

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		遷移金属超分子構造を用いた新奇熱電材料開拓			
研究テーマ (欧文) AZ		Investigation into new thermoelectric materials with the supramolecular structure of transition metals			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓)カハシ	名)ヒデフミ	研究期間 B	2015 ~ 2016 年
	漢字 CB	高橋	英史	報告年度 YR	2016 年
	ローマ字 CZ	Takahashi	Hidefumi	研究機関名	東京大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		東京大学大学院工学系研究科 特任助教			
<p>概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)</p> <p>本研究では、遷移金属化合物中の遷移金属が多量体化した場合に作る分子軌道に起因した特異な物性、特に熱電物性について研究した。高効率な熱電材料の設計指針とし近年、遷移金属化合物を用い遷移金属中の電子のスピンや軌道自由度を利用した方法の有用性が指摘されている。しかし、遷移金属1個の持つスピン・軌道自由度には限界がある。そこで、遷移金属多量体構造を利用し、多量体化に起因した分子軌道の自由度や、原子間のボンド形成に起因した構造の自由度を利用した新たな熱電材料の開発を試みた。</p> <p>本研究では、層状遷移金属カルコゲナイド化合物 MoTe_2 を用い研究を行った。この物質は遷移金属の Mo が1次元的に強く結合した1次元鎖構造を持つ。さらに MoTe_2 では、高温の無極性構造から低温の極性構造へ相転移することが知られている。そして、Mo を Nb に置換すると、この相転移が抑制され、それに伴い低温で熱電性能が向上することが知られている。そこで本研究者は、MoTe_2 の構造相転移を元素置換ではなく圧力で制御した場合に同様の熱電性能の向上が見られるかどうか、さらに、構造の不安定性に起因した新奇物性の探査を行った。</p> <p>MoTe_2 の高純度単結晶を用い、ピストンシリンダー型圧力セルにより 2GPa までの高圧測定を行った結果、極性 - 非極性構造相転移温度が減少し、それに伴いゼーベック係数が増大した。特に構造相転移が消失する臨界圧力でゼーベック係数が最大値を持つことを明らかにした。一方で、電気抵抗率は圧力を加えても変化しないため、熱電性能の指標である出力因子が一般的な熱電材料の6倍と巨大な値を持つことを発見した。この巨大な出力因子の起源として、1次元鎖を持つ MoTe_2 の構造自由度(構造不安定性)が関係していることが示唆される。さらに本研究者らは、構造変化に伴い超伝導転移温度が10倍以上増大することを発見しており、構造自由度と超伝導転移温度にも密接な関係があることを見出した。</p>					
キーワード FA	熱電変換	遷移金属化合物	分子軌道	超伝導	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Anticorrelation between polar lattice instability and superconductivity in the Weyl semimetal candidate MoTe ₂							
	著者名 ^{GA}	H. Takahashi, T. Akiba, K. Imura, T. Shiino, K. Deguchi, N. K. Sato, H. Sakai, M. S. Bahramy, and S. Ishiwata	雑誌名 ^{GC}	Physical Review B (Rapid Communication)					
	ページ ^{GF}	100501 (R)-1~100501 (R)-5	発行年 ^{GE}	2	0	1	7	巻号 ^{GD}	95
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名						
	ページ ^{GF}	~	発行年					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名						
	ページ ^{GF}	~	発行年					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年					総ページ ^{HE}	

欧文概要 ^{EZ}

We have investigated new thermoelectric materials with the supramolecular structure of transition metals. An important factor to improve the thermoelectric efficiency is spin and orbital degrees of freedoms inherent in localized electrons in the transition metals. However, the spin-orbital degrees of freedoms involved in an electron of the transition metals are limited. On the other hand, when the transition metals form molecular orbitals due to the strong metal-metal bonding, these orbitals possibly have high spin-orbital degrees of freedoms, which may lead to the high thermoelectric efficiency. In addition, the compounds with the strong metal-metal bonding have structural instabilities, structural degrees of freedoms, inherent in the formation of the bonding, which may also enhance the thermoelectric efficiency.

In this study, we have measured the thermoelectric and physical transport properties of the layered transition metal dichalcogenide MoTe₂, which has one dimensional Mo-Mo chains. To be noted here is that MoTe₂ shows a transition from a high-temperature nonpolar structure to a low-temperature polar structure, which can be suppressed by external pressure or chemical pressure.

Here, to clarify the relation between the polar-phase instability and thermoelectric properties, we have measured the resistivity ρ and thermopower S as a function of the external pressure. The application of the pressure significantly enhances S at the critical pressure where T_s becomes zero, while the resistivity is almost independent of the pressure. From these results, we find that MoTe₂ has a giant power factor, which is 6 times larger than that of the conventional thermoelectric material Bi₂Te₃. This study suggests that the polar lattice instability plays an important role on the anomalous enhancement of S , possibly resulting in the unusually high thermoelectric efficiency. In addition, we have found that the superconducting transition temperature increases by a factor of more than 20 with replacing the polar phase by the nonpolar phase, suggesting that the polar structural instability influences the superconducting transition temperature.