

平成 30 年 5 月 11 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26246047

研究課題名(和文)トポロジー最適化に基づく熱電素子のナノ複合構造設計

研究課題名(英文)Structural design of thermoelectric nano-composite based on topology optimizaiton

研究代表者

泉井 一浩 (Izui, Kazuhiro)

京都大学・工学研究科・准教授

研究者番号：90314228

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 31,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、熱電素子のナノ構造に着目し、抜本的に高性能な素子材料を設計するための、構造最適化法の開発を行った。熱電素子のナノ複合構造の特性は格子振動(フォノン)と電子の挙動の両者に依存するため、その複雑な挙動を解明するための、ボルツマン輸送方程式に基づいた数値解析法の開発と、その数値解析法を利用した形状最適化法の開発を行った。これらの方法を用いることで、物理的、及び、数学的な根拠に基づいて最適なナノ複合構造の設計を行う可能性を示した。

研究成果の概要(英文)：In this research, structural optimization methods for nano-structure of thermoelectric material were developed in order to generate high-performance devices. Since the characteristics of thermoelectric material are determined by behavior of phonon and electron, we, first, developed numerical analysis methods based on Boltzman transportation equation. Next, we investigate the methodology to calculate the shape derivatives based on the adjoint method. Finally, we developed structural optimization method for the nano-structure of the thermoelectric materials.

研究分野：最適設計

キーワード：熱電素子 構造最適化 ナノ複合構造 フォノン 電子

## 1. 研究開始当初の背景

熱電素子は熱エネルギーと電気エネルギーを相互に変換することのできる素子であり、素子内に電流を流すと熱の移動が発生し、逆に、図1のように熱電素子の異なる部分に温度差を与えると電流を得ることができる。前者の効果はペルチェ効果といい、高機能な冷蔵庫や精密機器の温度制御機構として広く利用されている。後者の効果はゼーベック効果と呼ばれ、排熱エネルギー等を利用した発電など、熱機関全体のエネルギー効率を向上させることができる素子として期待されている。このような特性を持つ熱電素子は、エネルギー変換技術の一つとして大いに注目を浴びており、よりエネルギー変換効率の高い熱電素子の開発を目指した研究が活発に行われている。特に、近年では、製造技術の進展により、ナノ構造レベルでの材料設計を行うことで、素子の効率を大幅に向上させる方法が注目を集めている。

熱電素子材料のエネルギー変換効率を向上させるためには、ゼーベック係数と導電率が大きく、かつ、熱伝導率が小さくすることが理想である。しかし、このうち導電率と熱伝導率は両者とも材料内の自由電子の移動の振る舞い大きく依存する値であり、通常の金属では相互依存的特性を有しているため、導電率が高く、かつ、熱伝導率が小さい材料を開発することは非常に困難であると言われてきた。これに対して、熱電材料のナノ構造に着目し、半導体の異種の材料を効果的に並べ超格子構造を持たせることで、フォノンの散乱を誘起し、熱伝導率のみを低下させることが可能であることが近年わかってきており、今後さらに適切なナノ構造を持った高効率な熱電材料の開発が期待されている。しかし、現状ではこのような新しい熱電素子の開発は試行錯誤のプロセスにより行われ、多大なコストがかかる状況であり、最適な材料の配置方法は未だに明らかにされていない状況である。

