

ALCA-Next

「エネルギー変換・蓄エネルギー」領域

2024年度 年次報告書

2024年度採択

[研究開発代表者名:小峰 啓史]

[茨城大学大学院理工学研究科(工学野) 准教授]

[研究開発課題名:高速スクリーニングによる高効率トポロジカル熱電材料の創成]

主たる共同研究者:

[千葉 貴裕 (東北大学 助教)]

[長谷川 靖洋 (埼玉大学 准教授)]

実施期間 : 2024年9月2日~2025年3月31日

§1. 研究開発成果の概要

本研究開発では、①ベイズ最適化を援用したコンビナトリアル合成、②データスクリーニングされたトポロジカル熱電材料、③物性スクリーニングを可能にする多点 TDIS 法を用いた高速熱電物性評価の3つの要素技術を高度に連携したシステムを開発し、高い熱電変換効率を有するトポロジカル熱電材料群を早期に創出することを目的とする。

今年度は、要素技術の育成、環境整備、基本的な研究フロー構築を目的として、(1) コンビナトリアル合成、及び、熱電評価の高度連携技術開発、(2) トポロジカル結晶絶縁体における表面バンド開放手法の検討、(3) 薄膜 TDIS 法のモデル構築、に取り組んだ。

コンビナトリアル薄膜合成装置における成膜条件を精査することで、コスパッタ成膜により4インチウェハ上で組成が傾斜した薄膜試料を得た。研究開発の初期整備として、トポロジカル結晶絶縁体、及び、高速熱電物性評価用試料の作製が可能であることを確認した。トポロジカル物質から熱電材料としてのポテンシャルを十分に引き出すため、約 6 千種類の候補物質が掲載されているトポロジカルデータベースをスクリーニングした。データベースから条件に整合する材料を選定したところ、13種類にまで候補材料を絞り込むことに成功し、材料探索効率を向上させることが出来た。候補材料である SnTe に対して、第一原理計算により薄膜表面の電子状態を解析した結果、本研究開発に重要なトポロジカル表面状態の出現を確認し、表面ギャップ開放の手段を考察した。コンビナトリアル合成した試料における熱電物性の分布測定を可能にする多点 TDIS 法の数値解析を行った。具体的な薄膜材料およびバルク材料に適した電極配置を提案し、ペルチェ熱流の下での電圧応答を調べることで、相対熱電性能指数の評価が可能であることを確認した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Kotoko Kodama, and Yasuhiro Hasegawa, “Measuring thermoelectric module properties by time-domain impedance spectroscopy using heat leakage at 300 K”, *Scientific Reports*, 15:9989 (2025).