

熱関連材料データベース PropertiesDB Web の開発と蓄熱材探索への応用

石 田 豊 和*

1. はじめに

地球規模での脱炭素化が求められる現在、エネルギーの有効活用そして更なる省エネルギー化に必要な技術が「熱マネジメント」である。技術革新が進んだ現在の日本においても、産業・民生・運輸の各部門においては依然として膨大なエネルギーが排熱として廃棄されている実態があり、 $\sim 500^{\circ}\text{C}$ を超えるような高温排熱、そして特に排熱の大部分を占める中温領域($\sim 200^{\circ}\text{C}$ 程度)から低温領域($\sim 50^{\circ}\text{C}$ 程度)の廃棄熱である「未利用熱」の有効活用を推進するためには、熱マネジメントに関する基盤的な研究開発が求められる。未利用熱の有効活用に際しては、広範囲にわたる排熱源を調査・特定すると同時に、排熱源とその排出温度域に応じて効率よく熱回収する技術が必要であり、膨大な未利用熱の有効活用技術は、エネルギー資源の制約および実社会からの要請として極めて重要な課題となっている。我々の日常生活に熱は不可欠なものであるため、これまで熱活用技術は様々な手法が提案されてきた。その一方で材料化学の視点からみると、熱マネジメントに用いられる材料は金属を含めて古くから馴染みのある素材であり、未利用熱の有効活用を推進するためには、材料の更なる高機能化および新規な材料探索が強く求められている。

このような社会背景もあり、2013年度から革新的な熱活用技術の研究開発を実施する目的で経産省/NEDO プロジェクト「未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究開発」が実施されており⁽¹⁾、現在(2022年7月現在)筆者らは、技術研究組合(未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合, TherMAT)において産学官から構成されるメンバーで未利用熱活用技術に関する研究開発を実施している。本プロジェクトでは基盤的な研究から社会実装を目指した応用研究まで幅広く実施しているが、筆者は特に、計算化学(電子状態計算や分子シミュレーション)と熱物性データベースを活用した高密度蓄熱材の探索を担当している。そこで本稿において

は、TherMAT の成果として一般公開した「熱関連材料データベース」に関する話題を提供すると同時に、計算化学と熱物性情報を活用した研究の一例として蓄熱材の計算分子設計を取り上げて、TherMAT における研究成果を紹介したい。

2. 熱関連材料データベースの整備と一般公開への経緯

TherMAT では熱の 3R 技術に注目し、3R を統合的に推進する技術として熱マネジメントの研究開発を展開している。ここで 3R とは、熱の使用量や放出量を減らす (Reduce) 技術、熱を再利用する (Reuse) 技術、熱を変換して利用する (Recycle) 技術の略であり、具体的な Reduce 技術としては断熱・遮熱・蓄熱、Reuse 技術としてはヒートポンプ、Recycle 技術としては熱電変換・排熱発電などが代表的な研究課題となる。TherMAT の研究開発で重要な点は、冒頭に述べた排熱の状況を把握すべく排熱実態調査を実施してその再利用ポテンシャルを把握すると同時に⁽²⁾、各種熱活用技術の基盤となる材料、部素材の見直しから出発して、熱関連材料に関する熱物性データ整理を進めながら、TherMAT 内部でこれら基盤情報の共有を進めたことが挙げられる。

例えば断熱材や蓄熱材、熱電変換材料などの熱関連材料の研究開発を効率的に進めるためには、熱伝導率や蓄熱密度、熱電変換性能に関する性能指数などの目標値を満足する物質の探索と同時に、新物質を部素材とするモジュール設計に必要な多角的・体系的な物性情報が必要である。しかしこれまで、材料探索に必要な物質の化学組成を収録したデータベースは一般に公開されて化合物情報は広く利用可能である一方、熱的特性情報まで含めたデータベースの整備は遅れているのが現状であった。TherMAT ではプロジェクト開始時から産総研内に基盤的研究を支援すべく技術開発センターを設けて、熱関連材料の各種熱的特性情報とそれら関連データを学術論文やデータ集、既存のデータベースなどから探索・体系的に整理をして、TherMAT 内参画企業分室との間でデ

