

ビスマスの格子変形が輸送特性に及ぼす影響

Influence of lattice distortion on transport properties in bulk and nanostructured Bi

○小峰 啓史¹, 青野 友祐¹, 村田 正行², 長谷川 靖洋³(1. 茨城大, 2. 産総研, 3. 埼玉大)

○Takashi Komine¹, Tomosuke Aono¹, Masayuki Murata², Yasuhiro Hasegawa³

(1. Ibaraki Univ., 2. AIST, 3. Saitama Univ.)

E-mail: takashi.komine.nfm@vc.ibaraki.ac.jp

熱電材料へのナノ構造導入によって大幅に性能指数 ZT が向上すると予想されており^[1], 我々は石英テンプレートを利用した溶融 Bi の圧入によって, Bi ナノワイヤの研究開発を行ってきた^[2]. バルク Bi は菱面体構造を持つ異方的な結晶構造を特徴としている. さらに, 液体における密度が固体における密度よりも高いことが知られており, このことを利用して, 圧入法によって作製した Bi ナノワイヤーに格子変形を導入できる可能性がある. 本研究では, 圧力によって誘起された格子変形がビスマスの輸送特性に及ぼす影響を数値解析によって調べた.

本研究では, 系統的な評価や物理的考察を容易にするため, Liu and Allen の sp^3 タイトバインディング (TB) モデルを用いた^[3]. バルク Bi の結晶は, bilayer の積層構造で表現することが可能である. 層間は Van der Waals 力で結合しており, 層間距離を Internal displacement parameter u で特徴づけることが出来る. 圧力誘起によって起こり得る大きな格子変形は, この層間距離の変化であると考え, u をパラメータとしてバンド構造を計算し, 格子変形がバンド構造に及ぼす影響を解析した.

$u = 0.2341, 0.2400$ に対する状態密度を Fig.1(a), (b) に示す. u の増加に伴って, バンドオーバーラップが増加するとともに, 状態密度が高くなっている. フェルミ準位とキャリア密度の u 依存性を Fig.1(c) に示す. バンド構造の変化を反映して, フェルミ準位が増加しており, 結果として u の増加によりキャリアが誘起される. 講演では, 格子変形が輸送特性に及ぼす影響を考察する予定である.

【謝辞】本研究の一部は, NEDO「エネルギー・環境新技術先導プログラム」および JSPS 科学研究費補助金の支援により行われました.

【参考文献】

[1] L. D. Hicks *et al.*, *Phys. Rev. B* **47**, 12727 (1993).

[2] M. Murata *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 192104 (2009).

[3] Y. Liu and E. Allen, *Phys. Rev. B* **52**, 1566-1577 (1995).

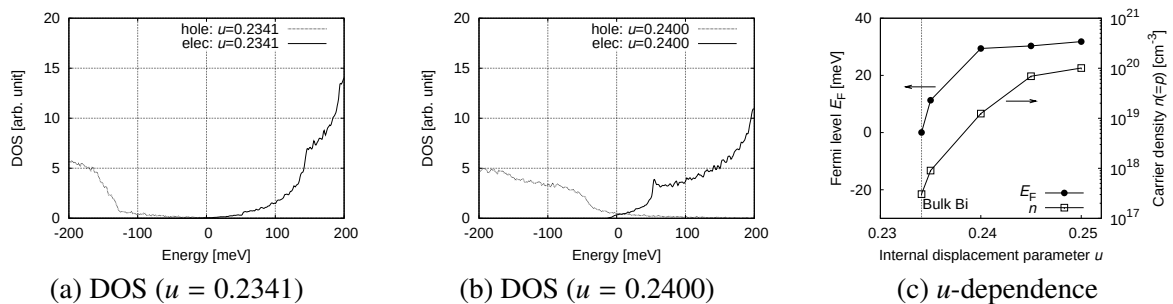


Fig.1 Density of states for internal displacement parameter u of (a) 0.2341 and (b) 0.2400, and (c) u dependence of Fermi level E_F and carrier density for the condition of $n = p$.