

フェルミ準位近傍に擬ギャップ・狭ギャップを形成する新規熱電変換材料

高 際 良 樹*

1. はじめに

近年、エネルギーハーベスティング(環境発電)に対する注目度が上がる中で、熱エネルギーを電気エネルギーに直接変換する「熱電発電」の研究が、実用化に向けて着実に進展している。廃熱として逃してきた熱エネルギーを電気エネルギーに変換して利用することにより、省エネルギー化社会に貢献できる発電方法である。これまで著者は、新規熱電変換材料探索を軸に、実験と理論計算を組み合わせた研究を遂行してきた。着目している物質群は、フェルミ準位近傍に擬ギャップを形成するアルミ系正20面体準結晶やフェルミ準位近傍に狭ギャップを形成する遷移金属と13族元素からなる金属間化合物である。本稿では、これまで得られてきた知見を簡潔にまとめ、今後の展望について概観したい。

2. 熱電変換材料と材料の特性を司る因子

熱電発電の実用化に際しては、モジュールの発電効率や発電コストが重要課題となるが、発電効率に大きく影響を及ぼすのが、モジュールを構成する熱電素子自体の性能である。通常の π 型モジュールでは、複数個の p 型と n 型の熱電素子を電気的には直列に、熱的には並列に接続する。熱電素子の評価指標として、無次元熱電性能指数 ZT が用いられており、次式で与えられる。

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa_{\text{total}}} T \quad (1)$$

ここで、 S , σ , κ_{total} , T はそれぞれ、ゼーベック係数、電気伝導率、全熱伝導率、温度である。 $S^2 \sigma$ は電気出力因子(パ

ワーファクタ)と呼ばれる項である。式(1)から、熱電素子の性能としては、単位温度差あたりの熱起電力が大きく、電気伝導率の大きい、即ち、電気出力因子が大きく、かつ、温度差がつきやすい材料が好ましいと理解できる。熱伝導率は、電子成分 κ_{electron} と格子成分 κ_{phonon} の和で与えられることから、 ZT の支配因子は以下のようにして考えると理解しやすい⁽¹⁾。

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa_{\text{electron}} + \kappa_{\text{phonon}}} T = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_{\text{electron}}} \cdot \frac{1}{1 + \kappa_{\text{phonon}} / \kappa_{\text{electron}}} \quad (2)$$

第一因子は、温度 T を除きキャリア濃度の関数である。第二因子は、熱伝導率の電子成分と格子成分の比が分母に含まれていることから、1以下に制約される。従って、第一因子が無次元熱電性能指数 ZT の最大値を与え、この値が高い材料を探索することが一つの指針になり得る。

近年、WIEN2k⁽²⁾やVASP⁽³⁾に代表されるバンド計算パッケージプログラムが広く普及し、物性理解・解釈に重要な役割を果たしている。式(2)の第一因子は、次式のボルツマン輸送方程式を用いて評価できる。

$$\sigma = e^2 \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{\vec{k}} \bar{v}_{\vec{k}}^2 \tau_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) \quad (3)$$

$$S = \frac{ek_B}{\sigma} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{\vec{k}} \bar{v}_{\vec{k}}^2 \tau_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) \frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \quad (4)$$

$$\kappa_{\text{electron}} = k_B^2 T \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{\vec{k}} \bar{v}_{\vec{k}}^2 \tau_{\vec{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\vec{k}}) \left[\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right]^2 - T \sigma S^2 \quad (5)$$

ここで、 e , k_B , f_0 , $\bar{v}_{\vec{k}}$, $\tau_{\vec{k}}$, μ はそれぞれ、電気素量、ボルツマン定数、フェルミ・ディラック関数、群速度、緩和時間、ケ

* 東京大学大学院助教；新領域創成科学研究科物質系専攻(〒277-0882 柏市柏の葉5-1-5) New Thermoelectric Materials Possessing Pseudo-gap or Narrow-gap Near the Fermi Level; Yoshiki Takagiwa (Department of Advanced Materials Science, The University of Tokyo, Kashiwa)
Keywords: thermoelectric material, band structure calculation, chemical bonding nature, pseudo-gap, narrow-gap
2014年1月6日受理[doi:10.2320/materia.53.260]

