

# 熱電素子・モジュール設計技術の開発

－ 第一原理計算とマルチフィジックスCAEによる熱電製品開発支援システムの構築と活用 －

豊田丈紫\* 的場彰成\* 宮田全展\*\* 小矢野幹夫\*\*

熱電素子やその集合体である熱電モジュールの開発の効率化を目的とし、計算科学を活用した高性能熱電素子の素材探索から発電向け熱電モジュールの構造最適化を実現する設計支援システムを構築した。材料探索では、全88モデルの不純物添加  $\alpha$ -MgAgSbの電子状態と電子輸送係数計算から3つのp型の熱電素子の候補が得られ、効果的な熱電材料の探索が可能となった。熱電モジュール設計ではボルツマン輸送方程式に基づく近似解析から各種p-n熱電材料の組合せに最適な素子断面積と高さの最適化値を求めることが可能になった。更に、実際の熱電モジュール形状から発電特性を求める有限要素解析モデルを作成し、熱源の広さや出力特性を考慮した構造最適化が可能となった。

キーワード：熱電材料，熱電モジュール，第一原理計算，有限要素解析

Development of Thermoelectric Elements and Modules Design Technology to Realize High Efficiency Power Generation  
- Development of Thermoelectric Product Support System Combining First-Principles Calculation and Multi-Physics CAE -

Takeshi TOYODA, Akinari MATOBA, Masanobu MIYATA and Mikio KOYANO

For the purpose of improving the efficiency of the development of thermoelectric elements and their thermoelectric modules, we built a design support system that realizes the optimization of thermoelectric module structures for power generation through the search for materials for high-performance thermoelectric elements using computational science. In the material search, three p-type thermoelectric element candidates were obtained from the calculation of the electronic state and electron transport coefficient of all 88 models of doped  $\alpha$ -MgAgSb, and effective thermoelectric material search became possible. For the thermoelectric module design, it has become possible to obtain the optimum values of the element cross section and height for the combination of various p-n thermoelectric materials from the approximate analysis based on the Boltzmann transport equation. In addition, a finite element analysis model that determines the power generation characteristics from the actual thermoelectric module shape has been created, making it possible to design optimization that take into account the size and output characteristics of the heat source.

Keywords : thermoelectric materials, thermoelectric modules, first-principles calculations, finite element analysis

## 1. 緒 言

CAE(Computer Aided Engineering)の普及により、モノづくり現場におけるシミュレーションを活用した製品開発(デジタルエンジニアリング)は必須の技術になっている<sup>1)</sup>。近年、経験パラメータを使わずに材料の物性解析が可能な第一原理計算技術が発展し、材料開発においても従来の実験的手法に加えて計算科学を融合させた新たな設計手法の構築が期待されている。また、ナノスケールからマクロスケールまで対応可能なCAEを利用することで最終製品の性能予測が可能とな

り、製品仕様を想定して最適な材料設計を行うモノづくり手法が実現しつつある<sup>2)</sup>。

熱と電気を相互に変換する熱電変換技術は、電子冷却素子として実用化されている<sup>3)</sup>。一方で廃熱等のエネルギー回収技術である熱電発電は、材料の更なる高性能化や素子の集合体である熱電モジュールの構造設計が課題となっており広範な普及には至っていない<sup>4),5)</sup>。前者の熱電材料の性能向上には材料組成や不純物元素の添加量を精密に制御することで熱電物性を的確に制御する必要がある。後者は熱源の温度や規模に応じて発電出力を最大にする素子の形状やp-n対数の最適設計を行う必要がある。しかしながら、これらの工

\*電子情報部 \*\*北陸先端科学技術大学院大学

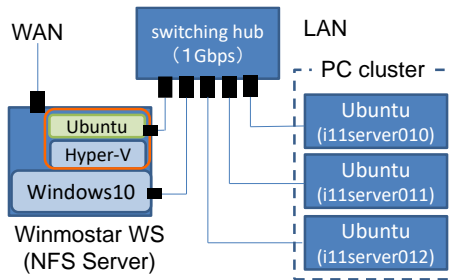
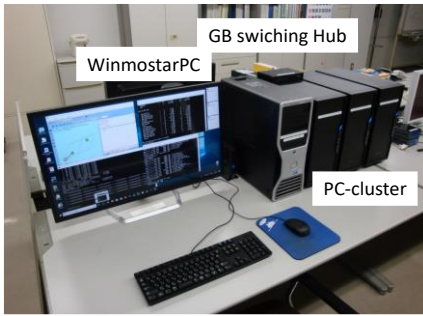


図1 熱電素子設計システムと構成

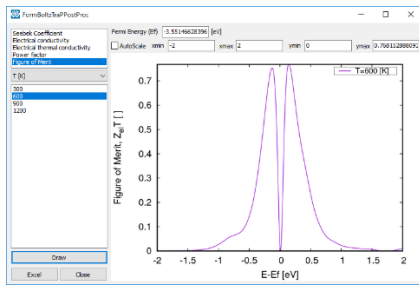


図2 熱電素子設計の入出力支援GUI

程に伴う試作・評価の開発コストの増大が課題となっている。そこで本研究では、熱電素子や熱電モジュールの開発の効率化を目的とし、計算科学手法を活用した高性能熱電材料の素材探索や発電デバイスとしての熱電モジュールの構造最適化を実現する設計支援システムの確立を目指した。

