

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： ラットリングとローンペアの融合的活用による熱電材料の開発
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

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 研究グループ長）

主たる共同研究者

水口 佳一（首都大学東京 大学院理学研究科 准教授）

末國 晃一郎（九州大学 大学院総合理工学研究院 准教授）

黒木 和彦（大阪大学 大学院理学研究科 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A ■ 期待通りの成果が得られている

○総合評価コメント：

熱電性能の向上を目指し、①格子熱伝導率の新しい低減方法と、②電力因子の新しい増強方法に関する研究を通して高性能新熱電材料を開発する。

■ 研究の達成状況および研究成果

- (1) カゴ状構造のない平面配位の物質系において、その中心原子に化学的圧力を加えてラットリングを誘起すると格子熱伝導率が効果的に抑制できることを初めて見出した。
- (2) 擬平面5配位の平面ラットリングが現れる LnOPnCh_2 において、ニクトゲンをより軽い元素に、カルコゲンを重い元素に置換することで電子状態の一次元性の増強と急峻なバンド分散を同時に実現すると電力因子が向上することを明らかにした。
- (3) 実用的な熱電材料として $ZT = 0.87$ (@T 467 K) の α -MgAgSb の熔融法による作製方法を確立した。

■ 得られた研究成果のインパクトについて

熔融法により作製した単相の α -MgAgSb は大量合成に向いており、生産性に適した低コスト熱電材料として期待される。

■ 研究の進め方において高く評価できること

本事業では、当初、ラットリングとローンペアの融合的活用法に関する普遍的学理の確立と、それによる新材料開発を目標としていた。組成を変えた膨大な回数の実験を極力減らすべく、格子熱伝導や電力因子の機構解明に向けて第一原理計算を活用している。具体的には、電力因子に関しては、電子バンド構造の上端を平坦化しつつ、フェルミエネルギーを横切るバンド中央部は急峻な分散を持つプリン型バンドを実現する材料を第一原理計算で探索しながら選択肢となる熱電材料を絞って研究を進めた。その結果、学術的な知見が得られるとともに、ラットリングとローンペアで熱電材料をマッピングできることを示した。

■ その他特記すべき事項

- ・層状構造に由来する大振幅振動と特異な電子状態を熱電効率の向上に利用すべく、実験と計算を有機的に動員して学術的に意味のある研究成果を得た。
- ・ローンペアもラットリングも含まないが、特性が有望と思われた MgAgSb に関する大量合成法の開発に成功し、個別面談を経て、研究加速を行った。中温域（200°C）で BiTe 系を超える性能を示している。
- ・領域内研究者（中辻 CREST、森 CREST、さきがけ酒井）との連携を通じた研究を積極的に行

い、共著論文 5 件を公表している。

- ・参加した学会などで研究の成果が認められ、17 件もの賞が授与されている。