

プロジェクトプレ終了評価報告書

評価委員会開催日：平成22年4月15日

評価委員：（敬称略、五十音順）

岡田益男 東北大学大学院 工学研究科 副学長・教授

長村光造 （財）応用科学研究所 理事・特別研究員

神谷信行 （株）KMラボ

小長井誠 東京工業大学大学院 理工学研究科 教授

確定年月日：平成22年6月21日

プロジェクト名	未利用熱エネルギー回収のための高温用新規熱電材料の開発
研究責任者の所属・役職 ・氏名	環境エネルギー材料萌芽ラボ エコエネルギーグループ グループリーダー 篠原嘉一
実施予定期間	平成21年度～平成22年度
研究目的と意義	<p>日本の温室効果ガスの削減目標は2020年までに1990年比で25%削減であるが、既に6%以上増加している。そのため、2050年までに80%削減という国際公約を踏まえて、抜本的な対応が求められている。日本が発生する温室効果ガスの約90%はCO₂であり、その大半が石油・石炭・ガスなどの化石燃料の燃焼によるものである。温室効果ガス削減のためには、再生可能エネルギーへの転換と共に、エネルギーを最後の一滴まで有効に利用する技術の開発が必須となっている。</p> <p>固体のゼーベック効果を利用した熱電発電素子は、熱を電気エネルギーに直接変換することが可能で、世界中で放出される膨大かつ分散された排熱を効率的に電力に変換できる技術として極めて重要である。熱電発電はバルクアプリケーション故に、高性能バルク熱電材料の開発が必須である。しかしバルク材料で高性能な熱電材料はまだ開発されておらず、開発のための道筋も明らかにされていない。</p> <p>そこで本研究では、バルク高性能材料開発の鍵を複合構造と考え、結晶構造および結晶組織における複合構造が熱電特性に与える影響を明らかにして、中高温域（500～1,500K）で利用可能な高性能熱電材料を創製し、中高温排熱利用を可能にする発電デバイス実用化の道を新たに拓くことを目的とする。これにより、エネルギーの有効利用による温室効果ガス削減という強い社会ニーズに応える。</p>
研究内容	<p>バルク熱電材料で熱電性能指数を大きく向上させる一つの手法は複合構造であると考えられる。ここで言う複合構造とは、一般的な積層構造や分散構造のみならず、原子、分子、クラスター、結晶、結晶粒などのメインユニットと、その間に存在する原子、分子、粒界、析出物などのサブユニットとの組み合わせも含む。熱電性能指数Zはゼーベック係数S、電気伝導率σおよび熱伝導率κから式$Z = S^2 \sigma / \kappa$で計算され、熱電性能指数の向上には大きなSとσ、小さなκが求められる。トレードオフの関係にあるS、σおよびκを高い次元でバランスさせるためには、結晶構造や結晶組織において複合構造の導入により状態密度の異方性や不連続性を積極的に導入することが鍵と考える。そこで本プロジェクトでは、結晶構造における擬一次元的構造および二次元的クラスター構造、結晶組織における析出物および結晶粒の効果について解明を進める。</p>
ミッションステートメント （具体的な達成目標）	<p>本プロジェクトは3つのサブテーマから構成される。サブテーマ1「異常熱起電力物質の探索と熱電特性制御」では、結晶構造内における擬一次元的鎖状構造の効果を明らかにすることで、高い熱起電力と導電率を両立させる物理的機構の理解を深め、その制御要因を明らかにする。サブテーマ2「原子ネットワーク物質の創製と熱伝導率の制御」では、結晶構造内における二次元的クラスター構造の効果を明らかにすることで、新規な高温用（800～1,500K）材料の開発を行う。サブテーマ3「実用材料プロセスと電極形成技術」では、結晶組織における析出物および結晶粒径の効果を明らかにすることで、中温用（500～800K）の金属ケイ化物を対象とした材料開発を実施する。</p>

