



機能分子化学科／
応用物理化学研究室
山本雅博 教授
工学博士



1961年、福井県出身
京都大学工学研究科工業化学専攻
専攻と研究内容／
表面・界面の物理化学

Yamamoto Masahiro

表面・界面の構造・物性・反応場を 探ることは何がおもしろい!?

表面(surface)・界面(Interface)とは何なのか?そして、そこで起こる反応はどのように進行するのかというのを研究しております。
この点でそれぞれの詳細を述べるよりは、私がこれまでいろんな人からお教えいただいた経験を述べたいと思います。研究・教育というのは、大学という“いれもの・はこもの”が提供するものではなく、人と人の出会いによってうまれるものだと思うからです。私は、福井市に生まれ高校卒業と同時に京都にてまいりました。共通一次試験(現センター試験)第一世代です。高校時代は、サッカー部に所属し体育会的な環境におりましたので、大学の教養部で受けた“文化的な衝撃”にはとてもショックをうけました。その考え方は今も深く根付いているように思い



図1／これまでおこなってきた研究

ます。甲南に入学された皆さんにも同じような経験すなわちスクールの流れをくむということは、これからの人生でもずっと引きずっていくこととなると思います。そして、そのスクールの流れは甲南理工学部の人々によって形成されているものだと思います。工学部に入りましたが、大学の1～2回生はずいぶん無駄な時間を過ごしたと今の効率重視の時代ならいわれるような遠回りを致しましたが、あのような貴重な経験は今となっては大切なように思っております。大学の4回生から京都宇治にある原子エネルギー研究所(現:エネルギー理工学研究所)で卒業研究することになりました。その後学生および助手として計17年程研究所でお世話になりました。研究所では、原子炉事故解析部門という部門に属し、原子炉の燃料被覆管に使われている4族の遷移金属であるジルコニウムの水素・酸素との反応を研究することとなりました。原子炉内が空焚きになり、水から発生した水素がジルコニウムと反応するとジルコニウムが水素を吸収して水素脆性により材料が破壊されるということ、酸素との反応で金属表面に生じた酸化膜が水素の吸収を阻害するものの、酸素との反応で生じる反応熱によりさらに材料の破壊が促進されると予想される現象を材料科学の観点から研究しようとのことでした。ただし、ご存じのようにd電子数の少ない遷移金属は、水素、酸素、窒素、炭素等の軽元素と極めて親和

性が高く、またその反応速度は軽元素気体との表面反応に強く依存するので清浄な表面で測定するためには超高真空装置が必要です。また、固体中の水素は格子間位置に点欠陥として存在するので化学の知識よりもむしろ物理的な知識が必要でした。恩師の先生方には、測定法や理論などほぼ一から教えて頂きました。(第1の出会いです。)甲南大学でも、水素の吸蔵材料をUHVの装置をもとにおこなうべく準備をすすめております。実験では、どうしても表面の軽元素の存在状態がin-situ測定により知りたいということで、Auger表面分光装置、仕事関数の測定装置、SIMS等を一部自作も含めて作成しました。この一連の研究のながれで、清浄金属ジルコニウム表面で酸素、窒素、炭素等は通常金属表面の外側に吸着するのではなく、金属第1層または第2層(酸素の場合はさらに第2層と第3層の間)のsubsurfaceに吸着するのではないかと推論するにいたりしました。当時、電子線の回折等により実験的な証拠もえられていたのですが、吸着サイトを正確に見積もることが可能な第一原理計算(量子力学に基づいて結合電子の力学を計算機上で求める。)によって解明することが必要だと考えるようになりました。現在では、計算するソフトが市販されておりますが、当時はいわゆるスパコン上で自作のプログラムを走らせる必要がありました。