## 2. 熱電素子設計手法の開発

### 2.1 熱電素子設計システムの構築

図1に構築した熱電素子設計システムの外観とシステム構成を示す。本システムはモデリング・可視化ソフトウェア Winmostar<sup>®</sup>をベースとし、モデルの電子状態の計算から緩和時間近似の範囲内でゼーベック係数などの熱電特性を評価することができる。また、計算の入力から結果表示のすべての作業はグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)環境で行える(図2)。計算機への負荷が高い電子状態計算は、ワークステー

表1 熱電素子設計システムの仕様

#### Windowsワークステーション

CPU	Intel Xeon E3-2660 (4Core/2.54GHz)
メモリ	DDR3 ECC PC3-12800 12GB
HDD	SATA SSD 500GB×2 (local, NFS)
ネットワーク	1Gbps×2 (WAN, LAN)

#### 計算ノード (3台)

CPU	Intel Core i5-8400 (6Core/2.8GHz)
メモリ	DDR4 PC4-21300 32GB
HDD	M.2 SSD 500GB
ネットワーク	1Gbps

#### 計算ノードのソフト環境

OS	Ubuntu 18.04 LTS
コンパイラ	GCC Ver. 7.3.0/ PGI Ver. 17.1
Message Passing Interfaceライブラリ	OpenMPI Ver. 2.1.1
線形演算ライブラリ	LAPACK, BLAS Ver. 3.7.1/ Intel MKL Ver. 18.1.038
高速フーリエ変換用アルゴリズム	FFTW Ver. 3.3.7/ Intel MKL Ver. 18.1.038
第一原理計算	OpenMX Ver. 3.8.5/ QuantumESPRESSO Ver. 6.3
電子輸送係数導出	BoltzTraP Ver. 1.2.5

ション(WS)に加えて汎用PC3台による並列計算機(PCクラスタ)<sup>6)</sup>上で実行できる。PCクラスタの仕様を表1に示す。計算機への実行命令はWSのジョブスケジューラで選択でき、利用者は実行中の計算機環境を意識せずに作業できる。本研究における電子状態の第一原理計算にはOpenMX計算コード<sup>7)</sup>を使用した。OpenMXは、東京大学の尾崎研究グループらが開発・維持している密度汎関数理論(DFT)、ノルム保存型擬ポテンシャル、擬原子基底関数に基づいた幅広いナノスケール素材のシミュレーション計算を行うためのプログラムである。特に並列コンピュータに対して入念に設計されており、取り扱う原子数が多くなる熱電材料の電子状態計算に有用である。熱電特性の計算にはBoltzTraP計算コード<sup>8)</sup>を使用した。BoltzTraPは、第一原理計算で得られた電子状態からボルツマン輸送方程式に基づいてホール係数やゼーベック係数など輸送係数を求めることができる。BoltzTraP解析機能は標準でOpenMXに対応していないため、新たにOpenMXの計算結果とBoltzTraPを繋

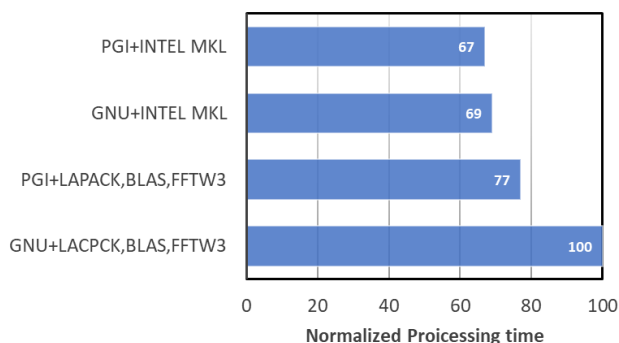


図3 実行速度のコンパイル環境依存性

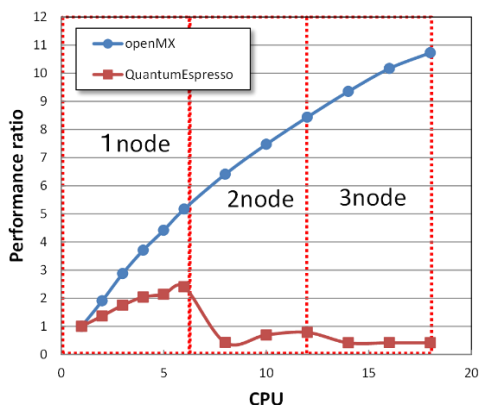


図4 第一原理計算の並列化効率

げるインターフェイス(MX\_Trap.sh)<sup>9),10)</sup>を熱電素子設計システムに組み込んだ。また、PCクラスタでの並列化効率の検証のため、擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理計算コードQuantum ESPRESSO<sup>11)</sup>をOpenMXとの比較に利用した。

