

# M

# aterials & Structures Laboratory

No. **20**  
OCTOBER 2025

# NEWS LETTER

## CONTENTS

### フロンティア研最前線：

P.2 熱伝導率スイッチング材料

### 研究の展望：

P.3 ありふれた元素で挑む熱電材料開発

### 学術賞：

P.4 新規拡張  $\pi$  共役分子の迅速合成を可能にする縫合反応の開発

P.5 免震建物上部構造への制振ダンパー付加による擁壁衝突時の応答制御に関する研究  
ーエネルギーの釣合いに基づくオイルダンパー設計法の構築ー

P.5 材料科学における汎用的なベイズ最適化手法の開発

### 研究の周辺：

P.6 画像解析技術を利用した火災荷重調査法の開発

P.6 超低電圧で光る白色有機 EL の開発

P.7 **トピックス、受賞、国際会議・セミナー等、人事異動**

文部科学省共同利用・共同研究拠点

先端無機材料共同研究拠点

**東京科学大学 総合研究院**

**フロンティア材料研究所**

Materials and Structures Laboratory, Institute of Integrated Research, Institute of Science Tokyo

## 熱伝導率スイッチング材料

教授 川路 均

社会全体のエネルギー効率を向上させて省エネルギーを実現するために、熱の再利用技術 (Reuse)、熱を変換して利用する技術 (Recycle)、熱の使用量を減らす技術 (Reduce) の3つの熱マネジメント技術が重要となっている。このなかで断熱・放熱を ON - OFF スイッチのようにコントロールすることが可能な“熱スイッチング材料”を開発することが出来れば、未利用熱の削減なども期待される。熱スイッチング材料の応用例の一つとして、例えば電気自動車のリチウムイオンバッテリーを取り囲む材料がある。バッテリーは、低温では放電容量の低下を防ぐために保温、高温では電解質の発火や寿命の劣化を防ぐために冷却が必要である。この場合、低温で低い熱伝導率、高温で高い熱伝導率を示す熱スイッチング材料があれば、材料自身が熱伝導をコントロールし、自立的な温度調整が可能となる。

熱スイッチングを実現する方法はいくつか考えられるが、ここでは金属・絶縁体相転移を利用する場合を考える。固体中において熱はフォノンと伝導電子によって運ばれるため、固体の総熱伝導率はこれらの和によって決まり、一般に金属の熱伝導率は絶縁体よりも高い。そのため金属・絶縁体相転移を示す物質の熱伝導率は金属相では高い値をもち、絶縁相では低い値を示すことが予想され、相転移温度で熱伝導率スイッチングが起きることが期待される。実際、六方晶 NiS では 260K 付近の金属・絶縁体相転移でそのような熱伝導率スイッチングが観測されている。ところが、全ての金属・絶縁体転移で同様な熱伝導率スイッチングが起きるわけではなく、金属相の熱伝導が絶縁体相よりも低く、相転移によって逆のスイッチングが起きる一見奇妙な現象も観測される。

その例を図1に示す。これは  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Ir}_2\text{S}_4$  の熱伝導率の温度変化を示したものであるが、Zn をドーピングしていない  $\text{CuIr}_2\text{S}_4$  では約 230K の金属・絶縁体相転移で熱伝導率スイッチングが起り、一般的な予想に反して高温側の金属相で熱伝導率が小さくなっている。これは、同図の下

に示すようにフォノン熱伝導率が高温金属相で異常に小さくなっているためである。この物質の金属相では Ir イオンの電荷自由度に起因したダイマー形成揺らぎが非常に大きく、相転移直上の熱伝導を大きく引き下げていることによると考えられた。また、相転移は Zn のドーピングに伴って低温側に移動し、熱伝導率のジャンプ量も減少しているが、注目すべきは金属相の熱伝導率が  $x=0.1$  まではドーピング量の増加とともに減少しているのに対し、 $x=0.3$  では逆に増えている点である。一般に不純物が増えると熱伝導率は低下するにもかかわらず  $x=0.3$  で逆に増えていることは、Zn のドーピングによってこのダイマー形成揺らぎが抑えられていることを示している。このように電子が電荷・軌道・スピンなどの自由度を持つ系では格子系との相互作用で熱伝導率を大きく変調することが可能であり、今後、それを利用した材料の開発も期待される。

