

# 平成21年度 島根大学「萌芽研究部門」研究プロジェクト 計画書

1. プロジェクト名称	チタン酸化物系新熱電変換材料の実用化基礎研究					
	(英訳名)	Study on materials physics and application prospects of titanium oxide-related compounds as novel thermoelectric materials				
2. プロジェクトリーダー	所属	総合理工学部	職名	准教授	氏名	北川 裕之
	現在の専門	材料物性・熱電変換材料			学位	博士(工学)
<p><b>3. プロジェクトの概要</b> ①本研究プロジェクトで何をどこまで明らかにするか、②国際的あるいは専門的な視野からプロジェクトの必要性・重要性・ユニークな点、③島根大学で行う意義・大学の発展にとって期待される効果、について簡潔に記入してください。</p> <p>① 酸化チタンおよびチタン酸ストロンチウムは安価で安全な材料である。申請者らの研究グループはホウ素ドーパチタン酸化物が、室温～100K の温度範囲で、大きな電気伝導率とゼーベック係数を有することを実験的に見いだした。これらは熱電変換に魅力的な物性であり、ホウ素の添加方法、添加量の最適化などが必須の研究課題となっている。本研究プロジェクトでは、ホウ素をドーパしたチタン酸化物系材料について、熱電物性の測定と低温物性、電子状態などの実験的・理論的な研究および組織・結晶学的研究を組み合わせ、物性発現のメカニズムを明らかにするとともに新しい熱電変換材料の設計指針を得る。また、これまで研究を進めてきた <math>\text{Bi}_2\text{Te}_3</math> 系材料については、新規な作製方法として異方性制御を意図した構造制御を試み、高性能化を図る。</p> <p>これらの研究を遂行することにより、固体物理学および熱電変換工学の発展に資するとともに、安価で安全な材料を使用した低温廃熱有効利用に関する応用展開を進展させる。</p> <p>② チタン酸化物は安定な化合物であり、既存の低温域熱電材料と比較して、高性能な温度領域が広いことがこれまでの実験で予測されている。さらに、原料は安価・安全であり環境負荷、元素戦略の観点からも有利である。すでに粉末冶金学的手法により実用化されている <math>\text{Bi}_2\text{Te}_3</math> 系材料については、結晶配向制御によるさらなる性能向上が求められている。簡便なプロセスで高配向結晶を作製できる手法の開発が強く望まれている。</p> <p>③ 本プロジェクトは、これまで島根大学で行われてきた重点プロジェクト研究「S-ナノテクプロジェクト」から生み出されたシーズであり、本学の物質・材料系研究の発展に寄与するものである。さらに、近年、京都議定書に代表される地球温暖化の原因となる炭酸ガスの放出削減の動きを反映して、低温廃熱有効利用に関する産業界の期待は大きく、熱電変換は注目されている技術の一つである。本学は、中国・四国地区で熱電変換技術を研究している数少ない研究機関であり、産業廃熱有効利用から、材料開発・素子化技術に関するものまで、多数の技術相談が寄せられている。島根発の新材料が開発されれば、地域産業の活性化にもつながる。</p>						
<p><b>4. 本学の中期目標・計画または大学憲章アクションプランとの関係</b></p> <p>島根大学憲章には「分野間の融合による特色ある研究を強化し、国際的に通用する創造性豊かな研究拠点を構築する。」と記されている。本プロジェクトは、「理工融合」により、一つの材料系の物性に潜む物理を明らかにするとともに、応用面の可能性を探るものであり、憲章に定められた理念とよく一致する。また、本プロジェクトの成果は、大型外部資金獲得に向けた取り組みも行っている。</p>						
<p><b>5. 平成20年度の主な成果</b> 特に重要なものを箇条書きにしてください。</p> <p>1. パルス通電焼結法によるホウ素添加ルチル型酸化チタンを作製した。構造解析・元素分析の結果、これまで実証が困難であった、添加したホウ素が酸化チタン内へ固溶していることを明確に示す結果を得た。さらに、ホウ素添加量とともに電気抵抗率、熱伝導率がともに減少することを実験的に見いだした。この結果は、固溶したホウ素が電気伝導キャリアを発生させるとともに、有効なフォノン散乱中心として働くことを意味しており、ホウ素添加によりルチル型酸化チタンの熱電変換性能を向上させることに成功した。</p> <p>2. スライドボートを用いた液相成長法による材料作製装置を完成させ、天然雲母板状に p 型 <math>\text{Bi-Sb-Te}</math> 結晶を成長させた。その結果、成長結晶はボートのスライド方向と高性能方向が一致すること、これと良い相関で、キャリア移動度はボートスライド方向に増加することを見いだした。熱電性能は粉末冶金法と比較して約 1.5 倍程度良好になった。</p>						
<b>6. 配分経費 (単位:千円)</b>						
平成(年度)	21				合計	
配分予定額(千円)	3,450				3,450	

