# 研究課題別事後評価結果

- 1. 研究課題名: 低温廃熱回収を目的とした熱電変換材料及びデバイスの開発
- 2. 個人研究者名

小菅 厚子 (大阪府立大学大学院理学系研究科物理科学専攻 准教授)

### 3. 事後評価結果

#### [研究の成果]

- (1) GeSbTe 系材料では GeTe-poor な菱面体構造をもつ組成でゼーベック係数の増大を確認し、立方晶から六方晶の相転移過程の中間構造が、電気的特性の向上に有効であることを実証。
- (2) 液体急冷凝固法と室温高圧プレスを組み合わせた準安定構造の作製法により、熱電特性の最大値が約1.5 倍向上する結果を得た。
- (3) 光熱変換機能を有する黒色化 CuNi と熱電デバイスを組み合わせて光発電特性の可能性を実証。

# 【総合評価】

準安定な結晶構造の中に新しい物性を見出す探求心や結晶の構造解析について、研究者としての高い資質を感じた。今後は専門分野を深耕しつつ、他の分野の研究者と連携した研究の推進を期待する。オンデマンドセミナーの企画や応物学会でのセッション開催等への取り組みを評価する。

### 評価の視点1

GeSbTe 系で準安定構造と熱電特性の相関を明らかにすることが目標であったが、既存の熱電材料に対して優位な特性を持つ材料を開発した等の展開はなかったので、材料特性を改善するうえでのボトルネック解消を目指したところまでと評価される。

#### 評価の視点2

(GeTe) nSb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>において、熱力学的に安定な六方晶構造の原子位置に原子が十分に拡散しきれていない、 欠陥を含んだ六方晶構造を作製し、電気的特性の増大と熱伝導率の低減が起こり、従来の試料より、 熱電特性の最大値が約1.5倍向上することを明らかにした。従来型の材料開発であったが、いわゆる 試行錯誤だけでなく、結晶構造、バンド構造の考察を経てそれを行った。

## 評価の視点3

 $100\,\mu$  W~1mW の実証を目指していたが、デバイス構造を用いた実証は達成できなかった。シミュレーションでは、温度差 1K で約  $30\,\mu$  W の性能が得られている。想定していなかった成果として、光熱駆動型熱電デバイスという新しい展開を図った。

### 評価の視点4

熱電特性評価に際し、領域内で構築した評価プラットフォームを活用した。

## 評価の視点5

熱電材料の劣化まで議論できれば、学術的、産業的なインパクトが大きくなると思われる。

# 評価の視点6

日本熱電学会の理事を務めるなど、学術界での活躍が認められた。

#### 評価の視点7

モデル物質として理解が進めば、熱電材料の劣化に関する議論ができると期待される。物質の平均構造と熱電特性との構造機能相関を研究するにあたり、分光学的な評価や、ミクロスコピックな評価が、さらなる考察を進める上での助けになると思われる。

# 評価の視点8

国内外の人的ネットワークを拡げ、熱電変換に関するオンライン、オンデマンドセミナーを企画、開催した。熱電分野の研究者として国際的なビジビリティが高まるとともに、エネルギーハーベスティング分野の振興に対して、特筆に値する大きな貢献であった。

## (2021年9月追記)

本課題は、新型コロナウイルスの影響を受け、6 ヶ月間期間を延長し、熱電デバイスの試作及び評価を行った。

その結果、GeSbTe 系材料の室温付近の熱電変換出力因子を、既存材料 Bi2Te3 の最大 2 倍に増大させる事に成功した。この増大が、従来熱電性能に寄与すると知られていた価電子バンドに加えて、新しい価電子バンドのバンド端が非常に狭いエネルギー領域で縮重する、バンド端縮重に起因する事を実験と計算から解明したデータがまとめられた。コロナ延長期間における考察と追実験及び解析により、成果をまとめる事ができた。更に、「Materials Today Physics」誌での発表と共に、プレスリリースも行った。延長により、室温廃熱を電気として再利用する廃熱利用技術としてインパクトの高い成果を発信することができた。