

未来社会創造事業 大規模プロジェクト型
年次報告書

令和元年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名:森 孝雄]

[物質・材料研究機構ナノアーキテクニクス材料研究センター
グループリーダー]

[研究開発課題名:磁性を活用した革新的熱電材料・デバイスの開発]

実施期間 : 令和6年4月1日～令和7年3月31日

§1. 研究開発実施体制

(1)「森」グループ(物質・材料研究機構)

① 研究開発代表者: 森 孝雄 (物質・材料研究機構ナノアーキテクニクス材料研究センター、グループリーダー)

② 研究項目

- ・超高性能薄膜の磁性との相関解明
- ・超高性能熱電薄膜の開発(n型制御、p型開発、作製条件制御)
- ・磁性半導体熱電薄膜の開発
- ・高性能磁性半導体バルク熱電材料の開発
- ・高性能ナノ構造バルク熱電材料の開発
- ・TD-TRによる薄膜熱評価技術の開発
- ・モジュールの作製へ向けた基礎プロセス開発

(2)「バウアー」グループ(ウィーン工科大学)

① 主たる共同研究者: エルンスト バウアー (ウィーン工科大学固体物理研究所、教授)

② 研究項目

- ・超高性能熱電薄膜の開発(n型制御、p型開発、作製条件制御)

(3)「小形」グループ(東京大学)

① 主たる共同研究者: 小形 正男 (東京大学大学院・理学系研究科、教授)

② 研究項目

- ・磁性による熱電特性の増強に関する理論的な機構解明、マテリアルデザイン

(4)「野村」グループ(東京大学)

① 主たる共同研究者: 野村 政宏 (東京大学生産技術研究所、教授)

② 研究項目

- ・フォノンの平均自由行程スペクトル測定および解析法の検討
- ・平面型熱電変換デバイスの構造最適化シミュレーションの作成

(5)「川本」グループ(物質・材料研究機構)

① 主たる共同研究者: 川本 直幸 (物質・材料研究機構マテリアル基盤研究センター、主幹研究員)

② 研究項目

- ・熱電薄膜や熱電薄膜実デバイスに活用できる TEM 内熱評価技術の開発

(6)「塩見」グループ(東京大学)

① 主たる共同研究者: 塩見 淳一郎 (東京大学大学院工学系研究科、教授)

② 研究項目

- ・モジュールの冷却側の伝熱制御技術の開発

(7)「宮崎」グループ(九州大学)

- ①主たる共同研究者:宮崎 康次 (九州大学工学研究院、教授)
- ②研究項目
 - ・印刷技術の開発
 - ・混合材料の評価

(8)「竹内」グループ(豊田工業大学)

- ①主たる共同研究者:竹内 恒博 (豊田工業大学大学院工学研究科、教授)
- ②研究項目
 - ・熱電モジュールの新規デザイン

(9)「李」グループ(産業技術総合研究所)

- ①主たる共同研究者: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
 - ・バルク熱電モジュールの試作
 - ・熱電モジュールの評価

(10)「櫻井」グループ(筑波大学)

- ①主たる共同研究者:櫻井 岳暁 (筑波大学教理物質系、教授)
- ②研究項目
 - ・半導体薄膜型熱電材料の欠陥評価とプロセスフィードバック

(11)「太田」グループ(産業技術総合研究所)

- ①主たる共同研究者:太田 道広(産業技術総合研究所ゼロエミッション国際共同研究センター、研究チーム長)
- ②研究項目
 - ・熱電変換デバイスの劣化解析と長寿命化

§2. 研究開発成果の概要

本課題では、パラマグノドラグなどの磁性を活用した熱電増強新原理やナノ構造制御および薄膜効果を活用することにより、IoT 動作電源およびカーボンニュートラルに貢献できるような省エネなどの実用化に資する熱電材料の原理実証・材料開発、および、産業プロセスに適したモジュール化やモジュールの要素技術の開発に取り組んでいる。2024 年度に関しては、下記のような研究進展が得られた。

ホイスラー Fe_2VAl 系の超高性能薄膜に関して、磁性による性能増強の作用もあり、p型の熱電材料の薄膜として最高性能を実現した。また、平面型熱電変換デバイスの開発が進み、室温において当該材料における最大発電密度を達成した。一方で、本プロジェクトで見出した、新規な高性能金属熱電材料の開発も進み、ハイスループットの DFT 計算によって高性能材料となり得る元素を選定し、バンド間の散乱を制御することによって、金

を含まないバルク金属系材料で、室温において、 $>10 \text{ mW/mK}^2$ を超えるパワーファクターを発現した。本プロジェクトで開発した、半世紀チャンピオンの Bi_2Te_3 系材料の最高性能を凌駕する新規 Mg-Sb 系材料に関して、乱れの精密な制御などをおとした電荷の非局在化およびフォノン散乱の促進によって、性能指数 ~ 2 に到達し、単素子デバイスで世界最高の変換効率 $\sim 12.6\%$ の実証に成功した。また、熱電発電および冷却モジュール作製の課題となっていた n 型の鉄電極に代わる高性能の CuNi 系合金電極を開発し、p 型に関しても新原理としてアクティブな自己最適化接触抵抗率メカニズムを見出し、安定性や抵抗で劇的に優れた新規電極を開発した。

また、応用にとって必須な熱電発電モジュールの正確な評価に関して、詳細な手法および今後の検討事項などの指針をまとめて発表した。

【代表的な原著論文情報】

1. Longquan Wang, Wenhao Zhang, Songyi Back, Naoyuki Kawamoto, Duy Hieu Nguyen, and Takao Mori, “High-performance Mg_3Sb_2 -based thermoelectrics with reduced structural disorder and microstructure evolution”, *Nature Communications*, 15:6800 (2024).
2. Raju Chetty, Jayachandran Babu, and Takao Mori, “Best Practices for Evaluating the Performance of Thermoelectric Devices”, *Joule*, 8, 553–562 (2024).
3. Airan Li, Longquan Wang, Jiankang Li, Xinzhi Wu, and Takao Mori, “Self-optimized contact in air-robust thermoelectric junction facilitates long-lasting heat harvesting”, *Nature Communications*, 16:1502 (2025).