さが比較的低い酸化物イオンの伝導経路の存在が示唆された。一方、(b)の $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ では、エネルギープロファイルが途中で途切れているのが確認でき、酸化物イオンが伝導しにくい構造型であることが示唆された。また、結晶構造図と突き合わせると、Baイオンで形成された結晶面で伝導経路が切れており、酸化物イオンが伝導しにくい原因も突き止めることが可能であることが分かる。また、このBVE計算は、分子動力学計算など他の計算化学アプローチに比べ計算手順が単純で、計算時間が短いことも利点であり、未知の結晶構造ファミリーの酸化物の構造情報から網羅的にエネルギー障壁の低い伝導経路の有無を確認することができる。

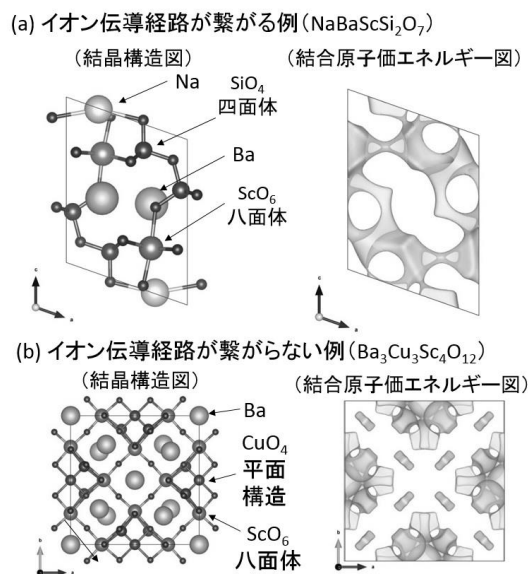


Fig. 1 $NaBaScSi_2O_7$ と $Ba_3Cu_3Sc_4O_{12}$ の結晶構造図と結合原子価エネルギー図。酸化物イオンの最安定エネルギーから 1.5eV における等値面。

2. 研究の目的

2年間の申請期間内に、上記の計算化学手法と実験を用いて、5種類程度の新しい構造型のイオン伝導体を見つけることを目指す。見出した新規のイオン伝導体の結晶構造及び導電機構を明らかにしていく。これらの計算アプローチからピックアップした候補材料の中でも実際に測定してみたところ、イオン伝導度の低い酸化物が出てくると思われるが、原因を追究して、これまでの計算アプローチでは何が足りなかったのか検討していくことで、本申請で提案するイオン伝導体の探索法をより完成度の高いものへ押し上げていく。本研究では、Scを含む123種類の結晶構造データから拡散のエネルギー障壁が比較的低い構造を有する酸化物を選択し、実際に試料合成および電気伝導性の評価を行った。元素としてScを選択した理由は、原料となる Sc_2O_3 は非常に高価で、やみくもにScを含む酸化物を作製して酸化物イオン伝導度を測定することは経済的に困難であり、計算化学アプローチによってイオン伝導性を見込める酸化物を選定してから、実験的な評価を行う今回の探索法が生かせると考えた。実際、これまで母材料としてScが含まれた酸化物の報告例はない。ドーパントとしてScを用いた酸化物イオン

伝導体としては、スカンジウム安定化ジルコニア($(\text{Sc}_2\text{O}_3)_x(\text{ZrO}_2)_{1-x}$) (S. P. S. Badwal, *Solid State Ionics* **52** (1992) 23.)や Sc-doped CaTiO_3 (S. Hashimoto et al., *Solid State Ionics* **139** (2001) 179.)などがある。また、 Sc^{3+} は Ar の同じ電子配置で閉殻構造であるため、 Sc^{3+} に起因した不純物半導体としての電子(やホール)のキャリア密度も非常に低いと考えられる。本報告書では、発見した新しい構造型の酸化物イオン伝導体の一つである $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ 系酸化物を中心に報告する。

