

## ZT > 2 を実現する条件と新しい熱電材料の開発

### Conditions for a large value of ZT and development of new thermoelectric materials

豊田工大, JST さきがけ, 名大 GREMO, ○竹内恒博

1. Toyota Technological Institute, 2. JST-PRESTO, 3. Nagoya Univ., ○Tsunehiro Takeuchi<sup>123a</sup>

E-mail: t\_takeuchi@toyota-ti.ac.jp

熱電発電におけるエネルギー変換効率は、発電素子内に使われている熱電材料の物性値 ( $S$ : ゼーベック係数,  $\sigma$ : 電気伝導度,  $\kappa$ : 熱伝導度) で決定される無次元性能指数の増加関数であることが知られている。大量に存在する廃熱や未利用熱を、熱電発電素子を用いて電力に変換し、有効に利用するためには、 $ZT$  の大きな熱電材料の開発が強く求められる。1990 年代以降に行われてきた研究により、いくつかの材料において、 $ZT$  の値は 2 を超えるに至っているが、実用化の観点からは、 $ZT$  のさらなる増大が必要とされている。

一般的に、熱電材料の物性を評価する際に、電子濃度、移動度、有効質量など、半導体電子論に多用される因子が利用されているが、我々のグループでは、これらの利用が、物性の支配因子の理解を妨げ、高性能熱電材料の開発の障害となっていると考えている。また、電子濃度、移動度、有効質量を利用する代わりに、正確な電子構造の情報を用いることが重要であると主張してきた。この考え方を基に、温度  $T_A$  まわりで利用される熱電材料に必要な電子構造の 3 つの条件として、①  $10 k_B T_A$  を超える大きなエネルギーギャップを有する縮退半導体であること、② バンド端近傍の数  $k_B T_A$  程度のエネルギー領域に複数のバンドが存在すること、さらに、③ バンド端近傍から急激に状態密度が増大することを提案してきた。また、この考え方にに基づき材料を選定し、電子構造の特徴を維持したまま格子熱伝導度低減させることで、Al-Mn-Si C54 相 ( $ZT_{\max} \sim 0.4$ ),  $\text{MnSi}_y$  ( $ZT_{\max} \sim 1.04$ ),  $\text{In}_2\text{S}_3$  ( $ZT_{\max} \sim 0.6$ ) などの熱電材料の開発を行ってきた。

上記の設計指針は、電気伝導度を維持したまま、ゼーベック係数を大きくする観点から構築しているが、線形応答理論を基に熱電物性のシミュレーションを繰り返すことで、上記の観点とは異なった  $ZT$  向上機構を見いだした。例えば、アモルファス Si を用いた場合、 $ZT$  は室温において 0.1 を超えることはないが、新しい材料設計指針をもとに電子構造に変調を与えると、 $ZT$  が著しく増大する。アモルファス Si と電子構造に変調を加えたアモルファス Si の  $ZT$  を化学ポテンシャルの関数として図 1 に示す。

講演では、新しい材料設計指針と、その指針に基づく材料開発の現状を詳しく紹介する。

謝辞：本成果は、国立研究開発法人新エネルギー・(NEDO) の委託業務の結果として得られた。

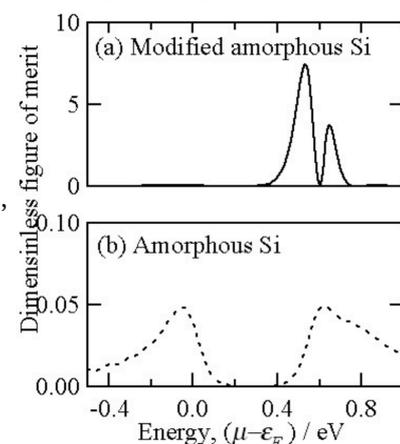


Figure 1 Calculated  $ZT$  of amorphous Si plotted as a function of chemical potential. Small modification on electronic structure drastically changed the maximum value of  $ZT$ .