

## ビスマスの格子変形がバンド構造および輸送特性に及ぼす影響

### Effect of lattice distortion on bandstructure and transport properties in bulk Bi

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

○Takashi Komine<sup>1</sup>, Tomosuke Aono<sup>1</sup>, Masayuki Murata<sup>2</sup>, Yasuhiro Hasegawa<sup>3</sup>

(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<sup>[1]</sup>, 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<sup>[2]</sup>. 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おり, 特異な輸送特性と深く関係している. 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 ナノワイヤに格子変形を導入してさらに物性を制御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バルクビスマスのバンド構造及び, 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) モデルを用いてバンド構造を計算した<sup>[3]</sup>. バルク Bi の結晶は, bilayer の積層構造で表現でき, 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. 本研究では, 格子定数  $a, c$  及び  $u$  を変えて, バンド構造を計算し, 有効質量や L 点電子バンド, T 点ホールバンドの相対位置を系統的に調べた.

体積を一定として, 軸比  $c/a$  を変えて計算したバンドパラメータ, 有効質量を図1に示す. 有効質量は L 点及び T 点の有効質量に関する幾何平均を示した.  $c/a$  の増加に対して, T 点ホールの有効質量は単調に増加するものの, L 点電子の有効質量の変化は複雑である. 圧縮すると, T 点, L 点の有効質量の大小が逆転することもわかる.

$a, c$  を固定して,  $u$  を変えた時の T 点, L 点周辺のバンド構造を図2に示す.  $u$  の増加に伴い, T 点ホールの位置は単調に上昇するが, L 点電子のバンド分散は複雑に変化することがわかる. 講演では, 有効質量の変化が量子効果や輸送特性に及ぼす影響を議論する予定である.

【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 (基盤研究 (B)) 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).

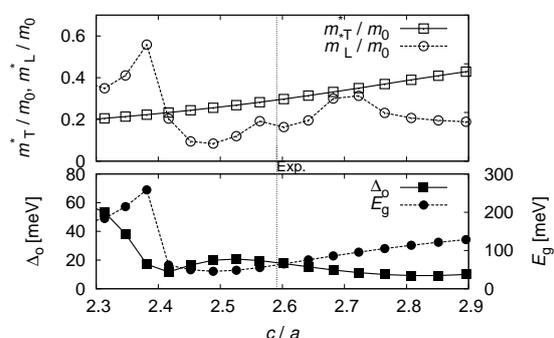


Fig.1 Band parameters as a function of  $c/a$ .

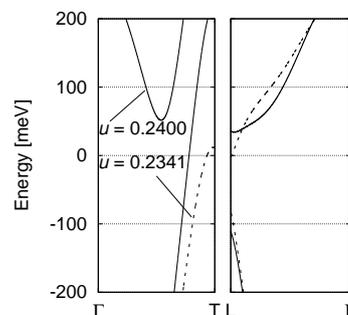


Fig.2 Band structure around T- and L- points for different internal displacement parameter  $u$ .