

Bi ナノワイヤーの結晶方向が輸送特性に及ぼす影響

Numerical analysis of effect of crystal orientation on transport properties in a Bi nanowire

茨城大学¹, 埼玉大学² ○内田仁志¹, 青天目悠太¹, 小峰啓史¹, 青野友祐¹, 村田正行², 長谷川靖洋²Ibaraki Univ.¹, Saitama Univ.² ○Hitoshi Uchida¹, Yuta Nabatame¹, Takashi Komine¹,Tomosuke Aono¹, Masayuki Murata², Yasuhiro Hasegawa²

E-mail : 13nm656r@hcs.ibaraki.ac.jp

【はじめに】

ビスマス及びその化合物は優れた熱電材料の候補として研究されており, ビスマスをナノワイヤーにすることで, 熱電性能が飛躍的に向上することが理論的に示唆されている⁽¹⁾. 我々は以前にナノワイヤーの表面状態が輸送特性に及ぼす影響を数値解析で調べたところ, ワイヤー長手方向に Trigonal 軸が向いているビスマスナノワイヤーにおいて, 負の表面ポテンシャルがゼーベック係数を向上させることを明らかにした⁽²⁾. しかし, 異なる結晶方向において表面状態が輸送特性に及ぼす影響は明らかではない. 本研究では, ワイヤー長手方向の結晶方向が Bi ナノワイヤーの輸送特性に及ぼす影響を解析した.

【計算方法】

結晶方向を考慮した表面ポテンシャルの影響を見積もるために, 電子及びホールの有効質量方程式を数値的に解き, ナノワイヤーの電子状態を求めた. ゼーベック係数 α は, 定緩和時間近似したボルツマン方程式を用いて求めた. 放物型の表面ポテンシャルを考慮した計算モデルを図 1 に示す⁽²⁾. ここで, δ は表皮深さ, V_0 はナノワイヤー最表面での表面ポテンシャルの大きさ, d はナノワイヤーの直径を表す. 本研究では, ワイヤー径 $d = 20$ nm, 表皮深さ $\delta = 5$ nm, 温度 $T = 77$ K として結晶方向を変化させて輸送特性を解析した.

【計算結果】

ゼーベック係数のフェルミエネルギー依存性を図 2 に示す. いずれの結晶方向においてもフェルミエネルギーが 40 meV 付近でゼーベック係数の絶対値が最大になることがわかった.

表面ポテンシャル $V_0 = 0, -400$ meV におけるゼーベック係数の絶対値の最大値をまとめたものが表 1 である. 表 1 より, いずれの結晶方向においても負の表面ポテンシャルがゼーベック係数を向上させることがわかった.

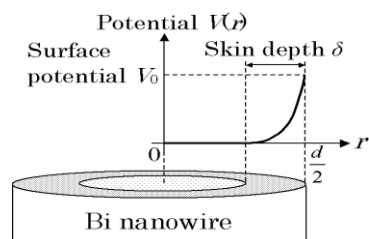


図 1 表面ポテンシャルを考慮した Bi ナノワイヤーの計算モデル

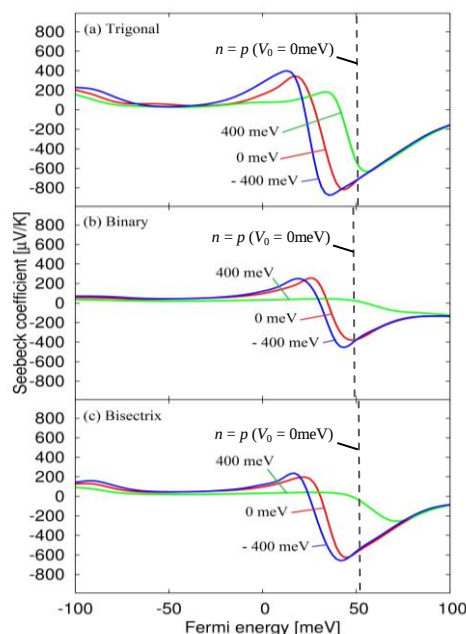


図 2 (a)Trigonal, (b)Binary, (c)Bisectrix を長手方向とした時のゼーベック係数のフェルミエネルギー依存性

参考文献

- (1) Y. M. Lin *et al.*, *Phys. Rev. B* **62**, 4610-4623 (2000).
- (2) T. Matsumoto *et al.*, *J. Elec. Mater.* **40**, 1260 (2010).

表 1 異なる結晶方向において表面ポテンシャルがゼーベック係数に及ぼす影響

Longitudinal direction	$ \alpha(V_0 = 0 \text{ meV}) _{\text{max}}$ [$\mu\text{V/K}$]	$ \alpha(V_0 = -400 \text{ meV}) _{\text{max}}$ [$\mu\text{V/K}$]	$\Delta\alpha$ [$\mu\text{V/K}$]
Trigonal	711	800	89
Binary	379	439	60
Bisectrix	503	547	44