

2026年4月16日

NIMS（国立研究開発法人物質・材料研究機構） / 国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）

熱電デバイスを自在に設計する AI「TEGNet」を開発

～性能予測を従来比約 1 万分の 1 の時間に短縮、開発プロセスを革新～

NIMS は、人工知能（AI）を活用した熱電発電デバイス設計用ニューラルネットワーク「TEGNet」（Thermoelectric Generator Neural Network）を開発しました。従来のシミュレーション手法では膨大な計算時間を要していた発電デバイス性能の予測を、99%以上の高精度を保ったまま従来比約 1 万分の 1 の時間で実行できます。本技術により、材料開発からデバイス設計までの最適化が大幅に加速し、廃熱回収や IoT センサ用独立電源などへの応用が期待されます。本成果はアメリカ東部時間 4 月 15 日（日本時間 4 月 16 日）に Nature 誌に掲載されました。

研究成果の概要

■ 従来の課題

持続可能な社会の実現に向け、温度差がある場所に設置するだけで半永久的に発電できる熱電発電技術が注目されています。熱電発電デバイスの高性能化には、材料開発に加えて寸法・構造の最適設計が不可欠です。一方、従来の数値解析（有限要素法）では、条件変更のたびに計算を繰り返す必要があり、計算負荷が大きく、設計探索の大規模化・高速化が難しいという課題がありました。

■ 成果のポイント

本研究グループは、この課題を解決するため、熱電発電デバイスの設計を高速に最適化できる AI モデル「TEGNet」を開発しました。TEGNet は材料の特性や素子の寸法・条件を入力すると、デバイス内で生じる電圧や熱の流れをすばやく予測し、発電出力と変換効率を高精度で見積もることができます（図 1）。本技術の最大の特長は、材料ごとに学習・独立させた TEGNet モデルを、物理法則に基づいてブロックのように自在に組み合わせられる「組立可変」な点にあります。このアプローチにより、特性の異なる材料をつなぎ合わせた複雑な構造のデバイスであっても、性能を迅速かつ網羅的に探索し、最適化することが可能になりました。実証として、Mg-Sb（マグネシウム-アンチモン）系材料を用いた 2 種類のデバイス設計を TEGNet により最適化し、そのデバイスを試作・評価した結果、実用的な温度条件で最大 9.3%および 8.7%の高い変換効率を達成しました。