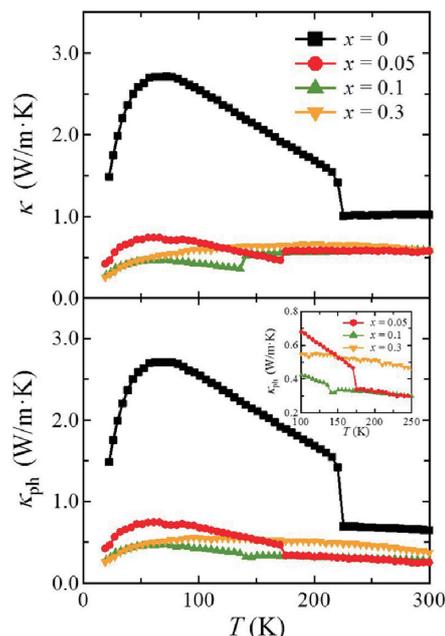


図1  $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Ir}_2\text{S}_4$  の熱伝導率 (上) とフォノン熱伝導率 (下)。K. Hashimoto, S. Kitani, H. Kawaji, Physica B, 629, 413675 (2022).

# ありふれた元素で挑む熱電材料開発

教授 片瀬 貴義

近年、エネルギー利用の拡大に伴い、エネルギーの消費削減と高効率利用が重要な課題になっている。実際、石油・石炭・天然ガスといった一次エネルギーを電力や燃料に変換する際、約3割のエネルギーが失われており、さらに最終的に消費されるエネルギーのうち有効に使われるのはごく一部にすぎない。その結果、一次エネルギー全体の約6割が“未利用熱”として環境中に放出されているのが現状である。こうした背景のもと、熱を直接電気に変換できる「熱電変換」技術が、工場や自動車などで発生する排熱を再資源化させる手段として注目されている。さらに最近では、IoT機器の自立電源や5G通信機器・レーザー装置における局所冷却素子などへの応用も期待されている。現在、主に用いられている熱電材料には、ビスマス・テルル ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) や鉛・テルル ( $\text{PbTe}$ ) などの金属カルコゲン化合物がある。これらは優れた性能を有する一方で、希少で毒性のある元素を含むことが、大規模な熱電技術の普及に向けた障害になっている。これに対して、酸化物材料は無毒で資源的に豊富という利点があるが、一般に熱伝導率が高いために変換効率を上げられない課題があった。

こうした課題を克服するため、我々は酸化物の熱伝導率を効果的に低減させる新たな手法の開発に取り組み、毒性元素を含まない高性能熱電材料の開発に挑戦してきた。近年の成果としては、重元素を添加する従来の発想とは逆に、軽元素の水素を酸化物に添加する方法で熱伝導率を低減させ、熱電変換効率を大きく向上させることに成功した[図1, Adv. Funct. Mater. 33, 2313144 (2023)]. さらに我々は、“逆ペロブスカイト構造”と呼ばれる特殊な結晶構造を持つ  $\text{Ba}_3\text{SiO}$  に着目し、その柔らかい結晶骨格が熱の伝播を著しく抑えることで、極めて低い熱伝導率を実現できることを明らかにした。この材料は300度付近の中温域において、毒性元素を一切含まない材料としては最高レベルの熱電変換効率(無次元性能指数  $ZT \approx 2.1$ )を示す可能性を持つことを見出した[図2, Adv. Sci. 11, 2307058 (2024)]. この性能は、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  や  $\text{PbTe}$  などの毒性元素を含む材料に匹敵しうることから、環境調和型熱電材料への代替候補として有望である。今後は、こうした革新的な設計指針に基づき、豊富で無毒な元素からなる高性能材料の開発をさらに深化させ、持続可能な熱電発電技術の社会実装へとつなげていきたい。