<p>平成21年度～平成22年プレ終了評価時までの主な研究成果（アウトプット）及び研究成果から生み出された（生み出される）効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）</p>	<p>1) 主な研究成果（アウトプット）： 結晶構造内における鎖状構造の効果については、擬一次元的鎖状構造を有するCaCo₂O₄に対して8GPa級の超高压合成法を駆使することで、Na置換体(Ca_{1-x}Na_xCo₂O₄)の合成を可能とするプロセスの開発に成功すると共に、キャリアドーピング技術を確立した。また新しい低次元スピン軌道相互作用系5d酸化物、スピンプラストレート系3d酸化物に於ける異常熱起電力物質を見出した。結晶構造における二次元的クラスター構造の効果については、炭化ホウ素系材料において、特異なn型を生み出しているクラスター構造を壊さずに、めざましい緻密化の効果を得られる添加元素を見出すと共に、パワーファクターの改善に資する添加元素も見出した。また結晶組織における析出物および結晶粒径の効果について、Mg₂(SiSn)系材料について検討した結果、ミクロレベルの粒径範囲では熱電特性に対する結晶粒の影響はほとんど認められないことを明らかにすると共に、LiとAgを二重添加することにより、p型Mg₂(SiSn)系熱電材料としては世界トップの熱電性能ZT（熱電性能指数×絶対温度）=0.34を達成した。</p> <p>2) 研究成果から生み出された（生み出される）効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）： 結晶内に異方性を有する物質や複雑な結晶組織を有する材料が高い熱電性能を示すことから、熱電材料におけるフロンティアは複合構造であると考えている。結晶内の複合構造の効果を理解できれば新規高性能物質探査の道標となる。また結晶組織における複合構造の効果を明らかにできれば、材料プロセスによる熱電特性向上の道筋を示すことが可能になる。中高温排熱回収発電には高性能なバルク熱電材料の開発が不可欠であり、本プロジェクトで見込まれる成果は物質探査やバルク材料開発の方向性を示すもので、実用材料開発に与えるインパクトは計り知れないと考える。</p>
<p>プレ終了評価時の進捗状況とそれから予測したプロジェクト終了時の目標の達成度合い及び自己点検</p>	<p>サブテーマ1では、研究計画通りにNa置換体の合成プロセスを開発するとともに、計画の前倒しで、構造や電子物性の解析、さらに磁気相関係の新規物質の探査も開始している。サブテーマ2では、研究計画通りに構造制御プロセス開発を実施するとともに、熱電性能の大幅な向上に繋がる興味深い添加元素も見出している。サブテーマ3では、研究計画通りに結晶粒径制御プロセスを開発および析出モデル材料の作製を実施するとともに、結晶粒の影響に関しては熱電特性評価も前倒しで実施している。研究実施の中で、p型Mg₂(SiSn)系熱電材料としては世界トップの熱電性能ZT=0.34を達成している。</p> <p>研究は順調に進展しており目標を（ほぼ）達成できそうである。目標達成に加えて、物質探査や実用材料開発の進捗も期待される。</p>
<p>【評価項目】</p>	<p>コメント</p>
<p>①研究計画、実施体制、マネージメント、連携 （計画はきめ細かったか、ロードマップに問題はなかったか、実施体制は十分だったか、マネージメントの是非、連携の範囲や連携課題、連携の成果はどうだったか、どこが問題なのか、など）</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・この分野では、実用化のための目標値は明確である。問題は、それに向かっていかにアプローチするかである。 ・サブテーマ1と2は新規物質の探索・創製であり、サブテーマ3ではZT（熱電性能指数×絶対温度）=0.34を達成したが、全体のテーマ連携が不明である（熱起電力物質の探索とサブテーマ3等との関係）。 ・鎖状構造、クラスター構造、析出構造と、見かけ上構造というキーワードでサブテーマの共通性を保とうとしているが、熱電特性、熱伝導率、電極形成と言葉を置き換えると、目的とする技術開発の方向が別々である。 ・サブテーマ責任者全員が併任である場合、このプロジェクトへのエフォート率を示すことが重要である。 ・研究員の人員はどうしても限られてしまうが、ポスドクの役割は其中で非常に重要になっている。ポスドクの活用は十分になされているのか。少ない人員であるので、プロジェクト内の連携はもちろんであるが、NIMS内における連携も重要になる。 ・マンパワーが少なければ、論点を絞って、可能性が高い方法を選択する必要がある。

