

ソルボサーマル法による $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_x(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ ナノプレート薄膜の作製 及び第一原理計算による物性評価

Fabrication of nanoplate thin film by solvothermal method and physical property evaluation by first principles calculations

東海大院工¹, 東海大院理², 都産技研³ ◦木村 勇輝¹, 津田 駿¹, 中里 暢宏², 並木 宏允³,
太田 優一³, 富田 恒之², 高尻 雅之¹

Graduate School of Engineering, Tokai Univ.¹, Department of Chemistry, Tokai Univ.², TIRI³
◦Yuki Kimura¹, Shun Tsuda¹, Nobuhiro Nakazato², Hiromasa Namiki³, Yuichi Ota³, Koji Tomita²,
Masayuki Takashiri¹

E-mail: 8bajm010@mail.u-tokai.ac.jp

1. 緒言

本研究ではソルボサーマル法により作製した N 型 $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_x(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ ナノプレートを印刷法により熱電半導体薄膜化させ, Se の置換率により, 構造や熱電性能がどのように変化するか解析を行い, 熱電半導体薄膜の性能向上を目的としている.

2. 実験方法

本実験では, Bi_2O_3 , Sb_2O_3 , TeO_2 , NaOH , PVP, エチレングリコール, H_2O を用いて $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_x(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ ナノプレートを作製した. Se と Te の比を 0.05 mol ずつ変えた試料を 12 個作製し, Se による置換がナノプレートに及ぼす影響について調べた. その後, 印刷法を用いた薄膜作製を行い, 薄膜の性能を確認するため抵抗及び熱起電力を測定し, パワーファクター($P.F.$)の算出を行った. また, 密度汎関数理論に基づく第一原理計算と半古典ボルツマン方程式によって, 熱電性能を計算し, Se 置換の影響を評価した.

3. 実験および解析結果

Fig. 1 に Se, Te 比が 1:1 の時の SEM 画像を示す. Se 量増加にともない, 結晶の大きさに統一性がなくなることが判明した. Fig. 2 の XRD 結果においては Se 量が増加するとピークが高角側にシフトし, Bi_2Te_3 のピークからずれていることから 3 元系のナノプレートができていることが判明した. 薄膜作製後のゼーベック係数は Se を添加した方が高くなり, $P.F.$ の値は $2.4 \mu\text{W}/\text{K}^2 \cdot \text{cm}$ を示した.

本発表では, 第一原理計算手法およびボルツマン輸送方程式において構造解析と熱電性能の実験値と計算値の比較を行う.

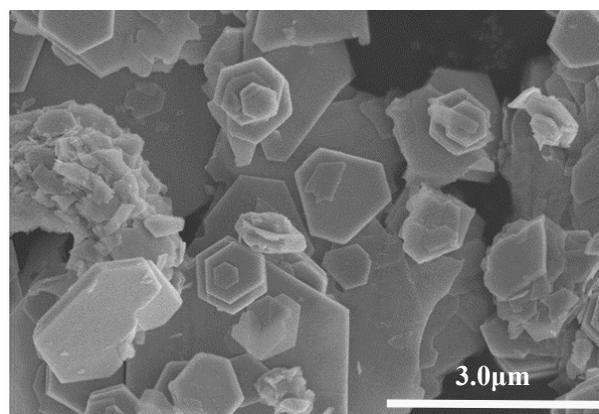


Fig. 1. SEM image of surface morphology of the $(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_{0.5}(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{0.5}$ nanoplate thin film.

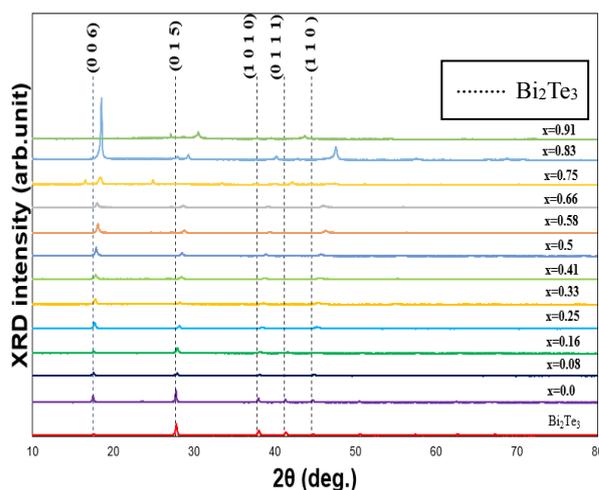


Fig. 2. The XRD patterns of nanoplate thin films with different composition.