3. 研究の方法

結晶構造データから酸化物イオンの拡散のエネルギー障壁を見積もるのに使用した結合原子価に基づくエネルギー計算には、3DBVSMAPPER (M. Sale and M. Avdeev, *J. Appl. Crystallogr.* **45** (2012) 1054.)を用いた。ピックアップした $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ は BaCO_3 、 Sc_2O_3 及び 微粒子粉末の SiO_2 を原料として固相反応法を用いて作製した。乳鉢で湿式混合した粉末を 1000°C 10 時間で仮焼し、 1280°C 10 時間で本焼した。また、イオン伝導度の向上を狙い、 $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ と $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ も同様の方法で作製した。X 線粉末回折とリートベルト法により合成した試料の生成相と格子定数を調べた。得られた試料に対し空气中で電気伝導度の温度依存性と 800°C における電気伝導度の酸素分圧依存性を測定した。試料のバンドギャップは、紫外/可視拡散反射測定で得られたスペクトルから Kubelka-Munk の式と T_{auc} プロットを用いて見積もった。

4. 研究成果

Fig. 2 に $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ 及び $\text{BaSc}_{1.9}\text{A}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ (A: Mg, Ca) の X 線回折パターンを示す。これらの試料において単斜晶系 $P2_1/m$ でほぼ全てのピークに指数付けが可能であった。 $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ と $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ の XRD パターンの指数がつかない $2\theta \approx 24^\circ$ のピークは、 BaCO_3 のメインピークであり、リートベルト解析により両サンプルの不純物量は重量比で 2% 程度であると見積もられた。不純物量は導電率測定には影響のない量であるとして、これらの試料の電気伝導性を評価した。紫外/可視拡散反射測定により見積もった $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ 、 $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ 及び $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ の光学バンドギャップは、各々 4.77 eV 、 3.76 eV 、 3.75 eV であり、測定温度範囲内では真性イオン化によるキャリア密度は非常に小さいことが明らかとなった(Fig. 3)。

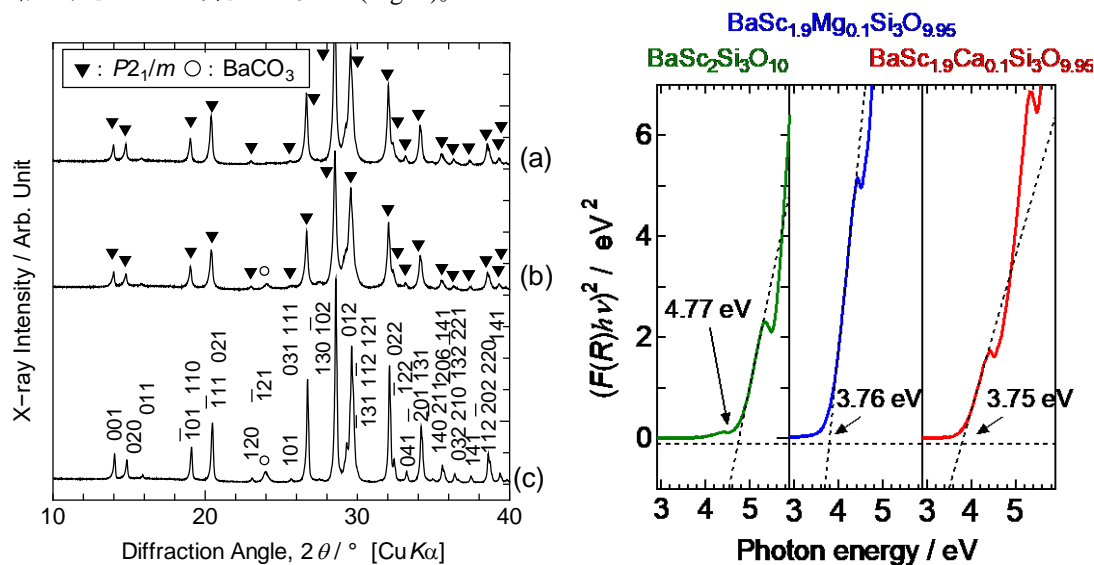


Fig. 2 XRD patterns of (a) $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$, (b) $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ and (c) $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$.

