

平成 30 年度物質科学研究会

日時：平成 30 年 12 月 14 日(金)10:00-17:00

場所：エッサム神田ホール 1 号館 401 会議室

〒101-0045 東京都千代田区神田鍛冶町 3-2-2 TEL 03-3254-8787

<http://www.essam.co.jp/hall/kaijo/index.html>

主催：中性子産業利用推進協議会

茨城県中性子利用研究会

共催：J-PARC MLF 利用者懇談会(結晶解析・pdf 解析分科会)

協賛：総合科学研究機構(CROSS)中性子科学センター

参加費：無料

ただし、資料代として 5,000 円いただきます。なお、中性子産業利用推進協議会の会員企業の皆さまと大学、研究機関の方は無料です。それ以外の方は事務局までご相談ください。資料代は当日徴収させていただきます。

テーマ：熱電材料開発の最前線と中性子回折の応用

趣旨：

省エネルギーの観点から低い温度での排熱利用や、燃費改善のために自動車のエンジンルーム内の排熱利用のために、高効率の熱電材料の開発に対する期待が高まっています。本研究会では、熱電変換材料に関して、最前線の研究開発動向から、熱電変換を効率的に行う材料構造の解明に至るまで幅広く議論します。

プログラム

10:00-10:05 開会挨拶 主査 大山研司 (茨城大学)

<チュートリアル>

10:05-11:00 高効率熱電変換材料の研究動向—材料中の構造に着目して

池田輝之 (茨城大学)

世界で生産されるエネルギーの 60%以上が「廃熱」として捨てられている。熱電変換素子は熱エネルギーから電気エネルギーを取り出す優れた特徴をもつ。二酸化炭素排出の抑制や将来の資源エネルギーの枯渇への対処といった地球規模の課題に対しては多方面からの対策を要すると考えられるが、エネルギー利用の高効率化を可能とする熱電変換技術はその一助となると期待される。この技術の普及に向けて、エネルギー変換効率や出力の向上は最も重要な課題の一つである。材料中にはさまざまなスケールの「構造」があり、さまざまな形で熱電特性にも関わっている。本講演では、熱電変換に使用される材料中の構造に着目し、その制御による特性向上への取り組みを紹介する。

11:00-11:55 中性子では何がみえるのか？ — 材料研究の視点から —

大山研司 (茨城大学)

新しい機能性材料の開発には原子レベルでの現象の理解が結局は近道となる。原子構造の理解には電子線や X 線が多く使われるが、本講演会では、茨城県と茨城大学の大きな強みである中性子のメリットについて説明する。中性子には材料科学の視点で以下の利点がある。

- 1) 電池材料などで重要な軽元素(水素、リチウム、酸素など)の観測精度が高い。
- 2) 物質への透過力が X 線、電子線に比べはるかに大きく、例えば、駆動中のエンジンの中身を動画撮影できる。
- 3) 磁気モーメントを持つので磁性材料の磁氣的性質を原子レベルで観測できる。分光実験

を行えば、磁気相互作用を直接定量化することも可能である。
また、通常の回折実験の事だけでなく、最近急速に発達してきた手法である中性子ホログラフィーにも触れ、新しい視点での熱電材料研究について提案したい。

11:55~13:00 昼 食

<構造解析>

13:00-13:30 熱電変換層状結晶化合物セレン化クロム銀(AgCrSe₂)における
原子ダイナミクス

川北至信 (J-PARC)

セレン化クロム銀(AgCrSe₂)は CrSe₂層と Ag層が交互にサンドイッチされた層状構造を有し、450K以上ではAgイオンが動き出す超イオン伝導体であることが知られている。最近、この物質の熱電特性にも関心が持たれており、原子ダイナミクスの観点から熱電性能に関わるフォノンの性質を調べた。その結果、この物質の熱電特性にとって有利な低熱伝導性は、Agイオンの流動化に伴って横波フォノンがオーバーダンプする現象と関係があることが分かった。

13:30-14:00 熱電材料の計算材料設計と実験による実証

間 広文 (豊田中研)

熱電素子の高い熱電変換効率を得るには、用いている熱電材料の熱電特性を高める必要があるが、通常的手法では熱電特性の劇的な向上は期待できない。本講演では、熱電特性を劇的に向上させたコンセプト(2元素同時ドーピング、結晶欠陥、エネルギーフィルタリング)を紹介する。また、熱電素子の応用として、太陽光発電+給湯システムを検討したので、それについても紹介する。

14:00-14:30 熱電における変換効率の向上と資源制約からの脱却：ナノ構造化と熱電硫化物

太田道広 (産総研)

