

トピックス

不規則なガラス構造に潜む規則性を発見！ —ガラスの物性評価や効率的な新規ガラス開発の 指針に—

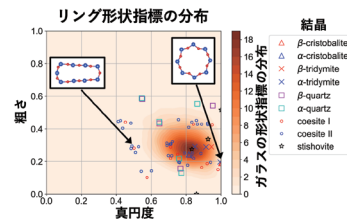
ガラスは、窓ガラスやディスプレイのように現在の日常生活に欠かせない基盤材料である。一方で、その原子配置が一見無秩序で複雑なために、構造の理解や制御が難しく、合理的な材料設計には多くの課題が残されている。これらの課題を解決するためにガラス構造の定量的な評価技術が必要とされ、これまで国内外で幾何学などに基づく解析法の開発が取り組まれてきた。

今回、東北大学の志賀元紀教授、早稲田大学の平田秋彦教授、NIMSの小野寺陽平博士、産業技術総合研究所の正井博和博士の研究グループは、

ループは、シリコンと酸素だけからなるシロカガラス（石英ガラス）のネットワークに内在するリング構造に着目して、“真円度”および“粗さ”という新たな指標を開発し、リング構造の3次元的な数量化に成功した。従来、リングの構成原子数のみが解析に用いられてきたが、本指標を用いることで、ガラスを構成するリングには、数種のシリカ結晶と同様なものと、ガラス独特の形状のリングが共存することを初めて明らかにした。さらに、リング周辺における原子分布を数量化することによって、ガラスの局所構造は結晶と同様に異方性を持ち、強い秩序が存在することを明らかにした。

本成果は、科研費・学術変革領域研究（A）「超秩序構造科学」の連携研究として行われたものであり、Communications Materials誌に掲載された（<https://doi.org/10.1038/s43246-023-00416-w>）。

東北大学 未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授 志賀元紀
連絡先：〒980-0845 仙台市青葉区荒巻字青葉468-1 レジリエント社会構築イノベーションセンター
E-mail: motoki.shiga.b4@tohoku.ac.jp
URL: <https://www.shiga-lab.org/>



[2024年1月23日]

毒性元素を含まない熱電材料で過去最高の 変換効率—逆ペロブスカイト酸化物で実現—

東京工業大学の片瀬貴義准教授・ホシニイ博士研究員・神谷利夫教授らの研究グループは、逆ペロブスカイト構造を有するBa₃SiO₄が、毒性元素を含まない材料として過去最高の熱電変換効率を示し、高性能熱電材料として有望であることを発見した。

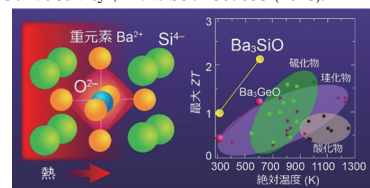
これまで、廃熱を電気エネルギーとして再利用するための熱電変換材料には、鉛やテルなどの希少で毒性を有する元素が使われており、より安価で環境に優しい材料の開発が求められていた。一方、SrTiO₃に代表される酸化物熱電材料は、無毒で豊富な元素で構成されるというメリットがあるものの、熱伝導率が高いために変換効率が低いという問題を抱えていた。

本研究では、“逆”ペロブスカイト構造と呼ばれる特殊な結晶構造を有するBa₃SiO₄が、SrTiO₃に比べて約1桁低い熱伝導率を示すことを見出した。このBa₃SiO₄では、陽イオンと陰イオンの配置がSrTiO₃とは“逆”になっ

おり、重元素のBaを多く含み、弱いO-Ba結合からなる柔らかい骨格を有していることから、低い熱伝導率を実現される。さらに第一原理計算から、通常は陽イオンになるSiが陰イオンとして振る舞い、電荷キャリアの移動を担うことで高い電気出力を実現できることを明らかにした。このことから、Ba₃SiO₄は300度付近の中温域において、毒性元素を含まない材料として最高の熱電変換効率(ZT)~2.1を示す有望材料であることが分かった。この性能は、鉛やテルなどの毒性元素を含む材料の性能に匹敵することから、毒性元素を一切含まない環境調和型熱電材料への代替につながるかと期待できる。

今後は、Ba₃SiO₄へのキャリアドーピングや他元素の固溶による性能向上を進めていくとともに、関連組成化合物への拡大によって、大気中での安定性向上やさらなる性能の革新が見込める。これらの実現によって、毒性元素を含む従来材料を代替し、熱電技術の大規模な利用拡大に貢献していくことが期待される。

文献：X. He et al., "Inverse-Perovskite Ba₃ZO₄ (Z = Si and Ge) as a High Performance Environmentally Benign Thermoelectric Material with Low Lattice Thermal Conductivity", Adv. Sci. 2307058 (2023).



東京工業大学 国際先駆研究機構 元素戦略MDX 研究センター
片瀬貴義, ホシニイ, 神谷利夫
連絡先：〒226-8501 神奈川県横浜市緑区長津田町 4259
E-mail: katase@mces.titech.ac.jp, h-xinyi@mces.titech.ac.jp, kamiya.t.aa@m.titech.ac.jp
URL: <https://www.msl.titech.ac.jp/~tkamiya/>
[2024年1月29日]