ミカルポテンシャルである。ゼーベック係数が大きい材料は、フェルミ準位近傍に急峻な状態密度の傾きを有するような電子構造を形成する。

以下では、フェルミ準位近傍の状態密度に落ち込みのある(擬ギャップを形成する)Al-Pd-遷移金属系正20面体準結晶、及び、フェルミ準位近傍に0.2-0.3 eV程度の狭ギャップを形成する13族元素(Ga)と遷移金属元素(Ru)からなる二元系金属間化合物を取り上げる。前者は、正20面体クラスターを基本骨格とする複雑クラスター固体であり、後者は、チムニラダー化合物の一種である。

Al系正20面体準結晶は、クラスターの球対称性が高いために、フェルミ球とブリルアンゾーンとの強い相互作用から、状態密度に擬ギャップを形成する。そのため、比較的高い電気伝導率とゼーベック係数が共存することで、高い電気出力因子が得られる。かつ多様な元素を含む複雑なクラスター構造や準周期性に起因してガラス並みに低い熱伝導率を示す。Al-Pd-Re系及びAl-Pd-Re-Ru系正20面体準結晶の熱電性能指数 ZT と有効質量 m^* の関係から、Al系準結晶の熱電性能指数の向上指針「重く強固なクラスターが弱く結合した固体」(weakly bonded rigid heavy clusters, WBRHCs)が木村らによって提唱されている⁽⁴⁾⁽⁵⁾。この材料設計指針に基づき、無次元熱電性能指数 ZT の向上について概説する。

RuGa₂に代表される後者の金属間化合物は、バンド端近傍に狭ギャップを形成することで、半導体的特性を有する。単純金属と遷移金属からなる金属間化合物でありながら、実用材料並みに高い電気出力因子を示すのが特徴である。但し、結晶構造が単純であることから、Al系準結晶や実用材料と比較して熱伝導率は数倍大きな値をとる。準結晶とは異なり、バンド計算が可能であるので、計算結果と比較しながら、その特性について簡潔に紹介する。

3. アルミ系正20面体準結晶の熱電特性

材料設計指針「クラスター内結合を強固にし、クラスター間結合を弱める」⁽⁴⁾⁽⁵⁾により、主に、クラスター間結合を弱めるための置換元素の選定を行った。関連結晶である α -AlMnSi及び構造同型である α -AlReSi結晶相における電子密度分布解析の結果、3d電子を外殻電子とするMnからなる α -AlMnSi結晶よりも、5d電子を外殻電子とするReからなる α -AlReSi結晶の方が、クラスター間・クラスター内結合ともに、強い結合状態であることが分かった⁽⁶⁾⁽⁷⁾。この結果から、原子間の結合性を弱めるために、原子番号の小さい元素を置換元素として選択するという方針を立てた。但し、この場合、クラスター内の結合強度も弱くする可能性もある。具体的には、Al-Pd-Re系においてRe-Ru⁽⁸⁾及びRe-Fe⁽⁹⁾置換効果、Re-Mn置換効果⁽¹⁰⁾、Al-Pd-Mn系において、Al-Ga置換効果⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾を調べ、熱電特性の向上に成功した。

