

高性能熱電材料の創成と量子ビーム解析

物質・材料

SATテクノロジー・ショーケース2019

■ はじめに

自動車のエンジンの内燃機関からの排熱や、送電・配電する際に発生するジュール熱は排熱として放出され、ヒートアイランド現象や電子機器の熱暴走の要因になりうる。廃熱を有効活用する熱電変換技術は、環境に優しい持続型成長社会実現には欠かせない。中核技術を担う熱電変換材料の開発に対して非常に多くの研究・開発がなされている。熱電効率を表すZT値は物質の電気・熱特性に密接に関係しており、熱起電力が高く、電気伝導率が高く、熱伝導率が低い物質が高ZT値の材料となる。電気伝導率や熱伝導率の微視的な原因を、量子ビームを用いて明らかにし、物質開発と密接に連携させることで研究開発のスピードアップを目指す。

■ 活動内容

1. ホールドープSnSeのフォノンの観測

SnSe(スズセレン合金)は923KでのZT値が2.6と世界最高値となることが報告されている[1]。Sn-Seの弱い結合によるアコーディオン構造が熱伝導を悪くしており、実際にフォノンが著しく非調和的であるとされている[2]。一方でNaを僅かにドープすることで300-800Kの広い範囲においてZT値が大幅に改善する[3]。ホールドープによりすることでフェルミ準位が下がりキャリアポケットが増え、その結果ZT値が増加すると予想されるが、広い範囲においてZT値が大幅に改善している点は興味深い。

3%のNaをドープした試料の中性子非弾性散乱実験により、フォノンの昇温によるソフトニングの様子を観測した。また、ノドープSnSeと比較してフォノンの非調和性の変化を検証した[4]。

2. クラストレート化合物BaAlGaGe合金のラットリング観測

クラストレート化合物はカゴ状構造中を原子がラットリングすることで熱伝導を妨げるとされている。ラットリングの描像をみるために、 $\text{Ba}_8\text{Al}_{16}\text{Ge}_{30}$ (バリウムアルミニウムゲルマニウム合金)と、一部AlをGaに置換した物質を対象にした。

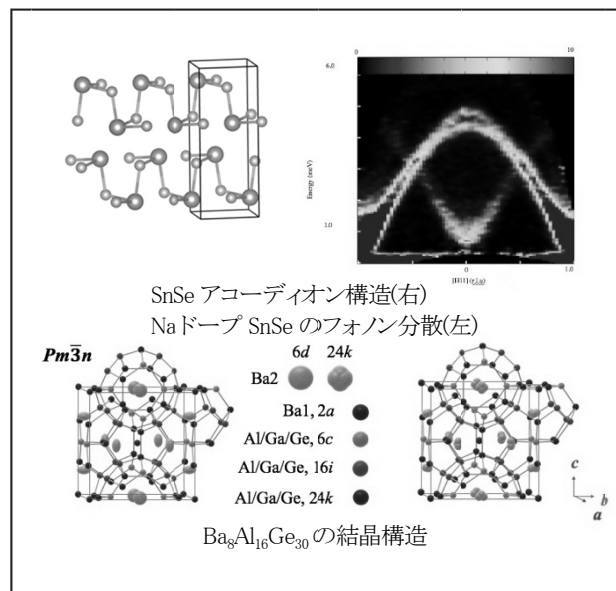
物質合成から電気伝導、ゼーベック係数、熱伝導のマクロ測定、中性子回折測定および結晶構造解析まで、一貫した研究を行った。GaドープによりZT値が向上することや、結晶格子の変化およびMEM解析によりカゴ状構造の中にあるBa原子の核密度分布の様子を観測した[5]。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

- [1] L.D. Zhao et al., Nature 508, 374-377 (2014).
 [2] C.W. Li et al., Nature Physics 11, 1063-1069 (2015). [3] K.L. Peng et al., Energy Environ.Sci. 9, 454-460 (2016).
 [4] P. Wu et al., PRB 98, 094305 (2018).
 [5] Widya Rika Puspita, 総合研究大学院大学博士学位論文

■ 関連情報等(特許関係、施設)

J-PARC MLF BL14 (AMATERAS) (中性子非弾性散乱)
 J-PARC MLF BL08 (S-HRPD) (中性子回折)
 物質・材料研究機構 (物質合成、マクロ測定)



代表発表者 神山 崇(かみやま たかし)
 所 属 高エネルギー加速器研究機構
 物質構造科学研究所
 問合せ先 〒305-0801 高エネルギー加速器研究機構
 TEL:029-864-5612(つくば)、029-284-4080(東海)

■キーワード: (1) 熱電材料
 (2) 中性子散乱
 (3) 中性子回折

■共同研究者:
 萩原 雅人 (高エネルギー加速器研究機構)
 Peng Wu (University of Science and Technology of China)
 Widya Rika Puspita (総合研究大学院大学)
 竹屋 浩幸 (物質・材料研究機構)