熱電変換の実用化を促進するために、我々は、材料からモジュールまでの研究開発を一貫して進めている。本講演では、ナノ構造形成によるPbTeバルク体熱電材料の高効率化や資源制約の少ない熱電硫化物の創製、そして、それらを用いた熱電発電用モジュールの開発について紹介する。我々は、ナノ構造の形成によりPbTeバルク体の熱電性能指数 ZT を、従来材料を凌駕する1.9まで向上させることに成功した。その上、それを用いたモジュールで変換効率12%(従来技術の2倍程度)を達成した。さらに、有害・希少元素を用いないと達成が困難とされていた $ZT=1.0$ の壁を銅と硫黄を主成分とした熱電硫化物コルーサイトで突破することに成功した。

<熱電素子>

14:30-15:00 NIMSにおけるユビキタス系熱電素子の開発：現状とこれから

高際良樹 (NIMS)

現在、超スマート社会を下支えする「地産地消型」自立電源技術の創出が求められており、1兆個とも言われている各種センサーの駆動に必要な電力の確保が大きな課題である。NIMSでは広範な普及に資する低コストかつ無害な熱電発電素子の研究開発を行っている。新材料開発に向け、計算科学を援用したスクリーニングを行い、候補材料の選定および出力特性の向上指針を構築する。また、近年、マテリアルズ・インフォマティクスによる材料研究の取り組みが多数報告されている。本講演では、計算科学・実験・機械学習を相補的に組み合わせた材料研究の一試行としてIoTセンサー用熱電発電素子の創出へ向けた取り組みについて紹介する。

15:00~15:20 休 憩

<ラットリング>

15:20-15:50 熱電材料におけるカゴを持たないラットリングのダイナミクス
李哲虎 (産総研)

高い熱電性能を得るには高い電気伝導率と低い熱伝導率を併せ持つ必要がある。この相反する性質を両立させるには、原子の大振幅振動「ラットリング」を活用することが有効とされている。これまでラットリングは大きなカゴ状構造の中に充填された原子でのみ生じると考えられていた。一方、我々はカゴ状構造を持たない平面配位構造の材料でもラットリングが発現することを発見した。平面配位構造を持つテトラヘドライトや層状ビスマスサルファイドの結晶構造解析やフォノン解析を行い、平面配位でラットリングが発現する条件なども明らかにした。本成果は熱電材料探索の範囲を飛躍的に広げ、より高い熱電性能を持つ新材料の創製に資すると期待される。

<ナノワイヤ>

15:50-16:20 熱電変換材料のナノワイヤー化で性能が上がるのか
長谷川靖洋 (埼玉大学)

熱電変換現象の特徴的な物性値であるゼーベック係数 S は、状態密度 $g(E)$ とエネルギー E の傾きに比例することから、 ZT を飛躍的に向上させるため熱電変換材料の構造を変える、つまり、超格子やナノワイヤー構造などを採用し、量子効果を取り入れ、低次元状態密度を導入することで、飛躍的なゼーベック係数の向上が達成できるという理論的な指針が得られている。本研究グループでは、有効質量が小さくバンド構造が分かっている Bi 材料とナノテクノロジーに着目し、ナノワイヤー熱電変換素子における作製方法と物性測定について焦点を当て、その最前線を紹介する。

<フォノン>

16:20-16:50 フォノンエンジニアリングと中性子散乱実験への期待
塩見淳一郎 (東京大学)

16:50-17:00 閉会挨拶とお知らせ 峯村哲郎 (茨城県)

交流会 : 17:20~19:20 @ ワインホール 130

神田駅近くの「ワインホール 130」で交流会を開催します。参加費は中性子産業利用推進協議会の補助があり 2,000 円です。講演者と参加者のざっくばらんな意見の交換の場になりますので、是非ご参加ください。参加費は当日いただきます。なお、当日キャンセルされた場合には参加費をいただきます。

<参加申込み>

申込み先 : 中性子産業利用推進協議会 事務局 大内 薫

E-mail: info@j-neutron.com

(1) 名前, (2) 所属, (3) 連絡先(電話番号, E-mail address)

(4) 交流会への参加の有無(領収書を発行します)

をご記入の上、メールにてお申込みください。

<問合せ先>

林 眞琴

総合科学研究機構中性子科学センター

茨城県東海村白方 162-1

いばらき量子ビーム研究センター D409

TEL: 029-219-5310 Ext:3211
E-mail: m_hayashi@cross.or.jp

＜会場へのアクセス＞

＜貸し会議室＞エッサム神田ホール

東京都千代田区神田鍛冶町 3-2-2

JR 神田駅北口徒歩 1 分

東京メトロ銀座線神田駅 3 出口前

<http://www.essam.co.jp/hall/access/>



＜交流会のご案内＞

会費：2,000 円

時間：17:20-19:20

会場：ワインホール 130

(右の案内図をご参照ください)

<http://tabelog.com/tokyo/A1310/A131002/13144314/>

東京都千代田区内神田 3-18-8 ナルミビル 4F

TEL: 03-5295-2525