* 国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合 (TherMAT) ; 主任研究員 (〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 つくば中央第 2 事業所)

Thermal Materials Database (PropertiesDB Web) and Its Application for Exploring Thermal Storage Materials; Toyokazu Ishida (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Tsukuba)

Keywords: thermal management, thermal energy storage, thermochemical/physical database, phase change materials, sugar alcohols, thermochemical materials, alkaline-earth metal oxide, molecular dynamics simulation, computational molecular design

2022年7月29日受理 [doi:10.2320/materia.62.106]

ータを共有するプラットフォームの役割を果たすデータベースシステムの構築を進めてきた。これが今回紹介する熱関連材料データベースの整備およびプロジェクト外部への一般公開に至る経緯である。

一般に各種材料開発には様々な物性とその関連情報が必要となるが、限られた規模の研究プロジェクトで全てのデータを網羅的に収集し、体系的に整備することには限界がある。そこで我々はまず Reduce 技術に注目し、断熱・遮熱・蓄熱・熱輸送等の基盤となる材料探索を想定してデータ収集と整理を進めていった。一連の文献調査を通して我々が実感したことだが、物質の熱的特性情報は古い文献に記載が見られ、かつ複数の出典に分散して記載されていることが多く、原典に遡って古い数値データを逐一確認し、統一的な記述により体系的に整理することにはかなりの労力を費やした。この過程で整理したデータをデジタル化して体系的に収録したシステムが今回紹介する「PropertiesDB Web」であり、本システムでは熱関連材料のデータと同時に、データベースに付随して提供する簡易検索/表示システムを利用して、収録データセット間の簡単な二次元相関を解析して表示することが可能である。本システムは簡便な検索ツールであり、現在では TherMAT の Web ページから成果一覧として無償で一般公開している⁽³⁾。

3. 収録データとデータベース構造など

TherMAT 共有のデータプラットフォームとして留意した点は、掲載する熱物性に関して物質の組成が定量的に表示されて、十分に評価された信頼性の高い高品位なデータセットを共通基盤として整備することにある。現在公開中の「PropertiesDB Web」では主として3つの文献から熱的特性情報に相当するデータを収集し整理しており、それぞれ1) Landolt Börnstein, 2) NBS tables of chemical thermodynamic properties, 3) 電子技術総合研究所調査報告書となるが、以下では各出典に関して簡単に収録データを説明する。

Landolt Börnstein の原典は1883年に創刊された歴史ある文献に遡り、幾多の専門家が物理・化学・工学分野の主要学術雑誌から重要な原著論文を選択し、厳しい評価を経たファクトデータを体系的かつ包括的に収録していることに特徴がある。原著シリーズでは自然科学の多岐にわたる分野から重要データを収録しているが、我々の目的は熱関連物性を整理して収録することなので、Group IV Physical Chemistry 内の関連号から必要データを入手している。例えば有機化合物の熱物性としては、Thermodynamic Properties of Organic Compounds and Mixtures より相変化のエンタルピー値やその温度などをデジタル化して収録している⁽⁴⁾。原著序文に記載がある通り、これらデータは化学および関連産業で物質変換プロセスを設計する際には基本となる物理量である。

次に無機化合物の物理化学データは、主として The NBS tables of chemical thermodynamic properties: Selected

values for inorganic and C1 and C2 organic substances in SI units⁽⁵⁾を参考として、本論文中の掲載データセットをデジタル化して整理している。無機化合物、特に本会報誌が主題とする金属材料に関しては、多種多様な物質データが存在し個別の目的に応じて整理されているが、本データの特徴は原著論文の序文にある通り、物質の基本データとして標準状態の各種熱力学量(エンタルピー、エントロピー、ギブスエネルギー、定圧熱容量)を整理している点にある。