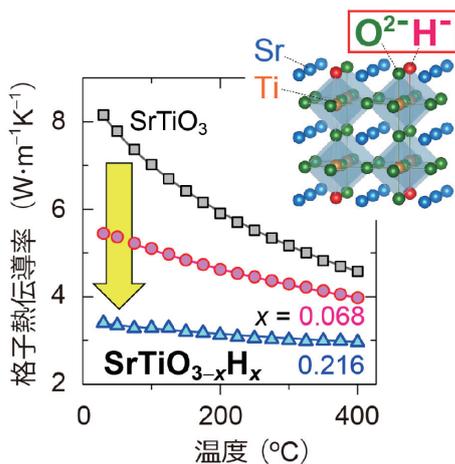


図1 水素置換による  $\text{SrTiO}_3$  の格子熱伝導率の低減。

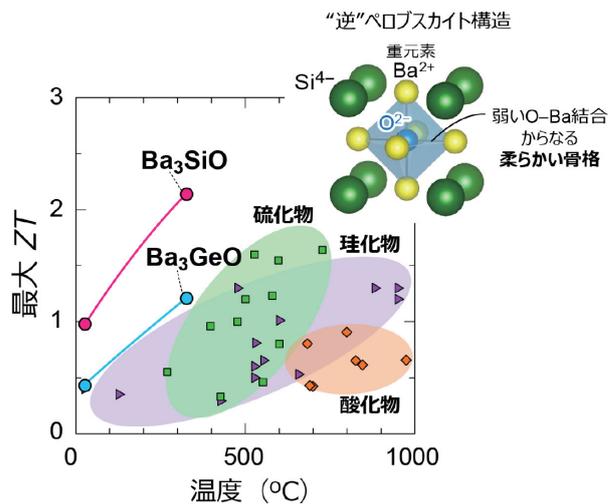


図2 逆ペロブスカイト型酸化物の最大熱電変換効率  $ZT$ 。

# 研究業績部門： 新規拡張π共役分子の迅速合成を可能にする縫合反応の 開発

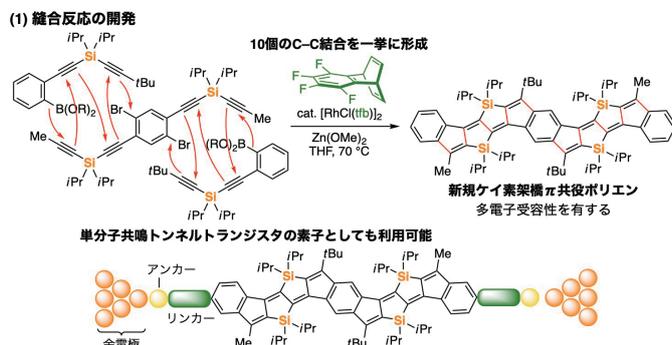
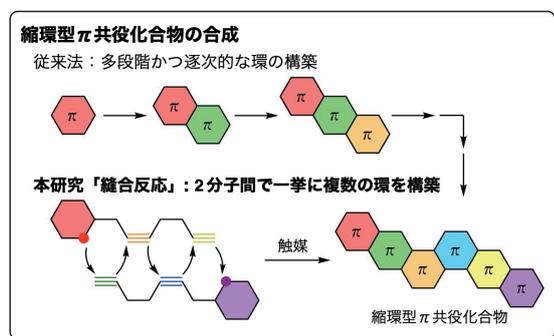
大阪大学 大学院基礎工学研究科物質創成専攻 教授 新谷 亮

拡張π共役系をもつ有機化合物は有機材料への利用が期待されており、その多くが縮環構造を有する。これらは一般に、多段階反応による環構築を経て形成されるため合成効率が低く、アクセス可能な分子構造にも制限がある。従って、拡張π共役系に基づく新規機能性分子の創出には、これらの問題を解決する革新的な合成法の開発が必要である。そこで本研究では、ロジウム触媒存在下、複数のアルキン部位をもつ非共役型の2分子間で縫い合わせるように炭素-炭素結合を連続的に形成することで縮環型拡張π共役化合物を一挙に組み上げる、全く新しい合成手法「縫合反応」を設計・開発した。その結果、従来法では合成困難な、高度に縮環した新規ケイ素架橋ポリエン類の効率合成に成功し、これらの分子が、従来の拡張π共役系とは異なる電子的性質をもつとともに、単分子電子デバイスの有機素子として有効に機能することも見出した。本縫合反応は汎用性に優れ、ケイ素架橋だけでなく、炭素や硫黄など他の架橋部位をもつ類縁体の合成にも適用できるほか、縫合反応を含む連続反応系により、発光性のフルオレン類や新規縮環オリゴシロールの効率合成も可能となった。

