

第6回マテリアルズ・インフォマティクス基礎研究会報告

併催: 4th workshop on novel superconducting materials and biomimetic Processes 2019, The 2nd topical symposium of center for spintronics research network (CSRN), Keio University

共催: 未来先導基金による物理情報・応用化学・化学特別講義, 慶大スピントロニクス研究開発センター(CSRN at Keio Univ.)

テーマ: 表面, ナノ構造におけるエネルギー材料開発と低次元物理現象

日時: 2019年8月30日(金) 12:57-18:00

場所: 慶應義塾大学 矢上キャンパス 14棟 203号室

*参加者: 22名

本会は, 表面の物理やナノ構造を利用したエネルギー材料の基礎から最先端までを議論する目的で開催された. 慶應義塾 未来先導基金による特別講義 2件, 慶大スピントロニクス研究開発センター共催のシンポジウムとして 3件の講師による招待講演を行った. インフォーマル meeting 以外は公開講演であるため, 参加費・当日の資料代は無料とした.

キャパシタ型蓄電池のための革新的なナノ複合材料科学, 酸化物熱電材料の結晶学的な異方性のプロセス制御による機能性向上技術, Co系複合アニオン化合物材料の不均一な磁気構造に起因する誘電応答の緩和性能と関連物質の熱電変換性能, レーザ光電子分光による固体中の電子状態観察技術, および酸化物熱電材料で生じるフォノンドラッグを活用した酸化物の熱電変換性能の向上原理の5つの Topics について最新の研究成果が紹介された.

1. Innovative dielectric nanocomposites for pulse energy storage applications

Do-Kyun KWON (Korea Aerospace University)

近年, 様々な工業分野で, キャパシタ型蓄電池の性能, すなわち高電荷移動度, 並列化性能, そして信頼性の向上が求められている. 特にパワーエレクトロニクス(強電)用途においては「絶縁破壊電界強度の向上」, 「環境下での誘電性能の安定性」, および「革新的な集積化方法」が市場形成のために重要と言える. 例えば, キャパシタ型蓄電池を自動車産業にて応用する場合, 200°C以上の温度での安定動作が必要となる. この目的を満たすには, 様々な強誘電高分子/共重合体, ガラス, 高比誘電率(High-k)無機化合物(セラミックス), およびそれらの複合材料を対象とした系(システム)としてのキャパシタ型蓄電池について試料合成と化学的評価を基盤とした研究が求められる. 会議では, 産業からの要請と, 革新的なキャパシタ型蓄電池に必要な基礎知識と基盤技術が解説された. その後, Kwon 博士の独自技術である原子数個分の厚みで形成された擬 2次元セラミックスの作製方法と機能について紹介された.

2. 熱電変換材料の高性能化に向けた $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 配向セラミックスの密度制御

下西里奈 (Keio Univ.)

熱電変換材料による発電は、廃熱を電気エネルギーに変換する魅力的な方法である。求められる機能は、高い電気伝導率、絶対値の大きな Seebeck 係数、および低い熱伝導率となる。 $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ (CCO)は、高温大気下での化学的安定性に注目され、研究が継続している熱電変換材料である。CCOは、NaCl型構造を示す Ca_2CoO_3 キャリアブロック層と、 CdI_2 型構造を示す CoO_2 キャリア伝導層が c 軸方向に積層した結晶構造を示す。CCOのセラミックス(ここでは空隙を含む多結晶)としては、最も高い電気伝導率を示す実験結果が報告された。この高い電気伝導率は、得られたセラミックスの高い Lotgering 因子(多結晶中の一軸配向度を0から1で示す基準)と関連すると報告された。

3. Co系複合アニオン層状化合物の熱電変換性能

岡田 悟志 (日本大)

現在、複合アニオン層状化合物(MALC)は、新規な超伝導材料としての Fe 系、熱電変換材料としての Cu 系などが着目されている。会議では Co 系 MALC $\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{CoO}_2\text{S}_2$ における電子相の相分離と、新規なペロブスカイト関連 MALC $\text{Sr}_2\text{ScTMPO}_3$ (TM: 遷移金属)の電気的性質について報告された。 $\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{CoO}_2\text{S}_2$ は、Coの磁気構造の温度変化に起因する特殊な電気的性質を示す半導体である。 $\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{CoO}_2\text{S}_2$ の電気抵抗率は、温度の上昇とともに減少する半導体的な挙動を示す。しかしながら、 $\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{CoO}_2\text{S}_2$ の Seebeck 係数は正であり、温度の低下とともに減少する金属的な挙動を示す。この特徴は、 $\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{CoO}_2\text{S}_2$ のインピーダンス測定により、結晶中のキャリア濃度が不均一に分布した磁性相に起因することが明らかになった。 $\text{Sr}_2\text{ScTMPO}_3$ は、TMに依存して、電気的性質が変化する新材料である。TM = Coの場合、 $\text{Sr}_2\text{ScTMPO}_3$ は金属的であり、Coサイトへの置換により、熱電性能の最大化が期待される。

4. 層状バルク磁性体に生じる二次元電子状態の直接観測

櫻木 俊輔 (東大)

層状磁性体の内部に生じる二次元的な電子状態の観察方法として放射光および、高次高調波発生レーザー光励起角度分解光電子分光測定(Laser-ARPES)とその成果が紹介された。放射光および Laser-ARPES はバルク反強磁性体の単結晶内部に生じる準粒子としてのスピン偏極した Dirac フェルミオンの実証に用いられている。加えて会議では、バルクとしての反強磁性磁気構造により、2次元方向に制限された超伝導相を示す新材料の実証が報告された。

補足: 素粒子物理学において、Dirac フェルミオンは、スピン量子数 1/2 の粒子のフェルミオンを示し、その対となる反粒子が存在する性質をもつ。過去に言及されたほとんどのフェルミオン、すなわちスピン量子数が半整数の粒子は、Dirac フェルミオンである。一方、固体物理学においては、固体の表面や内部に生じると仮定された準粒子(e.g. 正孔, 粒子としての電子)を Dirac フェルミオンと解釈している。

5. 酸化物熱電材料のフォノンドラッグ効果

片瀬 貴義 (東工大)

無毒で資源量が豊富な酸化物熱電変換材料は 熱的・化学的に安定であり、メンテナンスフリーの熱電変換素子への応用が期待される。しかしながら、カルコゲナイド等の実用材料と比べて、酸化物材料の熱電変換効率は未だ低いままである。ところで Si のような半導体は、キャリア密度を増やして電気伝導度を上げると熱電能は下がる「トレードオフの相関」があり、この相関が半導体の熱電変換性能を上げられない課題となっている。会議では、熱電材料が抱える「トレードオフの相関」に縛られずに、熱電変換効率を向上させる方法として、酸化物における"フォノンドラッグ効果"が紹介された。フォノンドラッグ効果は、電子と格子の相互作用によって、低温においてゼーベック係数の絶対値が極大を示す現象である。このアプローチは、酸化物の熱電変換性能の増大に有用であると報告された。

文責: 神原陽一



2019年8月30日, 日吉にて