

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 3 日現在

機関番号：32660

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26390007

研究課題名(和文) ナノ物質の新奇な光電・熱電効果の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study on novel photoelectric conversion and thermoelectric conversion in nano materials

研究代表者

小鍋 哲 (Konabe, Satoru)

東京理科大学・研究推進機構総合研究院・講師

研究者番号：40535506

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、低次元ナノ物質で顕在化する量子効果を利用し、新奇なエネルギー変換プロセスの物理機構の解明とそれを用いた高効率・高機能エネルギー変換材料の提案を目的とする。研究期間を通じて、当初の目的である低次元ナノ物質における新奇エネルギー変換(光電変換・熱電変換・圧電変換)について、多くの知見が得られた。基礎物性の解明により、数多くの論文発表や講演を行っただけでなく、実用化を見据え特許出願を行ったことは、ナノ物質を利用した新奇エネルギー変換技術の基盤構築に資する成果だと考えている。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this project is to study novel energy conversion processes with the use of quantum effects in low-dimensional nano materials and propose new materials with high-efficient and high-performance energy conversion. We clarified several new photoelectric, thermoelectric, and piezoelectric conversion processes. For these results, we published papers and provided invited talks. In addition, we applied for patents. These are important achievements for future energy-conversion technologies using nano-materials.

研究分野：物性理論

キーワード：光電変換 熱電変換 原子層材料

## 1. 研究開始当初の背景

エネルギー枯渇や地球温暖化などの環境問題を克服し、持続可能かつクリーンな社会の実現のためには、自然エネルギーや再生可能エネルギーの自給率向上が必要不可欠である。具体的な手段として、枯渇燃料の代替エネルギー源開拓やスマートテクノロジーとしてのエネルギーハーベスト技術の開発などがあるが、そのためには熱や光などの異なる形態の様々なエネルギー源を利用することとその高効率化が重要になる。しかし、代替エネルギーとして期待されている太陽光発電においては、既存の光電変換プロセスに基づく限り発電効率に理論的上限值(ショックレー・クワイサー限界)が存在することが知られている。一方、エネルギーハーベスト技術として代表的なものに熱電変換による発電があるが、重元素を用いていることやその発電変換効率が非常に小さいことから、極めて限られた状況を除いて実用化には至っていない。このようなエネルギー生成手段の原理的な困難を乗り越えるためには、基礎科学を規範として、これまでにない全く新しいエネルギー生成機構とそれらを実現する新奇材料を見出すことが強く望まれる。

## 2. 研究の目的

本研究では、低次元ナノ物質で顕在化する量子効果を積極的に活用した新奇なエネルギー変換プロセスの物理機構の解明とそれを実現する機能性ナノ材料の提案を目的とした。

特に、期間中(平成26年度～平成28年度の3年間)に次の3つの課題の遂行を計画した:

課題1: トポロジカル効果による新奇光電・熱電効果の理論構築

課題2: トポロジカル光電・熱電変換プロセスの開拓と応用に向けた特性評価

課題3: トポロジカル効果と多体効果を融合した新規エネルギー生成機構の解明

課題1、課題2、課題3の具体的な内容とどこまで明らかにするかを以下に記す。

課題1: トポロジカル効果による新奇光電・熱電効果の理論構築

量子力学的トポロジジーを利用した光電効果・熱電効果の一般論を展開し、これに基づくトポロジカル光熱電変換の基礎理論を構築する。量子力学的トポロジジーとして、具体的にはベリー曲率を考え、それを運動量空間における有効磁場と捉えることで光電変換と熱電変換を理論的に記述する。

