

高性能熱電材料の創成と量子ビーム解析

High performance thermal electricity ~ creation and analysis using quantum beam ~

目的
Purpose

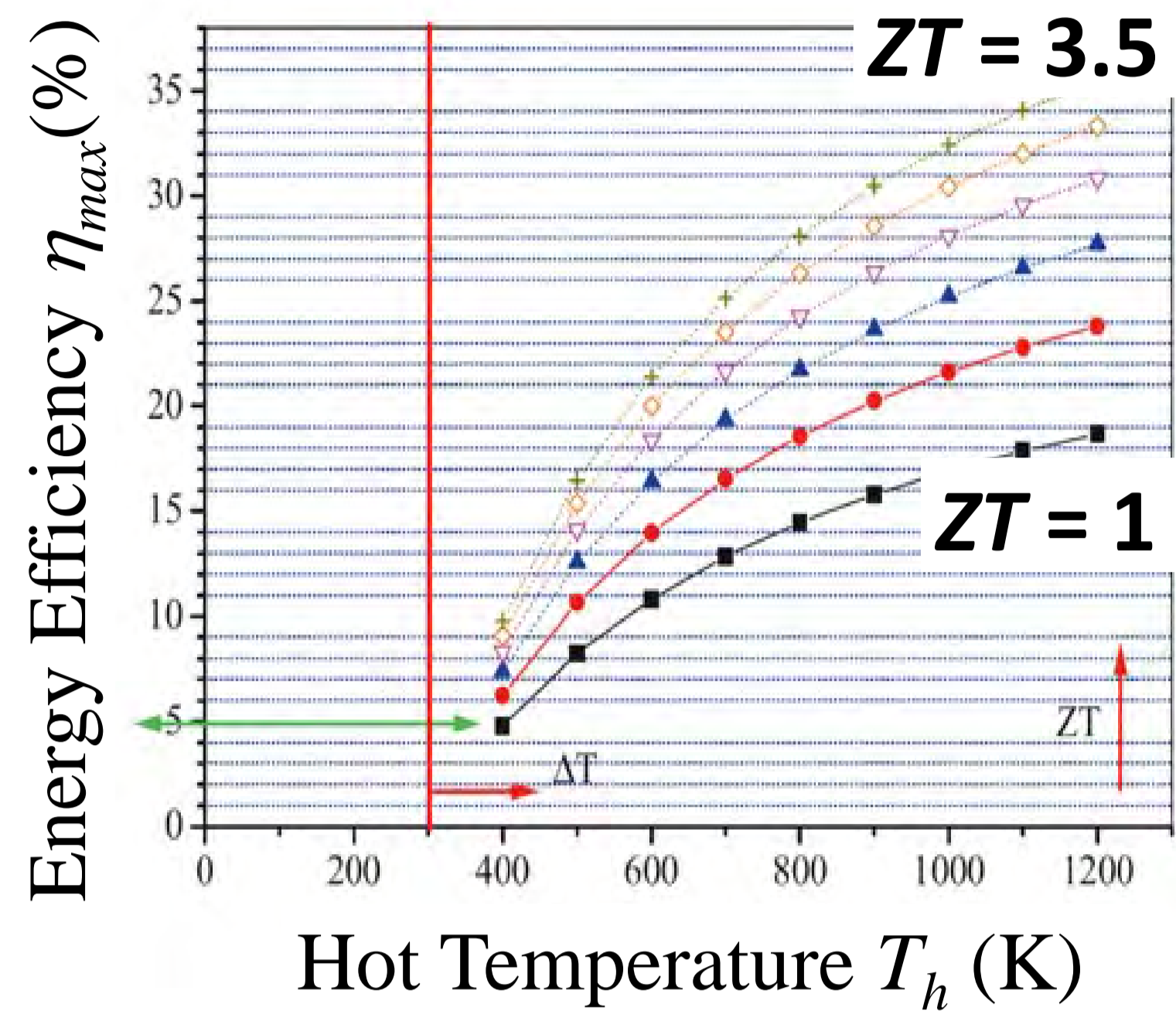
廃熱を高効率に電気に変換する社会的要望を背景に、高性能熱電材料の創成に向けて物質合成と量子ビームを用いた評価を密接に連携させる。