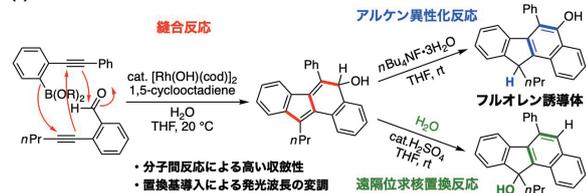
さらに、この縫合反応を重合反応へと展開した「縫合重合」により、従来法ではアクセス困難な縮環型π共役ユニットを繰返し単位にもつ新規π共役ポリマーの合成にも成功した。π共役ポリマーは通常、繰返し単位とな

るπ共役ユニットをもつモノマーの重合により合成されるが、安定なモノマーとして予め用意することが困難な繰返し単位をもつポリマーの合成には大きな制限がある。一方、本縫合重合は、アルキン部位を複数もつ調製容易なモノマーに対して、ロジウム触媒を用いた連続的なアルキン挿入反応を連鎖的に行うことで繰返し単位となる架橋型のπ共役ユニットの構築とポリマー鎖の伸長を一挙に実現する新規重合法である。この手法により得られたポリマーは剛直な架橋構造によって伸長した共役系をもつとともに、高い耐熱性などを有する。また、ジアルキニルアレーンをモノマーとした縫合重合では、重合条件下において芳香族化を伴うアルケンの異性化が起り、対応するポリ(アリーレンビニレン)が得られることを見出した。ポリ(アリーレンビニレン)は発光性・導電性材料への利用が期待されているが、本重合法では、重合過程において繰返し単位となるアリーレン構造が構築されるため、これまでアクセスできなかったポリ(アリーレンビニレン)類を簡便に合成できる。

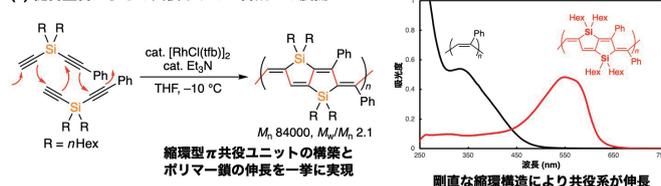
このように、これまでに例のない独自反応の開発を通じて、従来法では合成できない新たな機能性物質の迅速合成を達成し、それらの物性評価・機能開拓にも取り組んできた。今後のさらなる展開により、幅広い有用な新規物質の創出を可能にし、様々な関連分野への貢献をしていきたい。



**(2) 縫合反応を含む連続反応系への拡張**



**(3) 縫合重合によるπ共役ポリマー合成への展開**



研究奨励部門：

# 免震建物上部構造への制振ダンパー付加による擁壁衝突時の応答制御に関する研究

## —エネルギーの釣合いに基づくオイルダンパー設計法の構築—

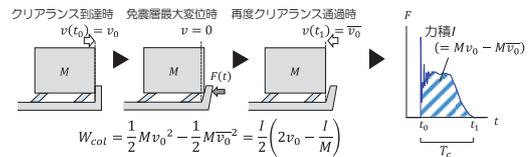
近畿大学 建築学部 建築学科 准教授 犬伏 徹志

現行の設計想定を大幅に上回る地震動の発生が予測されており、免震建物がこのような地震動を受けると周囲の擁壁へ衝突し、上部構造に過大な応答や損傷が生じる可能性がある。擁壁衝突時の応答評価に関する研究は比較的多いが、応答予測や応答制御に関する研究は少なく、大地震後にも建物機能維持や継続使用を可能とするためには、これらの技術が必要である。