図1に示すように、Re-Ru置換では ZT の最大値 ZT_{\max} は置換前の0.10から0.15⁽⁸⁾に、Ru-Fe置換では ZT_{\max} は

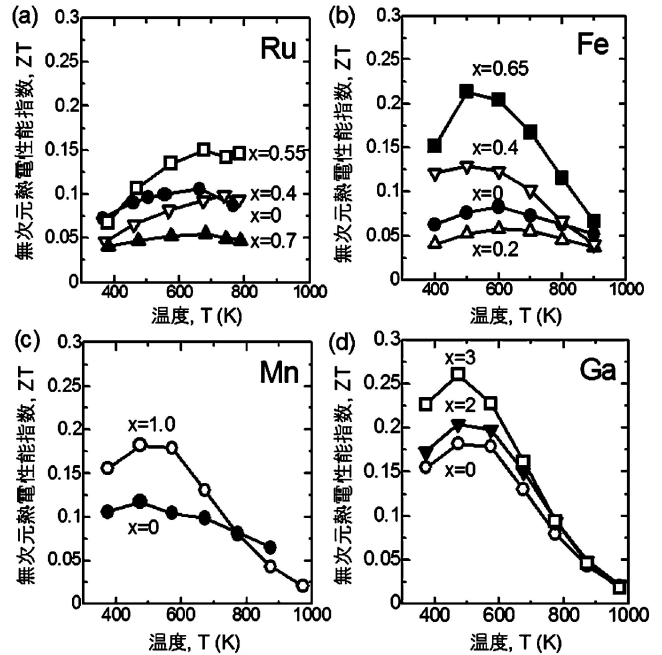


図1 (a) $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{20}(\text{Re}_{1-x}\text{Ru}_x)_9$ ($x=0, 0.4, 0.55, 0.7$)⁽⁸⁾, (b) $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{20}(\text{Re}_{1-x}\text{Fe}_x)_9$ ($x=0, 0.2, 0.4, 0.65$)⁽⁹⁾, (c) $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{20}(\text{Re}_{1-x}\text{Mn}_x)_9$ ($x=0, 1.0$)⁽¹⁰⁾, (d) $\text{Al}_{71-x}\text{Ga}_x\text{Pd}_{20}\text{Mn}_9$ ($x=0, 2, 3$)⁽¹¹⁾ 準結晶の無次元熱電性能指数 ZT の温度依存性。

0.21⁽⁹⁾と最大で約2倍増加させることに成功した。しかし、アーク溶解後、熱処理したAl-Pd-Re系準結晶の試料組織は、相対密度が65%程度と多孔性が高いため、熱電特性の再現性の向上を図る必要があった。そこで、放電プラズマ焼結法によるクラックを含まない試料作製プロセスの確立を試みた。組織改善の結果、再現性の高いデータの取得が可能になり、Al-Pd-Re準結晶の ZT_{\max} は0.12を示した⁽¹⁰⁾。一方、ReをMnで置き換えたAl-Pd-Mn準結晶の試料の相対密度は95%を越えるため、組織改善の必要性はないと考えた。バルク試料の ZT_{\max} は0.18とAl-Pd-Re準結晶の約1.5倍の値を示した⁽¹⁰⁾。このAl-Pd-Mn準結晶を出発物質として、13族元素のAlをGaで元素置換を行った結果、 ZT_{\max} は0.26という比較的高い値を示した⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾。音速測定により、Ga置換によりクラスター間の結合性が弱化している実験事実が得られたが、これに加えて、合金散乱による格子熱伝導率の低減が ZT 向上に大きく寄与している。なお、Ga置換量は3at%程度であり、この場合、結合が強固なクラスター内のAlサイトと置換するのではなく、結合が弱いクラスター間のAlサイトと優先的に置換していると考えられる。同様に、Al-Pd-Re準結晶をベースとしてAl-Ga元素置換を行った結果、 ZT_{\max} 向上には成功したが、その値($ZT_{\max}=0.18$)はAl-Ga-Pd-Mn系には及ばなかった($ZT_{\max}=0.26$)⁽¹²⁾。なお、これらの ZT は全て p 型としての値である。

WBRHCsの材料設計指針に基づいた元素置換により、実用化目標である $ZT=1$ (変換効率10%程度に相当)の約1/4程度であるが、473Kで0.26という比較的高い値を示した。第

四元素の置換により ZT が飛躍的に向上する可能性があり、これら擬ギャップ系合金での材料探索の余地は残されている。

4. RuGa₂ 金属間化合物の熱電特性

RuGa₂ はフェルミ準位近傍に 0.3 eV 程度の狭ギャップを形成し、 p 型特性として、室温におけるキャリア濃度 n_H は $2.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 、移動度 μ_H は $150 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ を示す⁽¹³⁾⁻⁽¹⁵⁾。この高い移動度は、 Γ 点と Γ -Z 方向に、有効質量の小さなホールバンドがフェルミ準位近傍に存在することに起因している⁽¹⁶⁾。

RuGa₂ の熱電変換材料としてのポテンシャルを評価するために、緩和時間一定の近似を用いたボルツマン輸送方程式を用いて、 ZT の計算を行った。但し、格子熱伝導率を Cahill らによって提唱されている最低格子熱伝導率のモデル⁽¹⁷⁾に置き換えた。

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_{\text{electron}} + \kappa_{\text{min}}} \quad (6)$$