Fig. 3 Tauc plots of $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$, $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$, and $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$.

Fig. 4 に $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ 及び $\text{BaSc}_{1.9}\text{A}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ (A: Mg, Ca) の 800°C での全導電率の酸素分圧依存性を示した。 $10^{-24} \leq P(\text{O}_2)/\text{atm} \leq 1$ においてこれらの試料の全導電率は酸素分圧に依存しなかった。また、 $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ と $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ はほぼ等しい導電率であった。また、乾燥空气中と室温加湿した空气中で測定した $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ と $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ の導電率に違いはなく、プロトン伝導度も無視できるほど小さいことを確認した。したがって、これらの試料は、酸化物イオン伝導が支配的であることが強く示唆された。Fig. 5 に $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ 、 $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ 及び $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ の酸化物イオン伝導度のアレニウスプロットを示す。 Sc^{3+} の一部を Mg^{2+} あるいは Ca^{2+} に置換することにより、 1000°C にて約 19 倍イオン伝導度が増加した。この導電率の増加は、 Mg^{2+} や Ca^{2+} の置換により酸素空孔が生成し、酸化物イオン伝導のキャリア濃度が増加したことに起因すると考えられる。

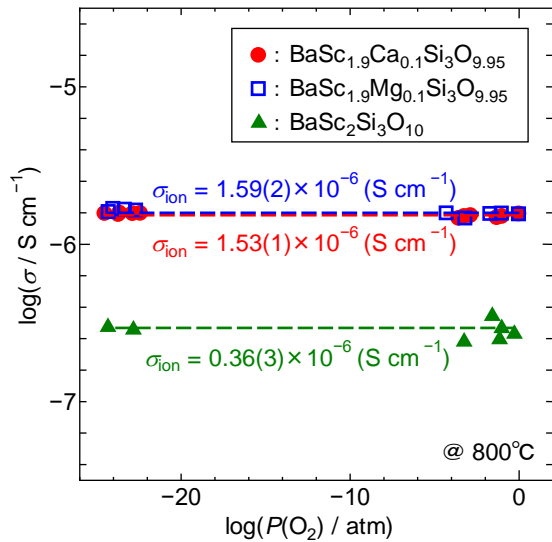


Fig. 4 $P(\text{O}_2)$ dependence of electrical conductivities of $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ and $\text{BaSc}_{1.9}\text{A}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ (A: Mg, Ca) at 800 °C.

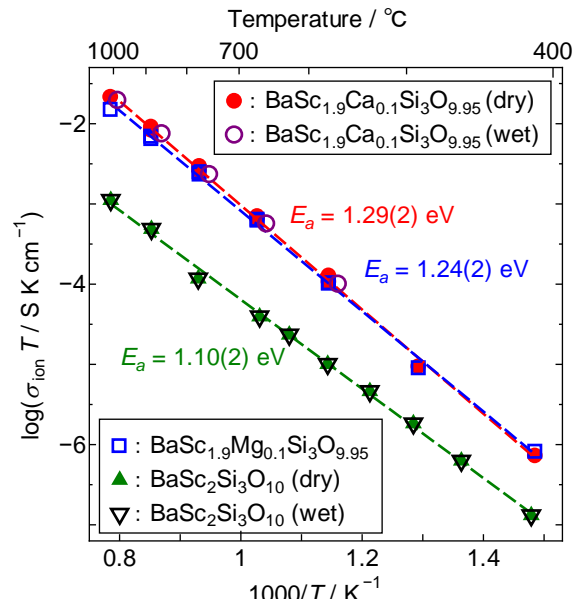


Fig. 5 Arrhenius plot of oxide-ion conductivity of $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ and $\text{BaSc}_{1.9}\text{Ca}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ in dry and wet air, and $\text{BaSc}_{1.9}\text{Mg}_{0.1}\text{Si}_3\text{O}_{9.95}$ in static air.