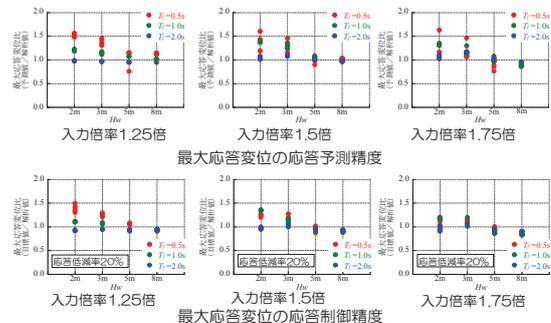
本研究では、エネルギーの釣合いに基づく方法を用い、免震建物の擁壁衝突時の最大応答予測法および応答制御法を構築した。まず、衝突速度と力積を用いた衝突エネルギーの算定方法と、それに用いる力積の推定式を提案した。そして、上部構造を弾性1質点系とした場合について、上部構造の最大応答変位予測法および応答制御法を示した。精度検証の結果、応答予測および応答制御ともに概ね可能であった。

設計への展開にはまだ多くの課題があるため、さらに研究を進め、より安心・安全な免震建物の設計、免震構造の健全な普及に資する情報を提供していきたい。

### 【衝突エネルギーの評価方法】



### 【応答予測および応答制御の精度検証】



研究奨励部門：

# 材料科学における汎用的なベイズ最適化手法の開発

東北大学 金属材料研究所 講師 清原 慎

近年、新材料探索において機械学習 (ML) 手法が急速に普及し、特にガウス過程 (GP) に基づくベイズ最適化 (BO) は限られた試行回数で最適材料を発見できる代表的手法として広く用いられている。しかし従来の GP は特徴量 (記述子) を自動生成できず、探索効率は事前の特徴量設計に大きく依存していた。本研究ではこの課題に対処するため、ディープラーニングと GP を組み合わせた Deep Kernel Learning (DKL) を BO に導入した。DKL は非線形特徴変換により GP の表現力を高め、複雑な構造-物性関係の自動抽出を可能にする。酸化物 922 件 (バンドギャップ、イオン誘電率、電子有効質量) や有機-無機ペロブスカイト合金 610 件 (実験バンドギャップ) において、DKL はこれまでの GP と同等または高い探索効率を示した。また DKL は転移学習を利用でき、既存データから新たな探索への効率向上も確認された。このように、DKL はこれまでの GP を用いた BO に置き換わる汎用的な手法であり、多様かつ複雑な材料空間を効果的に探索するのに適していると期待される。

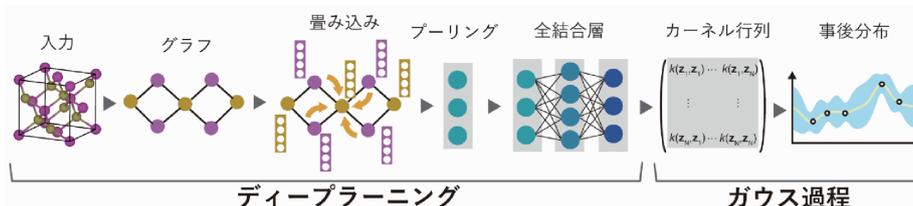


図. Deep Kernel Learning のアーキテクチャ

## 画像解析技術を利用した火災荷重調査法の開発

教授 樋本 圭佑

建物の避難安全設計や防耐火設計では、室内に存在する可燃物が燃焼した場合の単位床面積あたりの発熱量のことを「火災荷重密度  $q''$ 」と呼び、火災時の危険性を算定する根拠としている ( $q''$  が大きいほど火災の成長は早く、継続時間は長い)。 $q''$  の大きさは室の用途に依存するため、建築基準法に規定される性能検証法では、室の用途 (10 の大分類と 22 の小分類) に応じて  $q''$  の設計値を設定し、満足すべき安全性の水準を区別している。このような設計値は、過去の実態調査の結果を集約したデータベースに基づいて設定されている。しかし、実態調査の実施頻度は低く、近年の可燃物収納実態の変化を反映できていないといった課題を抱えている。

そこで筆者らは、画像解析技術を利用した新しい火災荷重調査法の開発を進めている。これは、室内を撮影した動画データから可燃物を検出して、各可燃物の重量・発熱量を推計、さらにその結果を集計することで  $q''$  に換算するというものである (図 1)。こうした手続きにより、可燃物の寸法や重量の計測といった手間のかかる作業を省略し、動画データを入手できさえすれば半ば自動的に  $q''$  を推計できるようになる。ただし、本調査法はまだ基礎的な検討段階にある。今後、実用化を進めて実態調査の効率化を図り、データベースの拡充と定期的な更新を行えるようにしていきたい。