課題2: トポロジカル光電・熱電変換プロセスの開拓と応用に向けた特性評価

課題1で得られた、トポロジカル光熱電効果の基礎理論を用いて、様々な該当物質(グラフェン、シリセン、トポロジカル絶縁体)にお

いて具体的に光電変換・熱電変換プロセスを調べ、物質固有の特性とともに、トポロジカル効果に基づくエネルギー変換の普遍的な特性を解明する。さらに、ここで得られた知見をもとに、高効率に光電変換・熱電変換が発現する材料を密度汎関数法に基づく非経験的第一原理計算や分子動力学法を用いて探索・デザインする。これにより、新たな物理原理に基づく光電・熱電変換プロセスの可能性を提示する。

課題3: トポロジカル効果と多体効果を融合した新規エネルギー生成機構の解明

低次元物質においては電子間相互作用に起因した多体効果が重要である。そこで、課題1、課題2により明らかになった量子力学的トポロジジー(ベリー曲率)に基づく光電・熱電効果に、電子間クーロン相互作用の効果を融合する。これにより、低次元ナノ物質に特有の量子効果を利用した光電・熱電変換プロセスを明らかにし、新規エネルギー生成の学理創出を目指す。

## 3. 研究の方法

本応募研究で実施する研究課題は、強束縛近似や有効質量近似などの経験的計算手法と密度汎関数法による非経験的計算手法に基づき理論計算を行う。期間内(3年間:平成26年度-平成28年度)に、低次元原子層物質で重要になる、量子力学的トポロジジーと電子間クーロン相互作用に基づく新たなエネルギー変換原理を開拓する。

## 4. 研究成果

当初の研究計画に概ね沿った成果を得ることができた。本研究期間における研究成果は以下の通りである。

・単層遷移金属ダイカルコゲナイドの熱電特性について理論的な研究を行った。その結果、外部磁場を印加することなくエネルギーバンドのバレー自由度に依存した大きなネルンスト効果(=バレーネルンスト効果)が生じることを予言した。これは物質のトポロジジーを利用した新奇熱電効果である。

・単層遷移金属ダイカルコゲナイドの光学応答について理論的な研究を行った。その結果、遷移金属ダイカルコゲナイドにおいては、トポロジジーに起因した選択則や光により生成された励起子間のクーロン相互作用が本質的であることを明らかにした。この結果は、光電変換を考える上で極めて重要な知見である。

・単層黒リン(フォスフォレン)の熱電特性について、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により調べた。その結果、フォスフォレンを10%程度引っ張ることにより熱電パワーファクターが伸張前に比べ150%も増大することを明らかにした。

・単層黒リンと同様に、多層黒リンの熱電特性について、密度汎関数理論に基づく第一原

理計算により調べた。その結果、多層においても引っ張りにより熱電特性が大幅に向上することが明らかになった。

・遷移金属ダイカルコゲナイドの圧電特性について、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により調べた。その結果、既存のバルク圧電材料に匹敵するような圧電特性を有することを明らかにした。

以上、いずれの結果も新奇エネルギー変換(光電変換・熱電変換・圧電変換)について多くの知見を与えるものである。基礎物性の解明により数多くの論文発表や招待講演を行っただけでなく、実用化を見据え特許出願も行ったことは、ナノ物質を利用した新奇エネルギー変換技術の基盤構築に資する成果だと考えられる。

#### 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10件)

(1) S. Konabe and T. Yamamoto: Valley photothermoelectric effects in transition metal dichalcogenides. *Physical Review B* 90: 075430-1-5, 2014.

(2) T. Yamamoto and S. Konabe: Thermal Transport and Thermoelectric Properties of Graphene and Related Materials. *Journal of the Vacuum Society of Japan* 57: 457-460, 2014.

(3) S. Konabe and S. Okada: Effect of Coulomb interactions on optical properties of monolayer transition metal dichalcogenides. *Physical Review B* 90: 155304-1-5, 2014.

(4) S. Konabe and T. Yamamoto: Significant enhancement of the thermoelectric performance of phosphorene through the application of tensile strain. *Applied Physics Express* 8: 015292-1-4, 2015.