## 2. 2 熱電素子設計システムの検証

### 2. 2. 1 コンパイル環境と並列化効率の検証

第一原理計算では行列演算、ベクトル演算並びに高速フーリエ演算等が用いられており、計算性能はプログラムのコンパイル環境に大きく依存する。そこで、コンパイラと数値計算ライブラリの組み合わせによる実行速度の検証を行った。第一原理計算の条件はマグネシウムシリサイド熱電材料(Mg<sub>2</sub>Si)を対象物質として選択し、Perdew-Burke-Ernzerhof型の一般化勾配近似(GGA-PBE)の交換関連エネルギー汎関数を用いてカットオフ条件を400Ryとした。実行性能の検証はk点の分割数(メッシュ)を8×8×8としたときの電子状態密度の計算に要する処理時間で行った。図3に検証結果を示す。PCクラスタに標準で実装されているGNUコンパイラ(GCC)と演算ライブラリであるLAPACK, BLASお

よびFFTWでの計算結果を基準値とした。コンパイラをPGI<sup>12)</sup>に変更することで約23%高速化し、数値計算ライブラリをIntelMKL<sup>13)</sup>にすることで最大33%の高速化が可能であった。一方でGCCとIntelMKLの組合せは31%向上しPGIに匹敵することが分かった。以上の結果から、複数ノードの並列計算は、実行速度が比較的速く無償利用が可能なGCCとIntelMKLの組み合わせで実施した。

PCクラスタで並列処理する場合、各実行プロセスはそれらの間で互いに通信しながら並列処理を行う。このための通信プロトコルをMessage Passing Interface (MPI) と呼び、プログラミング言語とは独立にライブラリとして実装されている。本研究ではMPIライブラリとしてOpenMPI<sup>14)</sup>を用いた。第一原理計算の計算条件は前述と同じくMg<sub>2</sub>Siを選択し、汎関数およびカットオフ条件は同一とした。並列化のスケール性能評価はk点のメッシュを前述より多い30×30×30とした。図4に第一原理計算の並列化効率の評価結果を示す。CPUのコア数1個で計算した処理時間を基準値とした性能比(Performance ratio)は、OpenMXの場合CPU数に応じて性能比が増加し複数ノードに亘って同様の傾向を示した。一方で、Quantum ESPRESSOは単一ノード内の並列化効率はCPU数に比例するものの、複数ノードを利用した場合に性能比が低下した。これは、各計算コードのメモリ共有の手法に由来する通信量の増大とノード間のネットワーク帯域がボトルネックとなっているためと考えられる。以上の結果から、構築した熱電素子設計システム(OpenMX+BoltzTrap)は、並列化効率が高く計算負荷の高い熱電材料の電子状態計算に対して有効であった。

### 2. 2. 2 熱電材料の最適構造探索

熱電発電の用途開発において実用化の目的が立っていない理由の一つとして、100℃～400℃の中温度域において比較的高性能で現存する環境調和型Mg<sub>2</sub>Si系n型材料に比べてp型材料の目的が得られていないことが挙げられる<sup>15)</sup>。そこで本項では熱電素子設計システムを使いMg<sub>2</sub>Si系n型材料に匹敵するp型材料の探索を目的とした熱電材料の物質設計を行った。熱電材料の設計は基本組成の物質に不純物元素を導入することで半導体特性が制御できることを利用して行う。そのため、物質設計は様々な不純物を導入したモデルの第一原理計算を行い、構造安定性や熱電物性を比較するスクリ

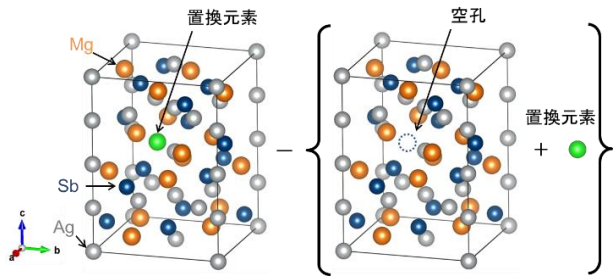


図5  $\alpha$ -MgAgSbの結晶構造と構造安定性パラメータ  $U_{stability}$ の評価指標の概念図

ーニング手法を採用した。本研究では室温でp型熱電特性を示す可能性が示されているMgAgSbを基本組成として選択した(図5)<sup>16)</sup>。MgAgSbは277°C以下で安定な $\alpha$ 相で熱電性能を示し、その結晶構造は空間群 $I4_2d$ の正方晶系である。不純物元素が導入される席(サイト)はMg,AgおよびSbの3つが考えられる。そこで、種々の不純物元素を $\alpha$ -MgAgSbの3つのサイトへ置換した計88モデルの電子状態を計算し、形成エネルギーの大きさから $\alpha$ 相としての構造安定性を評価した。評価指標である構造安定性パラメータ $U_{stability}$ は以下の計算式で表される(図5)。

$$U_{stability} = \{U_{substitution\_system} - (U_{defect\_system} + U_{isoatom})\} k_B^{-1} \quad (1)$$