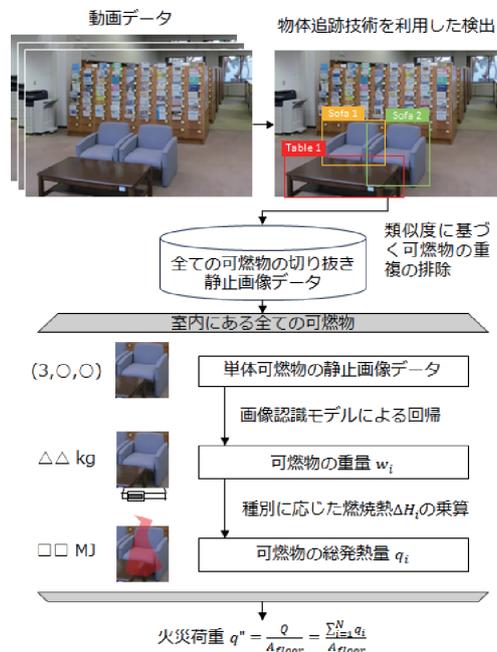
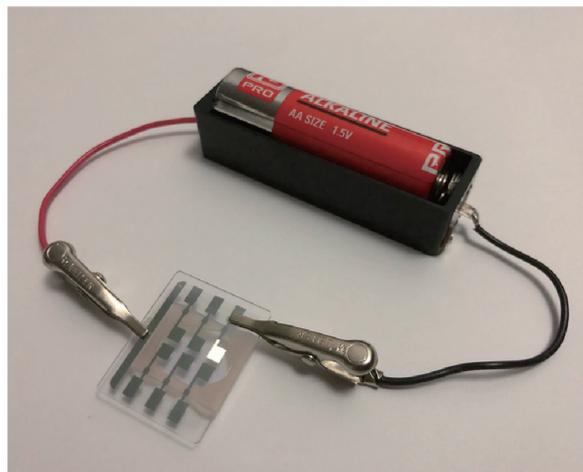


図 1 画像解析技術を利用した火災荷重推定の流れ

## 超低電圧で光る白色有機ELの開発

准教授 伊澤 誠一郎

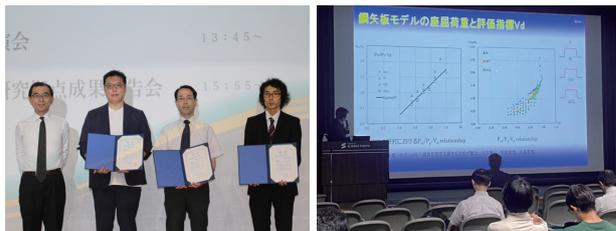
白色有機 EL はテレビのバックライトなどで商用化されている発光素子である。これまでの数多くの研究で発光の効率は向上してきたものの、白色発光を得るために要する電圧を低下させることができた例は少なく、最小でも 2.5 V 程度にとどまっていた。私たちの研究グループでは、これまでに 2 種類の有機分子の界面におけるアップコンバージョン過程を利用することで、青色有機 EL の低電圧化に成功してきた (*Nat. Commun.* 2023, 14, 5494)。さらにこの青色アップコンバージョン有機 EL (UC-OLED) 技術を応用し、同発光素子内に水色とその補色である黄色の発光色素を加えることで、乾電池 1 本相当の電圧である 1.5 V 以下で発光できる白色有機 EL を開発した。二種類の発光色素を加えることで、白色を作り出す水色と黄色の発光割合をそれぞれの色素へのエネルギー移動速度でコントロールすることができた。加えた発光色素は UC-OLED の低い駆動電圧を損ねることなく発光色を制御できたため、これまでで最も低い電圧で光る白色有機 EL の開発に成功した (*J. Mater. Chem. C* 2025, *in press*)。今後さらに発光効率の向上など研究をさらに進展させ、大画面テレビなどで利用される白色有機 EL 素子の消費電力を大幅に低減を目指す。