Fig. 5 に bc 面と ac 面を投影した結晶構造図と結合原子価に基づくエネルギー計算から見積もったエネルギープロファイルを示した。 $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ の結晶構造は、Sc が中心に存在する八面体が線共有した Sc_2O_{10} と Si を中心とした四面体が点共有で蹄型に連なった Si_3O_{10} と Ba^{2+} イオンから形成していることが分かる。エネルギープロファイルと合わせてみると、 Si_3O_{10} 周りが拡散しやすく、b 軸方向と [101] 方向には、 Si_3O_{10} から別の Si_3O_{10} へホッピングする箇所が拡散を律速しており、エネルギー障壁は、1.49eV であった。[10-1] 方向には、Ba-Ba-Sc で形成される狭い三角形の中を拡散しなければならぬため 1.91eV であり、この結晶構造は 2 次元、または 3 次元の拡散が示唆された。

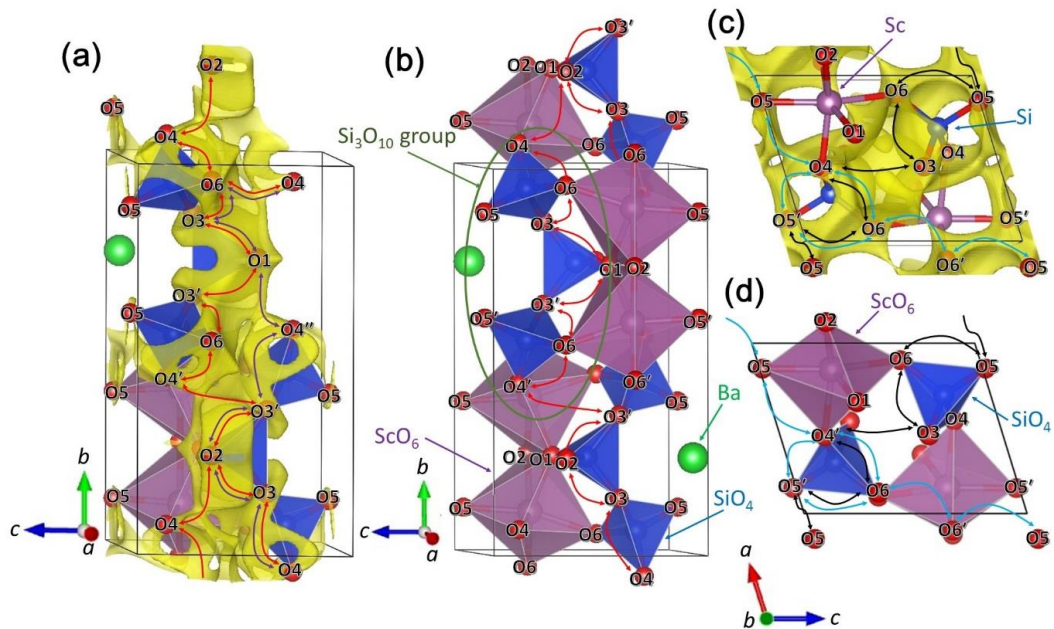


Fig. 5 (a) BV-based energy landscape for an oxide ion in $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ with the isovalue at 1.5 eV viewed along the a axis ($0.0 \leq x \leq 1.0$, $0.0 \leq y \leq 1.0$, $0.0 \leq z \leq 1.0$) with blue SiO_4 tetrahedra, purple ScO_6 distorted octahedra and green Ba cations. The red and purple lines with arrows indicate the possible migration paths in the b axis direction. (b) Crystal structure of $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ viewed along the a axis ($0.0 \leq x \leq 1.0$, $0.0 \leq y \leq 1.0$, $0.0 \leq z \leq 1.0$). (c) BV-based energy landscape for an oxide ion in $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ with the isovalue at 1.67 eV viewed along the b axis ($0.0 \leq x \leq 1.0$, $0.38 \leq y \leq 0.61$, $0.0 \leq z \leq 1.0$). The blue and black lines with arrows denote the possible migration paths in the [10-1] and [101] directions, respectively. (d) Crystal structure of $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ viewed along the b axis ($0.0 \leq x \leq 1.0$, $0.38 \leq y \leq 0.61$, $0.0 \leq z \leq 1.0$).