(5) K. Takashima, S. Konabe and T. Yamamoto: Carrier localization length in edge-disordered graphene nanoribbons with sub-100 nm length. *Journal of Applied Physics* 119: 024301-1-7, 2016.

(6) S. Konabe: Screening effects due to carrier doping on valley relaxation in transition metal dichalcogenide monolayers. *Applied Physics Letters* 109: 073104-1-4, 2016

(7) S. Konabe, S. Kawabata, and T. Yamamoto: Thermoelectric properties of

bilayer phosphorene under tensile strain. *Surface and Interface Analysis* 48: 1231-1234, 2016

(8) K. Takashima, S. Konabe and T. Yamamoto: The Effect of Edge Disorder on Electronic Transport in Metallic Graphene Nanoribbons at Finite Temperatures. *Surface and Interface Analysis* 48: 1214-1216, 2016.

(9) K. Tada, T. Funatani, S. Konabe, K. Sasaoka, M. Ogawa, S. Souma, and T. Yamamoto: Modulations of thermal properties of graphene by strain-induced phonon engineering. *Japanese Journal of Applied Physics* 56: 025102-1-6 2016

(10) T. Izawa, K. Takashima, S. Konabe, and T. Yamamoto: Optimization of Thermoelectric Power Factor and Deviation from Mott's formula of Edge-disordered Semiconducting Graphene Nanoribbons. *Synthetic Metals* 225: 98-102 2017

[学会発表](計23件)

(1) S. Konabe: Theory of high efficient photo-electric conversion in carbon nanotubes. *IEEE International Nanoelectronics Conference (INEC2014)*, 2014年7月30日、北海道大学

(2) 小鍋哲、山本貴博: 遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレーネルンスト効果、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 7 日、中部大学

(3) 小鍋哲、岡田晋: 遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレー分極緩和の理論的研究、日本物理学会 2014 年秋季大会、2014 年 9 月 7 日、中部大学

(4) 小鍋哲、岡田晋: 遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレー分極緩和の理論的研究、第 48 回フラレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム、2015 年 2 月 23 日、東京大学

(5) 小鍋哲、加藤哲平、臼井信志、山本貴博: ナノカーボン薄膜および原子膜材料の熱電変換シミュレーション、第 52 回日本伝熱シンポジウム、2015 年 6 月 4 日、アクトシティ浜松コンgresセンター

(6) 小鍋哲、加藤哲平、山本貴博: 熱エネルギーハーベスティングのためのフレキシブル材料探索、高周波磁気調査専門委員会、2015 年 8 月 6 日、千代田区サニー貸会議室

(7) 小鍋哲、山本貴博：フォスフォレン(単層黒リン)熱電特性の引張制御による飛躍的向上、第12回日本熱電学会学術講演会、2015年9月8日、九州大学

(8) 小鍋哲：2次元原子層材料における新奇熱電物性の理論的研究、日本物理学会2015年秋季大会、2015年9月17日、関西大学

(9) 小鍋哲：原子層材料の第一原理熱電シミュレーション、第25回日本MRS年次大会、2015年12月8日、横浜市開港記念会館

(10) S. Konabe: Thermoelectric effects in atomically thin 2D materials, CEMS Topical Meeting on Emergent 2D Materials, 2015年12月12日、理化学研究所

(11) S. Konabe and T. Yamamoto: Theoretical study of the thermoelectric property of phosphorene under the tensile strain, Pacificchem2015, 2015年12月17日、ホノルル

(12) S. Konabe and T. Yamamoto: Strain Engineering for Thermoelectric Performance of Phosphorene, International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2016), 2016年1月19日、Kyoto Terrsa Conference Center

(13) 小鍋哲、山本貴博：単層遷移金属ダイカルコゲナイドにおけるバレーネルンスト効果、第53回日本伝熱シンポジウム、2016年5月25日、グランキューブ大阪

(14) 小林裕、吉田昭二、櫻田龍司、高島健悟、山本貴博、斉藤哲輝、小鍋哲、谷口尚、渡邊賢司、真庭豊、武内修、重川秀実、宮田耕充：WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> ヘテロ構造における一次元閉じ込めポテンシャルの形成、第51回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム、2016年9月7日、北海道

