

「計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向」 目次

第I編 熱電変換材料の最新研究動向

第1章 熱電変換材料の最新研究動向概要 森 孝雄

- 1 導入
- 2 熱伝導率を選択的に低減する作戦
 - 2.1 マテリアルズインフォマティクスを活用した低熱伝導率材料の探索例
 - 2.2 複合アニオンによる不均一な化学結合による熱伝導率低減効果
 - 2.3 動的な電荷移動による大きな熱伝導異方性効果
 - 2.4 ドーピングによる化学結合の軟化による熱伝導率低減効果
 - 2.4.1 ドーピングによる格子の軟化の実験的な示唆 (ラマン分光など)
 - 2.4.2 格子の軟化, または, フォノン散乱による熱伝導率低減効果の定性的比較
 - 2.5 原子間サイトへのドーピングによる熱伝導率低減効果
 - 2.6 欠陥制御
- 3 パワーファクター (ゼーベック効果) を増強する作戦
 - 3.1 界面制御による高電荷易動度
 - 3.2 欠陥制御
 - 3.3 磁性によるゼーベック係数の増強
 - 3.3.1 マグノンドラッグ
 - 3.3.2 パラマグノンドラッグ
 - 3.3.3 スピン揺らぎ
 - 3.3.4 磁氣的なスピントロピー
- 4 まとめ
謝辞 参考文献

第II編 第一原理計算

第1章 バレー縮重度とバンド異方性を同時に考慮した熱電性能の指標: 122系ジントル相化合物を例に 白井 秀知, 黒木 和彦

- 1 はじめに
- 2 122系ジントル相化合物の熱電性能
- 3 122系ジントル相化合物の熱電特性の計算結果
- 4 122系ジントル相化合物の結晶構造とバンド構造
- 5 バンド縮重度と熱電性能の関係
 - 5.1 ホールドープ領域
 - 5.2 電子ドープ領域
- 6 バレー縮重度とバンド構造の異方性を組み合わせた熱電設計指針
- 7 おわりに
謝辞 参考文献

第2章 第一原理電子・フォノン計算と実験を活用したリン化合物熱電材料の創製 宮田 全展

- 1 はじめに
- 2 第一原理計算コードOpenMXを活用した電子・フォノン輸送計算
- 3 P鎖状構造を有するリン化合物Ag₃SnP₇におけるAgの非調和振動と第一原理電子・フォノン計算
 - 3.1 実験によるAg₃SnP₇の多結晶合成と格子熱伝導率
 - 3.2 第一原理計算によるAg₃SnP₇の電子・フォノン物性
 - 3.2.1 Ag₃SnP₇の電子構造と結合状態の解析

- 3.2.2 4次の非調和項を繰り込んだ第一原理フォノン輸送計算とAg原子の非調和フォノン
- 4 まとめ
謝辞 参考文献

第III編 非平衡輸送理論

第1章 熱電理論における微視的理論の方法: フォノンドラッグ効果を中心に 松浦 弘泰, 小形 正男

- 1 はじめに
- 2 ボルツマン方程式から得られるSB関係式とその適用限界
- 3 SB関係式の成立条件: Kubo-Luttingerの線形応答理論に基づく熱電理論
- 4 SB関係式が成立する範囲内での熱電効果
 - 4.1 ノーダルライン半金属での表面状態に由来した熱電効果
 - 5 SB関係式が成立しない状況での熱電効果
 - 5.1 フォノンドラッグ効果
 - 5.1.1 Kubo-Luttingerの線形応答理論を用いたフォノンドラッグ効果の理論
 - 5.1.2 強く乱れた系でのフォノンドラッグ効果: FeSb₂への適用
 - 5.2 マグノンドラッグ効果
 - 5.3 電子格子相互作用の効果や電子間相互作用の効果
- 6 まとめ 参考文献

第2章 熱電効果のランダウ理論 山本 貴博

- 1 はじめに
- 2 電気伝導のランダウ理論
- 3 低温のコンダクタンスと量子化
- 4 熱伝導のランダウ理論
- 5 低温の熱コンダクタンスと量子化
 - 5.1 熱コンダクタンスの量子化
 - 5.2 ヴィーデマン・フランツの法則
- 6 熱電効果のランダウ理論
 - 6.1 モットの公式
- 7 熱電効果のランダウ理論の応用: 量子ドット
脚注 参考文献

第IV編 格子力学計算

第1章 熱電材料研究に資する第一原理格子力学 只野 央将

- 1 はじめに
- 2 格子力学法の理論背景
 - 2.1 原子間ポテンシャルとそのTaylor展開
 - 2.2 フォノン分散 (調和近似)
 - 2.3 有限温度フォノン分散
 - 2.4 格子熱伝導率
 - 2.4.1 Peierls-Boltzmann理論
 - 2.4.2 緩和時間近似
 - 2.4.3 コヒーレントな熱輸送
 - 2.4.4 格子熱伝導率のスペクトル分解
 - 2.5 フォノン散乱
 - 2.5.1 フォノン-フォノン散乱
 - 2.5.2 フォノン-電子散乱