方法
Method

熱電特性発現の土台となる結晶構造、電気伝導率を向上させるための電子状態、熱伝導度を低下させるための格子ダイナミクスの3つの理解を量子ビームを用いて推進する。

展望
Prospect

得られた技術や理解に関心を持つ研究者や企業に提供し、デバイス化、社会実装に向けた検討をすすめる。



$$\eta_{max} = \frac{(T_h - T_c)(\gamma - 1)}{T_c + \gamma T_h}$$

$$\gamma = \sqrt{1 + ZT}$$

無次元性能指数 ZT

ZT値が大、温度差が大

↓
エネルギー効率 大

Godart, et. al. (2009)

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa_{lat} + \kappa_{el}}$$

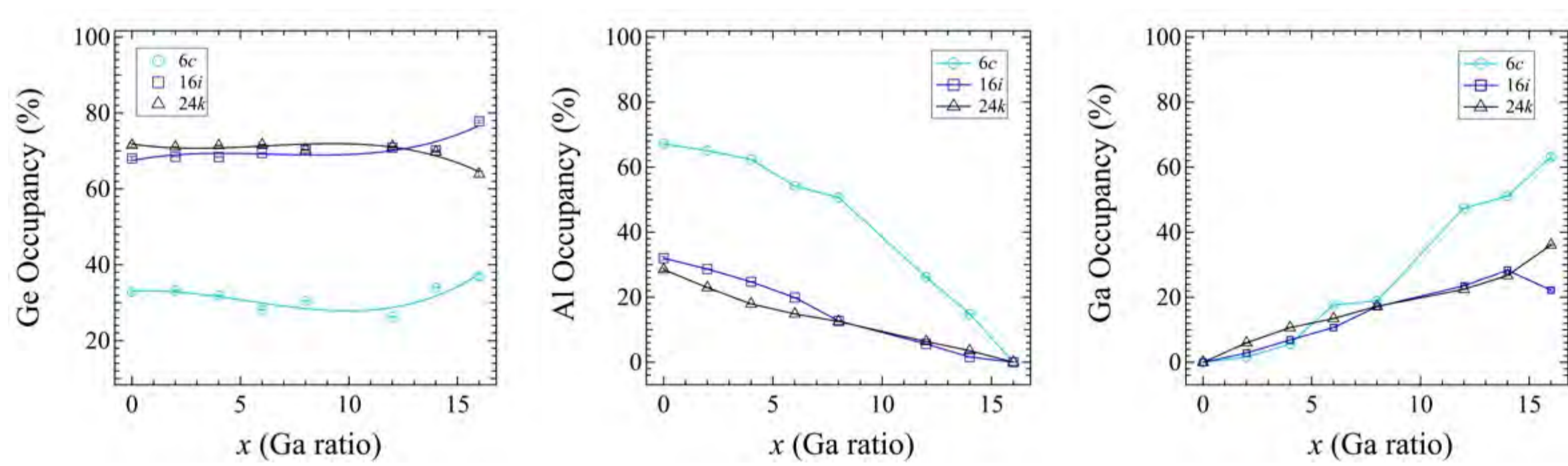
→ ゼーベック係数 S 、電気伝導度 σ
→ 熱伝導度 κ (格子 + 電子)

