特集

最先端量子ビームで切り拓く熱電変換材料の研究最前線

企画にあたって

宮崎秀俊[1]　藤井　進[2]　山本知一[2]　田中秀明[3]
新里恵多[3]　佐藤豊人[4]　横井達矢[5]

熱電変換材料は，熱エネルギーを直接電気エネルギーへと変換する機能を持つことから，持続可能なエネルギー社会の実現に向けて極めて重要な研究対象である．この材料の開発には，電気的特性と熱的特性の相反する性質を同時に最適化する必要があり，そのためには電子構造およびフォノン構造の精密な制御が不可欠である．こうした設計指針を実現するための有力な手法として，放射光，中性子線，電子線といった量子ビーム技術が近年ますます注目を集めている．

量子ビーム技術は，電子構造やフォノン構造をはじめ，材料の組織や特性をナノスケールからマクロスケールに至るまで観測するための強力なツールであり，熱電変換材料の研究開発に幅広く応用されてきた．これらの技術を用いた観測は，材料の機能性メカニズムを深く理解するための知見を提供するとともに，実験データと理論モデルの橋渡しを可能にしている．さらに，得られたデータは，マテリアルズ・インフォマティクスの発展に貢献し，シミュレーションの精度向上や効率的な材料探索に資するものである．これらの成果は，熱電変換材料だけでなく，電子材料，触媒材料，電池材料といった広範な分野においても重要な知見をもたらしている．

しかしながら，量子ビーム技術を活用した熱電変換材料の研究においても，依然として未解決の課題が残されている．例えば，電子構造やフォノン構造の精密観測から得られる知見をどのように材料設計に活用するか，あるいは実験と理論の橋渡しをさらに深化させる方法など，多くの研究課題が存在する．また，これらの課題解決に向けた研究を俯瞰し，多分野の研究者が意見交換する機会は限られているのが現状である．

本特集では，最先端の量子ビーム技術が熱電変換材料研究に与える影響とその可能性に焦点を当てる．具体的には，光電子分光装置を用いた電子構造の詳細な観測や，中性子線による構成元素の配置と磁気構造の解明，蛍光X線ホログラフィーを活用したドーピング効果の評価など，多様なアプローチを取り上げる．また，X線非弾性散乱法を用いたフォノン構造の解析や，マルチプル拡散法を活用した組成探索といった新技術についても取り上げる．さらに，これらの成果がマテリアルズ・インフォマティクスや計算シミュレーションとの連携を通じて，材料設計の効率化や新規材料の創出にどのように寄与するのかを明らかにする．

本特集が提供する知見は，熱電変換材料のさらなる高性能化への指針を示すとともに，関連分野の研究者間の学術交流を促進するものである．また，量子ビーム技術を活用した材料研究の最前線を広く共有することで，多分野における研究の進展を後押しする契機となることを期待する．

最後に，本特集企画にご寄稿いただきました執筆者の方々に，心より感謝申し上げます．本特集が，材料科学および関連分野における新たな研究の方向性を示す契機となることを願っております．

★★★