最後に、無機化合物、有機化合物の融点等の熱力学データを整理した報告書として、電子技術総合研究所の調査報告書第196号「蓄熱および蓄熱材に関する調査報告書」に有用なデータが多数登録されており⁽⁶⁾、この原著書籍中の数値データをデジタル化して整理することにより PropertiesDB Web へと掲載している。

ここで重要な点は、これら3つの原典はいずれも過去に出版されたもので各々独自の流儀でデータが整理収録されているため、PropertiesDB Web の構築に際しては我々で出典ごとに分散したデータ構造を見直し、統一したデータ構造でデータベースシステムを一括管理する方式に改めた点にある。具体的には、PropertiesDB Web 上では物質の基本情報(名前、化学式、分子量等)ごとに独自の ID を再設定し、その ID と個別の熱物性値にリレーションを張ることで、相互参照を可能とする設計を採っている。さらに各熱物性項目および各単位にも ID を付与し、リレーション化することで、今後他の物性値を追加する際、リレーショナルデータベースの構造を大きく変えることなく追加することができるように再設計した。なぜなら、データベースシステムはデータの更新や新規追加が絶えず必要となるものであり、PropertiesDB Web の場合も例外ではなく、一般公開以降にも登録データの追加やシステムの更新を続けている。例えば、無機化合物のデータに関しても Landolt Börnstein 収蔵のデータセットである Thermodynamic Properties of Inorganic Materials · Pure Substances. Part 1~4 の追加作業を現在実施しているところである⁽⁷⁾。これは SGTE(高品質な熱力学データベースの開発を目的としたヨーロッパの各研究機関により構成されたコンソーシアム)由来の良質なデータセットであり、次節で説明するように、簡単なキーワード検索により複数の独立した出典に渡る熱力学データを簡易検索できることは、各種研究において非常に有益だと考えている。

4. PropertiesDB Web での物性検索

以下では PropertiesDB Web の利用方法を簡単に紹介したい。先に述べたように PropertiesDB Web は、これまで体系化されていなかった熱的特性情報と関連データを統一したデータベースかつウェブ検索表示システムであり、以下のサイトから利用可能である⁽³⁾：<https://thermatdb.secsite.jp/Achievement/PropertiesDBtop.html>。

上記ウェブサイトからアクセスすると最初に以下のページ(図1)が表示され、現システム上で収録された熱物性データ

PropertiesDB Web

熱関連材料データベース表示ソフト

本データベースは、熱関連材料および基本的物質について、右記の物性データを収録しております。条件を設定し検索ボタンを押すと、条件を満たす物質を収録データから抽出し、その物性データの分布をグラフに表示することができます。また、検索結果の表上で任意の物質を選択すると、その化学式に該当するPubchemのデータを一覧表示します。

未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合
国立研究開発法人 産業技術総合研究所

【種別データ数】

有機物*	4,507
無機物*	8,804

*収録データ例を表示します

【物性別データ】

標準生成エンタルピー	7,953
標準生成ギブスエネルギー	4,221
標準エントロピー	3,478
比熱容量	1,905
転移エンタルピー	7,936
転移エントロピー	1,654

現在、標準生成エンタルピー・標準生成ギブスエネルギー・標準エントロピー・比熱容量は、標準状態(298.15K、1bar)の値のみです

【検索方法】

- 検索の条件は、「元素比」・「化学式」・「名前」・「物性値」について設定できます。
- どれか一つでも設定すれば、抽出は可能です。
- 複数設定した場合は、設定した全ての条件を満たすものを抽出します。

詳しい操作方法については[マニュアル](#)をご覧ください。

PropertiesDB Web を起動

出典 ④
 ● 4 析の原子量表 (2017) 、日本化学会 原子量専門委員会
 ● 神本正行、作田宏一、小沢丈夫、坂本健二、蓄熱および蓄熱材に関する調査報告、電子技術総合研究所調査報告 第196号
 ● K. N. Marsh (ed.), Thermodynamic Properties of Organic Compounds and Mixtures: Enthalpies of Fusion and Transition of Organic Compounds, Landolt-Börnstein - Group IV Physical Chemistry, vol.8A, 1995.
 ● Wagman, Donald D., The NBS tables of chemical thermodynamic properties: Selected values for inorganic and C1 and C2 organic substances in SI units, Journal of physical and chemical reference data, v. 11, supplement no.2

