	研究代表者	京都大学・化学研究所・教授
	研究課題情報	島川 祐一（しまかわ ゆいち） 研究者番号:20372550 課題番号: 23H05457 研究期間: 2023年度~2027年度 キーワード: エントロピー、熱量効果、遷移金属化合物、構造物性相関

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

我々の生活を取り巻く環境・エネルギーなどの分野においてさまざまな問題が顕在化してきている中で、持続可能な社会の構築に向けて、それらの課題を解決するための新しい材料の開発が強く求められている。この分野における大きな課題の一つが「熱制御」である。現代社会では空調や食料保存などの冷房・冷却のために世界で生産される電力の25~30%が使われているとも言われている。さらに未来社会での水素利用を想定すれば、水素液化・貯蔵において低温までの広い温度領域での冷却技術の開発が必須となる。本研究では、従来の熱制御技術の枠組みを超え、将来的には新たな産業技術分野を生み出す新しい熱制御新材料の開発を目指す。

本研究を効率的に遂行するために「物質合成」-「評価」-「理論計算」からなる組織を構成する。特異な手法を駆使した広範囲な組成・構造領域での物質合成を機械学習による構造探索と融合することによる新物質創製、放射光X線・中性子・電子線量子ビームの相補性を活用した高分解能構造・電子状態評価、独自開発コードによる第一原理電子状態計算と発展的なエントロピー評価、というおのおのが特徴的かつ最先端な手法が相補的かつ有機的に連携した新しい学際的物質・材料研究を展開する。

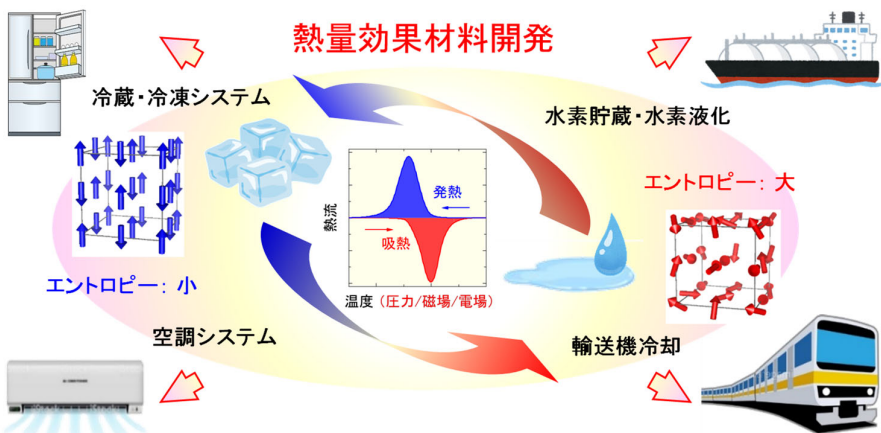


図1 研究全体のイメージ図

●固体熱量効果材料の利点

熱量効果は圧力や磁場などの外場を印加することで生じるエントロピー変化を利用して熱制御を行うものである。空調利用では従来のガス圧縮式冷却と比べて効率が高く、またコンプレッサーなどが不要なため機器の小型化が可能である点や冷媒であるフロンが不要なことから、環境に配慮した冷房・冷却が可能となる。そのため、次世代の冷却技術としても大きな注目を集めている。

●研究のアプローチ

本研究では電荷-スピン-格子が強く相関した遷移金属化合物の相転移に着目する。系のエントロピーは電荷やスピン、格子、おのおのの変化に付随して変化するが、電荷-スピン-格子が強く相関する系においては、その変化が重畳することで巨大なレスポンスが現れる可能性がある。また、熱変化を引き起こすエントロピー変化を電場、磁場、圧力などの多様な外場でマルチに制御できる可能性もある。このような新しい熱制御を実現する学理を電荷-スピン-格子が強く相関する系にエントロピーという新機軸を加えることで構築する。

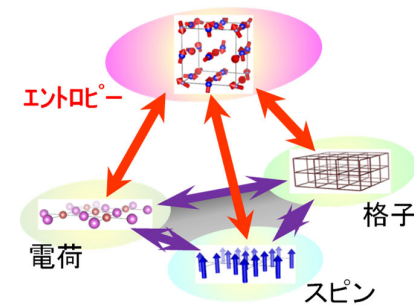


図2 エントロピーを新機軸とする物性相関

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●研究手法と実施体制

中心となる新物質合成では、高圧合成・エピタキシャル薄膜作製・トポクテック物質変換を中心とする特異な手法を用いて、広範な組成・構造領域から相転移において巨大なエントロピー変化を示す遷移金属化合物新物質を探索し合成する。機械学習手法を応用したグローバルな構造・配置空間での計算探索と準安定状態を含めた構造予測を新物質探索手段として取り入れる。発展的には構造予測のみならず物性予測を行い、それを物質合成にフィードバックした新物質探索を試みる。

新規に合成した熱制御材料の同定と精密な結晶構造解析には高分解能放射光X線・中性子回折、および電子顕微鏡（STEM）による構造評価、さらにはX線や電子線を使ったスペクトル解析からの電子状態評価を行う。物性評価では、電気・磁気特性に加えて熱測定を行い、外場印加による熱変化から熱量効果の評価を行う。また、理論計算では、電子状態を第一原理計算から明らかにする。ミクロスコピックな構造・電子状態情報から巨大なエントロピー変化を引き起こす特異な相転移の本質に迫る。

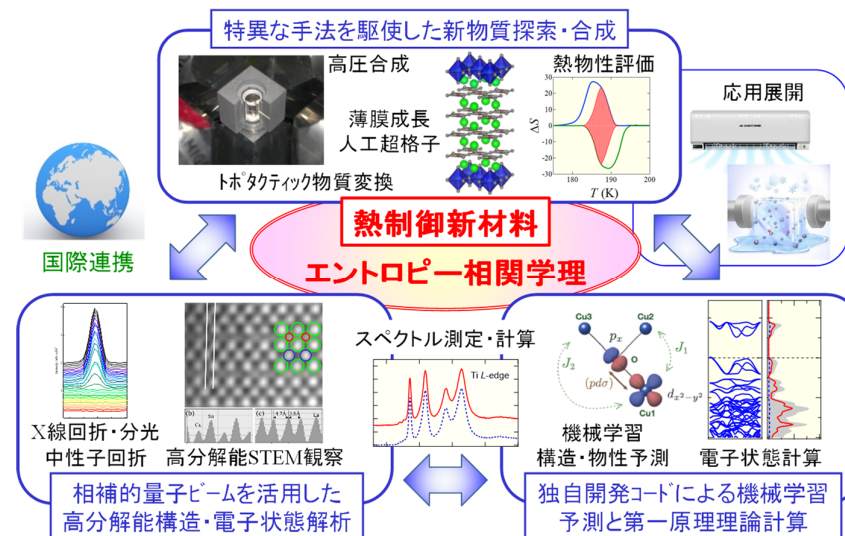


図3 研究手法と実施体制