量子ビームを用いた物性評価

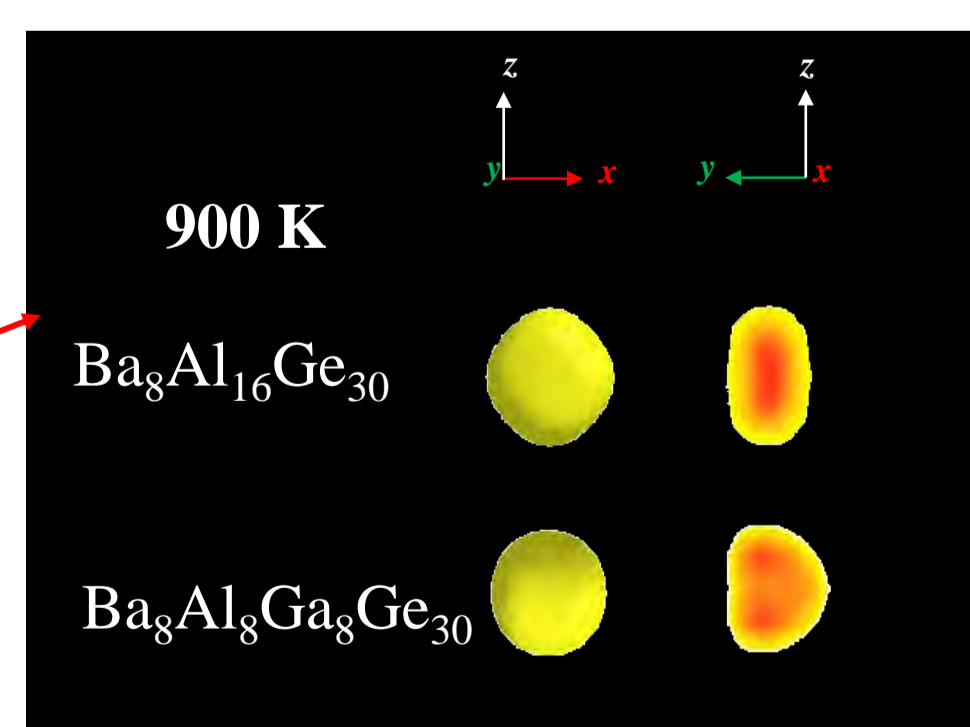
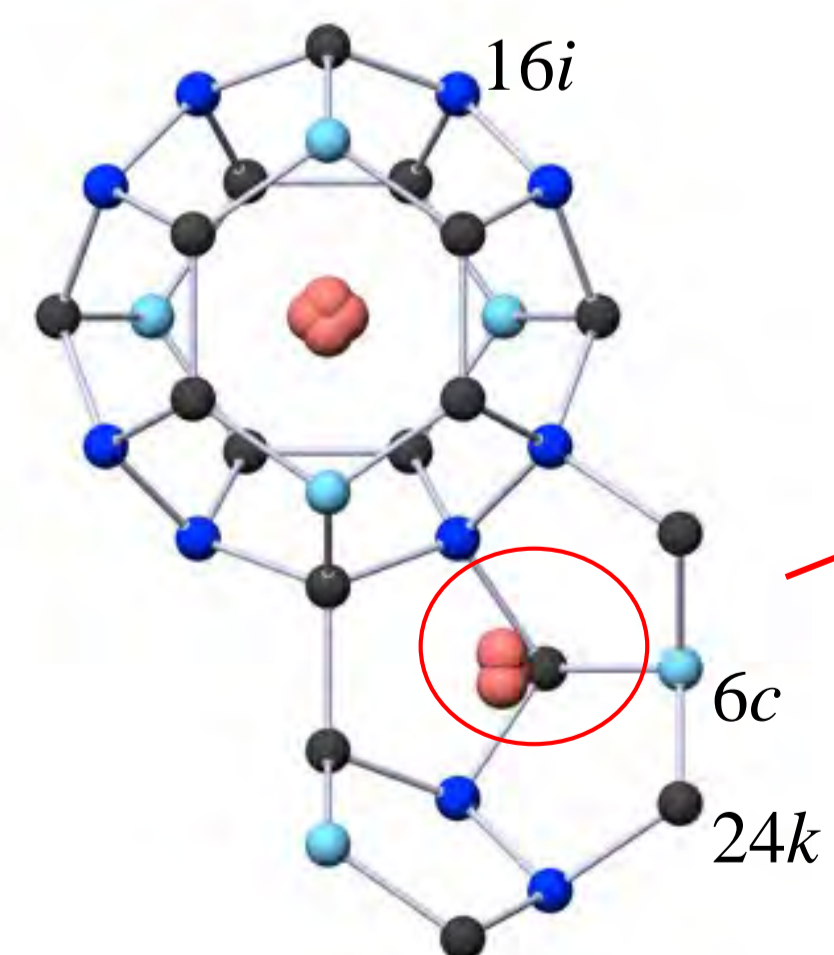
Clathrate $Ba_8(Al,Ga)_{16}Ge_{30}$