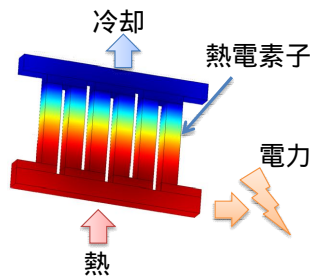


図1 熱電発電システムの模式図

## 2. 研究の目的

物理的な根拠と数理的な手続きに基づいて最適な物体構造を導き出す方法として、構造最適化法がある。この方法は自動車産業な

どの構造力学の分野で広く利用されるようになってきているが、この方法を構造力学の分野だけに留まらず新しい物理領域の問題に対して応用することで、高い性能を持った新しいデバイスの設計が可能となりつつある。研究代表者のグループではこれまで、構造最適化の方法論をコンプライアントメカニズムやセンサーなどの機能構造の創成設計や、流体や熱、電磁波等多くの設計領域に対して展開してきた。特に、熱電素子を用いた例としては、熱電素子の発熱と冷却機能による材料の膨張・収縮を利用した熱アクチュエータの設計法を構築している。構造最適化は、物理的な根拠に基づく数値的な反復計算により形状を決定していくため、設計者の経験と勘に基づく設計プロセスでは得ることが難しい複雑な形状をも導出することができ、極めて高い性能をもったデバイスを設計することが実現可能となっている。このような構造最適化の方法を、熱電素子材料のナノ複合構造の設計に展開し、異種材料の最適な配置を導出することにより、高いエネルギー変換効率をもった熱電材料を創り出すことが本研究の目的である。

## 3. 研究の方法

前述の通り、熱電素子のエネルギー変換効率特性は、導電率と熱伝導率におおきく依存するが、その特徴を決定づけるのは、格子振動（フォノン）と電子の挙動であるため、これらフォノンと電子の挙動の数値解析法を構築する必要がある。特にナノ複合構造の解析では、フォノンと電子は弾道的な挙動を示すため、マクロ的な数値解析法を用いることができない。本研究では、まず、熱電素子の熱伝導率に大きく影響を与えるフォノンの弾道的な挙動を解析するため、ボルツマン輸送方程式に基づいた数値解析法を構築した。ここではフォノンの存在確率を表した分布関数  $f$  は以下の時間発展方程式により表現される。

$$\frac{\partial f(t, x, \xi)}{\partial t} + \xi \cdot \nabla f(t, x, \xi) = -\frac{1}{\tau} (f - f^{\text{eq}}(\omega, T))$$

ここで、 $t$  は時刻、 $x$  は座標、 $\xi$  は速度、 $\tau$  は緩和時間、 $\omega$  は分散関係、 $T$  は温度を示している。

熱電素子のナノ複合構造の設計において、熱伝導率を最小化するためには、材料界面におけるフォノンの反射を利用することが効果的である。この材料界面におけるフォノンの反射を導入することが効果的である。ここでは、ボルツマン輸送方程式のモデルで、このような材料界面におけるフォノンの反射を表現するために、以下のような鏡面反射条件を設ける。

$$f_A(t, x, \xi) = \alpha f_B(t, x, \xi) - (1 - \alpha) f_A(t, x, \xi - 2(\xi \cdot n)n)$$

ここで、 $\alpha$  は、反射率を表す係数である。この鏡面反射条件を用いることで、図2のよう

に，異なる熱電材料の2相の温度の不連続性を数値解析モデルで表現できることを確認した．

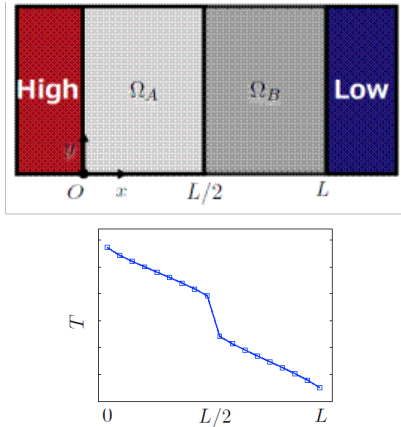


図2 2相の温度の不連続性

熱電素子のナノ複合構造の設計において，熱伝導率を最小化が望ましいが，より体系的な手法の構築のため，図3に示すような二相の熱電素子の一般的な協会条件のもとで，以下のような目的汎関数を考える．

$$\begin{aligned} \inf_{\Omega} J(\Omega) = & \int_0^{t_f} \int_{\Omega_0} j_0(T_i) dx dt + \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Omega_0} j_1(T_i, f_i) dx dk dt \\ & + \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Gamma_1} j_2(T_A, f_A) ds dk dt + \int_I \int_{D_\xi} \int_{\Gamma_2} j_3(T_B, f_B) ds dk dt \end{aligned}$$

