

2022 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	所裕子
研究機関名	筑波大学
所属部署名	数理物質系
役職名	教授
研究課題名	ナノと双安定性の相関による新奇機能性物質の探索機構の創出
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究では、ナノスケールでの双安定性に着眼して、ありふれた元素からなる物質に隠されている新奇な相（構造体）を発掘することで、新奇な物性および先端的な機能の創出を目的としている。具体的には、外部刺激応答型蓄熱材料、外部刺激応答型ウォーター・ハーベスティング材料、零熱・負熱膨張材料、電気伝導材料 に着目した研究を推進している。

外部刺激応答型蓄熱材料では、ラムダ型五酸化三チタンの新合成法を開発した。現在、合成した試料について各種特性を評価し、蓄熱特性と結晶子サイズの関係性の解明に着手している。また、相転移材料設計計算ツールとしてのソフトウェアを開発した。このソフトウェアは、平均場相転移モデル式をベースとし、各種パラメーターをインプットすることで相転移挙動とギブス自由エネルギーを簡単に算出できるものである。

外部刺激応答型ウォーター・ハーベスティング材料では、多種のシアノ錯体系試料を合成しスクリーニング実験を行った結果、刺激応答型ウォーター・ハーベスティング特性を確認した。このメカニズムを解明するため、各種測定を行った。現在、測定結果の解釈とメカニズムの解明を進め、論文執筆中である。また、物質探索中に合成した水分子を含むオクタシアノ NiW 錯体が、スピンドロップという興味深い磁性現象を示したので成果としてまとめ、学術論文として発表した (Akagi, et al., Cryst. Growth Des., 23, 1972 (2023))。

零熱・負熱膨張材料では、ジルコニウム酸化物系に着目し、目的とする正方晶構造体を合成した。現時点では単相は得られず、単斜晶との混合相であった。今後、正方晶の相分率を高くするよう合成条件を検討する。

電気伝導材料では、ナノサイズの七酸化四チタンの合成法を開発し、約 32 nm の七酸化四チタン・ナノ結晶子を合成した。今後は、得られた七酸化四チタン・ナノ結晶子の相転移特性を検討していく。