

2.5.4 フォノンエンジニアリング

(1) 研究開発領域の定義

ナノスケールの微小空間、微小時間でのフォノンおよび熱の振る舞いを理解し制御することにより、熱の高効率な利用や、デバイスのさらなる高性能化・高機能化を実現する。熱計測、フォノン輸送の理論・シミュレーション、材料・構造作製によるフォノン輸送制御、フォノンと電子/フォトン/スピンなどとの相互作用やハイブリッド量子系の統一的理解と制御、高度な熱伝導制御による蓄熱/放熱/断熱材料、熱スイッチ、熱ダイオードや高性能熱電変換素子などの革新的な材料・デバイス技術、などの研究開発課題がある。

(2) キーワード

フォノン、電子、フォトン、スピン、マグノン、フォノン輸送、フォノンクス、フォノン結晶、ナノスケール熱伝導、ナノスケール熱計測、時間分解サーモフレクタンス法、TDTR、ナノ構造制御、熱電変換、熱スピン効果、スピнкаロリトロニクス、スピンゼーベック効果、スピンペルチェ効果、トポロジカルフォノンクス、熱環境発電、エネルギーハーベスティング

(3) 研究開発領域の概要

[本領域の意義]

Society 5.0の実現に向けて、大規模情報処理・データストレージやハイパフォーマンスコンピューティングの需要が伸び続け、デバイスやシステムに対するマイクロスケール・ナノスケールでの熱マネジメントの重要性が増してきている。デバイスレベルでは、バルク材料中の熱拡散を記述するフーリエ則が成立しない寸法の構造で構成されることが多いため、熱伝導を担う熱フォノンの弾道的輸送特性や異種材料間の界面熱抵抗を考慮して熱伝導を議論することが必須となる。また、熱電変換材料開発においても、フォノンエンジニアリングは90年代に始まった構造設計論的アプローチの中核技術となっており、熱フォノンスペクトルを考慮したマルチスケールデザインによって高性能化を実現している。フォノンエンジニアリングは、このようなメソスケールにおける特殊な熱伝導を理解し、ナノ構造化によって制御を可能にする。これらの固体中のより高度な熱流制御技術や熱マネジメント技術、熱電変換応用などの確立は幅広い社会的インパクトを持つ。具体的には、情報処理デバイスの放熱問題の解決による超スマート社会の実現や未利用熱（廃熱）利用や熱環境発電によるカーボンニュートラル社会の実現を支える技術として期待されている。その期待に応えるためにも、理論・計測技術・実験・インフォマティクスの連携により、新たな物理・機能探索、材料開発、制御手法開発を進めていくことが重要になっている。このように、フォノンエンジニアリングはナノスケールの熱伝導理解・熱制御にかかわる様々な技術領域にまたがるが、ここでは、フォノン伝導の制御技術、ゼーベック効果やスピンゼーベック効果などを用いた熱電変換材料・デバイス技術、熱伝導計測技術を中心に紹介する。

[研究開発の動向]

熱電材料の高性能化を実現するためには、電気を流すが熱をできるだけ遮蔽することと、高い出力因子 $S^2\sigma$ の実現（高電気伝導度 σ かつ高ゼーベック係数 S ）が必要である。前者については、ナノスケールでの熱伝導の理解と制御が大きな鍵となることが、1990年代後半以降広く理解されるようになった。電気伝導を損なわずに熱伝導を低減するためには、フォノンの選択的な散乱が必要である。例えば、電荷キャリアとフォノンの平均自由行程の差を利用して、フォノンの長さスケールに対応する種々のナノ・マイクロ構造を材料に作り込むことでフォノンエンジニアリングを実現し、2000年代の中盤以降、熱電性能の高性能化が図られてきた。また、ナノ・マイクロ構造制御のほかにも、カゴ状結晶構造を有するスクッテルダイトやクラスレートなどにおいて、内包する原子のラトリング現象により、音響フォノンが効果的に散乱され、2000年代から新規な高性能熱電材料が見出されてきた。その他にも、ローンペア（孤立電子対）、層状構造に起因する Cu_3SbSe_3 や

BiCuSeOなどの高性能熱電材料が見出された。ここ数年の潮流として、化学結合の対称性等に着目した材料設計が注目されている。一方、後者の高い出力因子の実現に向けては、フォノンエンジニアリングほど広範囲に有効な出力因子の高性能化原理は最近まで見出されておらず、重要な課題として残されている。