ここで、 $U_{substitution\_system}$ は結晶構造中のMg,Ag,Sbのいずれかのサイトを他の元素で置換した場合の全エネルギー、 $U_{defect\_system}$ は上記の位置を空孔とした場合の全エネルギー、 $U_{isoatom}$ は置換元素単体の全エネルギーであり、 $k_B$ はボルツマン定数である。 $U_{stability}$ が負の値を示せば不純物元素を添加する前に比べてエネルギー的に安定な構造であり、半導体特性の制御に利用できることを示す。 $\alpha$ -MgAgSbの電子状態は24原子(Mg,Ag,Sb原子がそれぞれ8個)中に不純物原子または空孔を1個置換した場合(濃度~4.17%)の全エネルギーをOpenMXで求めた。計算条件は以下のとおりである。ポテンシャルはGGAを用いカットオフエネルギーは500Ry、k点メッシュは $4 \times 4 \times 5$ とした。不純物元素で置換したモデルは原子間に働く力が変わるため、結晶格子内の原子の安定位置を決定する必要がある。そのため原子座標と格子定数を変数とする格子緩和計算を行った。自己無撞着計算の収束閾値には全エネルギー $10^{-8}$ Hatreeを取り、準ニュートン法に基づいて原子にかかる力の最大値が $10^{-4}$ Hatree/Bohr以下になるまで格

子定数、原子座標の緩和を行った。

図6に不純物元素を置換した系の $U_{stability}$ の計算結果を示す。(a)は、Li,およびCaをMg位置に元素置換することで $U_{stability}$ が置換前よりも低い値を示す。これは、元素置換することでより安定な状態になることを示す。LiおよびCaは1価の原子であることから、正孔を放出

