

実験・計算科学・機械学習を用いた 革新的温度差発電材料の研究

SATテクノロジー・ショーケース2020

■ はじめに

近年、ゼーベック効果を用いた熱電発電(温度差発電)技術の応用・適用先として、室温から200°C以下の低温熱源を利用するIoT機器駆動用の自立電源が有望視されている。現状、各種センサー用電源としてはボタン電池が簡便かつ主流となっているが、ボタン電池の交換コストやリサイクル性を考えると、メンテナンスフリーの代替電源の確保が重要課題である。その中で、太陽電池は既に自立電源としての普及が進んでおり、導入事例も多い。

このような背景の下、室温近傍の微小温度差環境で各種センサーの駆動を可能とする自立電源システムの構築が可能になれば、冷却分野でのペルチェモジュールに加えて、発電分野における市場開拓に大きく貢献することに繋がる。我々は、社会実装に資する低コストかつ無害の新規温度差発電材料の開発および量産可能なモジュール化技術を構築し、僅かな温度差環境でもセンサー駆動に必要な電力を確保できる電源技術の確立を目指している。

■ 活動内容

1. 計算科学に基づく材料選定

これまでの温度差発電材料は、ビスマス・テルル系に代表されるように、希少元素・毒性元素を含むものが大部分を占めており、また、使用温度域に制限があることで、広く普及するには至っていない。

本研究では、大規模な普及に資する低コストかつ無害な温度差発電モジュールの開発を目指し、使用する元素に制約を設けた。元素の資源量を表す簡便な指標であるクラーク数を考慮し、酸素を除く上位3位の元素である鉄(第3位)、アルミニウム(第2位)、シリコン(第1位)元素のみからなる三元系(Fe-Al-Si)における材料探索を行った。その結果、 τ_1 -Fe₃Al₂Si₃相が室温近傍で動作する温度差発電材料として有望であることを世界に先駆けて報告した[1]。また、新規温度差発電材料の頭文字をとって、FAST材料(Fe-Al-Si Thermoelectric Material)と名付けた。

理論計算から予想されるように、室温近傍で比較的高い出力が得られ、IoT機器を駆動させる自立電源として応用可能であることを明らかにした[2]。本材料は耐酸化性が高く、優れた機械特性、加工性を有しており、既存材料を圧倒する特徴を兼備している[3]。

2. 機械学習による発電特性の向上

FAST材料の発電特性を向上させるためには、最適なキャリア濃度を有する組成を探索する必要があり、従来法では多大な労力を要していた。より効率的に最適組成を探索するために、一つずつ試料を合成して物性評価を行う従来型の実験手法と機械学習(ベイズ最適化)を組み合わせた研究開発に取り組んだ。その結果、実験開始前には容易に予想できなかった結果が得られ、新たな材料設計指針の構築へと繋がった。機械学習が非化学量論組成における最適組成の探索に大きな力を発揮したことは、今後の熱電材料研究に一石を投じるものである[4]。

3. 量産化可能なモジュール化技術の構築

P型とN型に調製したFAST材料を用いて、量産可能な小型発電モジュール化技術を構築し、温度・湿度センサーの情報をBLE通信により発信する実証試験に成功した(図1)。

■ 関連情報等(論文、特許)

- [1] Y. Takagiwa et al., *J. Therm. Anal. Calorim.* **131**, 281 (2018).
 [2] Y. Takagiwa et al., *J. Phys. Chem. Solids* **118**, 95 (2018).
 [3] Y. Takagiwa and Y. Shinohara, *Scripta Mater.* **172**, 98 (2019). [Viewpoint Article]
 [4] Z. Hou and Y. Takagiwa et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11**, 11545 (2019).
 □国際特許出願: 高際良樹, 「熱電材料、その製造方法およびそれを用いた熱電発電モジュール」, PCT/JP2018/032031.

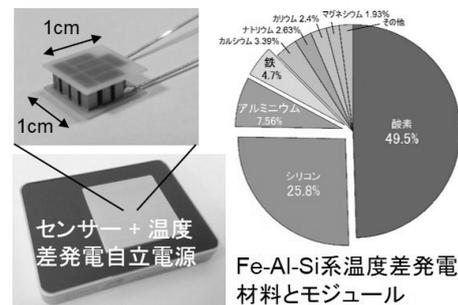


図1 開発に成功したモジュールと試作機

代表発表者 **高際 良樹(たかぎわ よしき)**
 所属 **国立研究開発法人物質・材料研究機構
 エネルギー・環境材料研究拠点
 熱電材料グループ**
 問合せ先 〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1
 TEL:029-859-2811 FAX:029-859-2601
 TAKAGIWA.Yoshiki@nims.go.jp

■キーワード: (1) 温度差発電材料
 (2) センサー用自立電源
 (3) 実験・計算科学・機械学習

■共同研究先: 東京大学、茨城大学、アイシン精機株式会社