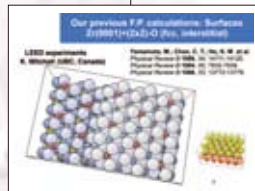


図2／ジルコニウム表面への酸素吸着の第一原理計算

丁度留学できるチャンスにも恵まれたので、米国の中西部のある大学に1年間行かせて頂くことになりました。留学先は、物理天文学科でしかも理論計算のみをおこなうグループだったので、それまで(化学の)実験を中心におこなってきた当方は大変めずらしがられましたが、ここでも現在もおつきあいのある香港から米国にこられた先生方の一からお教えいただきました。(第2の出会いです。)表面(固体/気体界面)の研究も90年代の終わりごろには一段落してきたので、その当時から興味のあった固/液界面の研究を行うために、研究所で液体の統計力学の数値計算を行われていた先生と共同で白金と液体の界面の第一原理計算を行いました。この研究は未だに種々の困難もあり、未解決であり将来的にすこしでも解決できればと思っています。その後、電極系の固液界面および水とまじりあわない油との液液界面の電気化学に関する研究をおこなっております京都の吉田地区および桂地区の研究室で10年間過ごしました。帯電した界面(電気二重層)、電気化学、溶液化学、電解

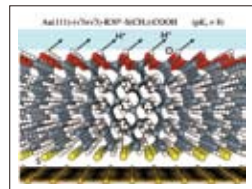


図3／末端に解離基をもつ自己組織化単分子膜上の電気二重層

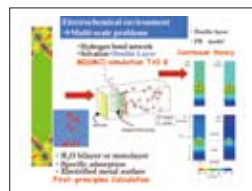


図4／界面物理化学はいろんな空間・時間スケールの考察が必要になる

質溶液論、Au(111)上に形成されたチオール自己組織化膜、STM/AFM、SHG/SFG等の非線形分光、表面反射赤外分光等、界面張力、表面プラズモン共鳴、モンテカルロシミュレーション、分子動力学シミュレーション等のことを再び一から学ばせていただきました。(第3の出会いです。)特に液液界面固液界面の分野では、4月より一緒に赴任しました村上良先生とも大きくオーバーラップする分野でもあり、応用物理化学の大きな研究の柱にしていきたいと考えております。

応用物理化学研究室

Laboratory of Applied Physical Chemistry



- 研究室の特色
固体と空気、固体と液体、液体と液体などの境目(界面・表面)の構造やその場での化学反応について、実験と理論の両方から研究を行っています。また界面・表面の性質をコントロールすることにより、エマルションや泡などのコロイド分散系の安定化についての研究も行っています。
- 研究室の自慢
できてから日が浅い研究室なので、自分たちの手で研究室を作り上げていく楽しめがあります。教官と学生が率直に意見を交わせる雰囲気の研究室を目指しています。
- この研究室で行われている研究テーマ
 - ◆ 水素貯蔵材料における化学反応
 - ◆ 溶液・化学的に修飾された電極界面、イオン性液体・電極界面での電気反応
 - ◆ 第一原理計算に基づいた界面での反応機構の解明
 - ◆ 分子動力学に基づいた界面での動的変化や熱力学量の観測
 - ◆ 微粒子で安定化された流体分散系の安定化
 - ◆ 微細構造を持つ固体表面上での液体の濡れ性

学生インタビュー

野口達侑さん
機能分子化学科4年次

研究テーマ
微粒子で安定化されたエマルションを用いた機能性材料の作製



Noguchi Tatsuyuki

私は生活に密接した身近にあるものに関する研究がしたいと考えていて、研究内容の対象が泡や牛乳、ドレッシングなどに代表される流体分散系を対象とする研究を4年次の卒業研究として選びました。例えばドレッシングは、互いに混ざりあわない水と油に機械的なエネルギーを加えて、油滴が水にもしくは水滴が油に分散した状態(エマルション)と表現されます。しかし攪拌後時間が経過するにつれて、エマルションは攪拌する前の分離した水と油に戻る傾向があります。一般にエマルションを安定化する際には界面活性剤が加えられますが、私の研究ではナノ・マイクロサイズの微粒子によりエマルションを安定化させます。微粒子、水そして油が成す界面の状態をコントロールし、機能性材料の作製に挑戦することが私の研究テーマです。まだ卒業研究が始まったばかりで分からないことが多いですが、先生や先輩と一緒に楽しく学び研究しています。応用物理化学研究室は今年度新たに先生が2人来て、立ち上げられた研究室です。私はこの研究室の第一期生として研究室を作り上げていくとともに、後輩の手本になるような研究が出来るように取り組みたいです。