

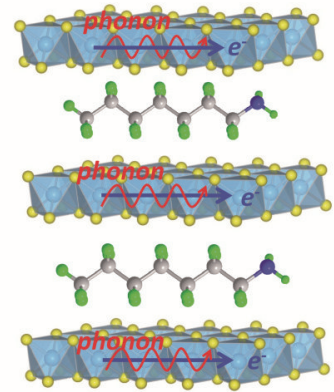
# TiS<sub>2</sub>系無機/有機超格子熱電変換材料の創製

化学・生物工学専攻 応用化学分野 無機材料化学研究グループ

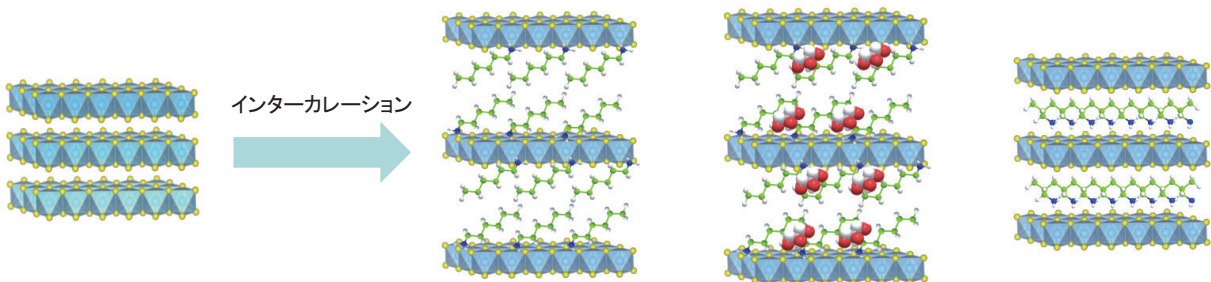
河本邦仁, 党 鋒, 万 春磊

## 研究開発の概要

本研究では組成・構造・物性が異なる2種類のナノブロックを周期配列(インテグレーション)して超格子構造を構築し、それぞれのナノブロックの特徴を組み合わせることによって、低温(室温~100度)大気中で使用可能な高性能熱電変換材料を開発することを目的とする。具体的に、層状TiS<sub>2</sub>単結晶のファンデルワールスギャップに有機分子を挿入して、無機/有機ハイブリッド超格子を形成する。この構造では、ソフトな有機分子層で挟まれたハードな無機TiS<sub>2</sub>層内部にフォノンが2次元的に閉じ込められるため、熱伝導率が劇的に低減して、ZTが大幅に増加した。また、様々な有機分子のインターカレーションにより層間距離を増加させることによって、電子の有効質量が増加していく。これは電子の量子閉じ込め効果の存在を示唆する。



TiS<sub>2</sub>ベースの無機/有機超格子



(a) TiS<sub>2</sub>単結晶

(b) TiS<sub>2</sub>/ヘキシルアミン

(c) TiS<sub>2</sub>/ヘキシルアミン/  
グリセリン

(d) TiS<sub>2</sub>/ポリアリルアミン

## 新規性・独創性

- ・TiS<sub>2</sub>のナノ構造制御による高性能化
- ・無機/有機ハイブリッド超格子:新規熱電材料の提案
- ・量子閉じ込め効果の発見

## 応用

- ・低温低品位な廃熱利用熱電発電システム
- ・柔軟性のある熱電モジュール
- ・他の量子電子デバイス

	S [ $\mu$ V/K]	$\sigma$ [S/cm]	$\kappa$ [W/mK]	ZT [-]
TiS <sub>2</sub> 単結晶	-160	409	4.45	0.069
TiS <sub>2</sub> (ヘキシルアミン)	-75	363	0.763	0.080
TiS <sub>2</sub> (ヘキシルアミン/ グリセリン)	-75	534	0.828	0.11
TiS <sub>2</sub> (ポリアリルアミン)	-78	781	0.69	0.21