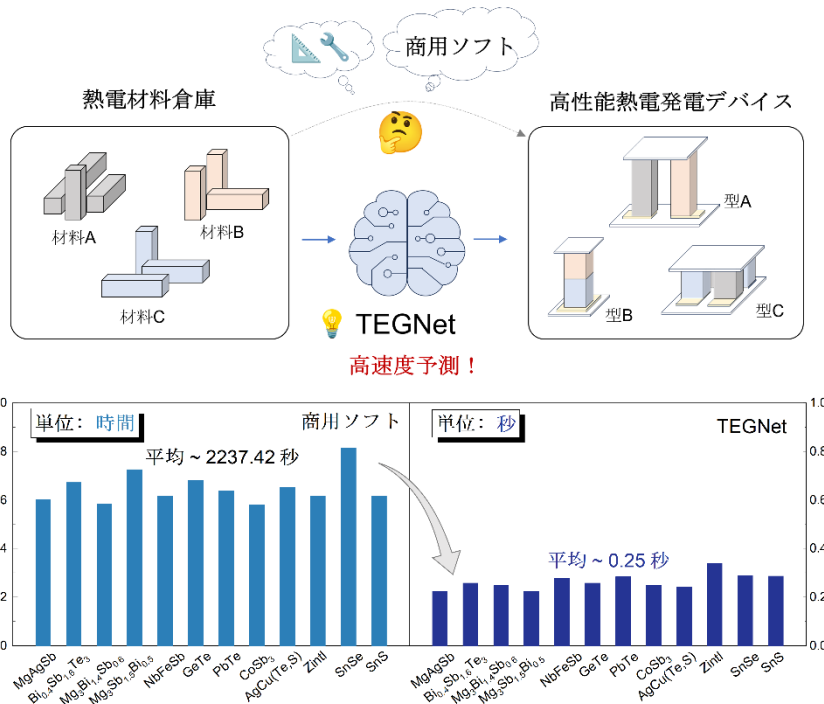


図 1： AI モデル「TEGNet」による熱電デバイス性能予測の大幅高速化（計算時間を従来比約 1 万分の 1 に短縮）

■ 将来展望

本研究成果は、従来の数値シミュレーションに依存した熱電発電器設計に対し、AI を中核技術とする次世代設計手法を提示するものです。近年、多くの AI 研究が材料レベルの最適化に焦点を当ててきたのに対し、本研究はデバイスレベルの最適化を直接対象としている点に大きな特長があります。これにより、材料設計とデバイス設計を相補的に高度化することが可能となり、熱電分野のみならず、エネルギー分野全体における AI 活用のさらなる発展が期待されます。

■ その他

本研究は、国立研究開発法人物質・材料研究機構 ナノアーキテクトニクス材料研究センター 熱エネルギー変換材料グループの森 孝雄 グループリーダーらの研究グループによって行われました。また、本研究は国立研究開発法人科学技術振興機構（以下、JST）未来社会創造事業 大規模プロジェクト型 技術テーマ「センサ用独立電源として活用可能な革新的熱電変換技術」（研究開発代表者：森 孝雄）の支援を受けて実施されました。

本研究成果は、Nature 誌にてアメリカ東部時間 2026 年 4 月 15 日（日本時間 4 月 16 日）にオンライン掲載されました。

研究の背景

熱電発電技術は、ゼーベック効果⁽¹⁾に基づき、固体素子によって熱エネルギーを直接電気エネルギーに変換する技術であり、廃熱回収や再生可能エネルギー利用の観点から注目されています。現在、産業機器や電子機器などから排出される未利用廃熱や周囲環境中の熱エネルギーの多くは十分に活用されておらず、経済的価値および環境保全の観点からその利用には、高い期待があります。

近年、多くの高性能熱電材料が開発されてきましたが、高効率な熱電発電デバイスの実現には、材料特性の向上に加えて、デバイス寸法や構造の最適設計が不可欠です。従来は、有限要素法⁽²⁾を用いた数値解析により設計最適化が行われてきましたが、材料の種類や構造条件が増えるにつれて計算負荷が急増し、設計の高速化・大規模化が困難でした。

さらに、熱電材料は温度依存性の高い輸送特性を示すため、異なる材料を組み合わせた複雑なデバイス設計には高度な計算が必要です。その結果、従来手法では十分な対応が難しく、熱電発電デバイス設計を効率化し、さらなる高性能デバイスの開発につながる新たな手法の確立が求められていました。

研究内容と成果

本研究では、熱電発電デバイスの性能を高速かつ高精度に予測可能な組立可変型ニューラルネットワーク⁽³⁾「TEGNet」を新たに開発しました。TEGNet は、ゼーベック効果に代表される熱電発電の本質的な物性に基づき、素子の寸法や境界条件を入力として、電圧や熱流量を出力し、そこから発電出力や変換効率などの主要性能指標を算出します。本手法は、温度分布や電位分布などの空間場を逐次計算する従来の有限要素法に基づく解析手法とは異なり、デバイスの最終的な性能指標を直接学習・予測する点に特長があります（図 2A 参照）。このように、仮想空間上でデバイス挙動を迅速に再現・予測する設計支援基盤として、デジタルツイン⁽⁴⁾としての活用も期待されます。

これにより、解析モデルを毎回構築することや、複雑な熱電連成偏微分方程式を逐次解く必要がなくなり、計算時間を大幅に短縮することに成功しました。十分な学習後、TEGNet は従来の商用有限要素解析ソフトウェアと比較して、計算時間を従来比約 1 万分の 1 に短縮しながら、99%以上の予測精度を達成しました（図 2B 参照）。さらに、TEGNet はモジュール化された設計思想を採用しており、異なる材料系に対する高い構造的汎用（はんよう）性と、モデルを柔軟に組み合わせる高い拡張性を有している点も大きな特長です。これにより、分段型構造や n-p 対構造⁽⁵⁾、さらには複雑なデバイス構造まで幅広く対応可能となりました。

本手法を用いて最適化設計を行い、本研究グループで以前開発された Mg-Sb 系合金を基盤とする新型 MgAgSb/Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te₃ 分段型および Mg₃Bi_{1.4}Sb_{0.6}-MgAgSb n-p 対型熱電発電デバイスを試作・評価しました。その結