ここで、 κ_{min} は最小格子熱伝導率であり、

$$\kappa_{\text{min}} = \left(\frac{\pi}{6}\right)^2 k_B n^{2/3} \left[\sum_i v_i \left(\frac{T}{\theta_i}\right) \int_0^{\theta_i/T} \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right] \quad (7)$$

$$\theta_{l,t} = v_{l,t} \left(\frac{\hbar}{k_B}\right) (6\pi^2 n)^{1/3} \quad (8)$$

で与えられる。 n は原子数密度、 $v_{l,t}$ は(縦波・横波)音速、 $\theta_{l,t}$ はカットオフ周波数である。音速の実験値を用いて算出したところ、室温以上の温度範囲では $1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ という値を得た。この値と式(3)-(5)を用いて、800 K における ZT のケミカルポテンシャル μ 依存性を計算した結果を図 2 に示す。 $\mu = 0$ は化学量論組成に対応している。およそ化学量論組成近傍の p 型材料としての ZT_{max} は 0.3-0.5 程度の値であり、実験値を良く再現している⁽¹³⁾⁻⁽¹⁵⁾。

リジッドバンドを仮定すると、この RuGa₂ は、ホールドープにより $ZT_{\text{max}} = 0.75$ 、電子ドープにより $ZT_{\text{max}} = 2.0$ に迫る高い ZT を得るポテンシャルを有している。但し、ホールドープ及び電子ドープともに、未ドープ RuGa₂ の電気伝

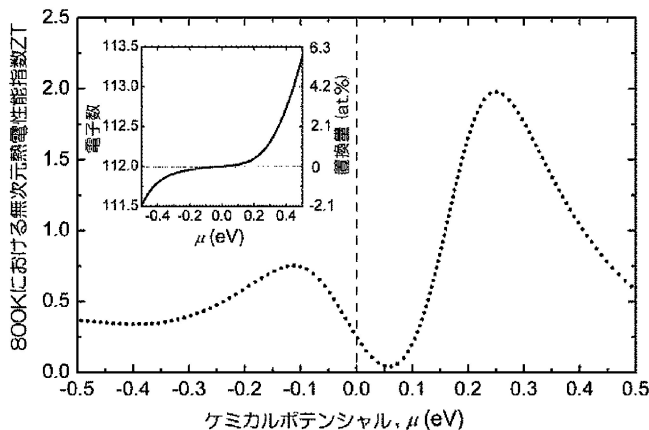


図 2 RuGa₂ の 800 K における無次元熱電性能指数 ZT のケミカルポテンシャル μ 依存性⁽¹⁶⁾。

導率から求めた緩和時間($\tau = 2.5 \times 10^{-14} \text{ s}$)を仮定しているために、 ZT を過大評価している可能性があるが、この値は材料科学者として勇気づけられる値である。電子数からおおよそ見積ると、Ru サイトを 0.5 at% (一価のホールドープ) 及び 1 at% (一価の電子ドープ) の置換により、ケミカルポテンシャルが ZT_{max} の位置までシフトすることが期待される。誌面の都合上、ホールドープ効果は文献(18)に譲り、電子ドープの結果を中心に紹介する。

キャリアドープを行う際に、ドープメントとしてどの元素を選択すべきかを検討することが必要である。不純物を取り入れた計算方法として、一般的にスーパーセル法が広く用いられているが、ここでは、結晶の対称性を下げることなく、元素置換の効果を取り入れることができる KKR-CPA 法⁽¹⁹⁾⁻⁽²¹⁾を用いた。KKR-CPA 法を熱電変換材料に適用した例として鉛カルコゲナイドが挙げられ、PbTe における Tl の Resonant states の評価⁽²³⁾ や Pb-Sb 置換効果⁽²⁴⁾、PbSe における Pb-Sr 置換効果⁽²⁵⁾、その他リジッドバンド近似の妥当性の議論等に用いられている⁽²⁶⁾⁽²⁷⁾。Ru サイトを Co, Rh, Ir, Ni, Pd で置換した場合を検討した結果、Ir が最も適切であると判断した⁽¹⁶⁾⁽²²⁾。