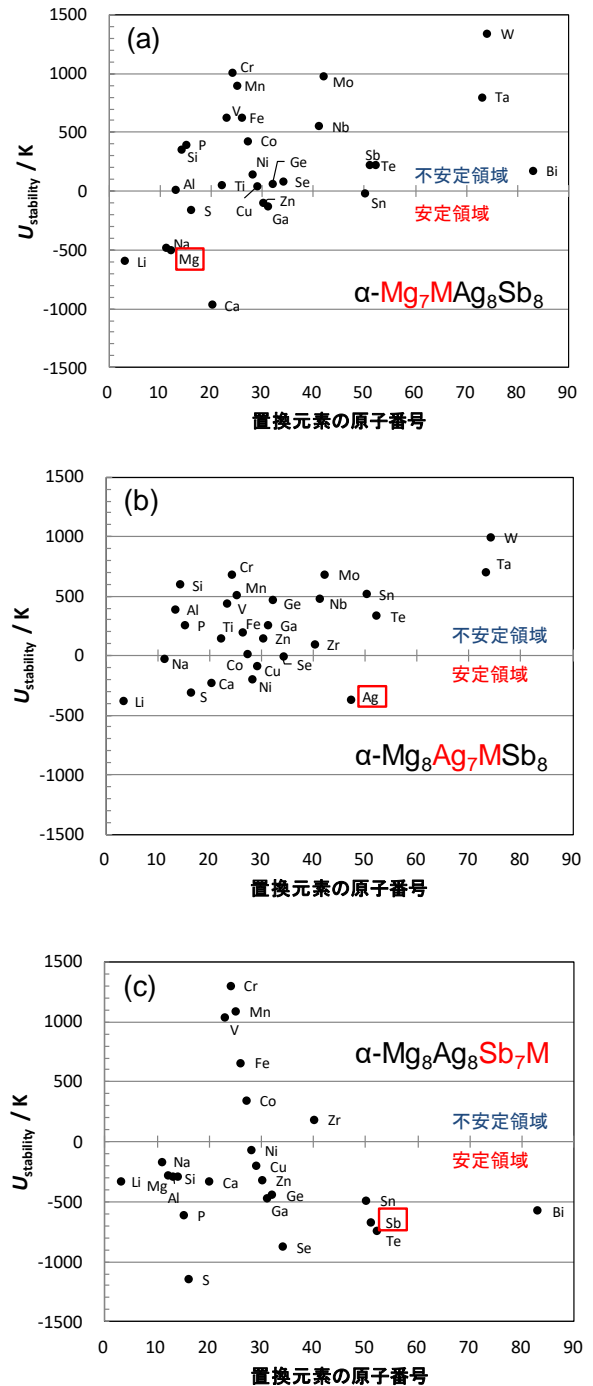


図6 各サイトの $U_{stability}$ の計算結果 (a)Mgサイト, (b)Agサイト, (c)Sbサイト

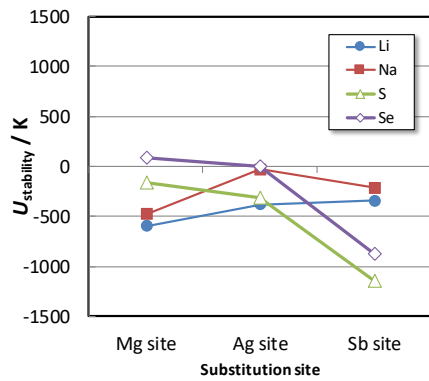


図7  $U_{stability}$ の不純物置換サイトの依存性

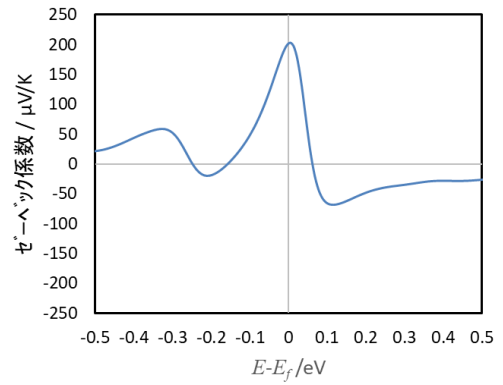


図9  $\alpha$ -MgAgSbのゼーベック係数

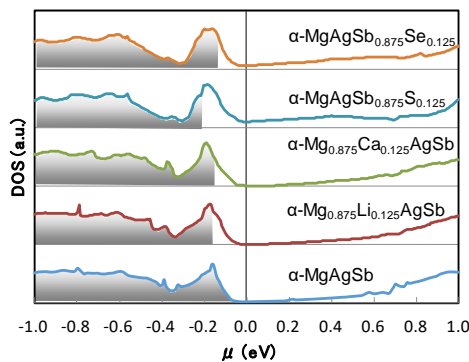


図8 不純物置換  $\alpha$ -MgAgSbの状態密度

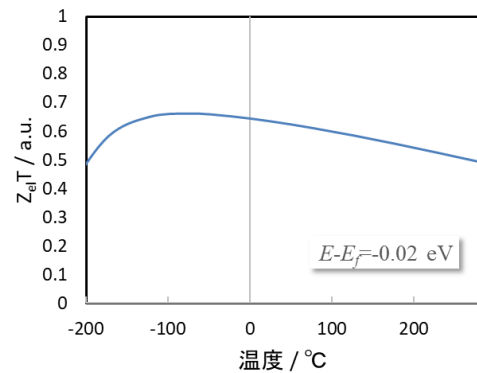


図10  $\alpha$ -MgAgSbのキャリア成分の無次元性能指数

してp型の半導体として機能することが期待される。(c)のSbサイトではS,Seの置換元素で安定性が高いことが分かった。一方で、(b)は置換前のAgに比べて安定な元素候補は存在せず、優先的な元素置換は困難であることが分かった。図7に $U_{stability}$ の置換サイトの依存性を示す。Li,NaおよびCaはMgサイトへ優先的に置換することでエネルギー的に安定となり、SやGeはSbサイトへ優先的に置換する傾向を示した。図8により安定な構造が期待される4元素(Li,Ca,S,Se)の状態密度(DOS)を化学両論組成とともに示す。不純物添加と化学両論組成のDOS形状は、差異が少なくリジッドバンド構造を示した。また、価電子帯中の塗りつぶした領域には電子が存在しており、フェルミエネルギーが価電子帯にある。このことから、不純物を置換することで価電子帯に空孔が形成され、p型半導体になると考えられる。図9にBoltzTraPより求めたゼーベック係数のキャリア濃度依存性(27°C)の計算結果を示す。ゼーベック係数は正の値を示し、キャリア制御により最高200  $\mu$  V/Kが得られた。図10に $Z_e T$ の温度依存性の計算結果を示す。無次元性能指数の計算には未知変数 $\tau$ を

含むため、熱伝導の格子の効果を含まない「理論的限界値」である $Z_e T$ が求まる。負の $U_{stability}$ を示す不純物の添加により比較的広い温度範囲で最大0.6程度のp型熱電材料が得られることが示された。

以上より、計算科学は熱電素子の材料開発における材料設計のツールとして有効であることが示唆された。

### 3. 熱電モジュール設計手法の開発

#### 3.1 近似解析手法による最適化

熱電モジュールは熱電材料を個片化した素子で構成され、複数のp型とn型の熱電素子を電極にて $\pi$ 型に連結した構造で構成される。その熱電変換特性はヨッフエ(Ioffe)の理論によるマクロな熱収支によって理解できることが知られており、熱電モジュールの設計に利用されている<sup>17)</sup>。本手法の利点は試作した熱電材料の3つの輸送係数である電気伝導率 $\sigma$  [S/m]、ゼーベック係数 $S$  [V/K]、熱伝導率 $\kappa$  [W/m/K]のみで設計が可能である。そこで、Ioffeの理論に基づく解析手法から素子の断面積と高さの最適比に関する設計を行った。以下に解析条件を示す。熱電モジュールの高温側(熱

