

グラフェン/h-BN 複合ナノリボンのゼーベック係数

Seebeck coefficients of graphene/h-BN nano-composites

電通大院先進理工¹, JST-CREST² ◯綾子 陽介^{1,2}, 赤石 暁^{1,2}, 中村 淳^{1,2}

Department of Engineering Science, The Univ. of Electro-Communications (UEC-Tokyo)¹

Japan Science and Technology Agency (JST), CREST²

◯Yosuke Ayako^{1,2}, Akira Akaishi^{1,2}, and Jun Nakamura^{1,2}

E-mail: ayako@natori.ee.uec.ac.jp

近年、熱電変換素子に使われる新たな熱電材料の研究が盛んに進められている。特に、グラフェンを短冊状に切り裂いた構造を持つグラフェンナノリボン(GNRs)と呼ばれる一次元物質が、安価でクリーンな熱電材料候補として注目されている。GNRs はエッジの形状の違いにより Zigzag 型・Armchair 型という 2 種類に分けられ、それぞれ異なる電子状態をもつことが知られている[1]。このうち特に Armchair-GNRs が高い熱電変換性能を示すことが理論的に示されている[2]。

ごく最近、我々は GNRs と BN ナノリボン(BNNRs)を組み合わせた超格子構造が巨大なゼーベック係数を示すことを第一原理計算によって明らかにした[3]。この超格子モデルにおいては、Zigzag-GNRs がもつ縮退したフラットバンドが GNRs-BNNRs 間の内部電界により有限のエネルギーギャップを持つようになるため、カウンターキャリアの相殺が抑制される[4]ことでゼーベック係数が大幅に増加する。本研究では、超格子構造よりも実験的に容易に作製できるグラフェン/h-BN 複合ナノリボン(図 1)を提案し、そのゼーベック係数を評価することを目的とする。

本研究では、計算モデルの GNRs と BNNRs のダイマー列数を、それぞれ整数 n, m を用いて表し、 $n, m = 2 \sim 6$ のモデルについて計算を行った。電子状態は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により求めた。擬ポテンシャルにはウルトラソフト擬ポテンシャルを用いた。交換相関項として一般化勾配近似(GGA)を用いた。波動関数は平面波で展開し、運動エネルギーのカットオフ値を 400eV とした。第一原理バンド計算の結果を用いて、半古典的 Boltzmann 輸送理論に基づく計算により、各モデルにおけるゼーベック係数を求めた。

図 2 は、Zigzag・Armchair グラフェン/h-BN 複合ナノリボンのゼーベック係数を化学ポテンシャルの関数として示したものである。Zigzag モデルではバンド端においてプリン型バンドが発現し、エネルギーギャップは GNRs 幅が長くなるにつれて減少した。また、ゼーベック係数の最大値はグラフェンや Zigzag-GNRs よりも大きくなり、GNRs 幅が長くなるにつれてゼーベック係数は減少した。一方 Armchair モデルでは、プリン型バンドは存在せず、BN 複合化によるゼーベック係数の増大が起こらないことがわかった。

[1]K. Nakada and M. Fujita, Phys. Rev. B **54**, 17954 (2013).

[2]H. Zheng *et al.*, Appl. Phys. Lett. **100**, 093104 (2012).

[3]Y. Yokomizo and J. Nakamura, Appl. Phys. Lett. **103**, 113901 (2013).

[4]K. Kuroki and R. Arita, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 083707 (2007).

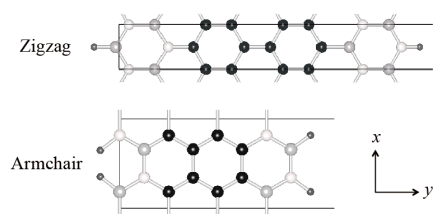


図 1 $n4m4$ グラフェン/h-BN 複合ナノリボンの構造
x 方向がリボン長手方向
黒：炭素、白：窒素、
大灰色：ホウ素、小灰色：水素

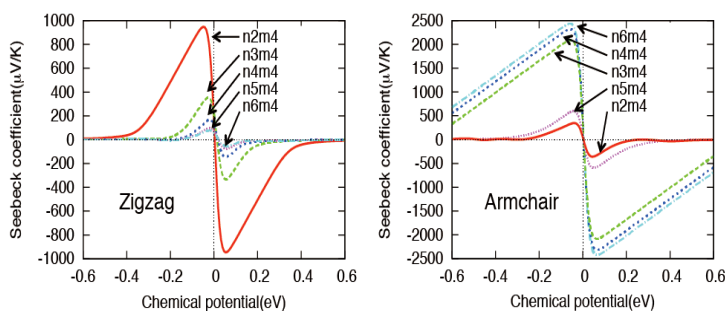


図 2 グラフェン/h-BN 複合ナノリボンにおけるゼーベック係数と化学ポテンシャルの関係