ペロブスカイト-ビスマステルライドの界面熱抵抗計算

Numerical Analysis on Interfacial Thermal Resistance Between Perovskite and Bismuth Telluride

九州工大工 [1]，九州工大生命体 [2]　°宮崎 康次 [1]，(M1) 宮本 翔太郎 [1]，河野 翔也 [1]，飯久保　智 [2]

Kyushu Inst. Tech. [1], Kyushu Inst. Tech.(LSSE) [2], °Koji Miyazaki[1], Shotaro Miyamoto[1], Shoya Kawano[1], Satoshi Iikubo[2]

E-mail: miyazaki.koji055@mail.kyutech.jp

熱電半導体の高効率化へ向けて、塗布できるペロブスカイト $CsSnI_3$ とビスマステルライド Bi_2Te_3 の微粒子を混ぜる手法を開発している。それぞれ構成材料自体の熱電特性の向上が必須であるが、それらの界面においてフォノン輸送が妨げられ、電子輸送が妨げられなければ、界面を利用した熱電特性向上の手法として活用できる可能性がある。本研究では、上記材料の組み合わせについて、それぞれのフォノン分散特性を第一原理計算で得て、DMM モデルを活用して熱抵抗を計算した（図 1)。その結果、無機材料同士が通常有する熱抵抗と比較して、10 倍程度大きな値が計算され、非常に大きい熱抵抗を有する可能性が示された。ペロブスカイトのフォノンの周波数が極めて低いことに起因しており、今後、さらなる検討と考えている。

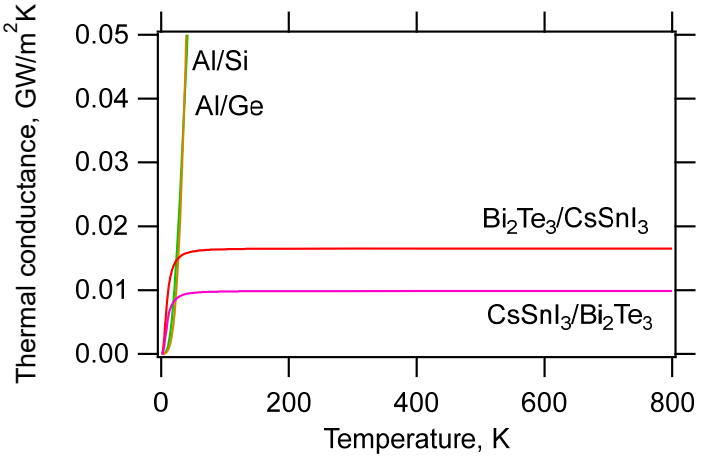

Fig.1 Calculated thermal conductance between $CsSnI_3$ and Bi_2Te_3.