



これまでの研究を通して

名古屋大学大学院博士課程3年
工学研究科 結晶材料工学専攻
山本 晃生

私は、名古屋大学大学院工学研究科結晶材料工学専攻の博士課程3年として生田研究室に所属し、同大学エコトピア科学研究所の竹内恒博准教授の下、環境調和元素から構成される熱電材料を開発する研究をしています。この度、本稿を執筆する貴重な機会を与えて頂いた中で、研究内容を述べると共に研究生活を通して感じたことを述べさせていただきます。

化石燃料枯渇問題やその燃焼に伴う地球温暖化ガスの排出問題が深刻になっている中、廃熱から有用な電力を再生する熱電発電技術が近年注目されています。熱電発電は、ゼーベック効果を利用して熱エネルギーを電気エネルギーに直接変換できる技術のことをいい、そのエネルギー効率は素子内に搭載された熱電材料の物性から算出される無次元性能指数 ($ZT = S^2 \sigma / (\kappa_{el} + \kappa_{lat})$) の増加関数になっています (S , σ , κ_{el} , 及び κ_{lat} はそれぞれゼーベック係数, 電気伝導率, 電子熱伝導率, 格子熱伝導度)。したがって、高い ZT を有する材料を開発する必要があります。さらに、産業や民生において消費される電力の大半は 250° 以下の低温廃熱になっており、且つ、廃熱は拡散的に広がって消失することを踏まえると、電力を回収するためには多量の熱電発電素子を必要とします。したがって、低温廃熱から有効な電力を回収するには、その温度域で高い ZT をもつだけでなく、材料が安価で無害な元素から構成されることも重要になります。ところが、低温廃熱温度域で高い ZT を有している代表的な既存の熱電材料 (Bi-Te 合金) には毒性元素やレアメタルを多く含まれていることが、実用化への足かせになっています。

ZT を決定している熱電物性の内、 S , σ , κ_{el} (以下では3つを電子物性と呼ぶ) は電子構造によって一意に決まり、一方 κ_{lat} はフォノン分散により決定されていることが知られており、特に高い ZT を示すためには熱電材料として良い電子構造を持つことが必要条件になっています。私をご指導下さっている竹内准教授は、これまでの研究の一部ではありますが、様々な材料に対して理論と実験の双方から電子構造を詳細に解析し、電子物性の支配因子とその制御因子を解明されてきました。さらに、そこで得られた知見をもとに熱電材

料として良い電子構造を持つ条件を提案し、実際に第一原理計算を用いることで材料を選定した結果、安価で無害な元素から構成され、且つ、良い電子物性(電子構造)をもった Si_2Ti 構造 Al-Mn-Si 合金を見つけられました。ところが、この材料では、フォノン分散が適切でないことに起因し、もう一つの因子である格子熱伝導度が大きい (約 $10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) ことが原因で ZT が低いという問題がありました。

私は、Al-Mn-Si 合金の ZT を増大させることを目標に掲げ、いかに熱電材料としての良い電子構造を維持したまま格子熱伝導度を下げたかを課題としています。一般的に構成元素を質量差の大きい重元素で部分置換すると、格子熱伝導度が低減することが知られていますが、同時に電子物性を低下させる要因にもなります。そこで、電子物性を変えない置換元素を第一原理計算(バンド計算とクラスター計算)を使って選定さえすれば、格子熱伝導度だけを低減させて ZT を増大できるであろうと考え、構成元素を重元素で部分置換することによる Al-Mn-Si 合金の物性改質を通して ZT を上げる取り組みを始めました。選定した結果、Mn を重元素 Ru や Re で部分置換することが有効であることがわかり、さらに、実験により、これらの元素で部分置換しても電子物性を低下させずに格子熱伝導度のみ低減されることを確認しました。次に、Ru と Re の単独で置換できた 3 at% Ru と 1 at% Re を共置換することもできるのではないかと考え、試料作製を行ったところ、格子熱伝導度のみをさらに下げることが出来ましたが、 ZT 値は目標値よりも未だに小さく、さらに格子熱伝導度を下げる必要がありました。そこで、文献を調べつつ、自身の研究に生かせることができないかと考え悪戦苦闘していたところ、竹内先生から「共置換したことによって固溶域が広がっている可能性もあるのではないかと」のアドバイスを頂きました。実際に取りかかってみたところ、固溶限が広がっていることを確認でき、このことを利用してさらに ZT を上げることができ、結果として目的に近づくことが出来ました。ちなみに、含まれる貴金属 Ru と Re は数 at% しか含まれていませんので、材料の価格は Bi-Te 合金よりも $1/4$ 以下になっており、Bi-Te 合金の代替材料として有望であることがわかってきています。

ここから得られた教訓として、私自身これまで成功する可能性の低いことに取り組むことには消極的でしたが、少しでも可能性があるのであれば実行することも研究への取り組みに重要であると考えようになりました。ただし、その可能性を見極めるには、高い専門性を備え、且つ、他の研究分野のバックグラウンドを知ることが必要と思っています。ところが、まだまだ未熟者であるため、至らない点が多いと痛感しております。幸いにも、身の回りには指導して下さい竹内先生はもちろん、生田博志教授、竹中康司教授などのお手本になる先生方がいらっしゃいますので、参考にさせていただきつつ、今後も専門性を深め、幅広い知識を習得していくことによって研究者としての能力を磨いていきたいと考えております。

(2013年10月12日受理)[doi:10.2320/materia.53.32]

(連絡先: 〒464-8603 名古屋市千種区不老町)