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 12 件)

- (1) 丹羽 栄貴「固体酸化物形燃料電池空気極材料の酸素量変化に伴う構造・機能変化の熱力学的研究」査読有, 熱測定, in press.
- (2) Masatomo Yashima, Takafumi Tsujiguchi, Kotaro Fujii, Eiki Niwa, Shunta Nishioka, James R. Hester, Kazuhiro Maeda, “Direct evidence for two-dimensional oxide-ion diffusion in the hexagonal perovskite-related oxide $\text{Ba}_3\text{MoNbO}_{8.5-\delta}$ ”, 査読有, *Journal of Materials Chemistry A* **7** (2019) 13910-13916.
- (3) Mamoru Sakai, Chengkun Wang, Takashi Okiba, Haruki Soga, Eiki Niwa, Takuya Hashimoto, “Thermal analysis of structural phase transition behavior of $\text{Ln}_2\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_{4+\delta}$ (Ln = Nd, Pr) under various oxygen partial pressures” 査読有, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* **135** (2019) 2765-2774.
- (4) Chengkun Wang, Haruki Soga, Takashi Okiba, Eiki Niwa, Takuya Hashimoto, “Construction of structural phase diagram of $\text{Nd}_2\text{Ni}_{1-x}\text{Cu}_x\text{O}_{4+\delta}$ and effect of crystal structure and phase transition on electrical conduction behavior”, 査読有, *Materials Research Bulletin* **111** (2019) 61-69.
- (5) Wenrui Zhang, Masahiro Shiraiwa, Nannan Wang, Tingli Ma, Kotaro Fujii, Eiki Niwa, Masatomo Yashima, “ $\text{Pr}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{CoO}_{3-\delta}$ perovskite as a new bifunctional electrocatalyst for oxygen reduction and oxygen evolution reactions”, 査読有, *Journal of the Ceramics Society of Japan*. **126** [10] (2018) 814-819.
- (6) Eiki Niwa, Masatomo Yashima, “Discovery of oxide-ion conductors with a new crystal structure, $\text{BaSc}_{2-x}\text{A}_x\text{Si}_3\text{O}_{10-x/2}$ (A = Mg, Ca) by screening Sc-containing oxides through the bond-valence method and experiments”, *ACS Applied Energy Materials*, 査読有, **1** (2018) 4009-4015.
- (7) Shungo Takano, Kiyoto Shin-mura, Eiki Niwa, Takuya Hashimoto, Kazuya Sasaki, “Chemical compatibility of $\text{Sr}_2\text{MgMoO}_{6-\delta}$ with representative electrolyte materials and interlayer materials for solid state fuel cells”, 査読有, *Journal of the Ceramics Society of Japan* **126** [6] (2018) 482-487.
- (8) Ryota Inoue, Kotaro Fujii, Masahiro Shiraiwa, Eiki Niwa, Masatomo Yashima, “A new structure family of oxide-ion conductor $\text{Ca}_{0.8}\text{Y}_{2.4}\text{Sn}_{0.8}\text{O}_6$ discovered by a combined technique of the bond-valence method and experiments”, 査読有, *Dalton Transactions* **47** (2018) 7515-7521.
- (9) Keigo Nakamura, Kotaro Fujii, Eiki Niwa, Yasatomo Yashima, “Crystal structure and electrical conductivity of BaR_2ZnO_5 (R = Sm, Gd, Dy, Ho, and Er) – A new structure family of oxide-ion conductors”, *Journal of the Ceramics Society of Japan*, 査読有, **126** [5] (2018) 292-299.
- (10) Wataru Uno, Kotaro Fujii, Eiki Niwa, Shuki Torii, Ping Miao, Takashi Kamiyama, Masatomo Yashima, “Experimental visualization of oxide-ion diffusion paths in pyrochlore-type $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ” *Journal of the Ceramics Society of Japan*, 査読有, **126** [5] (2018) 341-345.
- (11) Takashi Okiba, Tsubasa Sato, Fumito Fujishiro, Eiki Niwa, Takuya Hashimoto, “Preparation of $\text{Ba}_{1-x}\text{La}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ ($x=0.1-0.6$) with cubic perovskite phase and random distribution of oxide ion vacancy and their electrical conduction property and thermal expansion behavior”, 査読有, *Solid State Ionics* **320** (2018) 76-83.
- (12) Takeshi Matsukawa, Akinori Hoshikawa, Eiki Niwa, Masatomo Yashima, Toru Ishigaki, “Crystal structure of blue-colored ceria during redox reaction in a hydrogen atmosphere”, 査読有, *CrystEngComm* **20** [2] (2018) 155-158.