- 2.5.3 不純物・無秩序効果
- 2.5.4 粒界散乱
- 3 第一原理計算の実際
 - 3.1 IFCの第一原理計算
 - 3.2 計算のワークフロー
 - 3.3 LD法のソフトウェア
- 4 おわりに 参考文献

第V編 分子動力学シミュレーション

第1章 分子動力学法を用いた熱伝導度評価およびメカニズム解析 吉矢 真人

- 1 はじめに
- 2 熱伝導度計算法としての分子動力学法と格子動力学法の違い
- 3 分子動力学法の基礎
 - 3.1 古典的原子間ポテンシャル
 - 3.2 アンサンブルと温度・圧力制御
- 4 分子動力学法による3種の代表的熱伝導度計算方法
- 5 振動分子動力学法による熱伝導度計算とそのメカニズム解析結果
- 6 おわりに 参考文献

第2章 非平衡分子動力学法を用いた熱伝導予測 下野 昌人

- 1 はじめに
- 2 熱伝導率と熱電特性
- 3 分子動力学法
 - 3.1 分子動力学法の特徴
 - 3.2 原子間ポテンシャル
- 4 非平衡分子動力学法による熱伝導率の予測
 - 4.1 分子動力学法による熱伝導率予測
 - 4.2 周期境界条件によるバルク特性の予測(アルゴン結晶の場合)
 - 4.3 量子効果, 欠陥, 結晶粒径などを考慮した補正(CuFeS₂カルコパイライトの場合)
 - 4.4 多層膜など複合材料の予測(TiNi/MgO ナノ多層膜の場合)
 - 4.5 表面および添加元素の影響(Fe₂VAl ホイスラー合金の場合)
- 5 まとめ 参考文献

第VI編 モンテカルロシミュレーション

第1章 モンテカルロシミュレーションによるナノ構造化材料の熱伝導解析 堀 琢磨

- 1 ナノ構造化熱電変換材料
- 2 フォノン輸送の解析方法
 - 2.1 ボルツマン輸送方程式に基づくフォノンの輸送
 - 2.2 モンテカルロ法によるボルツマン輸送方程式の解法
 - 2.3 モンテカルロ法から発展した解析方法
- 3 フォノン輸送解析の具体例
 - 3.1 多角形ナノワイヤ
 - 3.2 ナノ多結晶体
 - 3.3 薄膜ポーラス体
- 4 まとめと今後の展望
- 参考文献

第2章 クラスター展開を用いた結晶構造予測 大西 正人

- 1 多元素系材料
- 2 クラスレート化合物
- 3 有限温度における結晶構造
 - 3.1 クラスター展開
 - 3.2 モンテカルロ法
- 4 I型クラスレート化合物の型熱電変換特性
 - 4.1 有限温度における結晶構造
 - 4.2 熱電変換特性
- 5 まとめ
- 参考文献

第VII編 連続体シミュレーション

第1章 熱発電デバイスのパラメトリックシミュレーションへ向けた開発 黒川 裕之, 當眞 友太, 渡辺 真也, 渡辺 友梨奈, 大堀 剛史, 大串 哲朗, 飯田 努

- 1 はじめに
- 2 熱電変換デバイスにおける数値解析手法
 - 2.1 伝熱解析と熱-電気連成計算の実施環境
 - 2.2 多様な熱源に対する熱発電デバイス設計環境の必要性
 - 2.3 パラメトリック解析および機械学習/AI化に向けた伝熱解析と熱-電気連成計算
- 3 熱発電デバイスの数値解析手法
 - 3.1 熱発電デバイス構造最適化へのモデル形成とアルゴリズム
 - 3.2 FlowDesignerによる伝熱解析とPythonプログラムによる熱-電気連成解析連携
- 4 熱発電デバイスシミュレーション
 - 4.1 計算モデル階層の構造化と構成モデルの主な役割
 - 4.2 物理層: 伝熱解析, ゼーベック効果計算
 - 4.3 熱発電素子モデル層: ペルチェ効果吸発熱, トムソン効果吸発熱, ジュール発熱計算
 - 4.4 発電量計算層: 発電量予測計算
 - 4.5 最適動作検証層: 変換効率・発電量最大動作点計算
- 5 熱インピーダンスマッチングおよび積算発電電力量(Wh)
- 6 リファレンス熱発電デバイスによるキャリブレーション環境の構築
- 7 おわりに

第VIII編 マテリアルズ・インフォマティクス

第1章 結晶粒界における格子熱伝導機構と情報科学的手法による予測・理解 藤井 進

- 1 はじめに
- 2 結晶粒界による熱伝導度の低下と熱電性能の向上
- 3 計算対象と手法について
- 4 粒界構造の導出と系統的熱伝導解析
- 5 機械学習による粒界原子の分類と理解
- 6 局所的な構造の乱れと熱伝導性の相関
- 7 粒界構造を入力とした熱伝導度の予測
- 8 熱伝導性を支配する局所配位環境の特定
- 9 まとめ
- 謝辞
- 参考文献