

微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出  
2020 年度採択研究代表者

2021 年度  
年次報告書

李 哲虎

産業技術総合研究所省エネルギー研究部門  
首席研究員

低熱伝導率材料を用いた熱電モジュールの開発

## § 1. 研究成果の概要

昨年度に引き続き第一原理計算の知見を利用しつつ、プロセス、ドーピングの最適化による材料性能の向上、界面抵抗が低く耐久性のある電極形成、素子の特性評価などを行った。

MgAgSb の材料開発ではプロセス及び組成の最適化を行い、不純物相を減らすことにより、熱電性能の向上に成功した。

Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 系では界面抵抗が十分に低い拡散防止層の形成に成功した。本材料は揮発性及び、水との反応性の高いMgを主成分として含んでいるため、安定した電極の形成が難しい。今年度は電極形成プロセスの検討を行い界面抵抗 $\sim 10^{-6} \text{ } \Omega \text{ cm}^2$  の拡散防止層を形成することに成功した。300°Cまで昇温した後も界面抵抗に大きな変化はなく、EDX/SEM 観察でも変化は観られず、耐久性を持つことを確認した。

Zintl 相化合物  $\text{CaZn}_2\text{Pn}_2$  ( $\text{Pn} = \text{As}, \text{P}$ ) に対して欠陥形成エネルギーを計算し、電子ドーブを実現する元素置換を示した。現在、Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 系が唯一高い熱電性能を示す n 型の Zintl 相化合物である。本研究は高性能な n 型 Zintl 相化合物の選択肢を増やし、より高性能で耐久性のある熱電材料の開発に寄与するものである。

## § 2. 研究実施体制

### (1) 李グループ

- ① 研究代表者: 李 哲虎 (産業技術総合研究所省エネルギー研究部門 首席研究員)
- ② 研究項目
  - ・熱電材料 122 Zintl 相の特性最適化
  - ・熱電モジュールの開発

### (2) 水口グループ

- ① 研究代表者: 水口 佳一 (東京都立大学大学院理学研究科 准教授)
- ② 研究項目
  - ・LnOPnCh<sub>2</sub> 系の熱電材料開発

### (3) 末國グループ

- ① 研究代表者: 末國 晃一郎 (九州大学大学院総合理工学研究院 准教授)
- ② 研究項目
  - ・熱電材料 MgAgSb の特性最適化

### (4) 黒木グループ

- ① 研究代表者: 黒木 和彦 (大阪大学大学院理学研究科 教授)
- ② 研究項目
  - ・第一原理計算に基づくモジュール動作温度領域における熱電特性の最適化
  - ・欠陥の形成エネルギー計算による元素置換のし易さの評価、並びに接合材料に適した元素選定

### (5) 黒崎グループ

- ① 研究代表者: 黒崎 健 (京都大学複合原子力科学研究所 教授)
- ② 研究項目
  - ・熱電材料の特性評価
  - ・熱電素子の耐久性評価

### 【代表的な原著論文情報】

1) H. Mori, M. Ochi, and K. Kuroki, "First-principles study of the electrical resistivity in zirconium dichalcogenides with multivalley bands: Mode-resolved analysis of electron-phonon scattering", *Physical Review B*, 104, 235144 (2021).