計算の結果(図 3)、まず、ドープしていない RuGa₂ はフェルミ準位近傍に狭ギャップを形成していることが確認でき、WIEN2k による計算と良く一致している⁽¹⁴⁾⁽¹⁶⁾。Ir 置換による電子ドープにより、フェルミ準位は価電子帯上端から伝導帯下端へとシフトした。伝導帯下端近傍の状態密度に僅かではあるが変調が起きており、有効質量に変化が生じている可能性が示唆された。即ち、正確な意味でのリジッドバンド近似が成り立たないことを示している。このように、ドープメントによる電子構造の変調を調べることは物性理解に不可欠である。

図 4 に、3 at% Ir 置換した試料の RuGa₂ の熱電物性測定結果を示す⁽¹⁶⁾。Ir 置換した試料の室温における電気伝導率は、金属的な温度依存性に变化した。ゼーベック係数は、Ir 置換により、1000 K まで負のゼーベック係数を示した。破線は、電子状態密度と群速度を加味した計算結果であり、概

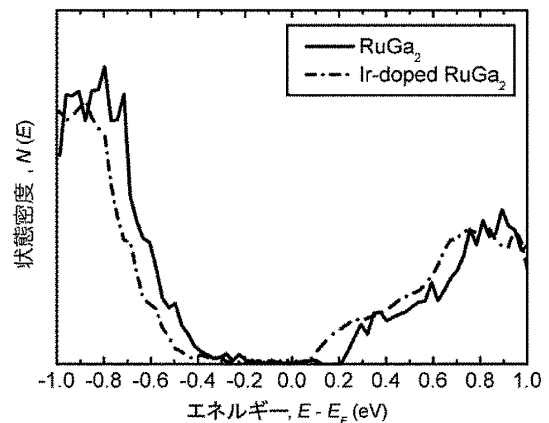


図 3 KKR-CPA 法を用いた RuGa₂ 及び 5% Ir 置換した Ir-RuGa₂ の電子状態密度⁽¹⁶⁾。

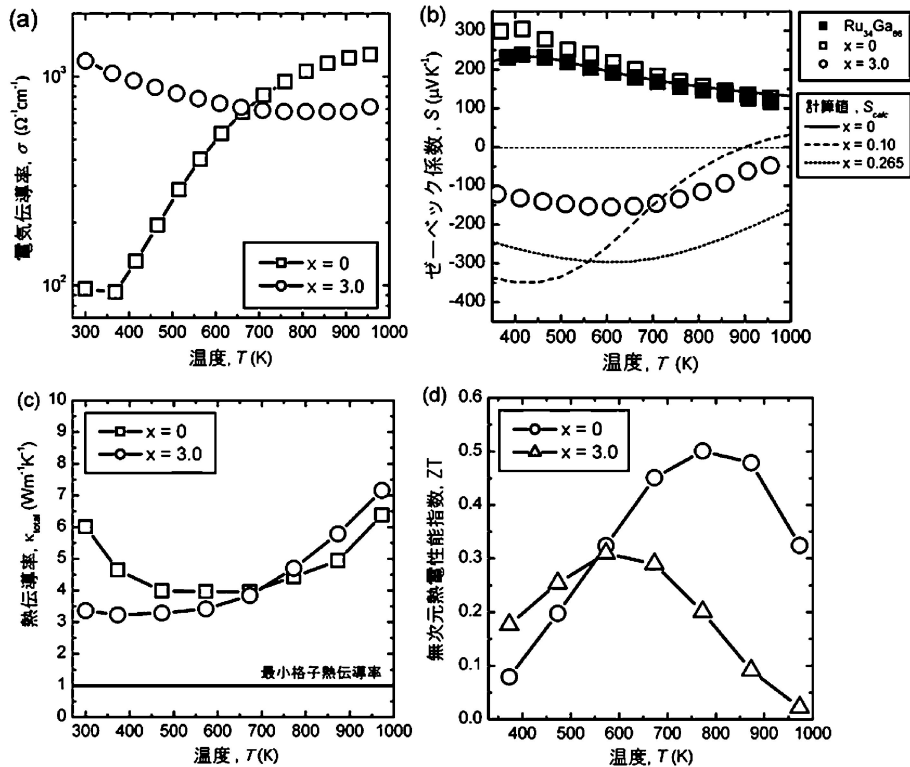


図4 $\text{Ir}_x\text{Ru}_{33.4-x}\text{Ga}_{66.6}$ ($x=0, 3$)の熱電特性 (a) 電気伝導率 σ , (b) ゼーベック係数 S , (c) 熱伝導率 κ_{total} 及び最小格子熱伝導率, (d) 無次元熱電性能指数 $ZT^{(16)}$.

