

Ge ナノワイヤにおける熱電特性の構造多形依存性 :第一原理計算による検討

Theoretical study for polytype dependence on thermoelectric properties of Ge nanowires

三重大院工, ○菰田 貴都, 秋山 亨, 中村 浩次, 伊藤 智徳

Mie University, ○Takato Komoda, Toru Akiyama, Kohji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail: 414m606@mie-u.ac.jp

【はじめに】半導体ナノワイヤは、バルク状態での電気伝導率およびゼーベック係数の値を維持しながら大幅に熱伝導率が低減させることが可能なことから、高効率な熱電変換素子への適用が期待されている[1]。近年、 Bi_2Te_3 等に代表される従来の熱電材料に加えて Si および Ge ナノワイヤ等のナノ構造が注目されており、それらの熱電特性について研究がなされている[2-3]。しかしながら Si および Ge ナノワイヤにおいては構造多形が実験的に観測されているものの[4-5]、それらの熱電特性におよぼす影響については不明である。これまでに我々は、Si ナノワイヤにおける構造多形と熱電特性の関係性を理論的に検討し、ナノワイヤの構造に依存して熱電特性が変化することを明らかにした[6]。本研究では Ge ナノワイヤに注目し、ボルツマン輸送方程式および第一原理計算により異なる構造多形の Ge ナノワイヤにおける熱電特性を計算することで、構造多形と熱電特性との関係性を明らかにする。

【結果および考察】FIG.は計算によって得られた、2H 構造および 4H 構造の Ge ナノワイヤの 300K における電気伝導率 σ 、ゼーベック係数 S 、電子による熱伝導率 κ_e および無次元性能指数 ZT をキャリア濃度の関数として示したものである。この図より、p 型の Ge ナノワイヤの電気伝導率が n 型の場合よりも一桁程度高い値を示していることがわかる。また、n 型の Ge ナノワイヤにおいては 2H 構造の方が 4H 構造よりも高い電気伝導率を示しており、ゼーベック係数においては n 型および p 型ともに 2H 構造の方が高い値を示していることがわかる。さらに、電気伝導率、ゼーベック係数および電子による熱伝導率の構造による変化は、p 型の場合よりも n 型の場合の方が大きいことがわかる。これは、価電子帯上端の電子状態よりも、伝導体下端の電子状態が構造に依存して大きく異なることに起因していると考えられる。これら Ge ナノワイヤにおける熱電特性の変化の傾向は Si ナノワイヤにおけるそれと同様の傾向を示している。

[1] A. I. Hochbaum et al., *Nature* **451** (2008) 163. [2] T. T. M. Vo et al., *Nano Lett.* **8** (2008) 1111. [3] N. Mingo., *Nano Lett.* **3** (2003) 1713. [4] X. Liu, and D. Wang, *Nano Res.* **2** (2009) 575. [5] E. Lopez-Cruz et al., *Solid State Comm.* **45** (1983) 787. [6] 菰田 他, 第 62 回応用物理学会春季学術講演会 (2015) 13p-P12-8.

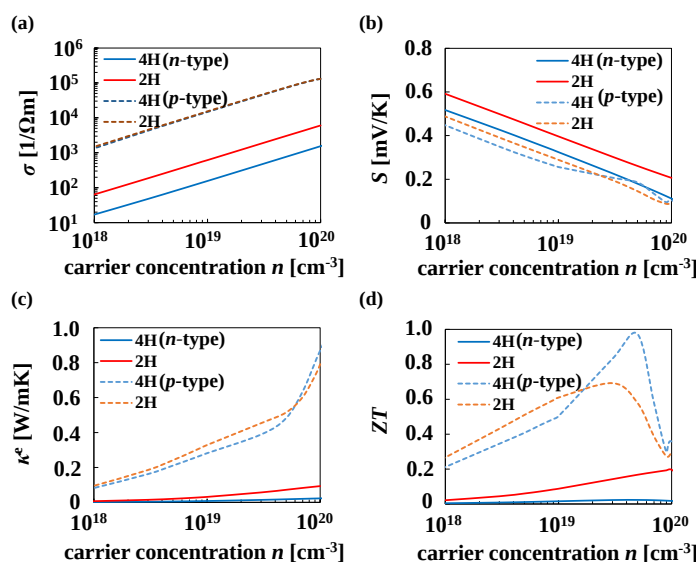


FIG.: Calculated (a) electrical conductivity, (b) Seebeck coefficient, (c) electronic thermal conductivity and (d) ZT at 300 K of n -type (solid line) and p -type (dashed line) Ge nanowires as a function of carrier concentration. In the calculation of ZT , the value of lattice thermal conductivity κ^l is assumed as $\kappa^l=0.3$ W/mK.