[学会発表] (計 93 件)

- (1) 丹羽栄貴「酸化物形燃料電池空気極材料の酸素量変化に伴う構造・機能変化の熱力学的研究」受賞講演、2018/11/1、第 54 回 熱測定討論会、東京工業大学すずかけ台キャンパス(神奈川)
- (2) 丹羽栄貴、藤井孝太郎、八島正知「結合原子価法と実験による新構造型イオン伝導体の発見」招待講演、2018/9/4、第 14 回固体イオニクスセミナー、湯沢ニューオータニ(新潟)
- (3) 丹羽 栄貴、藤井 孝太郎、八島 正知「結合原子価法により発見した新構造型酸化物イオン伝導体 $\text{BaSc}_{2-x}\text{A}_x\text{Si}_3\text{O}_{10-x/2}$ (A=Mg, Ca)の結晶構造とイオン伝導性」日本化学会第 98 春季年会、2018/3/20、日本大学理工学部 船橋キャンパス(千葉)
- (4) Eiki Niwa, Kotaro Fujii, Masatomo Yashima, “Exploration of a New Structure Family of Oxide-Ion Conductors $\text{BaSc}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}$ by the Bond Valence Method and Experiments”, 招待講演, *Collaborative Conference on Materials Research 2018*, 2018/6/25-29, Incheon (South Korea)
- (5) 丹羽栄貴「結合原子価法に依る新構造型イオン伝導体の探索」受賞講演、電気化学会第 85 回大会、2018/3/10、東京理科大学葛飾キャンパス(東京)
- (6) 丹羽栄貴、藤井孝太郎、八島正知「結合原子価法による新構造型酸化物イオン伝導体の探索」依頼講演、日本セラミックス協会 第 30 回秋季シンポジウム、2017/9/21、神戸大学(兵庫)

他 87 件

[その他]

(申請者の受賞)