フォノン結晶は、フォノンに対する人工的な周期構造であり、この構造を用いたフォノン輸送制御を行う場合、波動的な性質を利用する手法と弾道性を利用する手法がある。多くの場合、波動性を利用する際は、比較的狭い周波数スペクトルを持つ音響波や弾性波に対して、フォノン結晶が作るポテンシャルによってバンドエンジニアリングを行うことでフォノン輸送制御を行う。後者は熱フォノンのような広いスペクトルを持つ場合に、周波数が高いフォノンに対して微細構造による散乱で輸送特性の制御が行われてきた。歴史的には比較的大きな寸法でのフォノン結晶によるフォノン輸送制御に関する研究が多かったが、近年では、量子情報キャリアとしてのフォノンの活用が検討されている。また、厚さ数nmの超格子構造であれば室温でも熱伝導の低減が可能であることが示されており、フォノン結晶は熱制御にも活躍の場を広げつつある。弾道性を用いる場合は、コヒーレンス性を必要としないため、活用できる温度帯域や構造寸法が広く低コストで作製できることから、実用的な熱マネジメント技術への期待に応える研究が増加している。欧米や中国にシミュレーションを中心とした研究グループが多く存在し、国内では北海道大学と東京大学などが研究を進めている。フォノン結晶によるバンドエンジニアリングは、室温における効果の発現に超微細周期構造が要求されるが、現在主流であるフォノンの弾道性を用いた手法では成しえない新機能や性能を実現する可能性を秘めており、酸化半導体や二次元層状物質を用いた超格子構造や、トポロジカルフォノン結晶を用いたフォノン輸送制御も研究が進展している。

半導体中の熱マネジメントに関する技術開発が重要性を増しており、異種材料界面における熱伝送の基礎的理解や、集積回路などの発熱部とヒートスプレッダーやシンク間を満たす熱界面材料の製品化が進んでいる。特に、パワー半導体用途の熱界面材料の開発は企業がしのぎを削っており、熱伝導率の低い樹脂に充填される窒化アルミニウムや窒化ホウ素、アルミナなどの高熱伝導率のフィラーの充填密度を高め、フィラー間の接触面積を増やす工夫がなされている。また、炭素系材料を用いた柔軟性をもつ高熱伝導シートも商品化が進んでおり、今後大きな市場を形成する見込みである。

スピントロニクス効果の発見以降、日本・米国・欧州を中心に、多くの物性物理・磁性分野の研究者がスピントロニクスと熱利用技術の融合分野であるスピントロニクスに関する研究を開始した。特に、ドイツで2010年に大型プロジェクト「SpinCaT」が立ち上がったことを皮切りに、スピントロニクス分野の研究者人口が爆発的に増加した。ここ10数年間の基礎研究により、スピン流-熱流変換現象に関する物理的理解は大きく進展した。スピネルチェ効果やスピネルンスト効果（2017年に初観測）などの相次ぐ新現象の発見に加え、磁気トムソン効果（2020年に初観測）など非線形領域における磁気熱電効果の研究も開始されており、物理としてのスピントロニクスは成熟期に入りつつも、未だ勢いは衰えていない。

近年では異常ネルンスト効果を中心とした“横型”熱電効果が注目を集めている。横型熱電効果を用いれば熱流と電流がそれぞれ直交する方向に変換されるため、従来のゼーベック素子より簡易なデバイス構造が期待でき、耐久性向上や低コスト化のみならず、理論効率に近いデバイス効率を達成しやすいなどの利点が得られる。ホイスラー合金を含むトポロジカル物質（ワイル磁性体）や永久磁石など様々な物質・材料においてスピントロニクス現象の開拓が進められており、典型的な強磁性金属材料よりも一桁以上大きな異常ネルンスト効果が相次いで見出されるなど、顕著な成果が得られている。

スピントロニクスはスピントロニクスから派生した研究分野であり、これまでの研究の大部分は物性物理・磁性材料分野の研究者によって行われたものである。一方で熱電分野においても、金属・半導体材料に磁気を取り入れることで熱電性能指数の向上を狙う研究が広がっており、これは国内外に共通する傾向である。実際に日本においても、JST ERATO、CREST、未来社会創造事業やNEDO先導研究プログラム「未踏チャレンジ2050」および「エネルギー・環境新技術先導研究プログラム」などで研究が進められてきた。

熱物性計測については、時間領域サーモフレクタンス法 (Time-Domain-Thermoreflectance : TDTR) が、ナノスケールの材料や界面における熱物性の計測において、標準的な方法論となっており、材料開発や物性研究において欠かすことのできないツールとなっている。国内においても普及が進み、TDTR法を効果的に用いた研究開発が数と質の両面において充実しつつある。

TDTR法によるフォノン熱輸送スペクトルの計測では、試料表面にナノスケールのグレーティング構造を施した手法が一定の成功を収めるとともに、高速周期加熱や微小スポット径などによる挑戦が進められている。

(4) 注目動向

[新展開・技術トピックス]

国内のアカデミアの動きとして、2016年に応用物理学会に新設された「フォノンエンジニアリング」セッションが定着し、研究力強化、人材育成、ネットワーキングが活発に行われている。また、2018年に応用物理学会に設立された「エネルギーハーベスティング研究グループ」も、フォノンエンジニアリングを利用した熱電発電をカバーし、産学連携によるスマート社会化を支える環境発電システムの構築に貢献が期待される。

