課題番号 02207 / 補助事業番号 JPMXP0621467974

２０２２年度　各務記念材料技術研究所共同研究報告書

研究課題名	トポロジカル熱電変換材料の探索
重点課題	III-C 省エネルギー物性
新規・継続	継続
研究代表者氏名	フリガナ　スズキ　タケヒト 鈴木　健士
所属機関・部局・職名	東邦大学　理学部　講師

研究目的

線形分散したバンドの交差点をフェルミ準位近傍に持つトポロジカル半金属は、(1)電子移動度が高い事が多い事、及び(2)特徴的な分散関係に起因して強磁場中でも飽和しない熱電変換特性が理論的に予測されている事から、高効率の熱電変換材料の候補として興味を持たれている。しかしながら、現状では熱電変換効率の解明が進められた候補物質は少数に限定されており、より広範な物質探索と熱電変換特性の解明をする事が当該分野の発展に必要不可欠である。そこで、本研究では、電子バンド・格子構造の両観点から高効率変換特性が期待されるトポロジカル半金属を選択し、単結晶育成と輸送特性の測定を通じて熱電変換特性を明らかにする事を目的としている。

実験内容と研究成果

本研究では、熱電変換特性を明らかにするトポロジカル半金属として、三重縮退点を持つ三方晶 $PtBi_2$ を選択している。三重縮退点とは、非自明なトポロジーを有する線形分散バンドの交差点であるディラック点とワイル点の中間的状態として位置づけられる運動量空間の特徴的な点で、非縮退と 2 重縮退の線形バンドの交差から形成される。特に本研究対象の $PtBi_2$ は、他の典型的な三重縮退点候補物質と比べてフェルミ準位と三重縮退点のエネルギー差が小さい事が理論的に予測されており(代表的な三重縮退点物質 MoP ではエネルギー差が 1.4 eV あるのに対し、$PtBi_2$ ではフェルミ準位の 0.3 eV 上に三重縮退点が存在すると計算されている)、熱電特性を含む輸送特性に対する三重縮退の寄与を明らかにする上で $PtBi_2$ は望ましい系であると言える。本研究では、リジッドバンドモデルと価電子数え上げ則(valence electron count)に基づき、フェルミ準位と三重縮退点の更なる近接を図った化学置換系$(Pt_{1-x}Au_x)Bi_2$ (x = 0–0.3)の単結晶試料を金属フラックス法により育成し、電気抵抗測定を通じた基礎物性の評価を行った。その結果、Au 置換により残留抵抗比の減少(図 1)、磁気抵抗移動度の減少、及びホール抵抗率の変化(図 2)が観測され、定性的には Au 置換効果が観測された。熱電変換特性の測定については、既存の装置に独自の試料ホルダーを組合せ、低温領域の高精度測定に向けた装置改良を試みたが、動作不具合のトラブルが発生してしまい、現在原因究明の為の試験を行っている。

研究全体としては、熱電変換特性の測定については当初の計画から遅れが生じているものの、試料合成については、合成に成功した仕込み量 x の領域及び磁場下における電気抵抗率・ホール抵抗率による基礎物性評価は当初の計画通りの成果が得られた。今後は熱電変換特性装置の不良個所の改善ができ次第、育成した$(Pt_{1-x}Au_x)Bi_2$ の低温領域の熱起電力を測定し、三重縮退点に起因した熱電変換特性を明らかにする計画である。

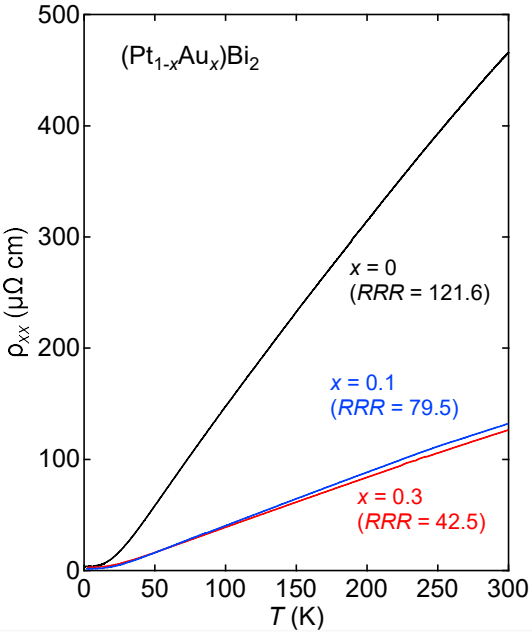

図 1. $(Pt_{1-x}Au_x)Bi_2$ の電気抵抗率

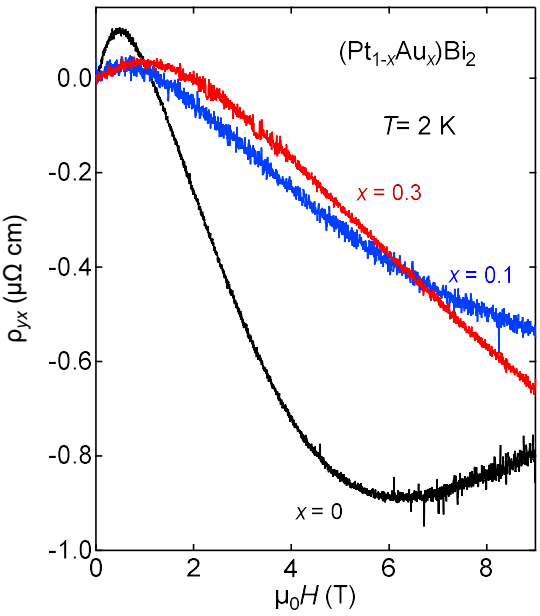

図 2. $(Pt_{1-x}Au_x)Bi_2$ のホール抵抗率

研究成果の公表状況（論文、国際・国内会議、学会発表、特許等の知財）

【研究会発表】

[1] 織田百合奈, 井上悠, 勝藤拓郎, 鈴木健士「三方晶 $PtBi_2$ における化学置換効果」2022 年度第 9 回 ZAIKEN festa, 2022 年 9 月

[2] Takehito Suzuki, Yurina Oda, Hisashi Inoue, Takuro Katsufuji “Chemical doping effect in a triply degenerate point candidate $PtBi_2$” The 21st Taiwan-Japan-Korea symposium on strongly correlated electron system (TJK21), April 2023 (scheduled).