図 1 公開した PropertiesDB Web のホームページ冒頭画面。(オンラインカラー)

検索条件

■ 元素比で検索

検索方法: ☒ 指定元素含む ☐ 指定元素のみ

比の種別: ☒ モル組成比 ☐ 重量組成比

	元素記号	最小	最大
1			
2			
3			
4			
5			

検索 条件クリア

■ 化学式で検索

検索方法: ☒ 完全一致 ☐ 部分一致 ☐ 前方一致 ☐ 後方一致

(例)C3H8

■ 名前で検索

検索方法: ☒ 完全一致 ☐ 部分一致 ☐ 前方一致 ☐ 後方一致

(例)Ethane

■ 物性値で検索

物性 最小 ~ 最大

元素選択

元素組成比切り替え

物性選択 X Y

図 2 PropertiesDB Web 初期起動画面。(オンラインカラー)

の概要が表示されている。

このページよりプログラムシステムを起動させると上記の検索パネルが表示されるが(図 2)、物性検索手段としては複数のキーワード入力に対応しており、多くは直感的な操作にて簡易検索が可能となっている。

画面左側の入力項目は物質の元素組成を指定するキーワード欄であり、画面右側の入力項目はより具体的な情報で物性を検索するためのキーワード群で、最初は大雑把な物性検索を行ってターゲットを絞り込む場合には、画面左の元素組成で物性値の分布を調べることが一般的かと考えられる。ここ