熱電材料の高性能化に向けては、ゼーベック係数を増強するいくつかの原理が提唱されている。バンド構造の縮重度の活用や、異種界面における低エネルギー電荷キャリアの遮蔽技術 (エネルギーフィルタリング) があげられる。また、磁性を活用したゼーベック係数の増強についても拡がりを見せている。従来より知られている、磁性金属における低温でのマグノンドラッグではない新規な試みとして、比較的高温の常磁性状態において有効な電荷と磁性イオン間の磁気相互作用を活用したゼーベック係数の増強 (パラマグノンドラッグ) が示されている。例えば、 Fe_2VAI 系ホイスラー合金において、スピン揺らぎの効果によってゼーベック係数が通常期待される拡散値に比べて1.5倍に増強されているという示唆が実験的に初めて見出された。パラマグノンドラッグの戦略がいろいろな材料系に適用されて、スピン揺らぎ、スピンエントロピーのより広い活用など、磁性活用の高性能化原理としての潮流の勢いが増している。

欠陥の制御・活用による熱電高性能化に関しては、スクッテルダイトと並び中高温で最高性能を示すGeTeを対象として、欠陥の理解および活用がより多彩になり、深化した。Geの欠陥形成エネルギーをドーピングで制御、生成しやすくすることにより、押し出されたGeのミクロナノ析出物が効果的にフォノンを選択的に散乱してZT \sim 2の高性能が得られたり、欠陥の多い相を安定化し電子供与体のドーブ許容量を大きくすることで初めてのn型半導体特性を発現させたり、欠陥の有効活用が多彩になっている。また、GeTe以外にも欠陥が高性能化に種々活用されるようになってきている。

また、 Mg_3Sb_2 系材料における欠陥制御効果により、大幅な性能増強が得られ、実用的な形態のモジュールにおいて、 Bi_2Te_3 系の世界最高性能モジュールに匹敵する熱電変換効率が得られた。開発材料性能自体からは1.5倍の変換効率が示唆されている。本材料は、 Bi_2Te_3 のように希少元素を用いていないため、資源制約からの解放やそれによるコスト低下が期待され注目に値する。

ここ数年、化学結合の精密制御による格子熱伝導率を低減する研究が大きく加速している。非調和的な結合が低熱伝導率につながる事が知られていたが、複合アニオン化合物において、複合アニオンの導入によりローカルな結合の対称性が落ちることによって、フォノン散乱が促進され、 $\sim 0.5 \text{ W/m/K}$ などの極めて低い熱伝導率が実現している。また、特定のドーピングによって、格子が大幅にソフト化することで、フォノン散乱に比べて、より大きく熱伝導率を低減させることが示されている。

その他にも、薄膜形態の資源豊富なホイスラー合金材料でZT \sim 5も報告され、注目を集めている。出力因子に関しても、室温近傍で、 Bi_2Te_3 系の約3倍の出力因子 $\sim 10 \text{ mW/m/K}^2$ を示すホイスラー合金系熱電材料がバンドギャップの制御や局在状態の活用などによって報告されている。

フォノン結晶に関しては、従来フォノンの弾道性と波動性が顕著になる領域における熱輸送現象の理解と制御技術の確立が進展してき。近年は、フォノンと他の量子との結合による新しい熱輸送現象の研究も進展してきており、表面フォノンポラリトン (フォノンとフォトンの結合による新しい固有状態) によって、誘

電体薄膜の熱伝導が増大することが実験的に報告されている。さらに、光とメカニクスの融合領域であるオプトメカニクス分野では、内閣府のムーンショット型研究開発制度における量子コンピュータに関する研究開発が本格化し、スピノプトメカニクスなどの研究が始まった。また、フォノン結晶マイクロ共振器を用いて、フォノンとマグノンの相互作用を増強するマグノメカニクスの研究も生まれている。今後、フォノンエンジニアリングは、高いパーセルファクターを可能にする共振器などを利用し、他量子との相互作用や量子結合を利用して活躍の場を広げると考えられる。

トポロジカル物質を用いた熱電変換・熱スピン変換研究は、日本のみならず世界的に推進されており、物性物理学における一つのトレンドとなっている。これらの研究により異常ネルンスト効果の発現機構や物質設計指針が明らかになり、基礎物性開拓から応用研究にも波及しつつある。磁性体と熱電半導体の複合材料において巨大な横熱起電力を生成できる「ゼーベック駆動横型熱電効果」は2021年に我が国で実証された新しい横型熱電変換機構であり、熱電変換出力向上への貢献のみならず、スピノカロリトロニクス分野と熱電分野の橋渡し役を担うことも期待される。

スピノカロリトロニクスで培われてきた物理を異分野に適用して更なる新展開を狙う試みも始まっている。2021年には強誘電体中の電気分極の集団励起を用いることで、絶縁体である強誘電体においても熱電効果が発現することが理論的に提案されており、これはマグノン輸送理論のアナロジーから生まれたものである。強誘電体を用いた熱電変換研究については、現時点では世界的な研究潮流と生み出すほどには至っていないが、電気分極の自由度を活用して新たな熱電変換現象・熱制御機能の実証を狙うプロジェクトが日本及び米国で始まっている。

