

計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向

Trends in R&D on Thermoelectric Material using Computational Science

監修：森 孝雄/塩見 淳一郎

- IoT センサーの自立電源、カーボンニュートラルに貢献する廃熱発電などへの利用で社会的な要請が高まっている熱電変換材料！
- 熱電変換材料の最新研究開発動向全般を俯瞰し説明！
- 計算科学を用いた材料科学研究の第一人者・気鋭の若手による執筆！
- 熱電材料の研究事例により、具体的計算科学手法の使い分けを学ぶ！

＜発行要項＞

- 発行：2022年4月12日発行
- 定価：本体 99,000 円(税込)
本体+CD(カラー)110,000 円(税込)
- 体裁：A4判・並製 214 頁
- 編集・発行：(株)シーエムシー・リサーチ
- ISBN 978-4-910581-18-7 C3058

＝ 刊行にあたって ＝

『計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向』の「刊行にあたって」を書かせて頂く。身の回りにあふれている「熱」を有用な「電気」に変換する熱電材料の200年の歴史を変え得るブレークスルーが起きつつある。1820年頃にゼーベック氏が発見されたゼーベック効果は、材料にかけた温度差によって電圧が発生するものであるが、コンパクトに固体素子で電気を作り出せる利便性にかかわらず、熱電材料の変換能力不足などにより、現在までに広範囲実用化に至っていない。しかし、最近、無数のIoTセンサーを駆動するための自立電源や、カーボンニュートラルに貢献できる廃熱発電としての社会的な要請が非常に高まっており、新規な高性能材料や高性能化原理の開発、モジュールの要素技術の開発、温度管理技術の開発、などが進んでおり、広く実装される日が近づいていると考えられる。

上記の中で、熱電変換能力を決定する熱電性能指数の向上はやはり至上命題である。パラドックス的な物性の要請に応えるために、最高の材料制御の科学技術が要求される。フォノンを選択散乱する方法、また、通常電気伝導とトレードオフの関係にあるゼーベック係数すなわちパワーファクターの増強方法、の双方の開発が必要である。いずれに関しても、例えば、前者は、フォノンや格子に関する計算や、熱伝達に関する計算、後者は、線形応答理論などの種々の相関に関する理論的な描像や、電子状態、バンド構造に関する計算など、理論的な知見がますます重要になっており、高性能熱電材料の開発に欠かせないものになっている。

なお、当該書籍では計算科学の次の分野での第一人者および気鋭の若手の先生方にご寄稿をお願いした(敬称略)。

- ・第一原理計算：1章 臼井秀知(島根大学 助教)、黒木和彦(大阪大学 教授)、2章 宮田全展(北陸先端科学技術大学院大学 助教)
- ・非平衡輸送理論：1章 松浦弘泰(東京大学 助教)、小形正男(東京大学 教授)、2章 山本貴博(東京理科大学 教授)
- ・格子動力学計算：1章 只野央将(物質・材料研究機構)
- ・分子動力学シミュレーション：1章 吉矢真人(大阪大学 教授)、2章 下野昌人(物質・材料研究機構)
- ・モンテカルロシミュレーション：1章 堀琢磨(東京農工大学 准教授)、2章 大西正人(東京大学 特任助教)
- ・連続体シミュレーション：1章 黒川裕之(東京理科大学 研究員)、飯田努(東京理科大学 教授)、他
- ・マテリアルズ・インフォマティクス：1章 藤井進(大阪大学 助教)

本書は、計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発の基礎、基盤技術から最先端の技術や動向を集約することによって、新規な高性能熱電材料の開発の加速に貢献することを目的としている。読者の研究開発に少しでも寄与できれば幸いである。

森孝雄、塩見淳一郎

執筆者一覧(掲載順)

森 孝雄	物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス 研究拠点(WPI-MANA) 副拠点長&MANA 主任研究者&グループリーダー/筑波大学連携大学院 教授	下野昌人	物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(WPI-MANA) NIMS 特別研究員
塩見淳一郎	東京大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 教授	堀 琢磨	東京農工大学 工学研究院先端機械システム部門 准教授
臼井秀知	島根大学学術研究院理工学系 助教	大西正人	東京大学大学院 工学系研究科 機械工学専攻 特任助教
黒木和彦	大阪大学大学院理学研究科・物理学専攻 教授	黒川裕之	東京理科大学 先進工学部 マテリアル創成工学科 飯田研究室 研究員
宮田全展	北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 環境・エネルギー領域 助教	當眞友太	東京理科大学 大学院
松浦弘泰	東京大学 理学系研究科物理学専攻 助教	渡辺真也	東京理科大学 大学院
小形正男	東京大学 理学系研究科物理学専攻 教授	渡辺友梨奈	東京理科大学 大学院
山本貴博	東京理科大学 理学部 教授	大堀剛史	東京理科大学 大学院
只野央将	物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス研究拠点 主任研究員	大串哲朗	株式会社アドバンスドナレッジ研究所 伝熱・冷却研究室 技術顧問
吉矢真人	大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 教授	飯田 努	東京理科大学 先進工学部 マテリアル創成工学科 教授
		藤井 進	大阪大学 大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 助教

注文書		メルマガ 会員登録	登録済み / 登録希望
品名	計算科学を活用した 熱電変換材料の研究開発動向	価格	冊子 90,000 円(税込 99,000 円) 冊子+CD 100,000 円(税込 110,000 円) ※メルマガ会員は定価の10%OFF
会社名		TEL	
部課名		FAX	
お名前		E-mail	
住所	〒		

お申込み・お問合せ
編集発行： (株)シーエムシー・リサーチ 101-0054 東京都千代田区神田錦町 2-7 東和錦町ビル3F
TEL: 03 (3293) 7053 FAX: 03 (3291) 5789 URL: https://cmcre.com E-mail: re@cmcre.com

*書籍はご注文を受けた翌営業日に納品書・請求書とともに送付します。

*お支払い方法は請求書指定口座に納品日の翌月末日までに振り込みでお願いします。

構成および内容

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 磁気的なスピントロポニー
 - 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

臼井秀知, 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ア理論

山本貴博

- 1 はじめに
- 2 電気伝導のランダウア理論
- 3 低温のコンダクタンスと量子化
- 4 熱伝導のランダウア理論
- 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ア理論
- 7 熱電効果のランダウア理論の応用：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 分子力学シミュレーション

第1章 分子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力学法と格子力学法の違い
- 3 分子力学法の基礎
 - 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 分子力学法による3種の代表的熱伝導度計算方法
 - 4.1 振動分子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 分子力学法
 - 3.1 分子力学法の特徴
 - 3.2 原子間ポテンシャル
- 4 非平衡分子力学法による熱伝導率の予測
 - 4.1 分子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 (Fe₂VAI 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
 - 3.3 薄膜ポラス体
 - 4 まとめと今後の展望
- 参考文献

第2章 クラスタ展開を用いた結晶構造予測

大西正人

- 1 多元系系材料
 - 2 クラステート化合物
 - 3 有限温度における結晶構造
 - 3.1 クラスタ展開
 - 3.2 モンテカルロ法
 - 4 I型クラステ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, 菅真友太, 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アシミュ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

お問い合わせ シーエムシー・リサーチHP <https://cmcre.com>
TEL: 03-3293-7053 FAX: 03-3291-5789 E-mail: re@cmcre.com