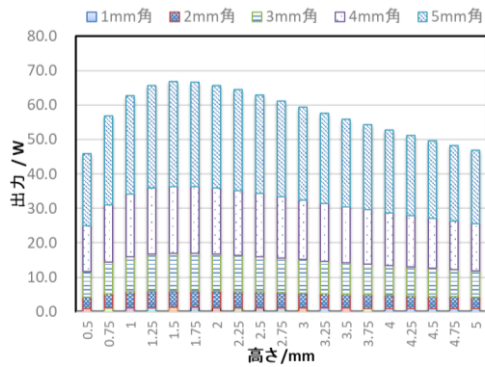


図11 数値解析を用いた素子寸法最適計算結果

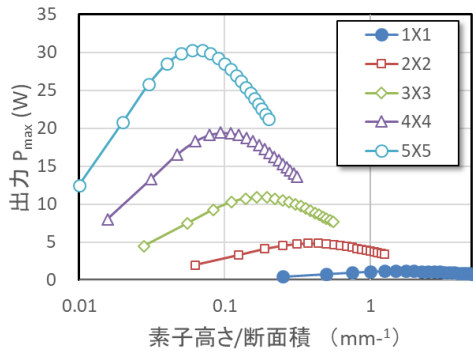


図12 数値解析を用いた素子寸法最適計算結果

源)の温度を $T_h$ 、低温側(廃熱)の温度を $T_c$ とし、素子の高温側と低温側の熱流密度をそれぞれ $Q_h$ 、 $Q_c$ とすると次のエネルギー保存則が成り立つ。

$$P = Q_h - Q_c \quad (2)$$

ここで $P$ は出力である。負荷抵抗を内部抵抗 $R$ とすることで最大出力が得られることから、最大出力 $P_{max}$ と最大変換効率 $\eta_{max}$ は以下の式で与えられる。

$$P_{max} = R \cdot I^2 = V_s^2 / 4R \quad (3)$$

$$\eta_{max} = P_{max} / Q_h = Q_h - Q_c / Q_h \quad (4)$$

断面積 $A$ で高さ $L$ の熱電素子が $N$ 個、 $p$ - $n$ 対が交互に電氣的に直列接続して熱的には並列に接続されているとき、全ゼーベック起電圧 $V_{ST}$ 、全発生最大電力を $P_T$ 、全内部抵抗(=負荷抵抗)を $R_T$ とすると、

$$V_{ST} = VS \quad (5)$$

$$P_T = AP_{max}, \quad A = A \cdot N \quad (6)$$

$$R_T = NR/A \quad (7)$$

となる。また、絶縁基板等の熱導体と各素子との間の単位断面積当たりの熱コンダクタンス( $K_h$ ,  $K_c$ )から熱流

連続の境界条件を用いることで熱電モジュールの発電量計算が可能である。しかしながら、実際の発電では素子内の温度差が大きく素子内パラメータを厳密に求める必要がある。そこで、近似解析を使って素子断面積と高さをパラメータとしたEXCELマクロを作成して数値解析を実施した。入力値は各温度における $p$ 型および $n$ 型のゼーベック係数、導電率および熱伝導率であり、EXCEL内で3次の多項式近似によるフィッティングから温度依存性パラメータを抽出した。また、素子両端の温度( $T_h, T_c$ )と $p$ - $n$ 対数( $N$ )を入力値として設定し、素子断面積と高さを関数とした最高出力を計算した。図11にPbTe系熱電材料の輸送係数<sup>17)</sup>を用いて $N=128$ で $T_h=300^\circ\text{C}$ ( $K_h=4 \times 10^3 \text{ W/m}^2/\text{K}$ )、 $T_c=30^\circ\text{C}$ ( $K_c=2 \times 10^4 \text{ W/m}^2/\text{K}$ )とした解析結果を示す。素子の高さが高くなるにつれて発電量が大きくなり、極大値をとる結果が得られた。これは、素子内に熱流が導入された際に生じる有効温度差が素子高さ1.5mmで最大になることで説明できる。また、1.5mm以上の高さでは内部抵抗増加によるジュール損失の効果が大きくなるため最高出力が低下する。図12に最高出力に対する素子の高さ/断面積の依存性を示す。ジュール損失は素子の形状に依存するため最大出力値は素子の断面積ごとに最適比が異なることがわかる。各素子の出力密度には大きな違いは認められないため、熱源面積に制限がない場合はより大きな断面積の素子を用いてモジュールを構成すると大きな出力が得られやすいことが示された。

以上より、近似解析を用いることで素子断面積と高さの最適比や素子寸法による発電量の予測が可能となった。

### 3. 2 有限要素解析による最適化

前述の近似解析手法は、素子への1次元熱流を仮定した計算でありモジュール面積には依らなかった。一方、実際の熱電モジュールでは素子の上下端をアルミナ等の絶縁基板を介して熱源と接触させるため、絶縁基板内の伝熱等も考慮した条件での解析が必要である。この場合、3次元の伝熱解析が可能な有限要素法(Finite Element Method: FEM)が有用となる。更に、伝熱と電気を関連付けて連成解析が可能なマルチフィジックスCAEを用いることで実際の熱電モジュール形状での発電特性が計算できる。そこで、マルチフィジックス解析ツールANSYS Mechanical Ver.19.2(アンシス・ジャパン(株))を使って熱電モジュールの素子形状の

