

物性研究所短期研究会

「熱電材料の高性能化はどこまで行くか」開催報告

附属物質設計評価施設 岡本 佳比古

形式：東京大学 物性研究所 大講義室における対面方式

日時：2023年12月5日10時～12月6日16時45分

提案者：森 孝雄（物質・材料研究機構）、岩佐 義宏（東京大学）、小形 正男（東京大学）、常行 真司（東京大学）、寺崎 一郎（名古屋大学）、福山 秀敏（東京理科大学）、山本 貴弘（東京理科大学）、岡本 佳比古（東京大学）、中辻 知（東京大学）、森 初果（東京大学）

熱電変換は固体中の伝導電子による電気エネルギーと熱エネルギーの直接変換です。現在、ペルチェ冷却と呼ばれる固体素子を用いた冷却・温度制御技術として広く実用されていますが、一方でゼーベック効果により熱エネルギーから電気エネルギーを取り出すこともできるため、廃熱発電の省エネ効果や無数のセンサーの自立電源としても期待されています。熱電変換をより広範な用途で実用するためには、素子を構成する熱電変換材料がより高い性能を示す必要があります。この性能は、ゼーベック係数 S 、電気伝導率 σ 、熱伝導率 κ 、動作温度 T を組み合わせた無次元性能指数 $ZT = S^2\sigma T/\kappa$ で表されますが、これらの物理パラメータにはトレードオフの関係があり、高性能化は容易ではありません。しかし近年、さまざまな高性能化の戦略により高い ZT が実現しており、従来は $ZT \sim 1$ が高性能材料の一つのベンチマークとされていましたが、最近では $ZT > 2$ に達する高性能材料の報告が増えています。また、巨大な出力因子 $S^2\sigma$ を示す物質系も発見されてきています。理論的側面に関しても近年進捗があり、従来は現象学的な半古典的なボルツマン理論が用いられてきましたが、ここ数年、熱電現象を量子力学的に取り扱う熱電線形応答理論が開発され、従来の予測を超えた新規な熱電特性の発見への道筋が切り拓かれ始めています。さらに、トポロジカル材料、カーボンナノチューブ、有機材料といった、これまでの材料開発の主戦場とは異なる新規材料系においても高い熱電性能を示すさまざまな新材料系が見出されています。

このように、熱電変換材料の開発は実験的にも理論的にも大きな進展がみられる状況にあります。そこで、熱電変換材料に関する集中的な議論を通じて新たな展望を切り拓くことを目的とした短期研究会を、2023年12月5日と6日に、物性研究所大講義室を会場とする対面方式によって開催しました。研究会がカバーすべき材料系は、従来材料である無機系のナローギャップ半導体から有機物、低次元

系、薄膜など、多岐にわたります。また、新材料開発の物理的なアプローチについても、フォノンの制御やゼーベック係数の増大といった方法だけでなく、トポロジカル物性や磁性との相関などさまざまです。本研究会では、各招待講演者の持ち時間を質疑込みで20分と短めに設定したうえで、研究会の最後に総合討論の時間を設けました。それにより、熱電研究の多彩なアプローチを俯瞰的に見渡しながら、今後、大きな性能向上に繋がりを重要なポイントを集中的に議論し、その結果得られた知見を各参加者が共有することを目指しました。研究会の使用言語は英語を基本とし、各招待講演の講演と質疑応答は英語で行われました。

研究会には110名を超える多くの方の参加登録があり、会場となった大講義室において活発な議論が行われました。特に、民間企業に所属される方にも多く参加いただき、熱電研究の裾野の広さ、社会への繋がりの強さを改めて感じました。研究会では、冒頭に提案代表者の森孝雄先生と廣井所長のご挨拶があった後、森孝雄先生と小形正男先生による、それぞれ実験、理論の立場から熱電研究の現状を俯瞰する招待講演から始まりました。初日の最後には福山秀敏先生による基調講演が行われました。「熱流とは何か」という熱電変換にとって核心的でありながら難しい問いかけに始まり、いかにして“Beyond Mott”を目指すかについて、さまざまなアプローチが議論されました。「基礎と応用の区別はない」という久保亮五先生のお言葉の引用もあり、熱電研究が物性研究者にとって挑戦的かつ魅力的な研究対象であることを再認識できました。2日目も、パナソニック株式会社 菅野勉 主席研究員による Mg_3Bi_2 系の欠陥の化学とフォノンの性質に関する招待講演を皮切りに、午後のポスターセッションも含め、活発な議論が行われました。最後に、山本貴弘先生を座長として総合討論が行われ、多岐にわたる講演が振り返られるとともに、フォノンの問題を中心に討論が行われました。特に、実

験的に観測された特異なフォノンの散乱現象におけるディ
スオーダーやグレインの役割や、ソフト化、相転移の効果
などが議論されました。個人的には、理論サイドではゼー
ベック係数と電気伝導率からなる出力因子の解釈には道筋
が見えているものの、特に *dirty* な系の熱伝導率の解釈が
大きな問題と感じられている一方で、実験サイドでは、熱
伝導率の低減に関しては理屈は抜きにしても有効な処方箋
が揃いつつあるため、出力因子をいかに実験的に向上させ
るかが重要という意見を、興味深く感じました。最後の

まとめで森孝雄先生が話されたように、本研究会は物理
ベースで熱電変換を議論する国内の研究会としては大部分
の主要研究グループに参加いただけた、またとない機会と
なったと思われ、今後、このような研究会を継続して行う
など、熱電研究グループの高いポテンシャルを生かせるよ
うに取り組んでいかねばならないと感じました。このよう
な有意義な短期研究会を無事に開催できたことを、全ての
参加者の皆様と、研究会の運営に携わった全ての方に感謝
申し上げます。

