

受領No.1488

## 地球上に豊富な元素で構成される負熱膨張材料の 機構解析と実験実証

代表研究者 望月 泰英 東京工業大学 助教  
共同研究者 磯部 敏宏 東京工業大学 物質理工学院・材料系 准教授



### Elucidation of earth-abundant negative-thermal-expansion materials and its realization

Representative Yasuhide MOCHIZUKI, Tokyo Institute of Technology, Assistant Professor  
Collaborator Toshihiro ISOBE, Tokyo Institute of Technology, Department of Materials Science and Engineering, Associate Professor

#### 研究概要

温めると縮む負熱膨張材料は、温度変化の激しい半導体や機材などの材料の長寿命化に貢献できる材料である。従来まで、負熱膨張性は重金属や希少元素、毒性元素を用いられた材料で発見されてきた。その中、2020年に申請者の所属する研究室の磯部敏宏准教授によって発見された負熱膨張材料、 $Zr_2SP_2O_{12}$  は地球上に豊富な元素で構成されており、線熱膨張係数は最大で $-35\text{ppm/K}$ ほどで、駆動温度は $300\text{K}$ から $770\text{K}$ と常温以上で広範囲であるため、実用的であるが、その負熱膨張性の機構や起源は不明である。 $Zr_2SP_2O_{12}$ はNASICON (Na Super Ionic CONductor) 型結晶構造を有しており、その構造に負熱膨張性への道標がある可能性が非常に高い。本申請研究では、地球上に豊富な元素で負熱膨張性を発現できる可能性のある十数種類のNASICON型物質に注目し、その熱物性について系統的な理論予測を行う。

本申請研究を遂行することにより、負熱膨張性に寄与する格子振動を第一原理格子動力学計算により可視化し、負熱膨張性を与える因子を見出す。また、本申請研究で得られる理論的知見について、磯部准教授と共に実験実証まで繋ぎ、重金属や希少元素、毒性元素を用いずとも、負熱膨張材料を合成する設計指針を見出す。