表2 30×30mm熱電モジュールモデルの素子数

素子断面形状 (mm)	素子対数
1×1	200
2×2	72
3×3	32
4×4	18
5×5	8

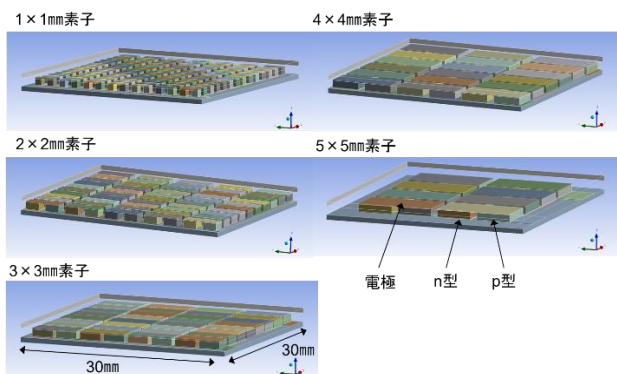


図13 FEM解析用3Dモデル

最適化を行った。各種熱源に対して均熱が得られる面積を前提条件とした。解析では30×30mmの絶縁基板上に素子を設置したモデルを作成した。図13に解析に用いた3Dモデルの一例を示す。素子断面は1×1mmから5×5mmまで1mm間隔で計5個を作成した。p-n素子のピッチ間隔は1mmとし、モジュール内のπ型素子はすべて直列接続とした。本条件で作成したモデルのp-n対数を表2に示す。FEM解析では電流と伝熱を直接連成して定常伝熱解析結果から熱電効果を解析することでモジュール内の電流分布を求めた。熱電材料の入力値は、各温度におけるp型およびn型のゼーベック係数、抵抗率および熱伝導率であり、ANSYS内で温度依存性パラ

熱解析結果(温度分布)

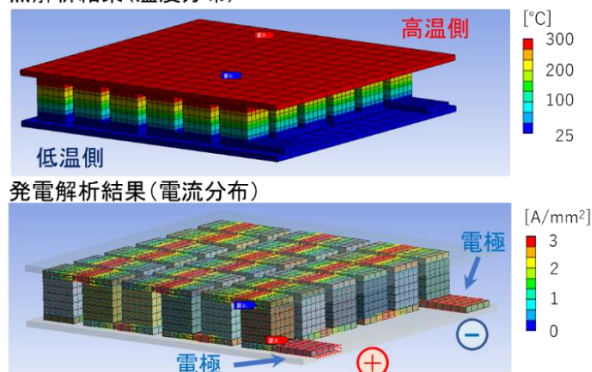


図14 FEM解析結果例 (4×4×4mm<sup>3</sup>素子)

表3 FEM解析で求めた30×30mm熱電モジュールの最高出力が得られる素子形状とその電流-電圧特性

素子形状 (mm)	$I_{Pmax}$ (A)	$V_{Pmax}$ (V)	$P_{max}$ (W)
1×1×1	1.6	3.2	5.12
2×2×1	5.4	1.5	8.1
3×3×1	10.8	0.9	9.8
4×4×1	15.1	0.5	7.7
5×5×1	17.8	0.2	4.4

メータが抽出される。解析ではPbTe系熱電材料の熱電特性を用いて熱電モジュールの両端に温度差 $T_h = 300^{\circ}C$ ,  $T_c = 30^{\circ}C$ を設定し、電極の両端を0Vに固定することでモジュール内の短絡時の電流密度分布から短絡電流( $I_{sc}$ )を求めた。また、電流の反対方向に電圧を印加することで熱電モジュールの電流-電圧特性を求めた。

モジュール内の温度分布と電流密度分布の解析結果例を図14に示す。熱電モジュール下端の高温部から低温部へかけて連続的に温度分布を示しており、高温部からの熱流が各素子内に均等に伝熱している。これに伴い発生した電流密度も均等に分布していることが明らかとなった。次に素子高さをパラメータ(1~6mm)としたFEMパラメトリック解析から素子高さの依存性を求めた。図15に解析結果を示す。最高出力は3×3×1mm素子の9.8Wであった。また、いずれの素子形状においても最高出力は高さ1mmの時が最も高かった。最高出力時の電流-電圧はモジュールの素子対数に依存する。表3に最高出力の電圧と電流値を示す。汎用的な電子機器を動作させる場合には2×2mm以下の素子断面積で構成して対数を多くする必要があることが示された。以上より、FEM解析から求めた30×30mm熱電モ

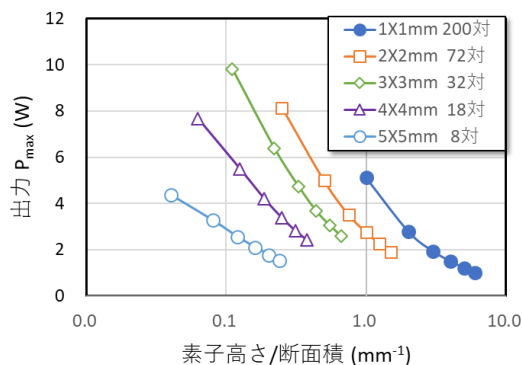


図15 30×30mm熱電モジュールのFEM解析結果

ジュールの最適素子形状は $3 \times 3 \times 1 \text{ mm}^3$ であり、素子高さ/断面積では約0.11であった。一方で発電エネルギーの利用用途の観点からは、汎用の二次電池の公称電圧(1.2V)と同様の $V_{Pmax}$ が得られる $2 \times 2 \times 1 \text{ mm}$ 素子が適応性の高いモジュールであることが示された。