一般的な傾向として、マテリアルズ・インフォマティクスをより活用する試みも増している。低い格子熱伝導率系の探索、高い出力因子の材料を抽出するようなデータマイニング的なアプローチが増えている。高性能の新規な材料系を実際に見出した例はまだ少ないが、各国でマテリアルズ・インフォマティクスを推進しており、今後もこの試みは続くと考えられる。

熱計測や理論的観点では、様々なエレクトロニクスで重要なアモルファス材料の熱伝導特性について、ディフューズンとプロパゴンがどのように熱輸送を担うのかの機構理解が注目を浴びている。例えば、米国MITグループでは、ナノグレーティングとTDTR法を用いてアモルファスシリコンのフォノンスペクトルを計測し、アモルファスのような長距離秩序を持たない系における熱輸送の起源を報告している。近年TDTR法による2次元材料の超断熱特性の報告が急増している。積層した2次元材料を利用して高性能な断熱特性が得られており、ナノサイズの構造体において自在な熱制御を実現するための基本材料として注目される。ナノ材料の熱物性計測手法では、ラマンによる計測も近年増えつつある。ラマンではTDTR法で必要なトランスデューサー膜が不要であるため、特に2次元材料などで有利である。定常的な温度上昇を解析する単純なものから、周期的加熱や高度な時間分解手法を取り入れて精度向上を狙ったものなど新しい提案がされている。

[注目すべき国内外のプロジェクト]

日本においては、近年フォノンエンジニアリングおよび熱電材料に関する研究開発が複数進められている。2015年からJSTのCREST・さきがけ複合領域「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」において、複数の熱電材料関連の課題があり、エネルギーハーベスティングの実用化に向けた高性能材料・デバイスで有望な成果が得られている。2017年からのCREST「ナノスケール・サーマルマネージメント基盤技術の創出」、さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」においては、フォノンエンジニアリングに関する課題が多数進められている。2019年にJST未来社会創造事業（大規模プロジェクト型）に採択された「磁性を活用した革新的熱電材料・デバイスの開発」では、磁性による熱電増強効果を利用した高効率熱電材料により、産業プロセス、低コスト大量生産に適したモジュール開発までを行い、IoTセンサー・デバイスのための自立電源需要に応える研究開発が推進されており、産学連携の活発化による社会実装を目指した展開が期待される。経産省では、未利用熱を回収・利用することで社会全体のエネルギー効率を向上させ

ることを目的として、産総研を中心としたNEDOプロジェクト「未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究開発」プロジェクト（2015年度～2022年度）が推進されており、ソフトウェア開発、高効率熱電モジュール、吸熱冷凍機開発などの成果が出ている。同じくNEDOのエネルギー・環境新技術先導研究プログラムや未踏チャレンジ2050でも、熱電変換材料やモジュール、システム開発などに関するテーマが推進されている。

2020年に始動した内閣府のムーンショット型研究開発制度目標6では、超電導量子ビットと光通信波長帯の光子や固体中の量子メモリとの相互作用の量子トランスデューサーとしてフォノンが考えられており、量子間の相互作用を増強させるスピンオプトメカニクス系の開発が行われている。

2022年よりJST-ERATO事業において、スピнкаロリトロニクスを基盤として、ナノスケールでのみ利用可能であった熱スピン変換能がマクロスケールで発現する材料、デバイス開発のプロジェクトが開始されている。

米国では、基礎材料開発研究に関しては、NSFやDOEのプロジェクトによって研究が進んでいる。ナノスケール熱輸送に関する研究が数多く採択されており、依然として基礎研究への研究費配分が行われている。熱電変換に関しては、基礎研究からデバイスやシステムレベルへの研究開発にステージが移行しているが、組織だったプロジェクト推進はみられない。

必ずしも熱電やフォノンエンジニアリングに限らないが、DoEのEnergy Earthshots Initiativeにおいて、Industrial Heat Shotがプロジェクトとして2022年に設定され、産業熱のCO₂排出削減に向けた技術開発が進展しようとしているため、今後注視に値する。

欧州では、2000年代後半からHERMOMAG, NANOHIGHTECHなど複数の熱電材料開発の大型プロジェクトの推進によって熱電関連の研究人口と活動の大幅な増加をもたらした。現在でも、分子界面の熱電的輸送現象の解明（NANO-DECTET）、有機・ハイブリッド熱電システム（HORATES）、マイクロTEGによるワイヤレスデバイス給電（WiPTherm）、2次元カルコゲナイド熱電ナノ構造デバイス（THERMIC）など、室温近傍の比較的低温域におけるエネルギーハーベスティングをターゲットとしたプロジェクトが進行している。フォノンエンジニアリング関連では、Horizon 2020やERC（European Research Council）において、複数のプロジェクトが進行している。2016年から4年間行われたPHENOMENにおいて、全フォノンニックサーキットの開発、オプトメカニクス、トポロジカルフォノニクス、二次元材料の電子フォノン相互作用などのプロジェクトが採択されている。グラフェンフラッグシップの中では、GrapheneCore3の中で半導体熱マネジメントに関するプロジェクトが進行する。また、2016年から5年間継続したSmartphonプロジェクトでは、フォノニクスをソフトマテリアルに展開するプロジェクトが進行し、ポリマーやコロイド科学への新展開があった。最近では、ナノフォノニクスの量子情報処理や通信分野に展開する研究が多く採択されている。全体的な傾向として、大規模のファンディングに関しては、基礎材料研究から、企業との連携などが必要なプログラムに主眼が移行している。

