戦略的国際科学技術協力推進事業（日中韓研究交流）

1. 研究課題名：「省エネルギー社会のための新熱電材料の開発に関する研究」
2. 研究期間：平成 21 年 12 月～平成 25 年 3 月
3. 支援額： 総額 14,415,500 円
4. 主な参加研究者名：

日本側（研究代表者を含め 6 名までを記載）

	氏名	所属	役職
研究代表者	知京 豊裕	物質・材料研究機構	ユニット長
研究者	山本 淳	産業技術総合研究所	主任研究員
研究者	足立 哲也	物質・材料研究機構	技術補助員
研究者	He Gang	物質・材料研究機構	博士研究員
参加研究者 のべ 4 名			

相手側（研究代表者を含め 6 名までを記載）

	氏名	所属	役職
研究代表者	He Yuan-Jin	清華大学 物理学科	教授
研究代表者	Seong Ihl woo	KAIST	教授
研究者	HOU Qing-Run	清華大学 物理学科	准授
研究者	ZHANG H Y CHEN	清華大学 物理学科	准教授
研究者	Gil Ho Kim	KAIST	博士研究員
研究者	Soo Ho Kim	KAIST	博士課程学生
参加研究者 のべ 10 名			

5. 研究・交流の目的

本研究・国際交流では、最も廃熱利用が期待される 400℃～600℃の範囲で熱電変換効率の高い熱電材料を計算科学による材料設計、コンビナトリアル手法による合成、ハイスループット計測などを用いて探索し、新材料を開発することを目的としている。

そのために、熱電材料に関する理論計算で実績のある中国、清華大学のチームによる材料設計、コンビナトリアルスパッタ合成と材料インフォマティクス作成で実績のある韓国 KAIST のチーム、コンビナトリアルパルスレーザー堆積法を使った酸化物合成と高速熱電特性評価で実績のある日本、物質・材料研究機構と産業技術総合研究所の合同チームで新熱電材料探索を進める。

6. 研究・交流の成果

6-1 研究の成果

計算科学による熱電材料の設計を担当した清華大学ではTiO₂に多くの遷移金属を入れた際の不純物準位を計算し、結果として、NbやCoが価電子帯に近い準位を形成し、キャリアを発生する可能性が高いことを示した。これは熱電材料を設計する際の指針となった。また、清華大学ではZnO系や有機材料の系の計算も行い、これらの結果は日韓の研究機関に情報として提供された。

これらの計算結果に基づいて、日本の物質・材料研究機構と産業技術総合研究所ではパルスレーザーコンビナトリアル堆積法を用いて、TiO₂系も含め、二元系酸化物、三元系酸化物のゼーベック係数を調べた。その結果、TiO₂-Al₂O₃-Nb₂O₅系では TiO₂:Al₂O₃:Nb₂O₅=7:2:1の時に-300 μV/K 高いゼーベック計数の組成をみつけることができた。

更に高いゼーベック係数をもつ材料を探索するために、コンビナトリアル手法を使い、

TiO₂-Cu₂O, V₂O₅-Cu₂O, HfO₂-Cu₂O, Nb₂O₅-Cu₂O などの二元系酸化物の試料を作製し、そのゼーベック係数を系統的に調べた。その結果 HfO₂-Cu₂O 系で全体的に高いゼーベック係数を示す組成が見つかったが、詳細に計測すると、その値はいずれも、50-60 μ V/K 程度であり、今回、TiO₂ 系で見つかった材料ほど高くないことがわかった。

韓国 KAIST のチームは、中国チームが示した、ZnO 系、Co₂O₃ 系、有機材料系の熱電材料に注目し、これらの材料をコンビナトリアルスパッタ法で探索した。ZnO-In₂O₃ 系で -160 μ V/K という高いゼーベック係数の組成領域を見いだした。また、導電性ポリマーである PEDOT:PSS にグラフェン (C) を 2w% 添加することで、ゼーベック係数 58.77 μ V/K、出力係数 0.14W/mK を実現した。

日韓連携として、蒸気圧が高く抜けやすい Na をもつ Co₂O₄ の薄膜作製とその後処理を KAIST のチームと物質・材料研究機構-産業技術総合研究所チームで行った結果、ゼーベック係数 144.53 μ V/K を達成し、NaCo₂O₄ 薄膜の熱電特性を初めて計測することができた。

6-2 人的交流の成果

今回の日中韓の研究には中国清華大学、韓国 KAIST から数人のポスドクや大学院生が参加していた。これらの研究交流を通じて、清華大学の優秀な計算科学専門の女性の研究員や韓国 KAIST の優秀な博士課程の学生を見出すことができた。

清華大学の He 教授は金属の熱電材料の理論計算と実験も進めており、今回の日中韓交流プログラムではこの分野の研究を行うことができなかったが、今後は物質・材料研究機構の金属シリサイドグループとの意見交換を進めていくことになった。

KAIST の Woo 教授とは熱電材料分野だけでなく、コンビナトリアル材料科学の分野での交流も盛んである。Woo 先生の研究は多岐に渡り、コンビナトリアル手法をつかった酸化物触媒の分野では世界的にも知名度は高い。また、KAIST 内でも多くの共同研究をおこなっており、Woo 教授との連携は KAIST との今後の連携にも役立つと期待される。2014 年の秋には第 8 回コンビナトリアル材料科学と技術に関する国際会議がオーストラリアで開催されるが、そのサテライトとして熱電材料も含む、酸化物の応用に関するワークショップを KAIST で開催する予定である。

7. 主な論文発表・特許等 (5 件以内)

相手側との共著論文については、その旨を備考欄にご記載ください。

論文 or 特許	・論文の場合： 著者名、タイトル、掲載誌名、巻、号、ページ、発行年 ・特許の場合： 知的財産権の種類、発明等の名称、出願国、出願日、 出願番号、出願人、発明者等	備考
論文		