ね実験の温度依存性を再現している。しかし、絶対値に関しては、実験値と計算値との間に差異が見られた。その原因として、KKR-CPA法による電子状態密度計算からも示唆されているように、リジッドバンド近似が成り立たないことが挙げられるが、計算結果から見積もられる有効電子ドーパ量は、仕込み組成と比較して、1/10以下と小さいことに起因している。有効ドーパ量が少ない原因は、現在究明中である。熱伝導率は、合金化散乱の効果でフォノンの平均自由行程が減少することで、主に室温付近で熱伝導率が約半分になった。但し、ここでは格子熱伝導率が支配的だが、最小格子熱伝導率の3倍程度までしか下がっていない。ZTはn型として0.31という比較的大きな値を示したが、計算から示唆されたような $ZT=1.0$ (変換効率10%程度に相当)を越えるような値を得るには至っていない。

5. 更なる性能向上のために

フェルミ準位近傍に擬ギャップを形成するAl系正20面体準結晶は、ガラス並みに低い熱伝導率が特徴で、比較的高いゼーベック係数と電気伝導率が共存するが、より高い熱電性能指数ZTを得るためには、ゼーベック係数の飛躍的向上が必要不可欠である。フェルミ準位近傍に狭ギャップを形成する RuGa_2 は、数百 μVK^{-1} という高いゼーベック係数を示すことから、準結晶においても狭ギャップを形成する材料の探索が必要である。即ち、半導体準結晶の探索である。現在、実在する構造モデルから理論計算により、ギャップ形成

のメカニズムを議論している⁽²⁸⁾。

後者の RuGa_2 に関しては、バンド計算及び実験結果との比較から、有効電子ドーパ量を増やすことが重要である。その際に、電子状態密度に変化を起こさないドーパントが望ましい。更に、格子熱伝導率の低減の為に、ボールミルを使用したプロセスを検討した。これにより、ZTは最大で16%上昇し、0.58を示す⁽²⁹⁾。しかし、焼結プロセス中に粒成長するという課題が残っており、焼結条件に関しては改善の余地が残されている。

非金属元素を含まない、遷移金属と13族元素からなる金属間化合物 RuGa_2 は、実用材料 Bi_2Te_3 並みに高い電気出力因子を有する。理論計算によりZTの算出を行った結果、電子ドーパにより性能向上の可能性が示唆され、RuサイトをIrで置換することを試みた。実際に、n型としての特性を示す材料開発に成功し、 $ZT_{\text{max}}=0.31$ という比較的高い値を得た。しかし、有効電子ドーパ量が少ないことに起因して、計算予測を下回る結果となった。今後は、有効電子ドーパ量の大きなドーパントの探索と格子熱伝導率低減の為にボールミルプロセスの導入・最適化、新たに薄膜特性を評価する。

今後も理論と計算を組み合わせ、新規熱電変換材料の探索及び合成・熱物性評価等を行い、当該分野の活性化及び熱電発電の実用化に向けて、微力ながら貢献していきたい。

6. 謝 辞

本研究課題の一部は、科学研究費補助金(21860021、

23760623), 及び, 熱・電気エネルギー技術財団(第17回研究助成)の支援を受けて行われた。また, 所属研究室で博士課程から御指導頂いている木村薫教授をはじめとして, 共同研究者の岡田純平氏(現: 宇宙航空研究開発機構), 細井慎氏(現: ソニー先端マテリアル研究所), 上村享彦氏(現: 日立金属), 鈴木彰敏氏(現: 豊田中央研究所), 松林佑華氏(現: 本田技研工業), 現, 木村研究室の学生である, 北原功一氏, 佐藤直大氏に感謝申し上げる。

