

物質探索空間の拡大による未来材料の創製  
2021 年度採択研究代表者

2022 年度  
年次報告書

大池 広志

東京大学 大学院工学系研究科／科学技術振興機構  
特任研究員／さきがけ研究者

準安定電子状態を活用した量子機能材料の開拓に関する研究

## 研究成果の概要

本研究課題では、物質中の電子が形成する準安定状態の理解に基づいて、熱電変換材料、超伝導材料などの機能材料の開拓を行います。物質の安定性の起源は、自由エネルギーが最小であるという熱力学的性質によって実現する最安定状態と、最安定状態への変化がとても遅いという速度論的性質で実現する準安定状態に分類されます。温度・圧力・化学組成などの熱力学パラメータが定まると最安定状態は一意に定まるのに対し、準安定状態は無数に存在し得ます。したがって、安定性の起源を理解し、準安定状態を設計可能にすると、新奇材料を探索するパラメータ空間を広げる指針が得られることとなります。本年度は、安定性の起源を実験的に明らかにすることに主眼をおいて研究を行いました。

安定性の起源を調べる方法の一つは、温度を上昇させて物質に熱ゆらぎを与えたときに、物質の状態が時間と共に変化するかどうかを観測することです。最安定状態であれば物質の状態は変化せず、準安定状態であれば物質は最安定状態へと変化します。この方法によって、塩化物が形成する複数の結晶構造の安定性が、準安定状態であるかどうかを明らかにすることができました。しかしこの方法では、準安定状態から最安定状態への変化が、変化を実測する時間（例えば1週間など）よりも遅い場合には適用できません。この場合に有効な方法として考えられるのは、熱力学量の測定から自由エネルギー最小の大小関係が入れ替わる熱力学条件を明らかにすることです。自由エネルギー最小ではないのに安定に存在する状態は、準安定状態と判別することができません。この方法によって、磁性酸化物が形成する複数の磁気構造の安定性の起源を明らかにしました。今後の研究では、このような安定性の起源の理解を、準安定状態の設計に繋げるための研究を行います。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Topological Nernst effect emerging from real-space gauge field and thermal fluctuations in a magnetic skyrmion lattice” *Physical Review B* 106, 214425 (2022).
- 2) “Thermodynamic determination of the equilibrium first-order phase-transition line hidden by hysteresis in a phase diagram” *Scientific Reports* 13, 6876 (2023).