

軽希土類を用いた新熱電変換材料の開発

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、CS₂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段アンビル型超高压発生装置



量子化学計算システム