

## 2. 平成 28 年度タスクフォース研究課題

---

- ・タスクフォース型研究課題 01  
「セリウム三二硫化物の用途拡大の検討」
- ・タスクフォース型研究課題 02  
「軽希土類を用いた新熱電変換材料の開発」
- ・タスクフォース型研究課題 03  
「軽希土類系新規グリーンマテリアルの探索」
- ・タスクフォース型研究課題 04  
「希土類超伝導線材の応用に向けた抵抗接合技術と多芯化技術の開発」

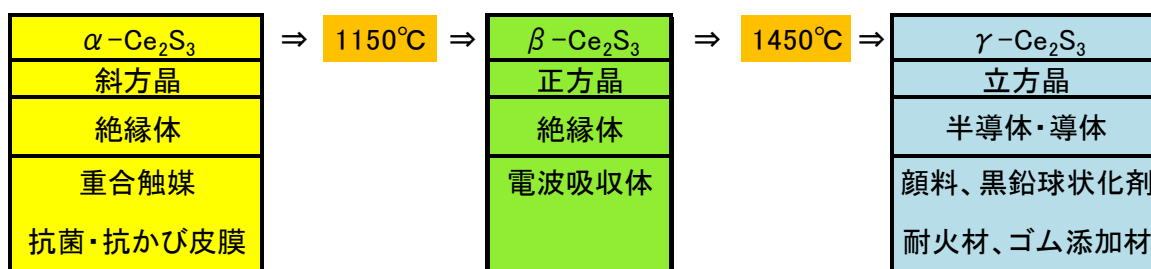
代表：中村 英次

尖閣諸島事件を契機に希土類（RE）の原料事情も一因となり、脱 RE、省 RE の考え方は浸透し、日本の希土類の需要は Ce の研磨剤需要の大幅な減少が見られた等を理由に、ピーク時の 1/3 程度まで減少した。しかし、今後の特定の元素、特に磁石用の Nd の需要がさらに伸びることが予想され、今後希土類の鉱石組成のバランスから Ce 等が大量に余る事が指摘されている。そして、希土類は他の元素にはない優れた特性を有しており、RE を使うべきところに適切に使う素材技術の発展は日本にとって重要である。

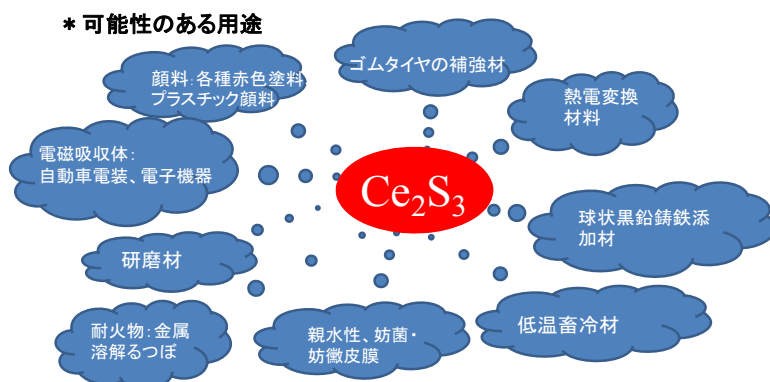
希土類のこれまでの需要は、大略、金属としての用途と酸化物系のものが多く、その他の硫化物は機能性材料としての可能性を秘めているが、実用化は顔料以外には見られない。そこで、新規用途開発のための幾つかの Ce 硫化物の実用化の可能性を評価するため、セリウム三二硫化物の用途別の特性等を明らかにする。

【計画】

硫化物は合成温度や焼結温度により結晶構造が変わり、それぞれの用途に適した結晶構造は異なり、各結晶型の作製方法は異なることから製法を選定する。



図に示すように また、希土類硫化物の考えられる用途として、イ) 顔料、ロ) ゴムやタイヤの補強材、ハ) 薄肉球状黒鉛鑄鉄の球状化剤、ニ) 熱電変換材料、ホ) 耐火物、へ) 電磁吸収体、ト) 親水性、防菌・防黴皮膜 チ) 低温蓄冷材等があり、これらの用途の先導的な研究により用途別の特性等を明らかにし各用途の実現の可能性を評価する。



代表：関根 ちひろ

熱電変換材料は、熱エネルギーを電気エネルギーに直接変換できる材料で、廃熱を利用した温度差発電には不可欠です。そして、この発電技術を普及させるために、材料の変換効率を大きく向上させることが課題となっています。本タスクでは、物質探索の段階から、資源供給安定性と低環境負荷を考慮しながら、軽希土類化合物を中心とした、優れた特性を持つ熱電変換材料の新物質探索を行い、次世代高効率熱電変換材料の新物質開発を目指しています。

### 【計画】

大型プレスを用いた高温高压合成法により、大気圧下では合成不可能である結晶構造、元素組成の新物質探索を行います。対象としている材料系は、ラットリング効果による格子熱伝導度の顕著な低減により熱電特性の向上が期待できるセリウム等の軽希土類を充填したスクッテルダイト化合物を予定しています。また、CS<sub>2</sub>ガス硫化と放電プラズマ焼結（SPS）法による軽希土類硫化物の作製、相転移を利用した結晶粒の微細化や自己ドーピングなどによる熱電特性の向上を目指しています。本タスクでは、物質設計、物性評価の各段階において、計算機シミュレーションによる解析を行い、計算予測と実験結果を比較し、フィードバックをかけながら、迅速な研究を推進します。



川井式2段アンビル型超子化学計算システム



量子化学計算システム