

はじめに

本書は、熱電変換、特に熱電材料の研究に参入しようとする非専門家のための初等的教科書である。物理学科3年生程度の標準的な熱力学、統計力学、電磁気学、量子力学の履修を前提にしているが、内容に関連する重要な項目は文中で説明を加えている。

熱電変換という技術は、ゼーベックが棒状の金属に温度差を与えたときに電圧が生じることを見出した1821年に始まり、すでに1世紀を超える歴史を持つ。代表的なビスマス・テルル系半導体が発見されてからでも半世紀を超える。この間に多くの教科書や専門書が出版されているにも関わらず、ここに新たに一冊の本を世に出すことに決めたのにはいくつか理由がある。

現代科学技術は異様ともいえるほど細分化・専門化されており、熱電変換も例外ではない。熱電変換は物理、化学、材料、電気、機械など多くの分野を横断する学際分野であり、どの分野においても体系化された学習機会がない。加えて、研究に求められる成果とスピードが年々厳しくなり、研究室の研究代表者たちには若手の成長をゆっくり待ってられないという事情がある。結果として、初学者は断片的な知識を手っ取り早く寄せ集め、体系としてその分野の研究を学ぶ余裕がない。すべての分野の体系を記述することは、著者の力量をはるかに超えるが、熱電変換を支える物性物理学に重心をおいた体系を、初学者に伝えることならばできるかもしれないと考えた。これが第一の理由である。

著者は、物理学科の学生に限っても、固体物理学の基本的な概念に対する理解度が年々落ちていくように感じている。固体物理学は他の物理学の分野にはない特殊な概念を数多く必要とする。特に、波数空間やブリルアンゾーンに代表される、周期結晶独特の舞台設定が初学者にとっての大きな障害である。やっかいなことに、固体中の電子は結晶全体に量子力学的波動として広がった状態を基底状態として持つために、波数空間でのイメージなしに理解することはできない。とはいえ、我々は実空間に生きているのであり、実空間のフーリエ変換先である波数空間にはなじみはない。そこで、波数空間の直観的説明や実空間からの自然な拡張を盛り込んで固体の輸送現象を初歩から記述できないかと考えた。これが第二の理由である。

iv はじめに

熱電変換の研究は 90 年代に質的な転換を遂げる。銅酸化物高温超伝導の発見以降、新物質の開発とそこから切り拓かれる新しい物性物理が固体物性研究の駆動力となったが、熱電変換の世界も例外ではない。フォノングラス、ラットリング、電子相関、ナノ構造といった新しい概念が次々と提案され、研究は大きく発展し、いまま発展しつつある。こうした状況を反映して多くの専門書・教科書が執筆されたが、それらは 10 名以上の著者による共著であり、最先端の様々な成果を素早く正確に得られる反面、基礎から体系的に学ぶには向いていない。著者は 90 年代にこの研究分野に参入し、熱電変換研究の発展をリアルタイムに見てきた。こうした経験を基にして著者の目から見た熱電変換研究の世界観を伝えることは意味があるのではないかと考えた。これが第三の理由である。

本書は、物理学科、化学科、材料工学科、電子工学科などの、熱電材料の研究を専門とする研究室の卒研究生を念頭に書いた。そのため、式変形やイメージ図をやや過剰に盛り込んだつもりである。非専門家が表記で混乱しないように、ベクトルは太字の斜体で、行列や量子力学演算子を上付きハットで表した。変数の引数は $f(\mathbf{k})$ のように、かならずカッコで囲んで示し、下付き表記 f_k を可能な限り避けた。また、第 2 量子化(場の理論)を用いた解説は、本書の守備範囲を超えると考え、思い切って省略した。数学的煩雑さを避けるため、基礎的な議論は可能な限り 1 次元の問題として論じている。そのため、ホール効果に代表される磁場効果については触れていない。全編を通して固体物理学の履修は前提にせず、電磁気学は SI 単位系を用いた記述を心がけた。

本書の構成は以下のとおりである。まず第 1 章では、熱電変換というエネルギー変換技術を紹介し、その長所や短所について簡潔に述べる。第 2 章では、熱電変換素子のマクロな動作原理を熱力学を復習しながら述べ、材料のミクロなパラメーターとの関連を明らかにする。熱電材料の重要なパラメーターである性能指数をここで導入する。第 3 章、第 4 章は物性物理学の基礎であり、それぞれ電子とフォノンの伝導現象について一般論を簡潔にまとめている。固体物理学を学んだ読者は読み飛ばしても構わない。第 5 章は、第 3, 4 章の結果を基にして、熱電材料の設計指針を解説している。ここではいわゆる半導体物理学、つまりバンド理論と一体近似の下で、性能指数がどのように最大化できるかを論じる。第 6 章以降は具体的な材料の各論であり、第 6 章で熱電半導体、第 7 章で非従来型材料を論じている。第 7 章は著者の専門でもあり、やや詳細な解説を試みる。この章の内容については、他に適当な良書がないためである。最後の第 8 章ではナノ構造化された熱電材料を解説する。

はじめに v

本書の試みがどれくらい成功しているかは読者の判断を待つしかない。本書に書かれた内容は多くの共同研究者のみなさんとの議論に依拠するが、誤った記述の責任はすべて著者にある。

本書の執筆を勧めてくださった監修の先生方、特に勝藤拓郎先生には深く感謝したい。

2017年8月

著 者