果、それぞれ 9.3% (分段型) および 8.7% (n-p 対型) という高い最大熱電変換効率⁽⁶⁾を実証しました (図 3A-B 参照)。これらの値は、同温度域における熱電発電デバイスとして国際的にも高い水準に位置します。本研究で確立した人工知能 (AI)⁽⁷⁾による設計手法は、熱電材料開発とデバイス設計を統合的に最適化する新しいアプローチを提示するものであり、今後の高性能熱電発電デバイスの迅速な開発に大きく貢献することが期待されます。

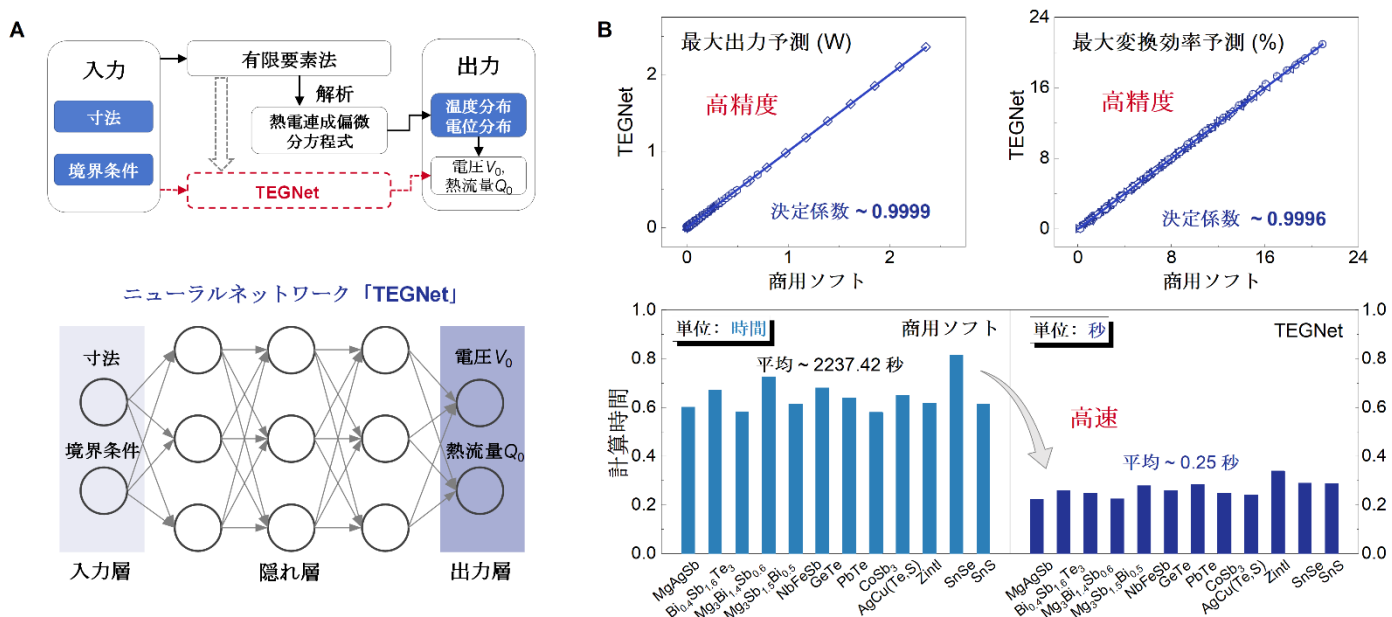


図 2: TEGNet の構成および予測性能 (A) TEGNet の概念図。素子寸法や境界条件を入力し、電圧および熱流量を出力する。(B) TEGNet と従来の商用有限要素解析ソフトウェアとの計算時間および予測精度の比較。