欧州各国の特筆すべき各取り組みに関して、いくつか抜き出してピックアップする。

ドイツにおいては、材料研究に関しては、Max Planck 固体化学物理研究所（MPICPfs）とLeibniz 固体研究所を筆頭に、継続的に成果が生まれている。モジュール開発に関しては、フラウンホーファー研究所やGerman Aerospace Center（DLR）で国研ならではの基盤的な実用化研究開発がMg₂Si系やスクッテルダイト系材料デバイスの作製や電極開発などに関して継続的に行われている。

フランスにおいては、熱電モジュール開発よりも材料開発研究の方が盛んで、CRISMAT、Institut Jean Lamourを筆頭に、20～25のグループが取り組んでおり、GIS Thermoelectricityというネットワークを形成している。高温熱電材料（HIGHTHERM）など、French National Research Agency（ANR）のプロジェクトが常時数件推進されている。France 2030は2030年まで75兆円相当を投資するイニシアティブで、低炭素化のターゲットに熱電に関するプロジェクトが入る可能性がある。

英国においては、2050年までのカーボンニュートラルを達成するために制定された5つの材料開発ロードマップの一つに熱電材料が選ばれており、今後の大きなファンディングの可能性はある。

中国において、熱電関連に極めて大きな研究投資がされており、研究者数は現在世界で圧倒的に多いと考

えられる。例えば、基礎熱電材料開発には2千人以上の国研・大学の研究者がおり、中国材料学会 (Chinese Materials Research Society) の中で、中国熱電学会 (Chinese thermoelectric society) が全ての学会の中で一番大きな組織となっている。

ファンディングに関しては、材料開発の基礎研究は Ministry of Science and Technology (MOST) や National Natural Science Foundation of China (NSFC)、実用化研究は、National Key Research and Development Program of China で毎年大型の予算が充当されている。

例えば、MOSTでは、約5億円の規模で、室温近傍の高性能材料の研究開発 (2019–2024)、磁性熱電材料の開発研究などが進行している。2022～2023年にも室温近傍の熱電材料・デバイスの開発、室温近傍の熱電デバイス・システムが採択される予定である。地方自治体も熱電関係のプロジェクトに積極的に投資しており、例えば、Bi₂Te₃系の実用関連プロジェクトをはじめとした複数のプロジェクトが推進されている。

ファンディングの全体的な傾向として、先に立ち上がった日本のCREST・さががけ「微小エネルギー」領域、未来社会創造事業大規模プロジェクトと同様に、室温近傍のエネルギーハーベスティングや磁性などの活用による高性能熱電材料開発などをターゲットしたものが目立っており、激しく追い上げている印象である。

韓国においては、数多くの大学、国研で熱電研究が盛んに行われている。従来は、基礎の材料開発に比べて、実用化研究に比重があったが、基礎研究や新規材料開発への投資が増えているのが大きな変化である。公的な競争的資金では、現在は100超の大小の熱電関係のプロジェクトが走っており、国の人口を考えると熱電予算規模が非常に大きい。企業の活動が活発であり、サムスン重工業、LG電子、LGイノテック、Hyundaiなどの複数の大企業が熱電研究開発を行っている。最近の顕著な動きで、サムスン重工業とLGイノテックの共同開発で、初めての船用の熱電発電システムを共同開発し、日本郵船が実施する予定である。

(5) 科学技術的課題

ナノスケールにおけるフォノン輸送と熱伝導の物理探求および制御技術は、様々な材料、ナノ構造中および異種材料界面での系統的な実験結果の蓄積と計測技術およびシミュレーション技術の進歩、インフォマティクスの活用によって着実に進展している。しかし、解釈やシミュレーションによる再現が困難な実験データが得られる場合が少なくない。ナノ構造では、構造パラメータに加えて界面や表面の性質、形状、欠陥などに依存する散乱がフォノン輸送特性に大きな影響を与えることが知られている。今後、より一層応用に展開するフォノンエンジニアリングにおいて、表面状態や欠陥の制御技術や異種材料の接合技術が重要な技術的課題になると考えられる。

熱電材料においては、磁性増強、欠陥導入など高性能化の指針が見出されているが、準安定状態や非平衡相の制御も含めて非常に広大な材料探索空間が存在する。したがって、材料探索の加速のための系統的に開拓する仕組みや理論的なツール・方法論などの構築が引き続き望まれる。

