

Bi ナノワイヤーにおける格子圧縮が量子効果に及ぼす影響

Compressive-stress-induced quantum effect in Bi nanowires

○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り大幅に性能指数 ZT が向上すると予想されており^[1], 我々はこれまで石英テンプレートを利用した溶融 Bi の圧入によって, Bi ナノワイヤーの作製と物性評価を行ってきた^[2]. 近年, 歪み導入により Bi ナノワイヤーの熱電性能が向上する可能性が議論されており^[3], 圧入法により作製した Bi ナノワイヤーでは, さらに強い歪みを導入出来ると期待できる. しかし, テンプレートに内包された Bi ナノワイヤーの格子圧縮が量子効果に及ぼす影響は十分に議論されていない. 本研究では, 格子圧縮がビスマスのバンド構造及び量子効果に及ぼす影響を数値解析により調べた.

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-Allen の sp^3 タイトバインディング (TB) モデルを用いて, 格子圧縮に対するバルク Bi のバンド構造を計算した^[4]. この TB モデルでは原子間距離に依存した行列要素を与えることが出来る. 石英テンプレートによる格子圧縮は, ナノワイヤーが内包される壁面からの圧縮応力として表現し, 格子変形には直交異方性を仮定した. 応力に対応する歪みから, 格子定数 a, c 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. さらに, 得られたバンドパラメータを元にナノワイヤーの有効質量方程式を解き, 半金属-半導体 (SM-SC) 遷移が発現するワイヤー径を調べた.

binary および trigonal 方向の圧縮応力がある場合のバンドパラメータの応力依存性を Fig.1 に示す. T 点および L 点の有効質量テンソルは主軸変換した対角要素の幾何平均として示した. 応力が増加すると, L 点と T 点のバンドオーバーラップ Δ_0 が減少し, L 点のバンドギャップ E_{gL} が増加する. Bi の trigonal 方向は bilayer で表現される積層構造であり, 層間圧縮が L 点バンドの相対位置を大きく変えることがわかる. このとき対応する Bi ナノワイヤーの長手方向は bisectrix 方向になる. 長手方向を bisectrix とする Bi ナノワイヤーにおけるバンド端のワイヤ径依存性を Fig.2 に示す. 格子変形を伴わない Bi ナノワイヤーに比べて, 圧縮応力があるときの Bi ナノワイヤーでは, SM-SC 転移がより大きなワイヤ径で生じることがわかる. L 点電子の有効質量は圧縮により増加するものの, バンドの離散化は十分に生じる大きさである. 結果として, テンプレートに内包された Bi ナノワイヤーにおいて, 格子圧縮が L 点バンドの相対位置を変え, より大きなワイヤ径で量子効果が発現する可能性を示唆した.

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

[2] M. Murata *et al.*, *Nano Lett.* **17** 110119 (2017).

[3] J. Kim *et al.*, *Acta Mater.* **144** 145-153 (2018).

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

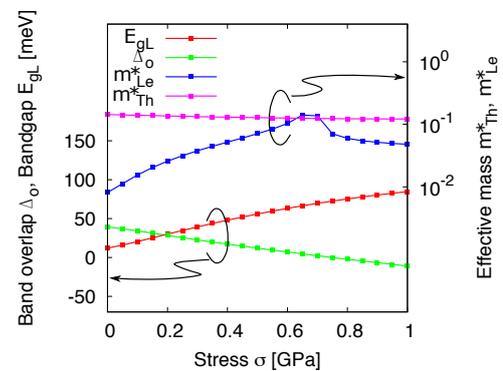


Fig.1 Band parameters as a function of stress

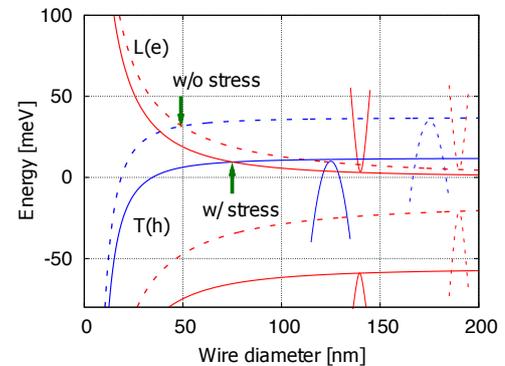


Fig.2 Wire diameter dependence of bandedges of T- and L- points in Bi nanowires with and without stress (0.5GPa).