非平衡グリーン関数法による Si クラスレートの輸送特性の計算

Calculation of Transport Properties of Silicon Clathrates by Non-Equilibrium Green's Function Method

○阿武宏明，岡本和也（市立山口東理大・工）

○*Hiroaki Anno and Kazuya Okamoto (Fac. Eng., Sanyo-Onoda City University)

*E-mail: anno@rs.socu.ac.jp

熱電材料におけるナノ構造・界面と熱電特性との関係を解明することは熱電性能の飛躍的な向上に繋がる重要な課題である. ナノ材料デバイスの輸送特性の計算において非平衡グリーン関数（NEGF）法は有力な手法となると期待される. 本研究ではクラスレート・ナノデバイスの輸送特性の解析と設計を目的としている. 今回はその手始めとして $B_8Au_6Si_{40}$ の基本的な輸送特性の計算を NEGF 法により実施した結果を報告する.

NEGF 法による電子輸送特性の計算は, QuantumATK パッケージを使用した. $B_8Au_6Si_{40}$ の結晶構造は Akai ら [1] が報告した構造を使用した. Fig. 1 は計算に用いた $B_8Au_6Si_{40}$ デバイス構造を示す. この構造の z 軸方向の透過係数スペクトルおよび熱電特性を計算した.

Fig. 1 にはデバイス構造と共にエネルギーE = 0 における固有状態の強度分布を表示している. 固有状態の強度は主にホストの Si 原子と Au 原子の周辺で高く，ゲスト Ba 原子の周辺では低い. このことはキャリアが主にホスト格子を伝導することを表している.

Fig. 2 は室温におけるゼーベック係数のスペクトルを示す. バルク $B_8Au_6Si_{40}$ の DFT 計算結果から，$B_8Au_6Si_{40}$ のフェルミエネルギーE_F は価電子帯中にあり伝導タイプは p 型であることが明らかとなった. ゼーベック係数のスペクトルもこの点は矛盾していない. ゼーベック係数のスペクトルから，$B_8Au_6Si_{40}$ においては n 型よりも p 型の方が高いゼーベック係数が期待できる.

今後, ナノ構造を有するクラスレートデバイスの輸送特性の解析へ展開する予定である.

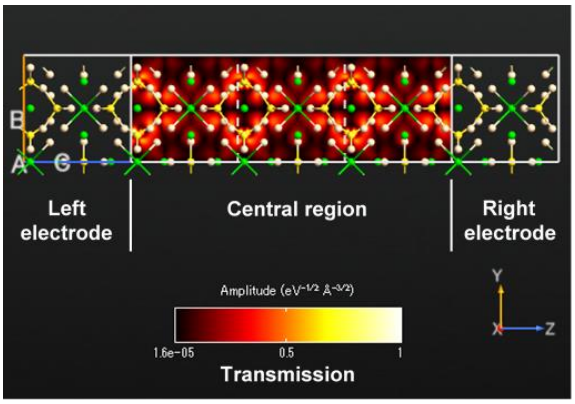


Fig. 1. A device configuration (green ball: Ba, yellow ball: Au, white ball: Si) and transmission eigenstate at E_F of cut plane in the central region.

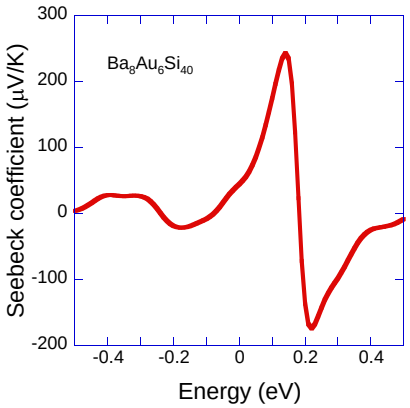


Fig. 2. Seebeck coefficient as a function of energy.

本研究は，JSPS 科研費 JP17K06841 の助成の結果得られたものである.

参考文献

1) K. Akai, et al., Proc. Int. Conf. on Thermoelectrics (ICT2005), (2005) p. 215.

© 2019年 応用物理学会