Al, Ga, Geからなるかご状構造 (ホスト) の中をBa原子 (ゲスト) がガラガラのように運動し (ラトリング)、熱伝導を阻害する。

かご状構造の原子配列の変化が熱伝導に与える影響を調べる目的で、ホスト原子を置換、配置に偏りが生じることを確認した。



高分解中性子回折実験を幅広い温度領域で行ない、MEM解析によりラトリングの様子を計測、Gaが6cサイトを占めるに連れ、ゲスト原子が高温で非調和的運動することを観測した。

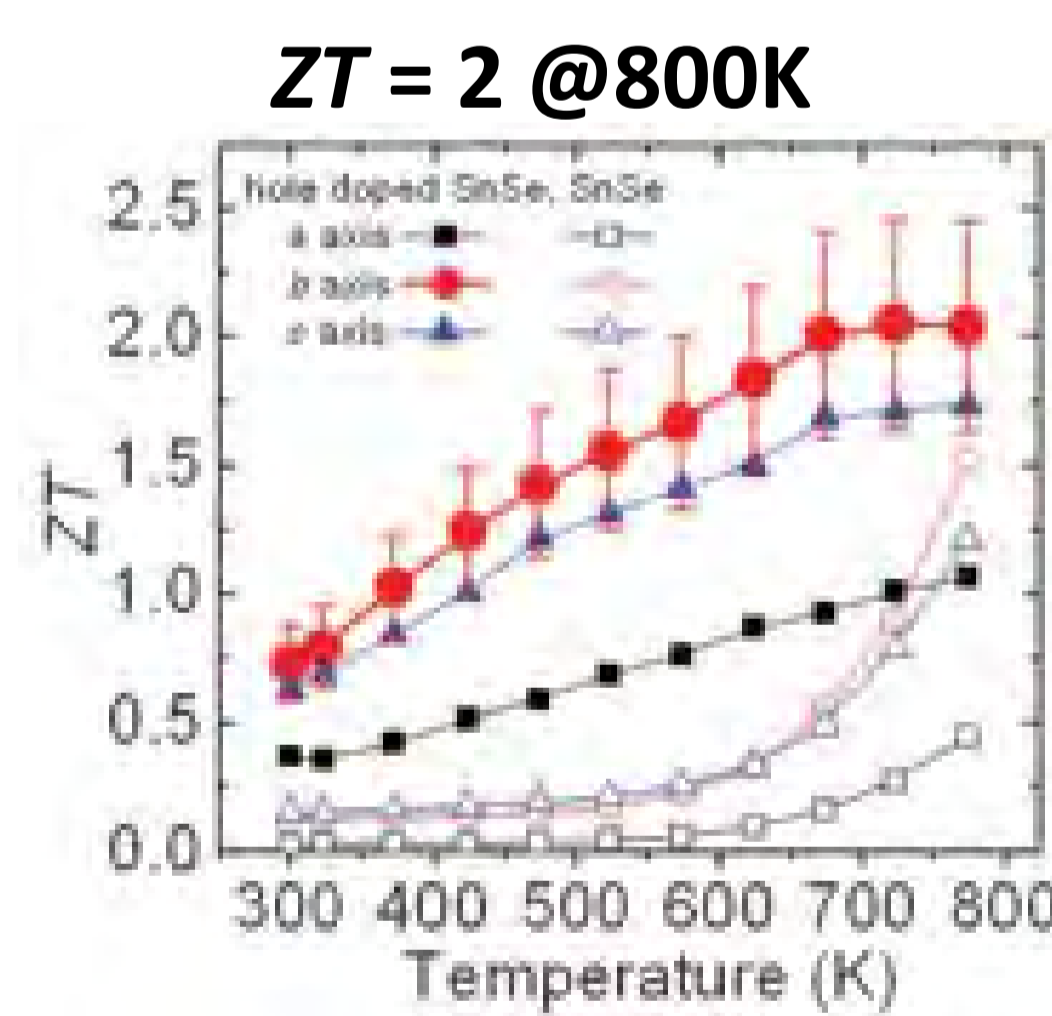


中性子回折データのMEM解析による非調和性の観察

