

「エネルギーの高度利用に向けたナノ構造材料・システムの創製」
平成14年度採択研究代表者

河本 邦仁

(名古屋大学大学院工学研究科 教授)

「ナノブロックインテグレーションによる層状酸化物熱電材料の創製」

1. 研究実施概要

固体中の熱の流れを電気の流れに変換する熱電変換材料には、熱的・電氣的に互いに相反する物性が求められる。金属酸化物は、この矛盾した要求への革新的な解答を見出している新しい候補物質群であると我々は考えている。

本研究では、金属酸化物の結晶構造が金属-酸素配位多面体を構造単位としたナノサイズの「機能ブロック」から構成されており、その組み合わせによって単一の構造要素としては全く矛盾するような物性が発現しうること、さらに酸化物においては、電子強相関効果などによって巨大なエントロピー輸送が生じる可能性に着目して、非従来型の伝導機構によるキャリア伝導ブロックと、格子振動の調和性を切断するフォノン散乱ブロックを組み合わせることにより、従来の熱電物性論の枠から解放された巨大な熱起電力と高い導電率の両立、あるいは電荷輸送と熱輸送の独立制御を可能とする層状酸化物熱電材料の創製を目指す。

本年度は研究の初年度として、層状コバルト酸化物を中心に、ドーピングによる原子価制御や化学量論制御によるキャリア伝導ブロックのチューニング、精密な構造解析や物性測定による伝導機構の解析、粒子配向セラミックスやナノヘテロ構造セラミックスの合成による多結晶体の性能向上、良質な単結晶試料の合成法の検討など、次年度以降の研究計画を推進する上で必要不可欠な基礎的知見の収集や要素技術の開発が各グループで並行して進められた。

次年度以降は、キャリア伝導ブロックの本質に迫る物性物理的理解と優れた熱電物性の発現機構の解明、フォノン散乱ブロックによる熱伝導率の低減効果と設計指針、所望のナノブロックを組み合わせることで調和的に熱力学的安定相へ誘導する技術の開発、継続的な物質探索による新たな候補物質の開発、計算化学の支援による酸化物熱電変換材料の評価などへと展開する。また、グループ間の緊密な連携と内外の情報交流の活性化ならびにチームの国際的なプレゼンスの表出を目的としたサテライトシンポジウムを開催する予定である。

2. 研究実施体制

(1) 名大グループ (リーダー: 河本邦仁)

- ①河本 邦仁、名大院工、教授
- ②ナノブロックインテグレーションの指針構築・研究の統括
- ①増田 佳丈、名大院工、助手
- ②ナノブロックインテグレーション結晶構造設計
- ①太田 慎吾、名大院工、博士後期1年
- ②ナノブロックインテグレーション結晶合成
- ①濱田 美子、名大院工、修士2年
- ②ナノブロックインテグレーション結晶合成
- ①布田 潔、秋田大学工学資源学部環境物質工学科、助教授
- ②ナノブロックインテグレーション結晶構造設計

(2) 九大グループ

- ①大瀧 倫卓、九大院総理工、助教授
- ②ナノブロックの不定比性と構造制御の指針構築・研究の統括
- ①野尻 能弘、九大院総理工、博士後期2年
- ② NaCo_2O_4 系層状酸化物熱電材料の微細構造とサイト選択置換効果
- ①前原 清香、九大院総理工、修士1年
- ②ナノヘテロ構造を導入したZnO系酸化物熱電材料の開発

(3) 東北大グループ

- ①梶谷 剛、東北大院工、教授
- ②指針構築・理論計算・研究の統括
- ①小野泰弘、東北大院工、助手
- ②ナトリウムコバルト系熱電酸化物の創製・結晶構造解析
- ①宮崎 譲、東北大院工、助手
- ②新規ミスフィット型コバルト酸化物の設計・結晶構造解析
- ①加藤信彦、東北大院工、修士2年
- ②ナトリウムコバルト酸化物熱電半導体の元素置換効果
- ①田山俊介、東北大院工、修士2年
- ②ミスフィット系コバルト・銅酸化物半導体の結晶構造と熱電性能
- ①鈴木洋介、東北大院工、修士1年
- ②新規ミスフィット型コバルト酸化物の合成・結晶構造解析
- ①小川秀憲、東北大院工、修士1年
- ②コバルト硫化物熱電半導体の創製
- ①木村大亮、東北大院工、修士1年
- ②コバルト・マンガン酸化物熱電発電デバイスの創製と評価

(4) 早大グループ

- ①寺崎 一郎, 早大理工, 助教授 (2003年4月より教授)
- ②ナノブロックレベルの伝導機構の解明と熱電変換材料設計指針の確立
- ①藤井 武則, 早大理工総研客員研究員, 科技団さきがけ研究PD
- ②層状コバルト酸化物の高品質単結晶成長と輸送現象の精密測定と解析
- ①小林 航, 早大理工, 博士後期課程1年 (さきがけ研究RS)
- ②エントロピー逆流機構による新熱電変換材料の探索

(5) 産総研グループ

- ①舟橋良次、産総研生活環境系、主任研究員
- ②コンビナトリアルケミストリー・研究統括
- ①三上祐史、産総研生活環境系、CREST研究員
- ②Co系酸化物単結晶の合成と評価
- ①鹿野昌弘、産総研生活環境系、主任研究員
- ②コンビナトリアルケミストリー