IoTセンサーの動作電源用の熱環境発電は世界的にファンディングの対象となっているが、フレキシブルな熱電材料も一つのターゲットであり、有機無機のハイブリッド熱電材料などの開発が引き続き望まれる。一方で高性能化を阻む問題として、有機-無機界面や、有機-金属電極界面における、コンタクトの向上、電荷輸送の阻害を低減するブリッジ技術や異種界面の電荷輸送を促進する新規機構の開発が期待される。こうした技術開発は、熱電変換技術以外にも広く活用でき、波及効果が大きい。また、デバイスやモジュールとして確立するためには、電極コンタクト選定・形成技術、温度差維持のための放熱技術、モジュール作製技術、モジュールデザインなどの総合的な設計技術にも取り組む必要がある。

熱電材料の材料開発側面に関しては、ホイスラー系薄膜の準安定状態やCu₂Se系などの超イオン伝導体やイオン化ゲルなどの非平衡的な状態を活用して、熱電の超高性能、高性能を発現させる新規な試みで最近顕著な成果が出ており、こうした準安定や非平衡的な系を系統的に開発する研究開発の仕組みや理論的なツール・方法論などの構築が望まれる。ナノコンポジット材料も、単一の材料の熱電物性を凌駕する方法として、変調ドーピング、エネルギーフィルタリング、粒界に金属相を入れ込んだナノコンポジット化などで熱電性

能の高性能化が示されているが、このような熱電ナノコンポジット材料の開発をマテリアルデザインへ昇格させることが重要である。すなわち、より高い制御性で精緻なナノコンポジット構造の作製手法の開発、マルチスケールな計算手法の開発などが必要である。また、熱電高性能化の簡易なフォノンエンジニアリング手法としてナノ多孔を導入する方法がある。例えば、 Bi_2Te_3 系材料の代替材料として研究が進んでいる Mg_3Sb_2 系においてMgに起因すると思われる多孔が散見され、これが高性能の要因の1つと考えられているが、十分な理解や制御ができていない。上記のナノコンポジット同様、ナノ多孔のより精緻な作製手法、およびシミュレーション方法の開発が待たれる。

スピнкаロリトロニクスは毎年のように新現象が発見されている稀有な分野であり、ここ10数年でその学理形成は大きく進展した。しかし、様々な現象や機能が実証されているものの、未だ実应用到に資する熱電変換能・熱制御能は得られていない点が大きな課題であり、その性能向上に向けて物性物理から物質・材料科学へと研究動向がシフトしつつある。ゼーベック効果に基づく熱電変換能を高めるための原理として、長らく量子効果や低次元化が主要な研究トピックとなり成功を収めているが、スピнкаロリトロニクスにおいてはこのような報告は見当たらない。各種スピнкаロリトロニクス現象の量子効果・低次元化の影響を明らかにすることは、基礎物理・工学応用の両面において重要であろう。実際、米国や韓国などでは、二次元物質を用いてスピнкаロリトロニクス現象の性能向上や新機能創発を目指す基礎研究が報告されている。実験技術が成熟しているスピンゼーベック効果、異常ネルンスト効果に関しては、性能指数・熱電発電効率の評価基盤が確立されているものの、モジュールに対する適用や、実際の利用形態における性能評価には至っていない。熱エネルギー制御技術としての応用を目指すためには、熱エネルギー輸送効率の評価基盤や熱設計指針も必要であろう。

熱物性計測の課題として、スピнкаロリトロニクスを好例とする動的な熱制御材料（熱流ダイオード、熱伝導スイッチ等）の評価への対応がある。温度、圧力、磁場、電場、相変態、化学反応など様々な外場を材料に加えた状況でその場計測を行う技術が重要である。極低温、高磁場、高圧力など専門的な知識と設備を要するものについては、分野間における幅広い連携と人材交流が求められる。

(6) その他の課題

これまで、フォノンエンジニアリング分野の研究の多くは、フォノンのみの熱輸送について行われてきたが、他の量子とのハイブリッド状態の輸送や新奇物理現象、量子情報通信分野といった量子科学分野への展開が始まった。そのため、伝熱工学分野のみならず、他分野の研究者との緊密な連携が必要になる。

国内外を含めて研究グループが増加し、基礎研究と応用研究に進展がみられるものの、実用化への道はまだ険しい状況である。材料開発から社会実装までの各レイヤーにおける課題解決に対する努力はなされており連携も進んできているが、フォノンエンジニアリングや熱電環境発電が普及し産業や社会に貢献するためには、キラーアプリの探索に一層の努力が必要である。

また、2015年以降、JSTなどにおいてフォノンエンジニアリングに関する基礎研究と熱制御や熱電変換の実用化に向けた研究開発が推進された。これらのプログラムのいくつかは2022年に終了するため、獲得した研究開発力が失われないよう、これらをより深い基礎研究や実用化につながる展開を可能にするための仕組み作りも重要である。社会実装の促進という観点では、初期フェーズでコスト側面の圧力を緩和するような政策導入によって、産業界の参画を積極化し、新興市場の創出を促す必要もあると考えられる。