108

物性・技術データ最前線

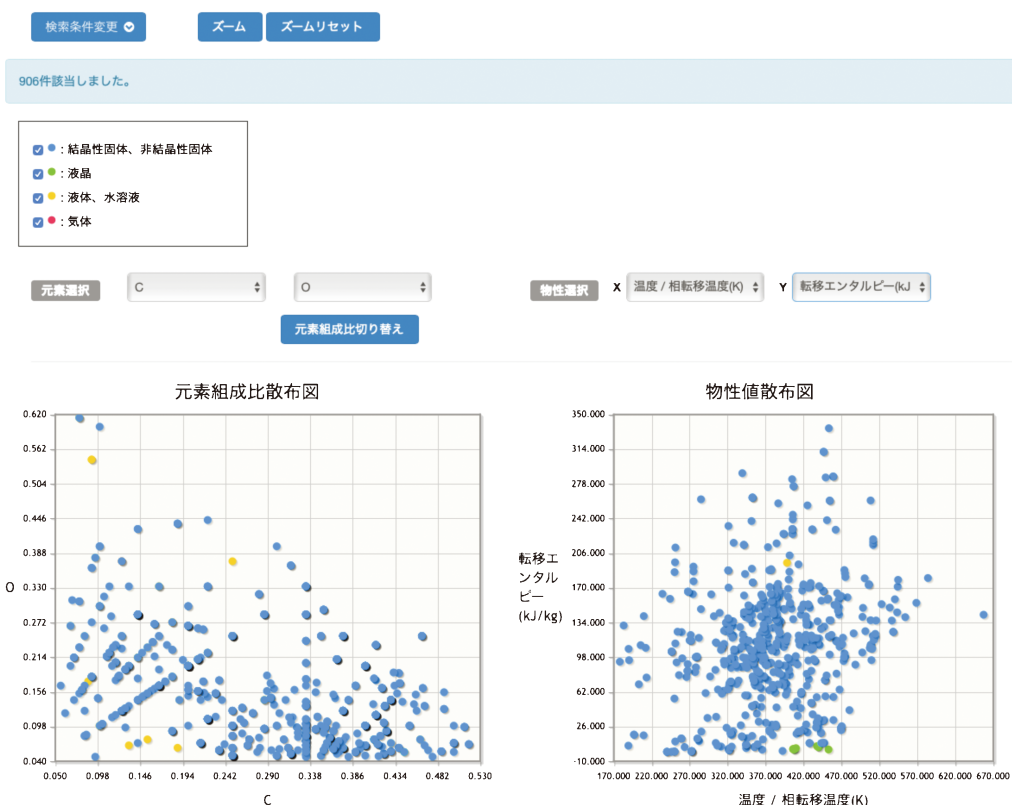


図3 有機化合物の固-液相変化。(オンラインカラー)

では元素比から物質検索を行うことを想定して、以下に具体的な操作手順の説明を続ける。例えば C, N, O 元素を物質組成に含むとして必要事項を入力して検索を実行すると、上記の画面(図3)が表示される(実際には「指定元素を含む」「モル組成比」場合だと検索条件が緩いので、システム上からは追加の検索条件を要求されることが多い)。

物性検索は平易な操作で実行可能であり、その表示手段も画面上で表示軸を切り替えるなど直感的な操作が可能である。図3の場合は温度に対する熱量(エンタルピー)の相関を示しているの、これは有機化合物の固-液相転移に伴う融解エンタルピー分布を表示していることになる。またグラフ上に表示されている検索物質に対して、画面最下部には物質情報がリストアップされており、利用者はシステム上に登録されたデータ一覧を確認することが可能である。なお検索表示パネルは4枚まで同時に表示することが可能であり、ユーザーが指定した物性値キーワードに対して簡単な2次元相関を表示することが可能であるが、これを例えば無機化合物を検索した場合を例にして以下に示す。例えばアルカリ土類金属であるマグネシウムを含む化合物をリストアップするために、Mg, O, H 元素を物質組成に含むとして必要事項を入力して検索を実行すると、今度は次頁の画面(図4)が表示される。

収録データの項で説明した通り、PropertiesDB Web 上で無機化合物のデータは標準状態(25°C, 1 気圧)で測定された標準熱力学データが基本となっているので、例えば横軸に温

度を指定して縦軸に熱力学物性を選択すると、結果は標準温度に対して直線上に重なって表示されてしまう。そこで標準熱力学量間での相関を調べるために4つの表示パネルを活用した結果が図4に示してあり、熱力学量としては標準生成エンタルピー、標準生成ギブスエネルギー、標準エントロピー、比熱容量、転移エンタルピー、転移エントロピーを選択することが可能となっている。ただデータ自体が原著から収録したものに限られるので、登録された化合物全てに対してこれら熱力学量が登録されている訳ではなく、データの有無に関しては、画面最下部の物質情報リストで詳細を確認する必要がある。

また我々が TherMAT の研究活動で整備公開したものは「熱関連材料データ」であり、その他の重要な物質データの登録は現在検討中である。しかし今後のデータベース活用の方向性として、単一のシステムで全ての情報を網羅するのは不可能であり得策でもない、例えば物質構造など従来から多用される構造情報については外部サイトを参照することによって補完する方針をとっている。物質の構造情報にも多種多様なものがあり、それぞれ特徴を持ったデータベースが公開されているところであるが、今回我々は化学情報サイトとして PubChem⁽⁸⁾ の有用性に着目して、先に述べた分子 ID をキーワードとして相互参照を可能としている。図4に示したマグネシウム含有化合物に関して、画面最下部には物質情報がリストアップされているが、ここである物質を選択すると PubChem 上に登録された基本情報(の一部)を切り出



図4 マグネシウム化合物の熱力学量データ表示例。(オンラインカラー)

して画面上に表示し、また別ウィンドウにて外部 PubChem 上での登録情報一覧を表示することが可能となっている(図 5)。例えば現在、データ駆動型研究開発の進展もあり様々な化学情報サイトが注目を集めているが、今回紹介した熱的特性情報については構造情報と比較して整備が遅れている状況であり、実際 PubChem 上では今回我々が紹介した PropertiesDB Web に掲載されている各種熱力学データの記載は認められない。もちろん PubChem(を含む各種の構造情報データベース)には有益な化学情報が沢山掲載されているので、これらサイトを相互参照することにより、ユーザーが自身の研究開発に必要な物性情報データを整理収集するのが現実的な対応だと考えている。

