

格子ひずみを負荷したビスマステルライド薄膜の電子輸送特性

Electronic transport properties of lattice strained bismuth telluride thin films.

東海大工, °稲本 拓也, 高尻 雅之

School of Engineering, Tokai Univ.

°Takuya Inamoto, Masayuki Takashiri.

E-mail: 1ber1217@mail.tokai-u.jp

1.はじめに

本研究では n 型ビスマステルライド(Bi-Te)系熱電半導体がひずみによって構造や熱電物性がどのように変化するか解析を行い, 熱電半導体の性能向上を目指す.

2.実験方法

RF マグネトロンスパッタリング装置によりガラス基板に Bi-Te を成膜した. 成膜条件は Ar ガス雰囲気中室温で 60 分間成膜を行った. その後, アニール処理(300℃, 60 分)や電子線照射を行い, 格子にひずみを与えた. ひずみの測定は XRD によって行い, 回折ピークの位置からブラックの式と六方晶系における格子定数算出の式を用いて計算した. また, 第一原理計算ソフト ABINIT^[1]およびボルツマン輸送計算汎用パッケージ BoltzTraP^[2]を用い, 測定した実験値での格子ひずみにおけるゼーベック係数, 電気伝導率を計算し, 実験値と比較を行った. 擬ポテンシャルは LDA^[3]を使用した.

3.実験結果

Fig. 1 より基準値(JCPDS-15-0863)に近づくほど電気伝導率は上昇していることが分かる. 一方, Fig. 2 ではひずみの一番大きいものにおいては計算値と実験値が一致していないが, 基準値に近づくほど計算値と実験値が一致していく傾向にある. また, 実験値のゼーベック係数においても基準値に近づくほど上昇の傾向がある. この結果から, Bi-Te 系 n 型熱電半導体は, 格子に対してひずみを負荷しない方が熱電性能の向上を期待できることが分かった.

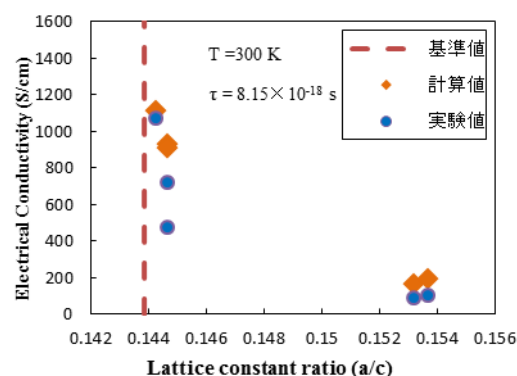


Fig. 1 Calculated electrical conductivity and experimental results of bismuth telluride thin films as a function of lattice constant ratio (electrical conductivity was fitted by Seebeck coefficient).

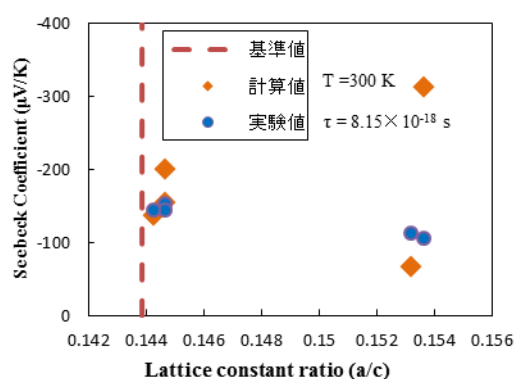


Fig. 2 Calculated Seebeck coefficient and experimental results of bismuth telluride thin films as a function of lattice constant ratio (Seebeck coefficient was fitted by electrical conductivity).

引用文献

- [1] X. Gonze, et al., Comput. Mater. Sci. 25, 478-492 (2002).
- [2] Georg K.H. Madsen, et al., Comput. Phys. Commun. 175, 67-71 (2006).
- [3] M.Fuchs, et al., Comput. Phys. Commun. 119, 67 (1999).