ここで  $j_i$  は，各相の温度およびフォノンの分布関数の任意の関数である．なお，初期条件，境界条件は以下の通りである．

$$\int_{D_\xi} \hbar \omega \frac{f_i}{\tau} dk = \int_{D_\xi} \hbar \omega \frac{f_i^{\text{eq}}}{\tau} dk \quad \text{in } I \times \Omega_i$$

$$f_A = \alpha f_B + (1 - \alpha) \bar{f}_B \quad \text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi+}$$

$$f_B = \alpha f_A + (1 - \alpha) \bar{f}_A \quad \text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi-}$$

$$f_A = f_A^{\text{eq}}|_{T=T_1} \quad \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi+}$$

$$f_B = f_B^{\text{eq}}|_{T=T_2} \quad \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\xi+}$$

$$f_i|_{t=0} = f_0 \quad \text{in } \Omega_i \times D_\xi$$

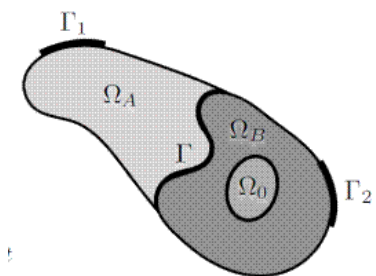


図3 2相熱電素子の境界条件

上式のように定義された目的汎関数に対し

て，構造最適化を行い，望ましい材料分布の最適解を得るためには，設計感度を求めることが最も重要な課題である．そこで，随伴変数法に基づく感度解析を実施した結果を以下で示す．

局所エネルギー保存則，上述の鏡面反射条件，熱浴の境界条件，フォノンの分布関数に関する初期条件のもとで，随伴場は以下の通り求めることがとなった．

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} + \xi \cdot \nabla p_i = \frac{1}{\tau} (p_i + \hbar \omega V_i) \quad \text{in } I \times \Omega_i \setminus \Omega_0 \times D_\xi$$

$$V_i = - \frac{\int_{D_\xi} p_i A dk}{\int_{D_\xi} \hbar \omega A dk} \quad \text{in } I \times \Omega_i \setminus \Omega_0$$

$$\frac{\partial p_B}{\partial t} + \xi \cdot \nabla p_B = \frac{1}{\tau} (p_B + \hbar \omega_0) + J'_{1,f} \quad \text{in } I \times \Omega_0 \times D_\xi$$

$$V_0 = \frac{1}{\int_{D_\xi} \hbar \omega A dk} \left( j'_{0,T} + \int_{D_\xi} j'_{1,T} dk - \int_{D_\xi} p_B A dk \right) \quad \text{in } I \times \Omega_0$$

$$p_A = - \frac{1}{\xi_x} \left( j'_{2,f} + \frac{\hbar \omega}{\tau} U_A \right) \quad U_A = \frac{\int_{D_\xi} j'_{2,T} dk}{\int_{D_\xi} \hbar \omega A dk} \quad \text{on } I \times \Gamma_1 \times D_{\xi-}$$

$$p_B = - \frac{1}{\xi_x} \left( j'_{3,f} + \frac{\hbar \omega}{\tau} U_B \right) \quad U_B = \frac{\int_{D_\xi} j'_{3,T} dk}{\int_{D_\xi} \hbar \omega A dk} \quad \text{on } I \times \Gamma_2 \times D_{\xi-}$$

$$p_A = \alpha p_B + (1 - \alpha) \bar{p}_A \quad p_B = \alpha p_A + (1 - \alpha) \bar{p}_B \quad \text{on } I \times \Gamma \times D_{\xi+}$$

$$p_i|_{t=0} = 0 \quad \text{in } \Omega_i \times D_\xi$$

この随伴場に基づけば，2相の境界の変動に関する感度は以下の式により求めることができる．

$$\begin{aligned} J' &= \frac{dJ}{d\Omega} = \frac{d\mathcal{L}}{d\Omega} \\ &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Omega} + \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{P}_j} \frac{\partial \bar{P}_j}{\partial \Omega} + \sum_j \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{Q}_j} \frac{\partial \bar{Q}_j}{\partial \Omega} \end{aligned}$$