5. 蓄熱材探索への応用

最後に計算化学と熱物性データを活用した研究例として、蓄熱材の理論計算化学研究について紹介する。蓄熱とは時空間を超えて熱の保存と輸送を可能とする技術であり、排熱を熱として直接活用できる基盤技術として非常に重要である⁽⁹⁾。一般的に蓄熱は、物質固有の比熱を利用する顕熱蓄熱、物質の相変化に伴った潜熱を利用する潜熱蓄熱、化学反応を利用した化学蓄熱に大別されるが、我々は高密度蓄熱の可能性を追求するのが目的であるので、ここでは分子シミュレーション技術を活用した高密度潜熱蓄熱材の計算分子設計を紹介する。

材料ID	材料名	CAS番号	化学式①	化学式②	分子量	状態①	状態②	温度 / 相転移温度(K)	標準生成エンタルピー(kJ/kg)	標
13474	MgOH+		MgOH	H1O1Mg1	41.318	水溶液	水溶液	298.150		
13475	Mg(OH)2		Mg(OH)2	H2O2Mg1	58.326	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-15851.200	
13476	Mg(OH)2		Mg(OH)2	H2O2Mg1	58.326	非結晶性固体	非結晶性固体	298.150	-15782.000	
13477	Mg(OH)2		Mg(OH)2	H2O2Mg1	58.326	気体	気体	298.150	-9618.350	
13478	Mg(OH)2		Mg(OH)2	H2O2Mg1	58.326	水溶液	水溶液	298.150	-15890.700	
13510	MgCl2 · H2O		MgCl2 · H2O	H2O1Mg1Cl2	113.226	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-8537.170	
13511	MgCl2 · 2H2O		MgCl2 · 2H2O	H4O2Mg1Cl2	131.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-9750.840	
13512	MgCl2 · 4H2O		MgCl2 · 4H2O	H8O4Mg1Cl2	167.274	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-11352.600	
13513	MgCl2 · 6H2O		MgCl2 · 6H2O	H12O6Mg1Cl2	203.306	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-12291.900	
13547	Mg(ClO4)2 · 2H2O		Mg(ClO4)2 · 2H2O	H4O10Mg1Cl2	259.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-4701.400	

IUPACName	MolecularFormula	CanonicalSMILES	IsomericSMILES	URL
magnesium;hydroxide	HMgO+	[OH-].[Mg+2]	[OH-].[Mg+2]	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/21225543
magnesium;hydroxide	HMgO+	[OH-].[Mg+2]	[OH-].[Mg+2]	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5162449

図5 マグネシウム化合物の熱力学量データと PubChem サイトとの連携。(オンラインカラー)

固-液相転移はすべての物質が持つ基本的性質であり、原理的にあらゆる物質が潜熱蓄熱の候補となりうるが、現時点で蓄熱に利用された物質は限定的であり、また「融解潜熱の理論上限はどの程度見込めるか?」といった学術的な問いに対しても、これまで明確な回答はなかった。そこで我々は図3に示すように既存物質の熱物性を事前調査して高密度蓄熱の可能性を持つ候補化合物を絞り込み、特に糖アルコール化合物の分子構造と特異な熱物性に注目することで、糖アルコール分子構造を鋳型とした計算分子設計を行うことにより高密度潜熱蓄熱の可能性を検討した。天然糖アルコール化合物としては主鎖骨格部分の炭素数が4~6個の化合物が知られており、我々はまずC4~C6糖アルコール分子の系統的な分子シミュレーションを実行して、天然化合物の持つ分子構造と熱物性との構造-機能相関を解明することを試みた。特にC6糖アルコール化合物に関しては図6に示す通り4つの構造異性体が存在し、分子構造の些細な違いが大きな融解潜熱/融点の違いになって現れることが実験事実として知られているため、計算による熱物性解析には格好の計算対象である。