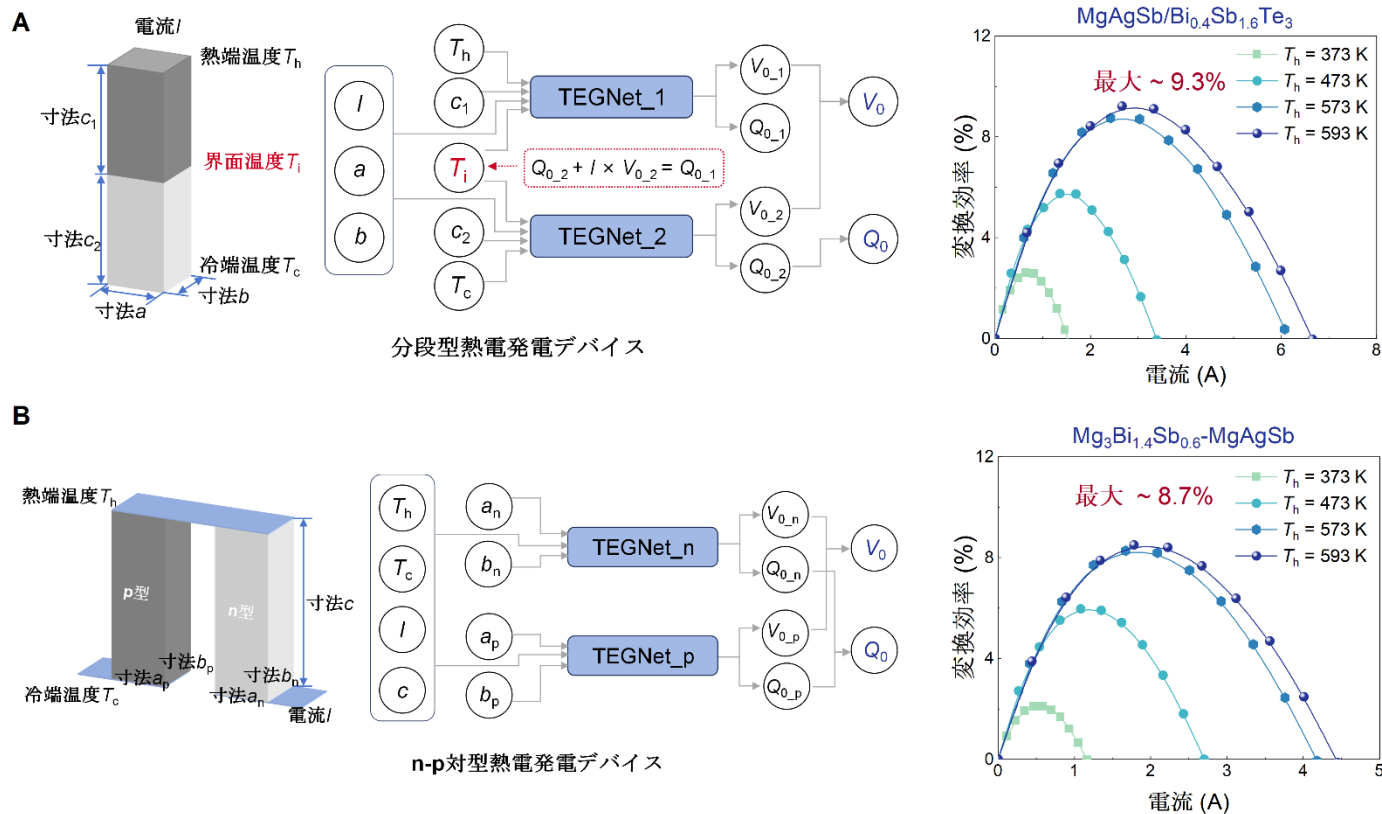


図 3: 最適化した熱電発電デバイスの性能 TEGNet を用いて最適化設計した (A) MgAgSb/Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te₃ 分段型熱電発電デバイスおよび (B) Mg₃Bi_{1.4}Sb_{0.6}-MgAgSb n-p 対型熱電発電デバイスの熱電変換効率。

今後の展開

今回の研究では、AI を活用した新たな熱電発電デバイス設計手法として、高精度かつ高速な組立可変型ニューラルネットワーク「TEGNet」を開発し、多様な材料系およびデバイス構造に適用可能であることを実証しました。また、本手法に基づく最適化設計により、実際の熱電発電デバイスにおいて極めて高い変換効率を達成しました。

今後は、本研究で確立した AI 設計基盤をさらに高度化し、より複雑なマルチステージ型の多段構造デバイスや大規模モジュール設計への適用を進める予定です。さらに、本手法を新規熱電材料の探索や材料開発プロセスと連携させることで、材料設計からデバイス設計までを統合的に最適化する次世代研究基盤の構築を推進します。