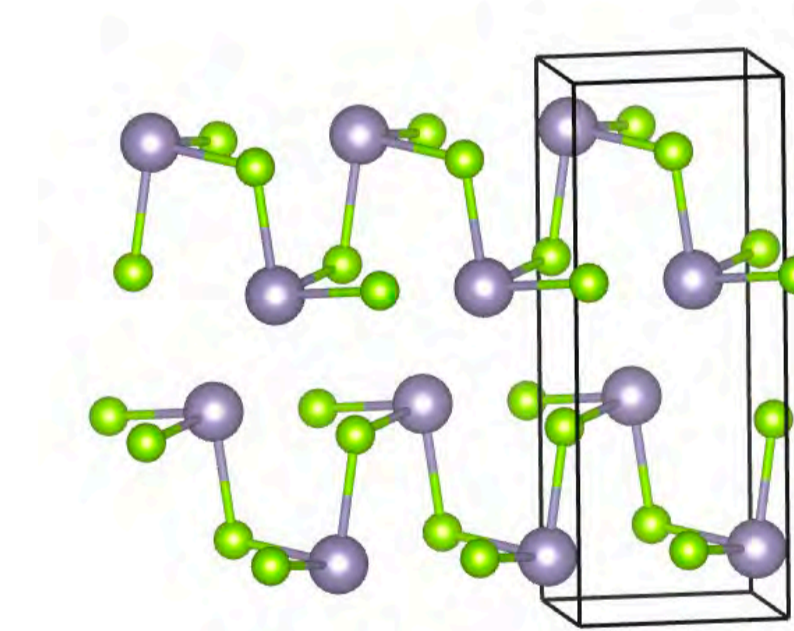
Na-doped SnSe

高いZT値 (800KでZT = 2) で注目されているSnSeはアコーディオン型構造が高いZT値に貢献していると言われている。

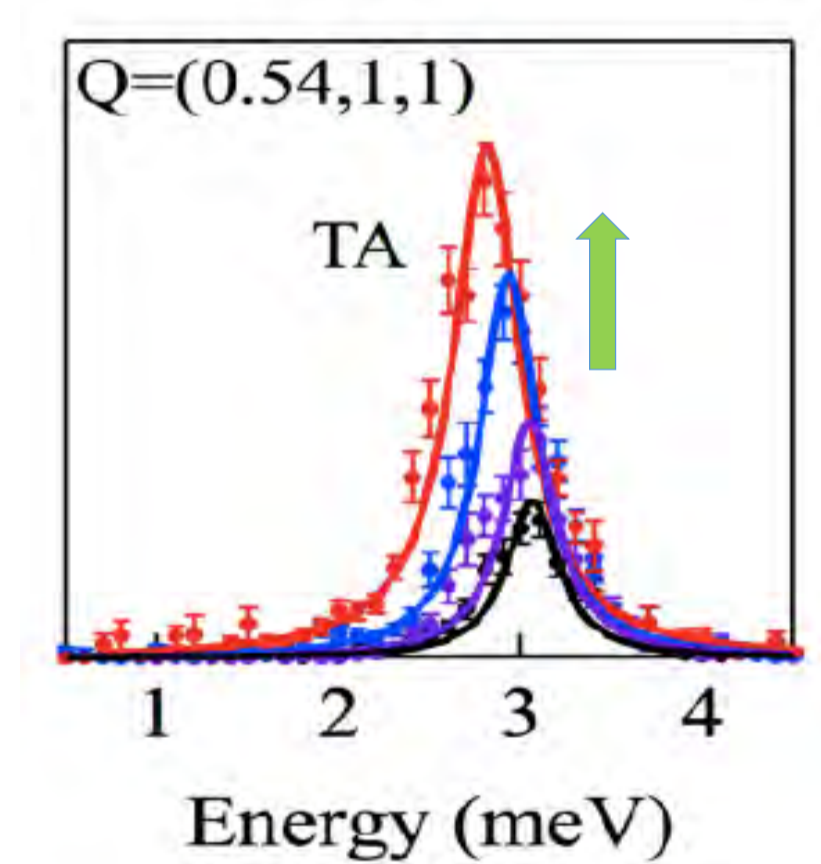
Naドープした試料を対象に、中性子回折、中性子非弾性散乱測定、光電子分光測定を実施した。昇温とともにT01、T02フォノンのソフトニングを観測した。T01、TAフォノンは高温でブロード (フォノンフォノン散乱の増大) になったが、このことは熱伝導の低下と対応している。