7. プロジェクト推進担当者 平成21年度に限って記入してください。			計 名
ふりがな(ローマ字) 氏 名(年齢)	所属部局(専攻など)・職名	現在の専門 学位	役割分担
(プロジェクトリーダー) きたがわ ひろゆき (KITAGAWA Hiroyuki) 北川 裕之 (37)	総合理工学部 物質科学科・ 准教授	熱電変換材料・ 博士(工学)	プロジェクト総括, 材料作製、基本物性の測定
やまだ やすじ (YAMADA Yasushi) 山田 容士 (47)	総合理工学部 物質科学科・ 准教授	酸化物機能性材料・ 博士(工学)	材料作製, 基本物性の測定
くぼ しゅうご (KUBO Shugo) 久保 衆伍 (63)	総合理工学部・物質科学科・ 教授	酸化物機能性材料・ 工学博士	材料作製, 基本物性の測定
にしごおり しじょう (NISHIGORI Shijo) 西郡 至誠 (42)	総合科学研究支援センター・ 准教授	低温物理学・ 博士(理学)	熱物性測定・解析
もりと しげかず (MORITO Shigekazu) 森戸 茂一 (39)	総合理工学部 物質科学科・ 准教授	材料組織学・ 博士(工学)	結晶学的評価・解析
ふじわら けんじ (FUJIWARA Kenji) 藤原 賢二 (48)	総合理工学部 物質科学科・ 准教授	低温物理学・ 工学博士	電子状態解明 (NMR を中心とした実験)
たなか ひろし (TANAKA Hiroshi) 田中 宏志 (48)	総合理工学部 物質科学科・ 准教授	物性理論・ 博士(工学)	電子状態解明 (理論的解析)

8. 研究計画および達成目標

【平成21年度】

【計画概要】

① ホウ素ドーパチタン酸化物

平成 20 年度の研究で、ルチル型  $\text{TiO}_2$  へのホウ素ドーパが熱電性能向上に有効であるという実験結果を得た。我々の研究グループは単結晶  $\text{SrTiO}_3$  においてもホウ素ドーパにより熱電性能が向上することを見いだしている。これらを基に、本年度は単結晶よりも実用的な焼結体におけるホウ素ドーパ  $\text{SrTiO}_3$  作製技術を開発し、熱電材料としての可能性を調査する。ホウ素ドーパ  $\text{TiO}_2$  に関しては、結晶構造解析を行い、電気伝導発現機構の解明を目指す。これらに加え、ホウ素ドーパ  $\text{TiO}_2$  については、透明導電膜としての応用が期待されていることにより、これまでの試料作製技術によりスパッタリング用のターゲット材製作へと展開する。

②  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  系材料に関して

平成 20 年度の研究で、スライドボートを用いた液相成長法が p 型材の高性能化に有望であることがわかった。基板材料の選定や熔融温度などの実験条件を最適化することおよび n 型材の作製を行い、素子化のための基礎的な知見を収集する。

【平成 2 0 年度評価を踏まえた本年度計画の主な変更点または改善点】

昨年度の研究で、 $\text{TiO}_2$  はホウ素ドーパにより熱電変換材料としての性能が向上するものの、実用材と比較して低いという結果を得た。評価者よりこの点についての指摘が数多くなされ、熱電変換以外の用途についての調査や、ホウ素ドーパ  $\text{TiO}_2$  の電気伝導発現機構の解明についての要望がなされた。これらの評価を基に、今年度はホウ素ドーパチタン酸ストロンチウムについて熱電変換材料としての可能性を追求することと並行して、ホウ素ドーパ  $\text{TiO}_2$  の透明導電膜としての可能性についても評価する。また、ホウ素ドーパ  $\text{TiO}_2$  の結晶学的評価を行い電気伝導発生のメカニズムについても調査する。