TiS<sub>2</sub>単結晶及び無機/有機ハイブリッド超格子の熱電特性

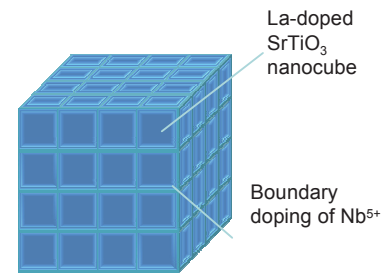
# バルク超格子熱電変換材料の化学創製

化学・生物工学専攻 応用化学分野 無機材料化学研究グループ

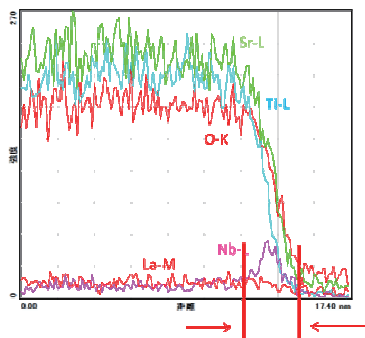
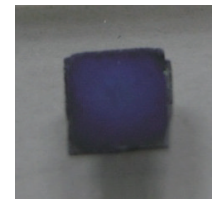
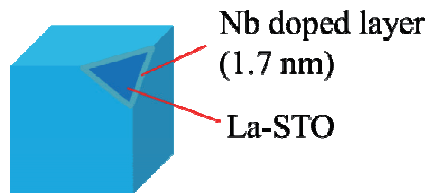
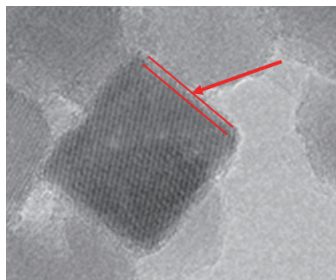
河本邦仁, 党 鋒, 万 春磊

## 研究開発の概要

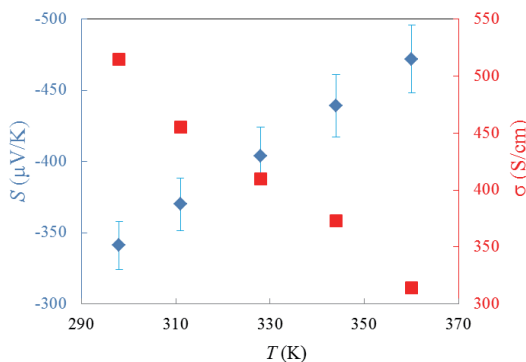
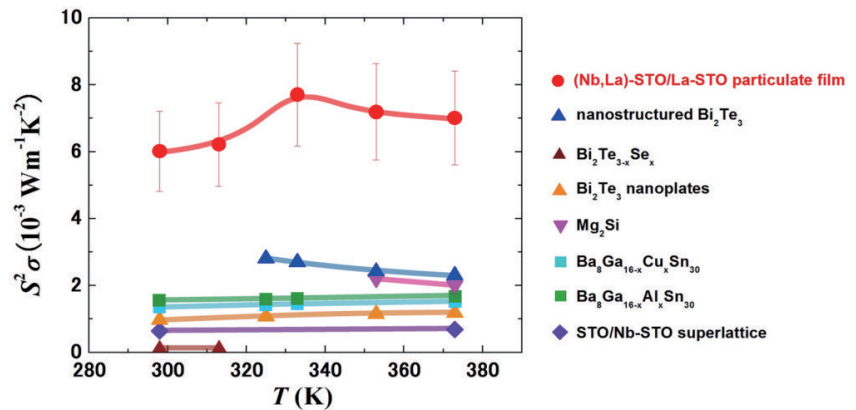
日本オリジナルの高効率バルク熱電変換材料の開発を行い、バックキャストテクノロジーの観点からこれをデバイス化して廃熱回収・電力変換への応用の道筋をつけることを目標とし、最近発見した無害かつ非希少元素から構成されるSrTiO<sub>3</sub>を利用したバルク熱電変換材料を開発し、研究を推進している。量子ナノ構造バルク材料の熱電特性シミュレーションに基づいて、ナノ構造化の有効性を一部実験的に検証した。ナノキューブ表面へNbを導入し、自己組織化により作成した3D超格子セラミックスは高熱電特性を得た。



3D超格子SrTiO<sub>3</sub>モデル構造



1.7 nm



## 新規性・独創性

- SrTiO<sub>3</sub> (STO) のナノ構造制御による高性能化
- ナノ粒子表面へ金属イオンを導入するプロセスの開発

## 応用例とその効果

- 低コスト、高性能熱電材料
- 低温低品位な廃熱利用熱電発電システム
- 発電効率を高める太陽熱アシストシステムの構築