文 献

(1) T. Takeuchi: Mater. Trans., **50**(2009), 2359–2365.
 (2) P. Blaha *et al.*: WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Programs for Calculating Crystal Properties, Techn. Universität Wien, Austria, (2001).
 (3) G. Kresse and J. Furthmüller: Phys. Rev. B, **54**(1996), 11169–11186.
 (4) 木村 薫: 熱電変換材料, 1.8クラスター固体, 日刊工業新聞社, (2005), 138.
 (5) 木村 薫, 岡田純平: 熱電変換技術ハンドブック, 9.クラスター固体, エヌ・ティイー・エス, (2008), 191.
 (6) K. Kirihara, T. Nakata, M. Takata, Y. Kubota, E. Nishibori, K. Kimura and M. Sakata: Phys. Rev. Lett., **85**(2000), 3468–3471.
 (7) K. Kirihara, T. Nagata, K. Kimura, K. Kato, M. Takata, E. Nishibori and M. Sakata: Phys. Rev. B, **68**(2003), 014205.
 (8) T. Nagata, K. Kirihara and K. Kimura: J. Appl. Phys., **94**(2003), 6560–6565.
 (9) J. T. Okada, T. Hamamatsu, S. Hosoi, T. Nagata, K. Kimura and K. Kirihara: J. Appl. Phys., **101**(2007), 103702.
 (10) Y. Takagiwa, T. Kamimura, J. T. Okada and K. Kimura: J. Electron. Mater., **39**(2010), 1885–1889.
 (11) Y. Takagiwa, T. Kamimura, S. Hosoi, J. T. Okada and K. Kimura: J. Appl. Phys., **104**(2008), 073721.
 (12) Y. Takagiwa, T. Kamimura, J. T. Okada and K. Kimura: submitted to Mater. Trans.
 (13) Y. Takagiwa, Y. Matsubayashi, A. Suzumura, J. T. Okada and K. Kimura: Mater. Trans., **51**(2010), 988–993.

(14) Y. Takagiwa, J. T. Okada and K. Kimura: J. Alloys Compds., **507**(2010), 364–369.
 (15) Y. Takagiwa, K. Kitahara, Y. Matsubayashi and K. Kimura: J. Appl. Phys., **111**(2012), 123707.
 (16) Y. Takagiwa, K. Kitahara and K. Kimura: J. Appl. Phys., **113**(2013), 023713.
 (17) D. G. Cahill, S. K. Watson and R. O. Pohl: Phys. Rev. B, **46**(1992), 6131–6140.
 (18) Y. Takagiwa, J. T. Okada and K. Kimura: J. Electron. Mater., **40**(2011), 1067–1072.
 (19) H. Akai: J. Phys. Soc. Jpn., **51**(1982), 468–474.
 (20) H. Akai: J. Phys.: Condens. Matter, **1**(1989), 8045–8064.
 (21) M. Schröter, H. Ebert, H. Akai, P. Entel, E. Hoffmann and G. G. Reddy: Phys. Rev. B, **52**(1995), 188–209.
 (22) Y. Takagiwa, K. Kitahara and K. Kimura: Mater. Trans., **54**(2013), 953–957.
 (23) C. M. Jaworski, J. Tobola, E. M. Levin, K. Schmidt–Rohr and J. P. Heremans: Phys. Rev. B, **80**(2009), 125208.
 (24) J. P. Heremans, B. Wiendlocha and A. M. Chamoire: Energy Environ. Sci., **5**(2012), 5510–5530.
 (25) H. Wang, Z. M. Gibbs, Y. Takagiwa and G. J. Snyder: Energy Environ. Sci., **7**(2014), 804–811.
 (26) Y. Takagiwa, Y. Pei, G. Pomrehn and G. J. Snyder: Appl. Phys. Lett., **101**(2012), 092102.
 (27) Y. Takagiwa, Y. Pei, G. Pomrehn and G. J. Snyder: APL Materials, **1**(2013), 011101.
 (28) K. Kitahara, Y. Takagiwa and K. Kimura: to be submitted.
 (29) N. Sato, Y. Matsuura, K. Kitahara, Y. Takagiwa and K. Kimura: J. Alloys Compds., **585**(2014), 455–459.



高際良樹

★★

2009年 東京大学大学院新領域創成科学研究科物質系専攻 博士課程 修了
 2009年4月– 現職
 2012年4月– 2013年3月
 カリフォルニア工科大学材料科学部門 客員研究員
 専門分野: 材料物性学
 ◎実験と理論計算を組み合わせ、新規熱電変換材料探索及び熱電特性向上の為に材料設計指針の構築を目指している。
 ★★★