

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： メカノ・サーマル機能化による多機能汎用熱電デバイスの開発
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

塩見 淳一郎（東京大学 大学院工学系研究科 教授）

主たる共同研究者

後藤 真宏（物質材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 主席研究員）

岩瀬 英治（早稲田大学 理工学術院 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A+■期待を超える十分な成果が得られている

○総合評価コメント：

表面形状（粗面・曲面・伸縮面）への装着性（機械的特性、伝熱特性）の優れた熱電デバイスおよびナノ構造化によるひずみエンジニアリングを活用した低コストで高性能指数を持つ Si 系熱電材料の研究開発。

■ 研究の達成状況および得られた研究成果

- (1) 機械学習と分子シミュレーションを用いた熱輸送計算を交互に組み合わせたマテリアルズ・インフォマティクス手法により、熱電変換の性能指数を最大にするナノ構造設計手法を開発した。
- (2) メタルアシストエッチングにより作製したポーラスナノワイヤーをプラズマ焼結するプロセスにより、ナノ多結晶、軟化粒界、ナノ細孔、ナノ析出層の階層的に有するナノ構造化膜材料を開発し、室温での $ZT=0.3$ を実現した。シリコンのみからできているバルクに展開できる熱電材料の中では、世界最高の性能を達成した。
- (3) 発熱体の表面形状（粗面・曲面・伸縮面）への装着性が優れた折り紙型熱電発電デバイスを作製し、25%程度の延伸性を実現するとともに、効果的な熱電発電ができることを実証している。

■ 得られた研究成果のインパクトについて

シリコンのみからできているバルクに展開できる熱電材料の中では世界最高の性能を達成し、熱電技術の低コスト化を通じた普及拡大に向けて大きく前進した。

■ 研究の進め方において高く評価できること

材料開発を得意とする塩見グループと、構造設計を得意とする岩瀬グループの協業により、延伸性を有する熱電デバイス設計が可能となった。これは、延伸性の設計と、熱電発電特性向上のための材料開発を分離することができ、研究加速にも寄与した。

ナノ構造の熱輸送を計算する手法とベイズ最適化手法を組み合わせ、ナノ構造内の原子の組成や構造そのものを記述子とすることで、全候補数の数パーセントの数の構造を計算するだけで最適構造を同定できることを示した。

■ その他特記すべき事項

- ・ チーム内、領域内での人事異動を進め、若手研究者のプロモーションを積極的に行っていることが高く評価される。
- ・ 国際強化支援策の支援により、ロシア科学アカデミーから招へいた Kosevich 先生（フォノンエンジニアリングの基礎理論が専門）との共同解析の中で「局所的構造」による新しいフォノン

共鳴現象を見出し、ストップバンド形成による熱伝導制御の可能性を示した。共著論文2件。

- 本領域の野村先生(さきがけ1期生)らと協力して、応用物理学会においてフォノンエンジニアリング研究グループを発足させた。
- 「歪みエンジニアリング」という新しい視点で熱電材料に取り組み、理論、実験の両面での成果が出ている。また、シリコン系材料に関する研究経緯は特徴的である。偶然、特性が大変に良い材料が見つかったが、その理由がわかっていない。研究成果を開発フェーズにもっていくための学術的理解が必要になっており、特許出願が学術的成果に先行している。科研費程度であれば、学理探求には達成できなかった可能性があり、戦略的創造研究推進事業ならではの伸びしろ確保であったとも言える。