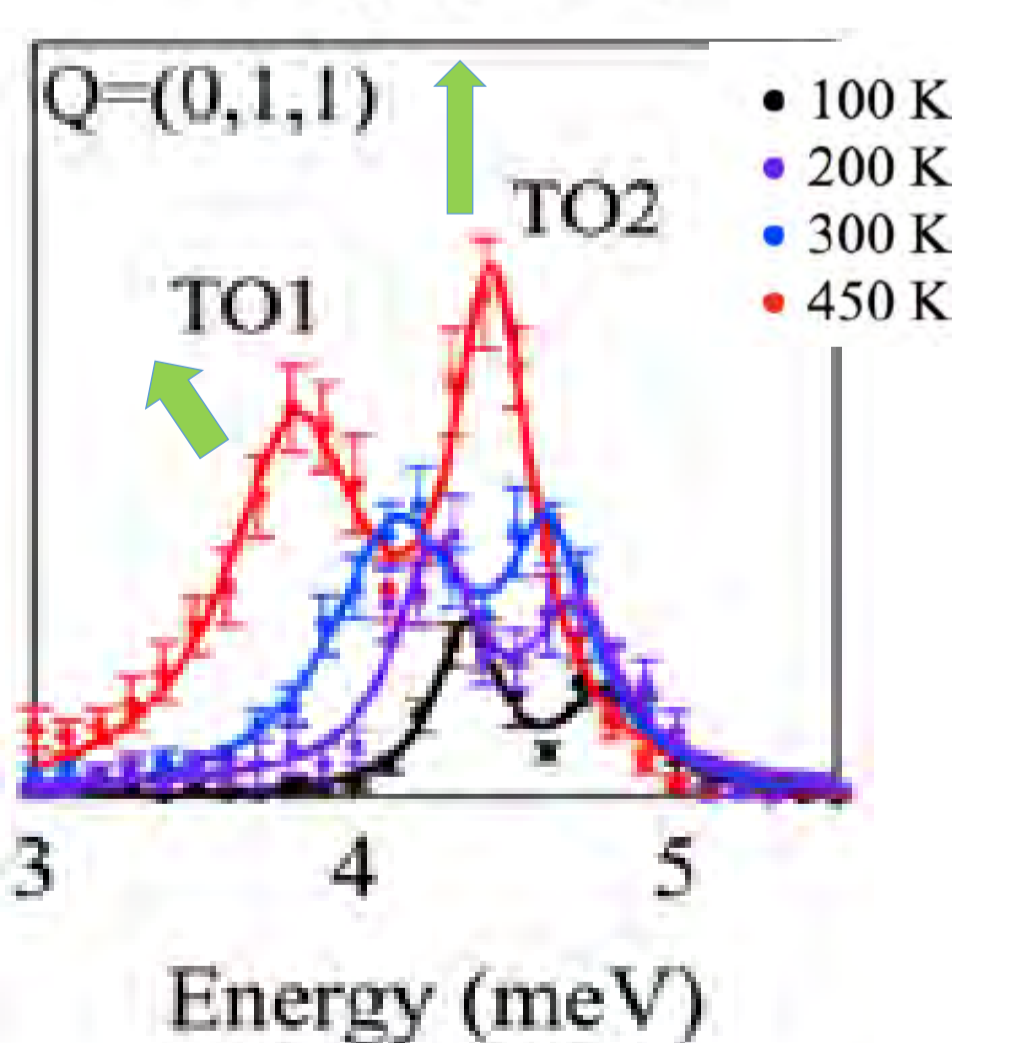
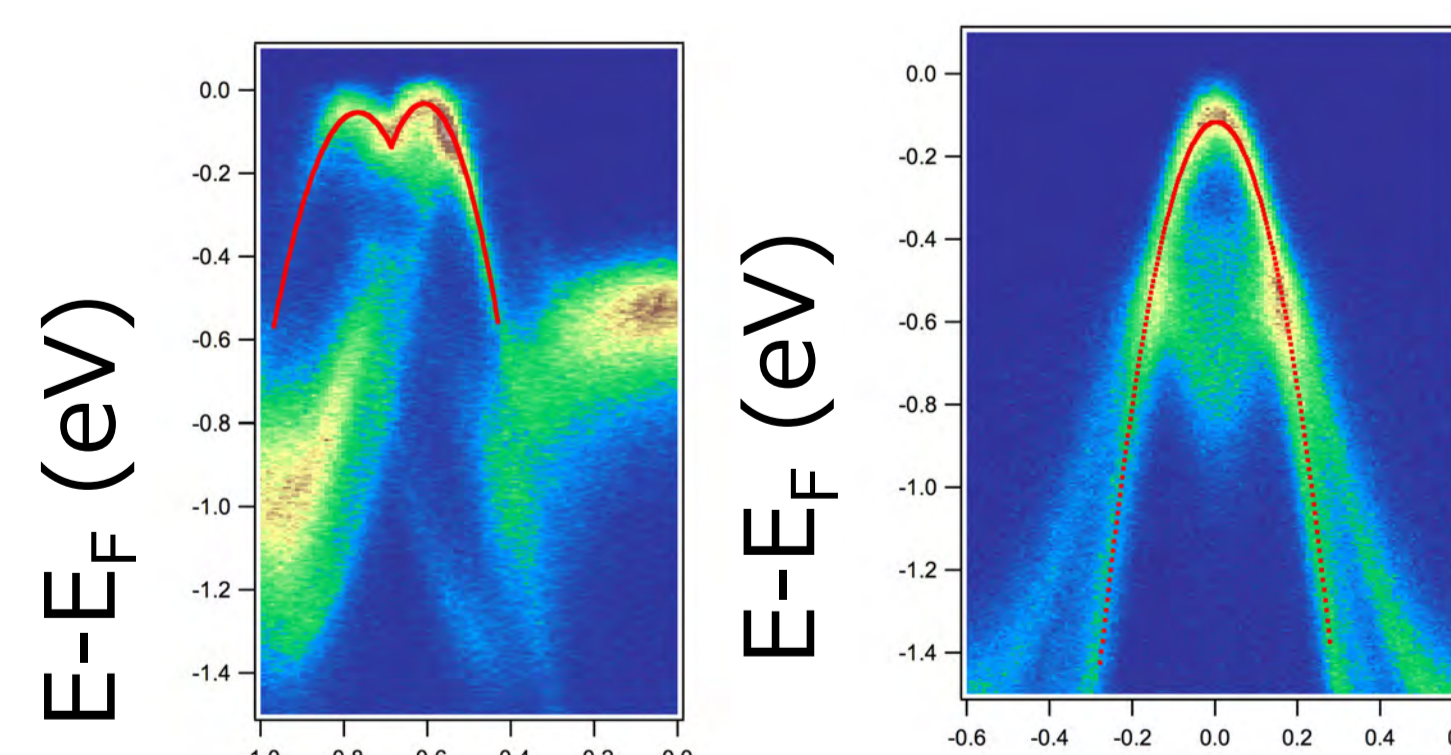
アコーディオン構造



非弾性散乱



ARPES測定のプロットの観測



高温でフォノンはソフト化
フォノン-フォノン散乱が増大

神山 崇、萩原雅人、鳥居周輝、W.Peng、W.Rika、S.Song(KEK)

竹屋浩幸、高野義彦 (NIMS) 西堀英治 (筑波大学)

益田隆嗣 (東大物性研) takashi.kamiyama@kek.jp