(7) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ Society 5.0の実現へ向けたIoT熱環境発電開発の必要性により、異分野からの研究者の新規参入で熱電の研究者は増えている。 ・ ファundingにおいても、2015年後半からJSTやNEDOでさまざまなプロジェクトが推進されている。特に、スピンを利用した熱電変換・熱制御に関する研究が多数展開されている。 ・ 量子情報通信技術を志向したナノフォトニクスに関する研究も開始している。 ・ 応用物理学会などで、フォノンエンジニアリングやエネルギーハーベスティングの活動が活発化し、ネットワークング、人材育成が加速している。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ 経産省の未利用熱を削減する大型プロジェクトが産総研と企業中心に走っており、モジュール作製や評価が進展。 ・ NEDO先導研究プログラム「未踏チャレンジ2050」、「エネルギー・環境新技術先導研究プログラム」でスピンを利用した熱電変換に関する研究が開始された。 ・ エネルギーハーベスティングをキーワードとして、コンソーシアム活動や商業化活動なども活発である。
米国	基礎研究	◎	↘	<ul style="list-style-type: none"> ・ 研究者人口が多く、材料開発、計測技術、理論・数値解析など幅広くカバーしており、二次元材料の作製・熱計測で新展開がみられる。 ・ 新規な原理（低次元量子効果、フォノンの選択散乱、共鳴準位、変調ドーピング、バンドの縮重度増強など）などを提唱してリードしてきた側面があるが、エネルギー政策的な変遷もあり、熱電関連の大型プロジェクトが終了している。 ・ 複数の拠点形成型事業により、スピнкаロリトロニクスの研究が大学を中心に精力的に進められている。
	応用研究・開発	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ 探査機の熱電原子力電池で長年の実装研究開発実績を誇るNASA JPLは、次世代機へ向けたスクッテルダイトやYb₁₄MnSb₁₁系などの新規材料のモジュール作製技術、長時間の性能試験、信頼性試験と総合的な応用研究の開発能力を持っている。 ・ Matrix Industriesがクラウドファンディングで資金調達、phononicが注目を浴びるなど、スタートアップの活動が活発化。
欧州	基礎研究	◎	→	<ul style="list-style-type: none"> ・ EUからのERC、Horizon 2020の大型予算プロジェクトのほかに各国の個別の熱電プロジェクト予算（ドイツDFG、BMBFやフランスANRなど）がある。例えばスピнкаロリトロニクス関係では、ERC Synergy Grants（研究費約10Mユーロ）でのスピン流-電流変換とスピнкаロリトロニクスを主軸とした大型プロジェクト（2014～2020年）や、SPINBEYOND（2017～2022年）などがある。 ・ eMRS内のセッションとEurothermおよびワークショップ、スクールが高頻度で開催されており、研究交流が活発である。 ・ ドイツでは、Max Planck研究所やLeibniz研究所などが材料開発研究を先導している。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ Horizon 2020で応用研究に関するプロジェクトが多数採択されている。 ・ ETCやTHERMINICといった応用をカバーする国際会議やCNRSの熱電ネットワークが活動を継続している。 ・ 熱電環境発電では、ERC予算配分があり、スタートアップ企業も存在する。 ・ モジュール開発に関しては、例えば、フラウンホーファー研究所やGerman Aerospace Center（DLR）で国研ならではの基盤的な研究開発が引き続き行われている。 ・ 企業の顕著な活動として、Isabellenhütteがホイスラー合金、Treibacher Industries AGがスクッテルダイト系のそれぞれの熱電材料の工業的なスケールアップ生産に成功している。

中国	基礎研究	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ MOST、NSFCなどから熱電関連プロジェクトに大きな投資がされており、研究者数も世界トップとなっている。 ・ 室温近傍のエネルギーハーベスティングや磁性などの活用による高性能熱電材料開発などをターゲットとしたプロジェクトが目立つ。また、広範な周波数帯でのフォノン結晶や音響メタマテリアルに関する基礎研究を行う研究者が多い。
	応用研究・開発	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ 実用化研究に関しては、今後も MOST から5億円規模のプロジェクトが複数計画されている。 ・ 中国の熱電専門企業は、20社以上あり、FerroTecを筆頭にペルチェの熱電冷却の企業の活動が、5G応用のために特に活発で、スタートアップも増えている。
韓国	基礎研究	○	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ 公的な競争的資金により100超の大小の熱電プロジェクトが走っており、予算総額約53億円で、2022年度の予算は31.5億円/年と、国の人口を考えると熱電予算規模が非常に大きく、増えている傾向にある。 ・ 従来はBi₂Te₃系材料を対象にしたプロジェクトが最も多かったが、現在はウェアラブル・フレキシブル熱電材料へと関心が移っており、二次元材料など各種の熱電材料の開発プロジェクトが増えている。
	応用研究・開発	◎	↗	<ul style="list-style-type: none"> ・ サムスン重工業、LG電子、LGイノテック、Hyundaiなどの複数の大企業が熱電研究開発を行っている。 ・ 船舶の排熱を熱電変換技術で再利用し炭素排出量を削減する取り組みが注目。韓国の通商産業エネルギー省のグリーン技術としての認定を受けるなど、官民で取り組んでいる。

