

ナノ構造制御によるグラフェンナノリボンの熱電性能の最適化

Edge-Disorder-Induced Optimization of Thermoelectric Performance of Finite-Length Graphene Nanoribbons

東理大工 ^{○(M2)}井澤 哲美, 高島 健悟, 山本 貴博

Tokyo Univ. of Science, [○]Tetsumi Izawa, Kengo Takashima, Takahiro Yamamoto

E-mail: takahiro@rs.tus.ac.jp

緒言

熱電材料は温度差を電力に変換することができ、エネルギー問題の解決策として期待されている。中でもグラフェンナノリボン(GNR)は、炭素原子から成る無毒・フレキシブルな物質のため、ウェアラブルデバイスやセンサの電源として注目されている。GNR の出力は高いが、同時に熱伝導率も高いため発電効率は低い^{1, 2)}。端に欠陥が入ると熱伝導率は大幅に低減することが知られているが³⁾、出力の端欠陥濃度依存性はどうかよく分かっていない。

そこで我々は、様々な端欠陥濃度 C_d をもつ GNR の電力指数 PF を理論的に計算し、 PF の C_d 依存性を調べた。

シミュレーション方法

端構造に欠陥をもつ GNR は、幅 1.78nm、長さ 8.7~296.7nm のジグザグ型 GNR(ZGNR)端原子の過剰・欠損で表現した。 C_d は(炭素原子の過剰・欠損数)/(端の炭素原子数)とした。

PF の算出に必要な電子透過率は、強束縛法および非平衡グリーン関数により計算した。 PF 算出における温度は室温(300K)とした。

結果と考察

図1は化学ポテンシャル0eVにおける ZGNR の PF の GNR 長依存性を、 C_d ごとに示している。 C_d が高くて、高性能熱電材料の PF の目安である $1\text{mW}/(\text{m K}^2)$ を裕に超えていることが分かる。この結果は、熱伝導率低減のために端欠陥を導入しても、高い熱電性能を維持できる

ことを示唆している。

さらに、 $C_d = 10 \cdot 15 \cdot 20\%$ では、GNR 長に対し PF が最大値をもつ。この結果は、各 C_d に対して最大 PF を示す最適な GNR 長が存在することを表している。

PF の最大値と先行研究³⁾の熱伝導率から性能指数 ZT を推定すると最大 2.8 程度であり、熱電材料の目標値である 2~3 に達する⁴⁾。

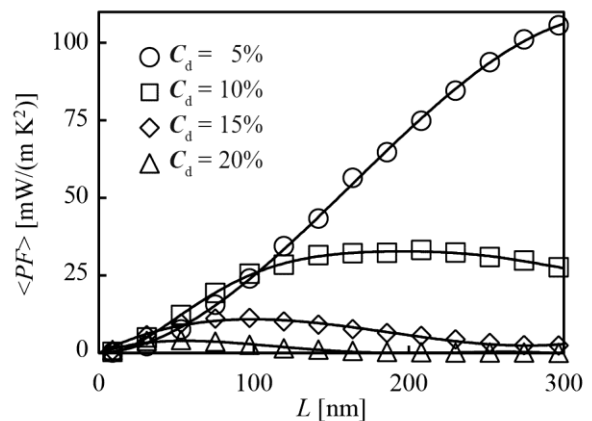


Fig. 1 Length dependence of $\langle PF \rangle$ ⁵⁾

結言

本研究では、GNR 端に原子レベルの欠陥を入れることによって熱電性能を最適化できることを発見し、高出力グラフェン熱電素子の設計指針を与えた。

- 1) J. Hu, X. Ruan and Y. P. Chen: *Nano Lett.* **9**, 2730 (2009).
- 2) M. Morooka, T. Yamamoto and K. Watanabe: *Phys. Rev. B* **77**, 033412 (2008).
- 3) H. Karamitaheri, M. Pourfath, H. Kosina and N. Neophytou: *Phys. Rev. B* **91**, 165410 (2015).
- 4) 井澤哲美, 高島健悟, 山本貴博: 表面科学 (掲載決定)
- 5) T. Izawa, K. Takashima and T. Yamamoto: *Surface and Interface Analysis* (Accepted).