廃熱発電への利用を検討する場合、変換効率も重要であるが廃熱源の温度や熱源規模に合わせて熱電モジュールの大きさにも最適値が存在する。この実用的な観点を考慮しつつ、熱電モジュールの素子寸法である断面積と高さの最適比や素子間ピッチの集積度といった用途に合わせた熱電モジュール設計を行う上でFEM解析は有効であると考えられる。

#### 4. 結 言

高性能熱電材料の素材探索と熱電モジュールの構造最適化を実現する熱電素子設計システムを構築した。熱電特性解析システムは、並列計算効率が高く不純物系の高負荷な材料系を複数計算させる場合において有効なシステムであることが明らかとなった。また、熱電モジュールの素子断面積や高さの最適化探索では近似解析による最適化手法にて所望の出力に要する素子数や出力見込みを効率よく求められることを明らかにした。更に、実環境に近い熱電モジュールの形状を考慮したFEMを実施した。伝熱-電気連成解析とパラメトリック解析とを連携した構造最適化は、出力を最大化する素子形状の設計に有効な手法であることが示唆された。今日ではクラウド型の高速計算環境が利用可能な状況となっており、熱電素子以外の材料開発においても計算科学による理論的裏付けに基づいた材料設計手法の利活用が期待される。

#### 謝 辞

本研究を遂行するに当たり、PCクラスタ環境構築に関するご助言を頂いた北陸先端科学技術大学院大学前園涼氏に感謝します。また、熱電素子設計の入出力支援GUI環境の構築と製品版への実装(Winmostar Ver.9)ご協力いただきました㈱クロスアビリティに謝意を表します。

#### 参考文献

- 1) 吉野睦, 仁科健. SQCとデジタルエンジニアリング. デンソーテクニカルレビュー. 2005, vol. 10, no. 1, p. 106-114.
- 2) 大富浩一, 羽藤武宏. IDCAEによるものづくりの革新, 東

- 芝レビュー. 2012, vol.67, no. 7, p. 7-10.
- 3) 木林靖忠. 電子デバイスへのペルチェ素子の応用. 株式会社KELK. <https://www.kelk.co.jp/useful/netsuden9.html>, (参照 2019-08-01).
- 4) 八馬弘邦, 村瀬隆浩, 後藤大輔, 藤本慎一, 牧野一也. 熱電発電技術と応用製品. KOMATSU TECHNICAL REPORT. 2018, vol.64, no.171, p. 47-53.
- 5) 堀康彦, 伊藤哲夫, 葛間泰邦. 熱電発電モジュールの形状が熱電発電ユニットの発電特性に与える影響. T. IEE Japan 1998, vol.118-B, no.7/8, p. 802-810.
- 6) 前園涼. 自作PCクラスタ超入門. 森北出版, 2017, 161 p.
- 7) T. Ozaki. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures. Phys. Rev. B. 2003, vol. 67, p. 155108.
- 8) G. K. H. Madsena and D. J. Singh, BoltzTraP. A code for calculating band-structure dependent quantities. Comput. Phys. Commun. 2006, vol. 175, p. 67-71.
- 9) 宮田全展. 第一原理電子状態計算による新奇硫化物熱電材料のマテリアルデザインと電子輸送現象の研究. 学位論文, <http://hdl.handle.net/10119/14833>, (参照 2017-9-22).
- 10) M. Miyata, T. Ozaki, T. Takeuchi, S. Nishino, M. Inukai, M. Koyano. Journal of Elec Materi. 2018, vol. 47, p. 3254-3259.
- 11) Paolo Giannozzi et. al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. J. Phys. Cond. Mat. 2009, Vol. 21, no. 39, 395502.
- 12) 株式会社ソフテック. 無償版コンパイラ PGI Community Edition 概要. PGI Compiler and Tools. [https://www.softek.co.jp/SPG/Pgi/pgi\\_community.html](https://www.softek.co.jp/SPG/Pgi/pgi_community.html), (参照 2019-08-01).
- 13) Intel. The Fastest and Most-Used Math Library for Intel®-Based Systems. Intel® Math Kernel Library. <https://software.intel.com/en-us/mkl>, (参照 2019-08-01).
- 14) Open MPI. A High Performance Message Passing Library. Open Source High Performance Computing. <https://www.openmpi.org/>, (参照 2019-08-01).
- 15) 飯田努, 平山尚美. マグネシウムシリサイド系熱電材料の実用化にむけた製造プロセス. までりあ. 2016, vol. 55, no. 7, p. 302-306.
- 16) Huaizhou Zhao, Jiehe Sui, Zhongjia Tang, Yucheng Lan, Qing Jie, Daniel Kraemer, Kenneth McEnaney, Arnold Guloy, Gang Chen, Zhifeng Ren. High thermoelectric performance of MgAgSb-based materials. Nano Energy. 2014, Vol. 7, p. 97-103.
- 17) 小川吉彦. 熱電変換システム設計のための解析. 森北出版, 1998, 532 p. 132-148.