(註1) フェーズ

基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲

応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲

(註2) 現状 ※日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価

◎：特に顕著な活動・成果が見えている

○：顕著な活動・成果が見えている

△：顕著な活動・成果が見えていない

×：特筆すべき活動・成果が見えていない

(註3) トレンド ※ここ1～2年の研究開発水準の変化

↗：上昇傾向、→：現状維持、↘：下降傾向

関連する他の研究開発領域

- ・ 革新半導体デバイス (ナノテク・材料分野 2.3.1)
- ・ スピントロニクス (ナノテク・材料分野 2.3.6)

参考・引用文献

- 1) Kunihito Koumoto and Takao Mori, eds., *Thermoelectric Nanomaterials: Materials Design and Applications*, Springer Series in Materials Science 182 (Berlin, Heidelberg: Springer, 2013)., <https://doi.org/10.1007/978-3-642-37537-8>.
- 2) Baoli Du, et al., "The impact of lone-pair electrons on the lattice thermal conductivity of the thermoelectric compound CuSbS₂," *Journal of Materials Chemistry A* 5, no. 7 (2017) : 3249-3259., <https://doi.org/10.1039/C6TA10420G>.
- 3) Yan-Ling Pei, et al., "High thermoelectric performance of oxyselenides: intrinsically low thermal conductivity of Ca-doped BiCuSeO," *NPG Asia Materials* 5 (2013) : e47., <https://doi.org/10.1038/am.2013.15>.
- 4) 森孝雄, 塩見淳一郎 監『計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向』(東京: シーエムシー・リサーチ, 2022).

- 5) Fahim Ahmed, et al., “Thermoelectric properties of $\text{CuGa}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}_2$: power factor enhancement by incorporation of magnetic ions,” *Journal of Materials Chemistry A* 5, no. 16 (2017) : 7545-7554., <https://doi.org/10.1039/C6TA11120C>.
- 6) Yuanhua Zheng, et al., “Paramagnon drag in high thermoelectric figure of merit Li-doped MnTe,” *Science Advances* 5, no. 9 (2019) : eaat9461., <https://doi.org/10.1126/sciadv.aat9461>.
- 7) Tian Wang, et al., “Machine Learning Approaches for Thermoelectric Materials Research,” *Advanced Functional Materials* 30, no. 5 (2020) : 1906041., <https://doi.org/10.1002/adfm.201906041>.
- 8) Hiromasa Tamaki, Hiroki K. Sato and Tsutomu Kanno, “Isotropic Conduction Network and Defect Chemistry in $\text{Mg}_{3+\delta}\text{Sb}_2$ -Based Layered Zintl Compounds with High Thermoelectric Performance,” *Advanced Materials* 28, no. 46 (2016) : 10182-10187., <https://doi.org/10.1002/adma.201603955>.
- 9) Zihang Liu, et al., “Demonstration of ultrahigh thermoelectric efficiency of $\sim 7.3\%$ in $\text{Mg}_3\text{Sb}_2/\text{MgAgSb}$ module for low-temperature energy harvesting,” *Joule* 5, no. 5 (2021) : 1196-1208., <https://doi.org/10.1016/j.joule.2021.03.017>. Zihang Liu, et al., “Maximizing the performance of n-type Mg_3Bi_2 based materials for room-temperature power generation and thermoelectric cooling,” *Nature Communications* 13 (2022) : 1120., <https://doi.org/10.1038/s41467-022-28798-4>.
- 10) Masahiro Nomura, et al., “Review of thermal transport in phononic crystals,” *Materials Today Physics* 22 (2022) : 100613., <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2022.100613>.
- 11) Laurent Tranchant, et al., “Two-Dimensional Phonon Polariton Heat Transport,” *Nano Letters* 19, no. 10 (2019) : 6924-6930., <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.9b02214>.
- 12) Gerrit E. W. Bauer, Eiji Saitoh and Bart J. van Wees, “Spin caloritronics,” *Nature Materials* 11, no. 5 (2012) : 391-399., <https://doi.org/10.1038/nmat3301>.
- 13) Ken-ichi Uchida, “Transport phenomena in spin caloritronics,” *Proceedings of the Japan Academy, Series B* 97, no. 2 (2021) : 69-88., <https://doi.org/10.2183/pjab.97.004>.
- 14) Min Young Kim, et al., “Designing efficient spin Seebeck-based thermoelectric devices via simultaneous optimization of bulk and interface properties,” *Energy Environmental Science* 14, no. 6 (2021) : 3480-3491., <https://doi.org/10.1039/D1EE00667C>.
- 15) S. Meyer, et al., “Observation of the spin Nernst effect,” *Nature Materials* 16, no. 10 (2017) : 977-981., <https://doi.org/10.1038/nmat4964>.
- 16) Ken-ichi Uchida, et al., “Observation of the Magneto-Thomson Effect,” *Physical Review Letters* 125, no. 10 (2020) : 106601., <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.106601>.
- 17) Weinan Zhou, et al., “Seebeck-driven transverse thermoelectric generation,” *Nature Materials* 20, no. 4 (2021) : 463-467., <https://doi.org/10.1038/s41563-020-00884-2>.