

Si ナノワイヤの熱電特性に関する理論的検討：構造多形の影響

Theoretical study for thermoelectric properties of Si nanowires: effects of polytypes

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】半導体ナノ材料はバルク材料とは異なる性質を示すことが知られ、様々なデバイスへの適用が期待されており、近年では熱電変換素子への適用も注目されている。特に半導体ナノワイヤにおいては、ゼーベック係数および電気伝導率の増大[1-2]や、熱伝導率の低減[3]が報告されており、それらに伴う無次元性能指数 ZT の増大が期待されている。近年、熱電変換素子への適用が注目されている Si ナノワイヤにおいては、成長方向の違いやコア-シェル構造の熱電特性におよぼす影響が理論的に予測されているものの[4-5]、ナノワイヤの構造多形の熱電特性におよぼす影響については不明である。そこで本研究では、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結晶構造をもつ Si 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.1は計算によって得られた、ダイヤモンド(3C)構造および六方晶ダイヤモンド(2H)構造を持つ Si ナノワイヤの 300 K におけるワイヤ方向の電気伝導率 σ_{zz} 、ゼーベック係数 S_{zz} 、電子熱伝導率 κ_{zz}^e および ZT をキャリア(電子)濃度の関数として示したものである。この図から、2H 構造の電気伝導率が 3C 構造のそれと比較して高い値をとり、ゼーベック係数および電子熱伝導率の結果も構造に依存していることがわかる。ゼーベック係数および電子熱伝導率の構造による違いは、電気伝導率の違いに比べて小さいため ZT についても 2H 構造の方が 3C 構造のそれよりも高い値をとっている。このような熱電特性の違いは、2H 構造と 3C 構造において伝導帯下端の電子状態が異なることに起因していると考えられる。以上の結果は、Si ナノワイヤの結晶構造に依存して電子状態が変化し、それに伴って熱電特性も変化し得ることを示唆している。

[1] B. M. Curtin et al., J. Appl. Phys. **115** (2014) 143704. [2] L. D. Hicks et al., Phys. Rev. B **47** (1993) 16631. [3] A. I. Hochbaum et al., Nature **451** (2008) 163. [4] G. Galli et al., Nano Lett. **8** (2008) 1111. [5] M. Hu et al., Nano Lett. **11** (2011) 618. [6] D. Li et al., Appl. Phys. Lett. **83** (2003) 2934.

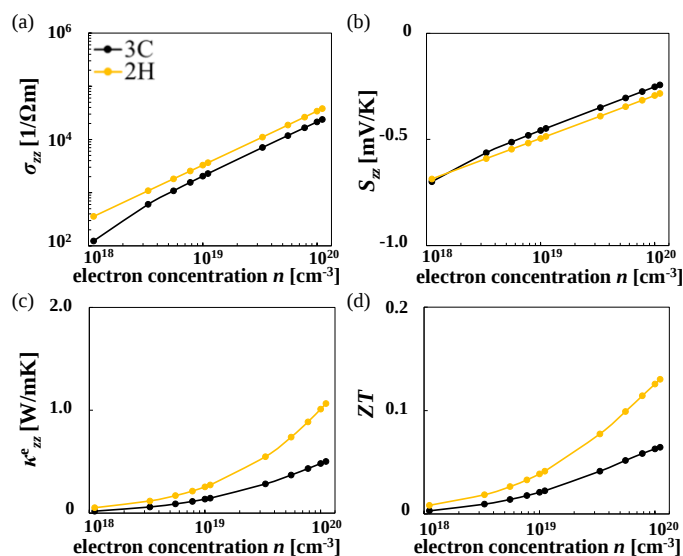


FIG.: Calculated (a) electrical conductivity, (b) Seebeck coefficient, (c) electronic thermal conductivity and (d) ZT at 300 K of n -type Si nanowires as a function of electron concentration. In the calculation of ZT , the experimental value of lattice thermal conductivity ($\kappa^l=6$ W/mK) [6] is used.