

極性構造不安定性が生み出す特異な熱電現象

東京大学大学院工学系研究科

高橋英史

熱電変換材料は熱と電気を直接変換できるため、環境負荷の少ないエネルギー材料として注目されている。熱電効果の一つであるゼーベック効果の大きさ（ゼーベック係数）は、熱力学的な解析から、電子一つが運ぶエントロピー（自由度）の大きさに比例することが知られている。そのため、ゼーベック係数は固体が持つ多彩な自由度と関係する。特に、強相関電子系材料では、スピン・軌道自由度やそのゆらぎにより、1電子描像を用いたバンド理論では予想できない巨大なゼーベック係数が観測され、高効率熱電材料の候補物質として盛んに研究されている[1,2]。

一方で、固体が持つ他の自由度として、構造相転移を引き起こす結晶格子の自由度が存在する。中でも、強誘電相転移の場合には、結晶内部での電気双極子モーメント（極性）の自由度が重要な役割を果たす。最近、この強誘電相転移と似た、極性-非極性構造相転移を持つ金属材料 MoTe_2 （図1）において、構造相転移温度を化学置換や圧力印加により抑制した場合に、低温領域でのゼーベック係数の異常な増大が観測された（図2）。このゼーベック係数増大の起源として、臨界組点近傍における構造のゆらぎとの関連性が議論されている[3]。本講演では、化学置換や圧力により構造相転移温度を抑制した場合の熱電現象の変化と構造臨界点でのゼーベック係数の増大の起源について紹介する。さらに、 MoTe_2 では構造相転移臨界点近傍において Bi_2Te_3 の5倍以上の巨大な出力因子が観測される。そこで、この巨大な出力因子の起源とともに、構造不安定性を利用した高効率熱電材料の実現可能性についても議論する。

[1] I. Terasaki et al., Phys. Rev. B **56**, 12685(R) (1997).

[2] W. Koshibae et al., Phys. Rev. B **62**, 6869 (2000).

[3] H. Sakai et al., Sci. Adv. **2**, e1601378 (2016).

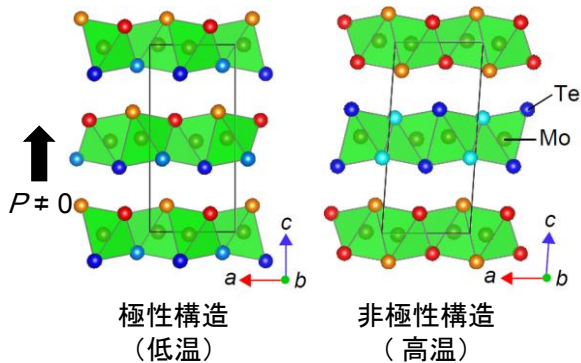


図1: MoTe_2 の結晶構造

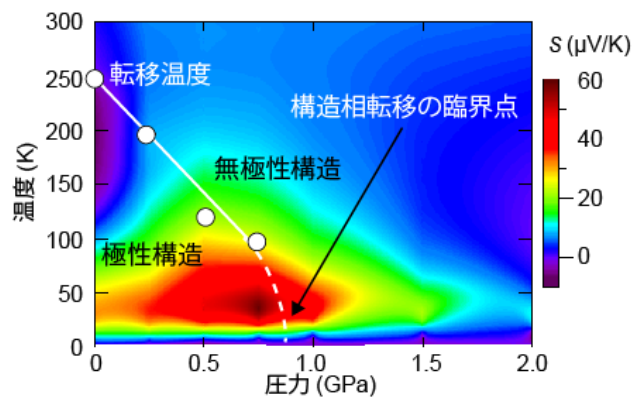


図2: 構造相図とゼーベック係数の圧力・温度依存性