<p><b>【研究項目】</b> 研究項目には①,②,…の様に番号をつけて箇条書きしてください。</p>	<p><b>【達成目標】</b> 対応する研究項目に対して第三者が本年度に達成できたと判断できる具体的な目標を記入してください。</p>
① ホウ素ドーピング SrTiO <sub>3</sub> の作製と物性評価	SrTiO <sub>3</sub> へのホウ素ドーピング効果を実験的に調べる。作製は主にパルス通電焼結法にて行い、キャリア濃度を $10^{24}$ - $10^{26}\text{m}^{-3}$ 程度に制御し、ホウ素ドーピングにおける熱電変換性能の最適化を図る。
② ホウ素ドーピング TiO <sub>2</sub> の作製と電気伝導特性の評価	昨年度得られたホウ素ドーピング TiO <sub>2</sub> について、結晶学的評価を行い電気伝導発生のメカニズムを調査する。さらに低抵抗率を有するホウ素ドーピング TiO <sub>2</sub> 薄膜の製造技術を開発するため、スパッタリングターゲットの作製も行う。
③ スライドボート法による Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> の液相成長に関する研究	スライドボート法による作製プロセスを最適化し、p 型、n 型両方において、性能指数 $Z=3\times 10^{-3}\text{K}^{-1}$ を目指す。この数値は、室温における実用化の目安となる数値である。

**9. 平成21年度経費明細**
研究項目と達成目標ごとに使用する経費を記入してください。（単位：千円）

- ・経費は本研究プロジェクトの遂行に必要な経費です。
- ・経費は政策的配分経費(a)(今回配分された金額)とそれ以外の資金(学内経費、外部資金)とし、それ以外の資金で充当させる場合は「配分経費以外(b)」の欄に金額を記入してください。
- ・研究計画の項目番号ごとに設備備品、旅費、人件費、消耗品費などに分けて、それぞれの明細を出来るだけ具体的に記入してください。
- ・単品の設備備品は配分経費(a)と配分経費以外(b)を合算して購入することはできませんのでご注意願います。

事項(品名)	(対応する研究項目番号)	配分経費(a)	配分経費以外(b)	合計(a+b)
<b>設備備品</b>				
卓上型粉碎・混合装置一式	① ②	2,000	0	2,000
<b>旅費</b>				
調査・研究旅費	① ②	200	100	300
成果発表旅費	① ② ③	200	100	300
<b>消耗品費</b>				
原材料・薬品・ガス	① ② ③	350	200	550
試料作製用消耗品	① ② ③	400	200	600
評価装置用消耗品	① ② ③	300	200	500
<b>その他</b>				
スパッタリングターゲット作製費用(装置使用料など)	②	0	750	750
<b>合 計</b>		3,450	1,550	5,000

## 10. 研究終了後の高次研究プロジェクト(重点研究部門)への構想 図などで解りやすく示してください。

本プロジェクトで得られた研究成果は、材料作製、構造解析、物性評価という材料工学的な研究で重要となる一連の内容を含んでいる。本プロジェクト終了後は、これら研究成果を実際の応用に結びつけていくことが重要である。ホウ素添加チタン酸化物に関する研究成果は、熱電変換材料としての知見に加え、透明導電膜を得るための基礎的な情報である。すなわち、これら研究成果は、本学が申請し、採択された都市エリア産学官連携促進事業の研究テーマ遂行に重要な技術基盤となりうる。また、スライドボート法による  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  系熱電材料は、本年度のプロジェクト研究における成果が実用性の高い技術として注目され、産業界から複数の問い合わせが寄せられている。これらニーズを背景として、本年度、熱電変換素子実用化の基礎を確立するため JST「シーズ発掘試験」への応募を行った。順調に研究を進めて、JST「育成研究」などの大型産学連携事業へ発展させたい。

以上のように、本萌芽研究プロジェクトの成果を基に地域連携・産学連携事業を推進し、本学の強みを生かした新たな材料開発技術の基礎を固める。さらに、3年後を目処に、特定研究部門「たたら製鉄におけるナノテクノロジーの結晶学的解明」の成果を含めて、材料技術・開発の知見を結集し、現在の酸化亜鉛を中核としたプロジェクトの次に来る、重点研究プロジェクト研究へと育て、さらに「都市エリア産学官連携促進事業」へと発展させたい。