#### 4. 研究成果

以上により導出した設計感度の妥当性の確認を行った．

まず，簡単な例として，領域全体の温度を最小化する目的汎関数を以下のように設定した．

$$J(\Omega) = \int_I \int_\Omega T_i dx dt$$

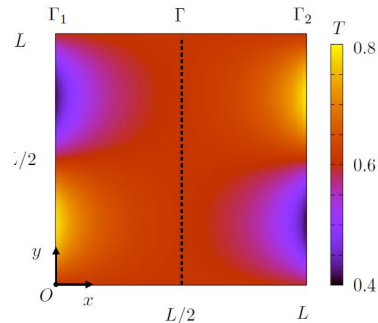


図4 温度最小化問題における温度分布設定

このとき，図4のように温度分布を設定し，このように設定された目的汎関数に基づいて，設計感度を上述の式に基づいて数値計算

により求めた。

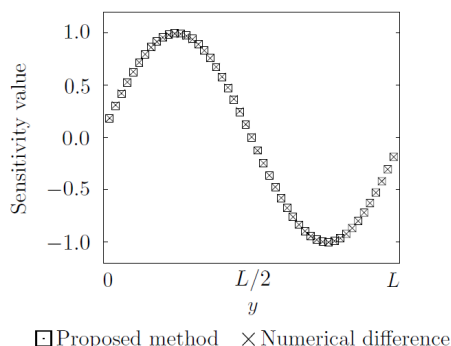


図5 差分法による感度との比較

求められた設計感度を差分法による感度と比較すると、図5のとおりとなった。随伴場に基づく準解析的な設計感度の導出法の精度が極めて高いことが示された。設計感度の数値をみても、境界が高温側に移動するほうが、領域全体の温度が減じるという結果を示しており、物理的にも妥当な結果であるといえることができる。

次に、領域の熱伝導率を以下のように定義して、左右両端の境界における温度差を目的関数として最大化することで、熱伝導率を最小化するとした定式化した場合について感度の検討を行った。このとき温度分布は図6の通り設定した。

$$\lambda_x = \frac{q_x}{\Delta T} = \int_{D_\epsilon} \hbar \omega f_i \xi_x dk \frac{L}{T_1 - T_2}$$

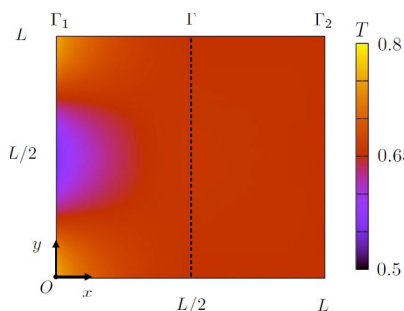


図6 熱伝導率最小化問題における温度分布設定

図7に随伴場解析を用いて計算した感度と、差分法により求めた感度との比較を示している。この問題においても感度はほぼ一致し、構築した方法により、高い精度で感度の計算が実施できることを示している。なお、右側の出口協会における熱流束の最小化としても熱伝導率最小化問題を定式化した場合についても、同様に精度の高い計算結果が得られた。

