

# 半導体ハイパーマテリアルの熱電材料応用

物質・材料

SATテクノロジー・ショーケース2024

## ■ はじめに

熱電材料は体温や電子機器から生じる微小な熱、工場・自動車から生じる廃熱を利用して発電するため、エネルギー・環境問題の解決に貢献する材料として注目を集めている。しかし、既存材料の多くは、毒性・希少元素を含む、熱・化学的安定性が悪い、機械強度が十分でない等の多くの問題を抱えており、幅広い実用化には至っていない。一般的に、熱伝導率が低いナローギャップ縮退半導体が熱電材料として高い性能を示すとされている。我々はハイパーマテリアルと呼ばれる複雑構造合金に半導体的特性を持たせることで、新たな熱電材料を開発することを目指した。これにより、熱電材料として適していないとされていた金属の性質を持つ材料を半導体化することによって熱電性能の高性能化に成功した。

## ■ 活動内容

ハイパーマテリアルは、3次元以上の超空間(ハイパースペース)を用いてその構造を記述できる物質群であり、その代表は準結晶である。準結晶は通常の結晶では許されない対称性(正20面体対称性)を持つ固体であり、1984年に発見された新しい物質群であり、これまでに100種類以上の準結晶が見つかった。しかし、これらの準結晶はいずれも金属的な性質であり、半導体の準結晶は見つかっていない。つまり、半導体準結晶が存在するかどうかは固体物理学における未解決問題の一つである。また、半導体準結晶はその特殊な対称性に起因して高い熱電性能を示すことが期待されている。しかし、準結晶は周期性を持たないため、半導体の探索が困難である。

そこで、我々は近似結晶と呼ばれる準結晶と類似の構造と物性を示す結晶で半導体を創製し、熱電材料として応用する研究を進めてきた。しかし、近似結晶においても半導体は当時見つかっておらず、高い無次元性能指数 $zT = S^2\sigma T/\kappa$  ( $S$ : Seebeck係数,  $\sigma$ : 電気伝導率,  $\kappa$ : 熱伝導率,  $T$ : 平均動作温度)を示さないことが問題であった。半導体の近似結晶を創製するために、まずバンドギャップの閉じた半金属的なバンド構造を持つAl-Ir系近似結晶に注目し、バンド端の電子軌道を可視化することでギャップを広げる指針を得た。その結果、Alの一部をSiで置換し、IrをRuで置換することでバンドギャップを広げ、Al-Si-Ru系で世界初となる半導体の近似結晶を創製した。この半導体近似結晶は室温で $200 \mu\text{V K}^{-1}$ を超える大きな $S$ を示した。また、キャリアドープによってp型とn型の作製も可能となり、それ

ぞれの極性で関連物質最大の $zT$ を得ることに成功した(図1)。

## ■ 関連情報等(特許関係、施設)

### 論文:

- [1] Y. Iwasaki *et al.*, Phys. Rev. Mater. **3** 061601 (2019).  
 [2] Y. Iwasaki *et al.*, Phys. Rev. Mater. **5** 12401 (2021).

### 謝辞:

ハイパーマテリアル:補空間が創る新物質科: 文部科学省科学研究費助成事業 新学術領域研究(2019年度 - 2023年度)(課題番号19H05817)

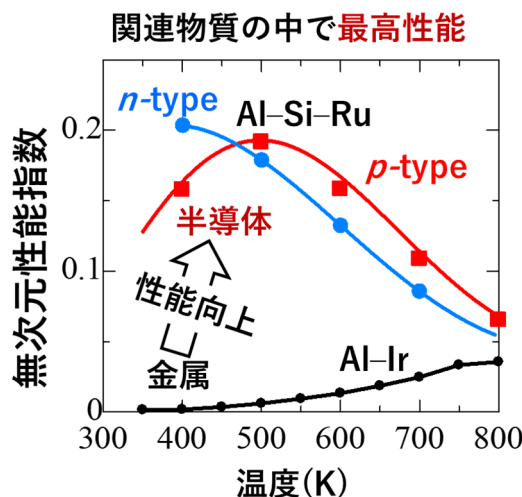


図1 近似結晶の半導体化による無次元性能指数の向上



←研究紹介動画  
はこちらから

代表発表者 **岩崎 祐昂(いわさき ゆたか)**  
 所属 **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**  
 問合せ先 **〒X305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1  
 TEL: 029-859-2823  
 EMAIL: IWASAKIYutaka@nims.go.jp**

■キーワード: (1)熱電材料  
 (2)発電技術  
 (3)合金  
 ■共同研究者: 木村薫 物質・材料研究機構