

## 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 ~

萩原雅人、Wu Peng、W. Rika、鳥居周輝、神山崇 (KEK)  
竹屋浩幸、高野義彦 (NIMS)、益田隆嗣(東大物性研)、西堀英治 (筑波大)

通常利用することができず地球温暖化の要因である排熱を有効活用できる熱電変換技術は、省エネ環境社会実現への重要な役割を果たす。この大部分を担う熱電変換材料に対して非常に多くの研究・開発がなされている。熱電効率を表す ZT 値は物質の電気・熱特性に密接に関係しており、熱起電力が高く、電気伝導率が高く、熱伝導率が低い物質が高 ZT 値の材料となる。平成 29 年度 TIA かけはし「高性能熱電材料の創成と量子ビーム解析」では、熱電効率の微視的な原因を、量子ビームを用いて明らかにし、物質開発と密接に連携することで研究開発のスピードアップを目指している。今回は主に熱伝導の一因を担う結晶格子および格子振動の様子を、中性子散乱を用いて明らかにした研究を紹介する。

新しい熱電材料 SnSe は 923K での ZT 値が 2.6 と世界最高値となることが報告されている[1]。結晶構造で特徴的な点のひとつは Sn-Se の弱い結合がアコーディオン状に折りたたまれており、その結果熱が伝導しにくいと考えられる。中性子非弾性散乱実験から、フォノンが著しく非調和的であるとされている[2]。さらに Na を僅かにドーピングすることで 300-800K の広い範囲において ZT 値が大幅に改善することがわかっている[3]。Na をドーピングすることでフェルミ準位が下がりキャリアポケットが増え、その結果 ZT 値が増加すると予想されるが、広い範囲において ZT 値が大幅に改善している点は興味深い。今回は J-PARC、MLF に設置されている AMATERAS 分光器を用いた中性子非弾性散乱実験により、SnSe と 3%Na ドープした SnSe の比較を行いフォノンの非調和性の変化を検証した。

クラストレート化合物はカゴ状構造のなかを原子がラットリングすることで熱伝導を妨げるとされている。このラットリングの描像をみるために、 $Ba_8Al_{16}Ge_{30}$  と Al を Ga に一部置換した物質群の対象にした。高分解能中性子回折計 SuperHRPD を用いて、10K から 900K の広い温度範囲における中性子回折実験を行ない、結晶格子の変化および MEM 解析によりカゴ状構造の中にある Ba 原子の核密度分布の様子を観測した。

[1] L.D. Zhao et al., Nature 508, 374-377 (2014). [2] C.W. Li et al., Nature Physics 11,1063-1069 (2015). [3] K.L. Peng et al., Energy Environ.Sci. 9, 454-460 (2016).