さらに、以上で述べた感度解析の方法を構造最適化に利用し、レベルセット法に基づいた形状最適化法として実装し、望ましい材料

配置が得られることを確認した。

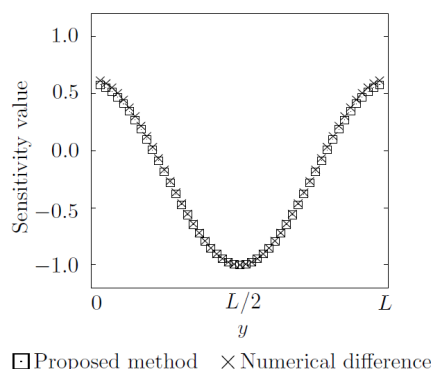


図7 差分法による感度との比較

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 3 件)

- [1] K. Furuta, K. Izui, K. Yaji, T. Yamada and S. Nishiwaki, Level Set-based Topology Optimization for the Design of a Peltier Effect Thermoelectric Actuator, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol.55, Issue 5, 2017, pp.1671-1683.
- [2] K. Furuta, A. Sato, K. Izui, M. Matsumoto, T. Yamada and S. Nishiwaki, Shape sensitivity for a two-phase heat conduction problem considering nanoscale effects, *Journal of Advanced Mechanical Design Systems and Manufacturing*, Vol.12, No.1, 2018, JAMDSM0003.
- [3] K. Furuta, A. Sato, K. Izui, T. Yamada, M. Matsumoto and S. Nishiwaki, Sensitivity analysis for energy minimization problems in phonon heat transfer systems, *Japan Society of Computational Methods in Engineering*, Vol.17, No.28-171215, 2017, pp.143-148. (IN JAPANESE)

〔学会発表〕(計 7 件)

- [1] S. Mukai, S. Seo, M. Matsumoto, Microscale Modeling of Energy Transport in Solids. Proceedings of the 5th International Symposium on Micro and Nano Technology (ISMNT5), May 18-20, 2015, Calgary, Paper S3-116.
- [2] S. Mukai, S. Seo, M. Matsumoto, BTE-Based Modelling of Phonon/Electron Transport, Proceedings of the First Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC2016), March 13-17, 2016, Hawaii, Paper 14638
- [3] K. Furuta, M. Orii, K. Izui, T. Yamada and S. Nishiwaki, Level set-based topology optimization for thermoelectric devices, *Asian Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization 2016*, 22-26, May, 2016, Nagasaki, Japan, 2A2-5.

[4] K. Furuta, K. Izui, M. Matsumoto, T. Yamada and S. Nishiwaki, Topology Optimization of Nanoscale Heat Conduction with the Boltzmann Transport Equation, *the 7th International Conference on Computational Methods*, 1-4, August, 2016, Berkeley, California, USA, Session 3B2.

[5] K. Furuta, A. Sato, K. Izui, M. Matsumoto, T. Yamada and S. Nishiwaki, Level set-based topology optimization for thermoelectric nanostructures considering the temperature discontinuity based on the Boltzmann transport equation, *12th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimisation*, 5-9, June, 2017, Braunschweig, Germany, No.294.

[6] K. Furuta, A. Sato, K. Izui, M. Matsumoto, T. Yamada and S. Nishiwaki, Shape sensitivity for thermal design problem based on the Boltzmann Transport Equation, *The 9th US and Japan Joint Seminar on Nanoscale Transport Phenomena*, 2-5, July, 2017, Tokyo, Japan, P-13.

[7] K. Furuta, A. Sato, K. Izui, T. Yamada, M. Matsumoto and S. Nishiwaki, Structural optimization for two-phase nanoscale heat conduction problems, *The 4th International Conference on Computational Design in Engineering*, 1-5, April, 2018, Changwon, Korea, M1606-3.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

特になし

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

泉井 一浩 (Izui, Kazuhiro)

京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻・准教授

研究者番号：90314228

### (2) 研究分担者

松本 充弘 (MATSUMOTO, Mitsuhiro)

京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻・准教授

研究者番号：10229578

山田 崇恭 (YAMADA, Takayuki)

京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻・准教授

研究者番号：30598222

西脇 眞二 (NISHIWAKI, Shinji)  
京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻・教授  
研究者番号：10346041