- (1) 日本熱測定学会 2018 年度 奨励賞、丹羽 栄貴「固体酸化物燃料電池空気極材料の酸素量変化を伴った構造・機能変化の熱力学的解析」2018/11/1.
- (2) 電気化学会(固体化学の新しい指針を探る研究会) 2017 年度 田川記念固体化学奨励賞、丹羽 栄貴「結合原子価法による新構造型イオン伝導体の探索」2018/03/10.
- (3) 合金状態図 第 172 委員会 第 33 回研究会 Best Poster Award、丹羽 栄貴、神庭 伸吾、藤井 孝太郎、橋本 拓也、八島 正知「CO₂吸収材料Li₄SiO₄の熱力学及び反応速度的解析」2017/10/19.
(共同研究者の受賞)
- (4) 日本セラミックス協会 2019 年 年会 優秀ポスター賞、手島 広明、藤井孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「新構造型酸化物イオン伝導体 BaLaZn₃GaO₇の発見」2019/3/24-26.
- (5) 日本セラミックス協会 2019 年 年会 優秀ポスター賞、張文鋭、藤井孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「結合原子価法と実験による新構造型酸化物イオン伝導体の発見」2019/3/24-26.
- (6) The Ceramic Society of Japan Best Student Paper Award in 2018, Wataru Uno, Kotaro Fujii, Eiki Niwa, Shuki Torii, Ping Miao, Takashi Kamiyama, Masatomo Yashima, “Experimental visualization of oxide-ion diffusion paths in pyrochlore-type Yb₂Ti₂O₇”, 2019/3/24-26.
- (7) 日本結晶学会 2018 年 年会 ポスター賞、辻口 峰史、藤井 孝太郎、齋藤 圭汰、丹羽 栄貴、James R. Hester、鳥居 周輝、神山 崇、八島 正知「Ba-Mo-Nb 酸化物におけるイオン伝導経路」2018/11/10-11.
- (8) 第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 優秀ポスター発表賞、井上 遼太・白岩 大裕・藤井 孝太郎・丹羽 栄貴・八島 正知・北川 裕貴・浅見 一喜・上田純 平・田部 勢津久 「新物質 BaGdScO₄の結晶構造解析と発光特性」2018/10/15-17.
- (9) 第 8 回 CSJ 化学フェスタ 2018 優秀ポスター発表賞、矢口 寛、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、白岩 大裕、日比野 圭佑、八島 正知「酸化物イオン伝導体の新構造ファミリーBaGdInO₄の結晶構造と電気伝導」2018/10/15-17.
- (10) 日本セラミックス協会 第 31 回秋季シンポジウム 優秀講演賞、安井 雄太、松井 将洋、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「結合原子価法による新構造型酸化物イオン伝導体 Ca₃Ga₄O₉の発見」2018/9/5-7.
- (11) 日本セラミックス協会 第 31 回秋季シンポジウム 優秀ポスター賞、松井 将洋、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「新構造型酸化物イオン伝導体 Ca₂Ge₇O₁₆の発見」日本セラミックス協会 第 31 回秋季シンポジウム、2018/9/5-7.
- (12) 日本セラミックス協会 2018 年 年会 優秀ポスター賞、海野 航、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知、Ping Miao, 鳥居 周輝, 神山 崇「高温中性子回折実験によるパイロクロア型 Yb₂Ti₂O₇系材料のイオン拡散経路の可視化」2018/3/15-17.
- (13) 日本セラミックス協会 2018 年 年会 優秀ポスター賞、城戸 誉芳, 白岩 大裕, 藤井 孝太郎, 丹羽 栄貴, 八島 正知「新構造型イオン伝導体 BaNdScO₄」2018/3/15-17.
- (14) 日本セラミックス協会 2018 年 年会 優秀ポスター賞、矢口 寛, 藤井 孝太郎, 丹羽 栄貴, 白岩 大裕, 日比野 圭佑, 八島 正知「酸化物イオン伝導体の新構造ファミリーBaGdInO₄の発見: 結晶構造と電気伝導」2018/3/15-17.
- (15) 日本セラミックス協会 2018 年 年会 優秀ポスター賞、辻口 峰史、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、齋藤 圭汰、James R. Hester、八島 正知「Ba₃MoNbO_{8.5}における酸化物イオン拡散経路の可視化」日本セラミックス協会 2018 年 年会、2018/3/15-17.
- (16) 平成 29 年度 日本結晶学会年会 ポスター賞、日比野 圭佑、小堺 理史、丹羽 栄貴、藤井 孝太郎、石原 達己、James R. Hester、八島 正知「高温中性子回折によるLa_{0.9}Sr_{0.1}O_{0.45}F₂の構造解析とイオン伝導経路の解明」、2017/11/23-24.
- (17) 第 37 回エレクトロセラミックス研究討論会 優秀賞、中村 圭吾、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「新構造型酸化物イオン伝導体 BaZnHo₂O₅の発見と高温における結晶構造解析」2017/9/12-13.
- (18) 第 37 回エレクトロセラミックス研究討論会 研究奨励賞、海野 航、藤井 孝太郎、丹羽 栄貴、八島 正知「パイロクロア型 Yb₂Ti₂O₇材料の結晶構造およびイオン拡散経路」2017/9/12-13.

(その他のアウトリーチ)

研究成果の 1 部が日経産業新聞(2018 年 9 月 11 日 6 面)に取り上げられた。

6. 研究組織

- (1) 研究分担者 なし
- (2) 研究協力者 なし