トピックス

「2025 年度フロンティア材料研究所学術賞受賞記念講演会および先端無機材料共同研究拠点成果報告会」

2025 年 7 月 16 日 (水)、「フロンティア材料研究所学術賞」受賞者 3 名の受賞式および記念講演会をすずかけ台キャンパスにて開催いたしました。続いて行われた「先端無機材料共同研究拠点成果報告会」では 3 名の研究代表者により共同利用研究における成果が発表されました。



先端無機材料共同研究拠点成果報告会	
「スピネル型 $\text{CuIr}_2\text{S}_4$ で生じる多彩な構造相転移の開拓」	片山 尚幸 (名古屋大学 准教授)
「分極軸・歪制御が駆動する強弾性ドメインスイッチングと圧電 PZT 薄膜の高性能化」	江原 祥隆 (防衛大学校 准教授)
「部分的板厚減少を有する鋼矢板の弾性座屈荷重に対する数値解析的検討」	大塚 貴弘 (名城大学 准教授)

受賞 (2025.4 ~)

受賞者	受賞	受賞内容	受賞日
大場 史康 教授	令和 7 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 「科学技術賞 (研究部門)」	計算科学に立脚した無機電子材料の開拓に関する研究	2025 年 4 月 15 日
伊澤 誠一郎 准教授	令和 7 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰 「若手科学者賞」	有機半導体界面を使った発光素子の開発の研究	2025 年 4 月 15 日
伊澤 誠一郎 准教授	市村清新技术財団 「第 57 回市村学術賞 貢献賞」	超低電圧で駆動する青色有機 EL の開発	2025 年 4 月 18 日
樋本 圭佑 教授	日本建築学会 「2025 年著作賞」	Large Outdoor Fire Dynamics	2025 年 5 月 30 日
片瀬 貴義 准教授	本多記念会 「第 46 回本多記念研究奨励賞」	高効率な熱電変換と熱制御を目指した新材料の設計と開発に関する研究	2025 年 6 月 5 日
伊澤 誠一郎 准教授	有機 EL 討論会 「第 18 回業績賞」	世界最小電圧で光る青色有機 EL の開発	2025 年 6 月 26 日

国際会議・セミナー等 (2025.4 ~)

開催日	開催名	開催場所	主催・共催
2025 年 4 月 25 日	Science Tokyo 設立記念 総合研究院キックオフシンポジウム—知の融合が生む新たな可能性—	湯島キャンパス / オンライン	東京科学大学 総合研究院
2025 年 6 月 5 日 -7 日	The 9th Joint Workshop on Building / Civil Engineering between Tongji and Science Tokyo	すずかけ台キャンパス	主催：東京科学大学 環境・社会理工学院 建築学系 共催：多元レジリエンス研究センター フロンティア材料研究所 未来産業技術研究所
2025 年 7 月 26 日	第 158 回工学地震学・地震工学談話会	すずかけ台キャンパス	主催：東京科学大学 地震工学研究グループ 共催：フロンティア材料研究所 多元レジリエンス研究センター
2025 年 8 月 5 日	Science Tokyo 第 6 回 TAC-MI 最先端研究セミナー 物質と情報で切り拓くサステナブルな未来	オンライン開催	主催：東京科学大学 物質・情報卓越コース 共催：フロンティア材料研究所 元素戦略 MDX 研究センター

人事異動 (2025.5 ~)

異動日	氏名	異動内容	新所属	旧所属
2025 年 10 月 1 日	片瀬 貴義	昇任	材料機能設計領域 教授	材料機能設計領域 / 元素戦略 MDX 研究センター 准教授

フロンティア材料研究所

Materials & Structures Laboratory

**NEWS LETTER** No. **20** OCTOBER 2025

発行日 令和7年10月1日

編集・発行 東京科学大学 総合研究院  
フロンティア材料研究所  
共同利用・研究支援室

お問い合わせ 〒226-8501 横浜市緑区長津田町4259 R3-27  
TEL.045-924-5968 FAX.045-924-5978  
電子メール [kenkyushien@mssl.titech.ac.jp](mailto:kenkyushien@mssl.titech.ac.jp)  
ホームページ <https://www.mssl.iir.isct.ac.jp>