紙面の関係で計算手法や解析結果の詳細は原著論文に譲り要点のみを説明すると、まず固-液融解過程の分子動力学計算を系統的に実行し、相変化に伴う各分子の構造/エネルギー変化を解析することで蓄熱機構の分子論的要因を解析した⁽¹⁰⁾。次にこの結果を基に高密度蓄熱を達成するための分子設計指針を提案し、この設計指針に従って理論計算から人工化合物を計算機上でデザインして、その熱物性も分子シミュレーションから予測した。まず我々が提案する分子設計のガイドラインは以下の3要素であり、このうち前2者は既存材料のシミュレーション解析から導き出した内容で、残り一つは熱物性データを活用して得られた経験的知見である：(1)分子間相互作用を稼ぐ様に分子骨格を直鎖上に伸張する、(2)分子内静電反発(歪み)の効果を除く為に、水酸基は極力離れた配向を持つように配置する、(3)そして炭素鎖長に関して

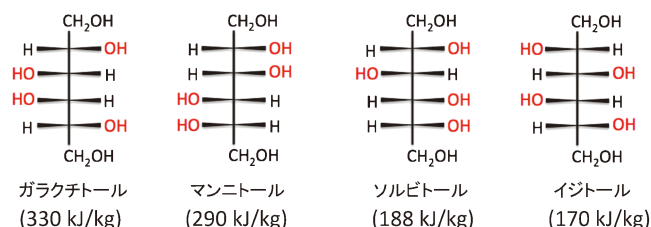


図6 C6糖アルコール分子の分子構造と熱物性(カッコ内は蓄熱密度 kJ/kg)。(オンラインカラー)

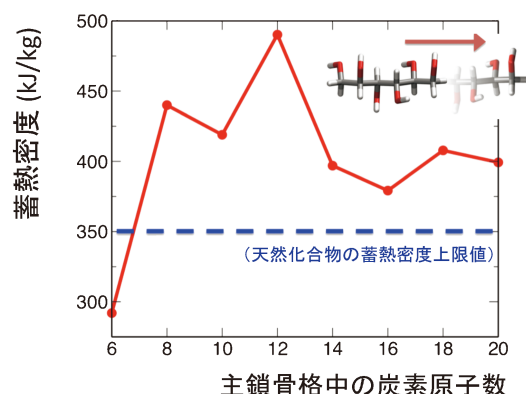


図7 人工糖アルコール化合物の分子鎖長と蓄熱密度との相関。(オンラインカラー)

は偶数個の炭素からなる分子鎖に限定する。

この3つのシンプルな設計指針に沿って人工糖アルコール化合物を計算機上でデザインして、その蓄熱物性を固-液融解過程の分子動力学計算から求めることでデザイン分子の蓄熱特性を計算から予測した。なお計算分子設計では、分子動力学計算のみならず結晶構造予測など複数の計算化学技術を活用して新規化合物のデザインを行なっているため、興味のある読者は原著を参考にされたい⁽¹¹⁾。ここでは重要な結果を述べるに留めるが、分子鎖の大きな糖アルコール化合物

に関しても興味深い分子物性が明らかとなり、蓄熱密度と融点の関係を要約すると図7に示す通りで、炭素数の増加に伴って蓄熱密度も増加するが炭素数には極大値があり、C12化合物の分子長を超えると蓄熱密度は頭打ちになり(～0.5 MJ/kg)、以降は減少に転じることが確認できる。理論計算で得られた最も重要な点は、「水素結合由来の極性有機分子結晶からなる物質に関して、分子構造をうまくデザインする事により既存材料を大きく上回る蓄熱が可能である」ことを純粋に理詰めで証明した点にある⁽¹¹⁾。そして恐らくこの事実は、現在知られている有機化合物構造を鋳型として用いた場合、融解潜熱の上限は高々 0.5 MJ/kg であることを予測しており、潜熱蓄熱物質の新規探索に関しては一つの方向性を与える結果である。

