



Title	Theoretical and Experimental Study on Metal Hydrides as Thermoelectric Materials
Author(s)	Wang, Yunxia
Citation	大阪大学, 2019, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/73572">https://hdl.handle.net/11094/73572</a>
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

## Abstract of Thesis

Name ( Yunxia Wang )	
Title	Theoretical and Experimental Study on Metal Hydrides as Thermoelectric Materials (熱電材料としての金属水素化物の理論的及び実験的評価)
<p>Abstract of Thesis</p> <p>Thermoelectric (TE) technology which can convert heat to electricity directly. Its interest is increasing due to the problem of massive energy consumption and environmental pollution. Exploration of new materials with nontoxic and low-cost characters is an important way among various strategies for getting practically applicable TE materials. In this thesis, potential TE materials are explored and metal hydrides are focused as a totally new group materials which have never been studied in TE field.</p> <p>Chapter 1 showed the background and basic knowledge of TE technology firstly. Then the research progress of TE materials was described including the existing problems and challenges. The detailed purpose of this work was also presented.</p> <p>Chapter 2 addressed the methods used in the present work, including both the theoretical and experimental methods. The explanation of first principles calculation, density functional theory and exchange-correlation potentials related with present work were explained in this part. And the method on metal hydrogenation technique and related characterization methods of sample were introduced, too.</p> <p>Chapter 3 focused on the TE properties of semiconducting metal dihydride materials. The Seebeck coefficient, electrical conductivity, and thermal conductivity of hydrides <math>\text{MgH}_2</math>, <math>\text{CaH}_2</math> and <math>\text{YbH}_2</math> were investigated by first-principles calculation. The results of our study gave a support that the three binary hydrides could be potential thermoelectric materials with comparably promising electrical properties.</p> <p>Chapter 4 investigated the potential of ternary hydride materials <math>\text{Mg}_2\text{FeH}_6</math> and <math>\text{Mg}_2\text{RuH}_6</math> as TE materials with first principles calculation. The Seebeck coefficient, electrical conductivity, power factor and lattice thermal conductivity were obtained and analyzed. It's concluded that these two trihydrides could also be promising in TE filed due to the intrinsic maximum ZT around 0.12 and 0.14 and much higher ZT values were obtained when minimum thermal conductivity was applied.</p> <p>Chapter 5 mainly performed the experimental study of a potential dihydride <math>\text{YbH}_2</math>. The hydride materials <math>\text{YbH}_x</math> were fabricated successfully by a Sievert's method. As far as known, it's the first report on the experimental study of hydrides as TE materials. The parameters related with TE properties were obtained. The results proved that ytterbium hydride material might have various potentials as an innovative thermoelectric material.</p> <p>Chapter 6 concluded the all the above work and gave an outlook of future work for the study of hydrides materials as TE application.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( Yunxia Wang )			
論文審査担当者	(職) 氏 名		
	主 査	准教授	牟田 浩明
	副 査	教 授	北田 孝典
	副 査	教 授	佐藤 文信
	副 査	教 授	黒崎 健
<p>論文審査の結果の要旨</p> <p>熱電変換は熱エネルギーと電気エネルギーとの直接変換であり、昨今の環境・エネルギー問題への関心の高まりにより、近年注目されているエネルギー変換である。この実用化のためには、毒性が低くかつ安価な新規熱電材料の探索が必要である。本論文では、熱電分野においてこれまで全く検討されていなかった新しい材料群として、金属水素化物に着目している。</p> <p>第一章では研究背景と熱電技術の基礎について述べるとともに、熱電材料の開発の進展、また材料開発における諸問題についてまとめられており、最後に本論文の目的が示されている。</p> <p>第二章では本論文で用いられた理論的及び実験的手法について述べられている。第一原理計算に基づいた各種熱電特性の計算手法、水素化実験及び各種熱電特性の測定方法について記載されている。</p> <p>第三章では半導体的挙動を示す二元系金属水素化物に着目し、なかでも報告例が全くないアルカリ土類金属水素化物を中心に、理論的手法によるゼーベック係数、電気伝導率、熱伝導率の計算結果が示されている。結果よりMgH<sub>2</sub>、CaH<sub>2</sub>及びYbH<sub>2</sub>などが高い熱電性能を示しうることを明らかにしている。</p> <p>第四章においては対象を三元系金属水素化物に拡張し、なかでも有望と考えられた立方晶構造をもつMg<sub>2</sub>FeH<sub>6</sub>、Mg<sub>2</sub>RuH<sub>6</sub>についての理論的手法による各種熱電特性の計算結果がまとめられている。最低熱伝導率の推定をもとに、無次元性能指数zTがそれぞれ0.1を超え、有望な熱電材料となり得ることを明らかにしている。</p> <p>第五章ではYbH<sub>2-x</sub>についての実験的評価結果がまとめられている。ジーベルツ法によりバルク金属水素化物YbH<sub>2-x</sub>試料の合成に成功するとともに、初めてその熱電特性を実験的に明らかにしている。この結果から、金属水素化物が新しい熱電材料群としての可能性を持つことを示している。</p> <p>第六章は結論であり、これまでの成果が要約されているとともに、熱電材料としての金属水素化物の今後の展望が述べられている。</p> <p>以上のように、本論文は熱電分野における全く新しい材料群として金属水素化物に着目し、初めてその熱電特性を報告しており、この知見は熱電材料研究ひいては環境・エネルギー工学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。</p>			