(15) 小鍋哲、山本貴博、川畑史郎：ワイル半金属の表面プラズモンポラリトンに関する理論的研究、日本物理学会2016年秋季大会、2016年9月13日、金沢大学

(16) 小林裕、吉田昭二、櫻田龍司、高島健悟、山本貴博、斉藤哲輝、小鍋哲、谷口尚、渡邊賢司、真庭豊、武内修、重川秀実、宮田耕充：WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> ヘテロ構造における一次元閉じ込めポテンシャルの形成、第77回応用物理学会秋季学術講演会、2016年9月13日、朱鷺メッセ

(17) S. Konabe, K. Tada, T. Funatani, K. Sasaoka, M. Ogawa, S. Souma, and T.

Yamamoto: Strain-Induced Modulation of Specific Heat of Graphene, 2016 MRS fall meeting, 2016年11月29日、Boston

(18) 小鍋哲、山本貴博：Piezoelectric properties of 3R bulk transition metal dichalcogenides、第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム、2016年3月2日、東京大学

(19) K. Ishizeki, K. Sasaoka, S. Konabe, S. Souma, and T. Yamamoto: Unified analysis of quantum and classical transport properties on metallic carbon nanotubes, 第52回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム、2016年3月2日、東京大学

(20) 小鍋哲、土川航太、山本貴博、川畑史郎：トポロジカル金属における表面プラズモンポラリトン、電気通信大学ナノトライボロジー研究センター開設シンポジウム、2017年3月8日、電気通信大学

(21) 小鍋哲、多田健人、船谷宣嗣、笹岡健二、小川真人、相馬聡文、山本貴博：引張によるグラフェンの熱特性変調、第64回応用物理学会春季学術講演会、2017年3月15日パシフィコ横浜

(22) 石関圭輔、笹岡健二、小鍋哲、相馬聡文、山本貴博：金属カーボンナノチューブの運動量緩和長と位相緩和長、日本物理学会第72回年次大会、2017年3月17日、大阪大学

(23) 小林裕、吉田昭二、櫻田龍司、高島健悟、山本貴博、斉藤哲輝、小鍋哲、谷口尚、渡邊賢司、真庭豊、武内修、重川秀実、宮田耕充：WS<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub> ヘテロ構造における一次元閉じ込めポテンシャルの形成、日本物理学会第72回年次大会、2017年3月18日、大阪大学

〔産業財産権〕

出願状況(計2件)

名称：光電変換素子、太陽電池及び光センサー

発明者：小鍋哲、岡田晋

権利者：小鍋哲、岡田晋

種類：特許

番号：2014-183372

出願年月日：2014年9月9日

国内外の別：国内

名称：半導体材料、導電性層にキャリアを生じさせる方法、及び熱電変換素子

発明者：山本貴博、中嶋宇史、阿武宏明、小鍋哲

権利者：山本貴博、中嶋宇史、阿武宏明、小鍋哲  
種類：特許  
番号：2015-205044  
出願年月日：2015年10月16日  
国内外の別：国内

〔その他〕

ホームページ等

<https://www.tus.ac.jp/ridai/doc/ji/RIJI/A01Detail.php?act=nam&kin=ken&diu=40d1>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

小鍋 哲 (KONABE, Satoru)  
東京理科大学・研究推進機構総合研究院・講師  
研究者番号：40535506

### (2) 研究分担者

山本 貴博 (YAMAMOTO, Takahiro)  
東京理科大学・工学部・准教授  
研究者番号：30408695

### (3) 連携研究者

竹延 大志 (TAKENOBU, Taishi)  
名古屋大学・工学部・教授  
研究者番号：70343035