プログラム

Dec. 5th

10:00-10:05 Welcome Address (Takao Mori, Chairperson)

10:05-10:10 Greetings (Zenji Hiroi, ISSP Director)

Session 1 Chair: Yoshihiko Okamoto (The University of Tokyo)

10:10-10:30 Takao Mori (National Institute for Materials Science)

“Development of enhanced thermoelectric materials and viable devices”

10:30-10:50 Masao Ogata (The University of Tokyo)

“Recent Development of Electrothermal Transport Properties in Microscopic Theory”

10:50-11:10 Kazuhiro Yanagi (Tokyo Metropolitan University)

“Thermoelectric properties of single-walled carbon nanotubes”

11:10-11:30 Takehiko Mori (Tokyo Institute of Technology)

“Temperature Dependence of Field-Effect Thermoelectric Power in Rubrene Crystals”

11:30-11:50 Takahiro Yamamoto (Tokyo University of Science)

“Kubo-Luttinger linear response theory of thermoelectric transport in disordered systems”

11:50-12:50 Lunch

Session 2 Chair: Satoru Nakatsuji (The University of Tokyo)

12:50-13:10 Yoshiaki Nakamura (Osaka University)

“Methodology of thermoelectric performance enhancement in low dimensional Group IV element materials”

13:10-13:30 Jun Hayakawa (Hitachi, Ltd)

“High power and environmentally friendly Si-based themoelectric materials”

13:30-13:50 Manaho Matsubara (Tokyo University of Science)

“Theoretical analysis of thermoelectric effect in FeSe thin films based on two-band model”

13:50-14:10 Akitoshi Nakano (Nagoya University)

“Thermoelectric property of uncompensated semimetal Ta₂PdSe₆”

14:10-14:30 Yoshihiko Okamoto (The University of Tokyo)

“Electronic states of a one-dimensional van der Waals crystal Ta₄SiTe₄”



- 14:30-14:50 Yoshihiro Iwasa (The University of Tokyo)
 “Two dimensional materials”
- Session 3 Chair: Hatsumi Mori (The University of Tokyo)
- 15:10-15:30 Satoru Nakatsuji (The University of Tokyo)
 “Large Magnetothermoelectric Effects of Topological Magnets and Their Applications”
- 15:30-15:50 Masaki Mizuguchi (Nagoya University)
 “Thermoelectric power generation by magnetic nano-structures”
- 15:50-16:10 Kenichi Uchida (National Institute for Materials Science)
 “Hybrid Transverse Magneto-Thermoelectric Cooling in Artificially Tilted Multilayers”
- 16:10-16:30 Akio Kimura (Hiroshima University)
 “Elucidating the ‘actual’ spin-resolved band structure of magnetic thin films for enhanced thermoelectric generations”
- 16:30-16:50 Taishi Takenobu (Nagoya University)
 “Unsolved problem in organic polymer materials”
- 16:50-17:10 Junichi Takeya (The University of Tokyo)
 “Thermo-electric properties of doped organic crystalline semiconductors”
- Keynote Talk Chair: Masao Ogata (The University of Tokyo)
- 17:30-18:00 Hidetoshi Fukuyama (Tokyo University of Science)
 “Search for good thermoelectrics based on Kubo-Luttinger theory”

Dec. 6th

- Session 4 Chair: Ichiro Terasaki (Nagoya University)
- 10:00-10:20 Tsutomu Kanno (Panasonic Holdings Corporation)
 “Defect chemistry and phonon damping in high-efficiency n-type Mg_3Sb_2 -based thermoelectric materials”
- 10:20-10:40 Tsunehiro Takeuchi (Toyota Technological Institute)
 “Development of high-performance thermoelectric materials using constructive electronic structure modifications and composite effects”
- 10:40-11:00 Chul-Ho Lee (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)
 “Development of thermoelectric materials with low thermal conductivity”
- 11:00-11:20 Naohito Tsujii (National Institute for Materials Science)
 “Development of Thermoelectric Materials using Magnetic Interaction”
- 11:20-11:40 Kaoru Toko (University of Tsukuba)
 “Thermoelectric properties of low-temperature polycrystalline group IV semiconductor thin films”
- 11:40-12:00 Kazuhiko Kuroki (Osaka University)
 “Theoretical studies on the thermoelectric properties of $CaAl_2Si_2$ -type Zintl phase compounds”
- 12:00-13:00 Lunch



13:00-13:45 Poster Session

Session 5 Chair: Takao Mori (National Institute for Materials Science)

13:45-14:05 Ichiro Terasaki (Nagoya University)

“Scattering time: the last black box”

14:05-14:25 Hideaki Maebashi (The University of Tokyo)

“Lorenz Ratio in Strongly Correlated Electron Systems: Effects of Umklapp Scattering”

14:25-14:45 Jun Fujioka (University of Tsukuba)

“Thermoelectric oxide narrow-gap semiconductor: electron-doped Pd-oxide”

14:45-15:00 Masayuki Ochi (Osaka University)

“Electron-hole dichotomy and enhancement of thermoelectric power factor by electron-hole-asymmetric relaxation time: a model study on a two-valley system with strong intervalley scattering”

15:00-15:15 Yoshiki Sato (The University of Tokyo)

“Orthogonal thermoelectricity in a multi-dimensional goniopolar conductor LaPt_2B ”

Session 6 Chair: Takahiro Yamamoto (Tokyo University of Science)

15:35-16:35 General Discussion

16:35-16:45 Closing

研究会当日の会場の様子