これにより、産業廃熱回収システム、IoT センサ用独立電源、分散型エネルギー供給システムなどへの実用化を加速し、脱炭素社会および Society 5.0 の実現に貢献することが期待されます。加えて、本研究で確立した「組立可変型ニューラルネットワーク」の概念は、熱電分野にとどまらず、他のエネルギーデバイスや機能性材料設計分野への応用も可能であり、今後は幅広い分野への展開を進めていきます。

■ 掲載論文

題目	Composable neural emulators accelerate thermoelectric generator design
著者	Airan Li, Xinzhi Wu, Longquan Wang, Gang Wu, Jiankang Li, Zhao Hu, Xinyuan Wang, and Takao Mori (全 NIMS)
雑誌	Nature
DOI	https://doi.org/10.1038/s41586-026-10223-1
掲載日	アメリカ東部時間 2026 年 4 月 15 日 (日本時間 4 月 16 日)

■ 用語解説

- (1) ゼーベック効果：熱電発電の基本原理です。物質の両端に温度差を与えたときに、温度差に比例した電圧が発生する現象。
- (2) 有限要素法：複雑な形状や物理現象を多数の小さな要素に分割し、それぞれを数値的に解析する計算手法です。熱電発電デバイス設計においては、温度場や電場の解析に広く用いられています。
- (3) 組立可変型ニューラルネットワーク：ニューラルネットワークは人間の脳内の神経回路を模した情報処理モデルであり、大量のデータから特徴や関係性を学習することができます。組立可変型とは、異なるニューラルネットワークを柔軟に統合し、統一モデルとして構成できる能力を指します。従来の固定アーキテクチャとは異なり、今回の組立可変型ニューラルネットワークは多様なモデルを必要に応じて組み立て・再構成することを可能にします。
- (4) デジタルツイン：現実の物理システムや装置を仮想空間上に再現し、その挙動や状態を高精度に予測する技術です。
- (5) 分段型構造や n-p 対構造：熱電発電デバイスの構造を示し、いずれも、できるだけ高効率に発電できるように、分段型は、熱電材料の熱電物性の温度依存性の違いを考慮して異種材料を接合した物で、n-p 対構造は、熱電物性のマッチングの良い n 型材料と p 型材料を対として組み合わせた構造の物、をそれぞれ指します。
- (6) 熱電変換効率：熱電発電デバイスの性能評価において最も重要な指標の一つです。投入された熱エネルギーのうち、電気エネルギーとして回収できる割合を示す指標です。
- (7) 人工知能 (AI)：人間の知的活動を模倣し、学習・推論・判断などを行う情報処理技術です。

本件に関するお問い合わせ先

報道・広報について	NIMS 国際・広報部門 広報室 〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1 E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017
	科学技術振興機構 広報課 〒102-8666 東京都千代田区四番町 5 番地 3 E-mail: jstkoho@jst.go.jp TEL: 03-5214-8404, FAX: 03-5214-8432
支援事業について	科学技術振興機構 未来創造研究開発推進部 正木 法雄 〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 K's 五番町 E-mail: kaikaku_mirai@jst.go.jp TEL: 03-6272-4004, FAX: 03-6268-9412

NIMS とは？

NIMS（ニムス）は、物質・材料科学の研究に特化した国立研究開発法人です。

エネルギー、環境、医療、インフラ、モビリティ——私たちの暮らしを支えるあらゆる技術は「物質」と「材料」で成り立っています。

NIMS はそれらの基礎・基盤研究だけでなく、成果の普及とその活用の促進まで総合的に行っています。

社会の発展は常に物質・材料科学の進歩とともにあり、いま、地球規模の環境・資源問題の解決に向けたカギとして、その重要性はいっそう高まっています。

NIMS は「材料で、世界を変える」というビジョンのもと、持続可能で豊かな社会の実現を目指して、世界最先端の研究を続けています。

【NIMS を掴む参考ページ】

NIMS はこんな研究所！ <https://www.nims.go.jp/nims/introduction.html>

NIMS ビジョン <https://www.nims.go.jp/nims/profile.html#vision>