



物質の熱伝導率を低減させる新しい機構を発見 —高性能な熱電材料開発の新たな指針に—

東北大学、大阪大学、京都大学、産業技術総合研究所の研究グループは、結晶構造内のトンネル空間に配置した大きな振幅で振動する（ラットリング）原子が互いに強く相関することにより、物質の熱伝導率が著しく低減する現象を実験と理論計算によって明らかにした。

熱エネルギーを電気エネルギーに直接変換できる熱電材料を用いた熱電発電は、未利用熱の有効活用の観点から強い関心が持たれている。熱電材料は、高いゼーベック係数、大きな電気伝導率、低い熱伝導率（キャリアと格子の2つの成分からなる）を有するものほど優れた性能を示すが、格子熱伝導率（物質

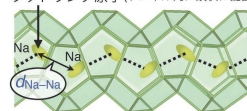
の結晶格子が担う熱伝導率）以外の各特性はトレードオフの関係にある。そのため、高性能な熱電材料の開発には、格子熱伝導率の低い物質を開拓し、物質の熱伝導率を低減させる機構を理解・解明することが重要である。

研究グループは、結晶構造内のトンネル空間にナトリウム（Na）原子鎖が内包された数種のスズ（Sn）系金属間化合物（Na-X-Sn系化合物、XはAl, Ga, In, Zn）に着目し、それらが極めて低い格子熱伝導率と高い熱電特性を有することを明らかにした。さらに、各化合物のNa原子がトンネル伸長方向に沿って大きな振幅で振動（ラットリング）しており、Na原子間の距離が近い化合物ほど格子熱伝導率が低いことを実験的に見出した。

これらNa原子の1次元的な振幅振動状態や、Naの原子間距離と格子熱伝導率との相関性は、格子動力学を取り入れた第一原理計算によっても説明され、ラットリング原子が近接することで熱伝導を担う骨格構造のフォノンの非調和性が増大し、格子熱伝導率が低

下する機構が明らかにされた。このラットリング原子が互いに強く相関することによって引き起こされる熱伝導率の低減機構は、今後の高性能な熱電材料の開発に新たな指針を与えるものと期待される。本研究成果は、2022年12月17日付けでAdvanced Materials誌のオンライン版に掲載された（DOI: 10.1002/adma.202207646）。

ラットリング原子(トンネル内に鎖状に配置)



原子間距離 d_{Na-Na} 減少 → フォノンの非調和性 増大 → 格子熱伝導率 KL 低下

東北大学 多元物質科学研究所

教授 山田高広

連絡先: 〒 980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1

E-mail: takahiro.yamada.b4@tohoku.ac.jp

[2023年2月7日]