6. 今後の展望など

本項では熱関連材料データベース PropertiesDB Web の紹介と、計算化学と熱物性を活用した研究例として、高密度潜熱蓄熱材の計算分子設計を説明した。PropertiesDB Web については引き続きデータの追加を行っており、TherMAT 内外の利用者の声を反映してシステムのアップデートを続ける計画である。また計算化学と熱物性データを活用した化学蓄熱材の探索も並行して進めており、特に我々はアルカリ土類金属化合物の蓄熱特性に興味を持って研究を進めている。例えば図4に示した通り、マグネシウム含有化合物の標準熱力学データを活用することで、化学反応における原理的な反応熱を推定することは可能であるが、化学反応の律速段階を同定するなど分子論的な解析には、やはり計算化学研究が必須となる。我々の計算化学研究における当面の課題は、典型的な化学蓄熱系である酸化マグネシウム水和反応過程の化学反応解析であるが、妥当な構造モデルに基づく電子状態計算の結果と熱力学データとの整合性をとることで、実際の反応機構を解明すると同時に化学蓄熱の実用化につながると期待している。

本研究は経済産業省および NEDO の支援のもとで実施した。また未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合(TherMAT)事務局からは多大なご支援を頂いた。潜熱蓄熱

材の計算化学研究に関しては、稲垣泰一博士(現慶應義塾大学)が先導して実施した研究成果であり、化学蓄熱の計算化学研究については、石村和也博士(現クロスアビリティ社)らとの共同研究である。また熱関連材料データベースの開発に関しては、馬場哲也博士(前 TherMAT)、須田幸子(TherMAT)さんらとの共同研究の成果である。

文 献

- (1) 未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合 HP.
<http://www.thermat.jp>
- (2) 産業分野の排熱実態調査報告. <http://www.thermat.jp/HainetsuChousa/HainetsuReport.pdf>
- (3) PropertiesDB Web(熱関連材料データベース表示ソフト).
<https://thermatdb.securesite.jp/Achievement/Properties-DBtop.html>
- (4) K. N. Marsh (ed.): Landolt-Börnstein Group IV Physical Chemistry, vol. 8A, (1995).
- (5) D. D. Wagman, *et al.*: J. Phys. Chem. Ref. Data **11**, Suppl. 2 (1982).
- (6) 神本正行, 作田宏一, 小沢丈夫, 坂本龍二: 蓄熱および蓄熱材に関する調査報告, 電子技術総合研究所調査報告, 第196号 (1978).
- (7) Landolt-Börnstein Group IV Physical Chemistry, vol. 19A1, (1999).
- (8) 米国 NCBI が提供する化合物データベース PubChem.
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>
- (9) 鈴木 洋 監修: 熱エネルギーの有効活用に向けた蓄熱技術開発, シーエムシー出版, (2022).
- (10) T. Inagaki and T. Ishida: J. Phys. Chem. C, **120**(2016), 7903–7915.
- (11) T. Inagaki and T. Ishida: J. Am. Chem. Soc., **138**(2016), 11810–11819.



石田豊和

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★
2003年 京都大学大学院理学研究科 化学専攻 博士課程修了

自然科学研究機構 分子科学研究所を経て2006年より産業技術総合研究所, 現在に至る。この間, 経済産業省産業技術環境局研究開発課(2011～2012年), 米国オークリッジ国立研究所客員研究員(2016年より)。研究・専門分野: 理論計算化学, 特に QM/MM 計算や分子シミュレーション手法を用いたタンパク質機能(特に酵素反応)の理論解析

◎計算化学研究の経験を生かして TherMAT へは開始当初より参画し, 高密度蓄熱材の計算化学研究を担当した。また TherMAT 技術研究組合運営/技術委員を兼任。

E-mail: toyokazu.ishida@aist.go.jp

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★