	<p>ある。ZT=1.5~2を目指すためのブレークスルーが少し見えにくい。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・外部との連携が、具体的にどのようなのかについて、報告があってもよい。
<p>②研究開発の進捗状況及び具体的目標の達成度 (研究責任者の自己評価を踏まえて、進み具合はどうだったか、目標は達成されそうか、目標は具体的であったか、世界レベルで見て目標は高かったか・低かったか、問題点は何か、など)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・平成21年度の目標は達成されたが、最終年度の現在の進捗状況は必ずしも満足いくものではない。さらなる特性向上に向けた取り組みを望む。 ・新規高性能熱電変換材料(500~1,500KでZT>1)を開発することを目標としているが、サブテーマ1または2の達成度は不明である。 ・どうすればよいかと手はあっても、今少し道筋が見えにくい。 ・サブテーマ1または2と、サブテーマ3との連携が不明である。 ・国内では名古屋大学との競合となっている。それと比べると目指しているものがやや低いようである。 ・CaCoO₂は擬一次元構造を持ち、Na添加により金属性が発現し、熱電特性の高性能化が期待されている。しかしこれは高圧合成によるもので、工学的に容易に合成できるのか、さらに2A金属添加による熱伝導度の制御等、解決すべき具体的課題が多い。BCのn型カウンターパートに成りうる新規なBC原子ネットワーク物質の研究開発状況についても触れられていない。析出モデルという提案の実態が成果として得られているのか。P型Mg₂Si-Sn化合物の合成は成功したのか。熱電材料と電極材料の関係が不明確である。 ・なぜこの材料なのか、はっきりしない。
<p>③論文・特許等の直接の成果(アウトプット)、効果・効用(アウトカム)、波及効果(インパクト) (世界レベルの質の成果が出たか、どのような効果・効用あるいは波及効果が出たか/期待されるか、研究タイプを考慮した費用対効果は、問題点は何か、など)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・Mg₂Si-Sn系における成果は評価できる。 ・非常に難しい仕事だけに、ゆっくりでも基礎的なことの積み上げが大きな発展につながる。 ・論文の数だけでなく質の高さが少々懸念される。もう少しIF(インパクトファクター)の高い雑誌への投稿が望まれる。 ・論文レベルの成果はあるが、受賞とかプレス発表がないのは、客観評価として、やや物足りない。 ・中高温排熱回収発電用材料の開発という目標と、これまでに実施してきた基礎的研究の間に乖離があり、自己判断としての「計画を超えて進展」とは言い難いと判断される。 ・サブテーマ1と2の達成度から、今後の研究提案はどのようなものになるのか。 ・CaCo₂O₄とRB₁₇CNでは、どちらの物質が発展的なのか、はっきりしない。
<p>④総合評価 (研究全体に対する総合的所見、及び上記評価項目①~③に含まれない、その他の評価ポイントがあれば追加してコメント)</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・サブテーマごとの進捗状況はよく進んでおり、これを次期プロジェクトのサブテーマ候補として提案している。 ・新規高性能熱電変換材料は排熱利用を可能にする発電デバイスであり、今後、一層の研究の推進が望まれる。 ・事前評価で指摘されている点、すなわち、バルクでZT~2を得るとの具体的なアイデア(どうすれば達成できるのか)が未だに見えない。 ・道筋を示すことが2年間の目標ということであれば、未だ、こうすれば目標が達成できるという決め手が得られていない。 ・鎖状構造、クラスターといった構造を取り上げているが、もう少し理屈が欲しいところである。2年間の研究開発によって指針を示したのではなく、これらの複合構造でZTがいくつになったかを示したのみではないか。 ・目標の期待値はあるが、現状の材料の延長でよいのか、あるいは、新たな材料を開発していかなくてはならないのか、が掴みきれていない。それがはっきりする方向性を示した方がよい。 ・第二期中期計画期間では、熱電特性に対する複合構造効果を結晶および結晶組織の点から明らかにすることを目的とするため、平成23年度以降の実用材料開発や電極材料開発に至らないとあるが、平成22年度はロードマップにあるような探索、解析といったことではなく、真剣に現時点の成果をどのように実用化に結びつけるかに注力すべきである。
<p>総合評価点 (10点満点)</p>	<p>6.5</p>

各委員の評価点 (10点満点)		7, 6, 7, 6 (順不同)
評価点	評価	評価基準
10	S	全ての点において模範的に優れている。 計画を変更することなく継続すべきである。
9		
8	A	総合的に優れている。 一部計画を見直し継続すればS評価になる可能性がある 平均的なプロジェクトである。 継続は認めるが、継続する時に、一部計画を見直した方が良い点がある。
7		
6		
5	B	期待されたほどではない。 計画を見直して継続すべきである。
4		
3		
2	C	大きな問題があり、継続を中止すべきである。 プロジェクトの見直し、計画の抜本的な変更が必要である。
1		