

GeTe-rich Ge-Sb-Te 系熱電材料の結晶構造とバンド構造

Crystal Structure and Band Structure of GeTe-rich Ge-Sb-Te Thermoelectric Materials

阪府大理¹, 近大高専総シスエ², JST さきがけ³ ^{○(D)}奥友洋¹, 船島洋紀², 久保田佳基¹, 小菅厚子^{1,3}

OPU¹, KUTC², JST PREST³, ^{○(D)}Tomohiro Oku¹, Hiroki Funashima², Yoshiki Kubota¹,

Atsuko Kosuga^{1,3,*} *E-mail: a-kosuga@p.s.osakafu-u.ac.jp

諸言

GeTe-Sb₂Te₃擬二元系化合物はGeTe-rich組成においてはGeTeと同様、低温相の菱面体構造と中温相のNaCl型構造をもつ[1]。この物質は高い熱電特性を示すことが報告されている一方、文献により高性能を示す組成や構造が異なり、組成と熱電特性の相関が明らかになっていない[2,3]。そこで本研究では、GeTe-Sb₂Te₃擬二元系化合物の組成・構造・電子構造の相関についての研究を行った。

結果と考察

我々が作製したGeTe-Sb₂Te₃擬二元系化合物は、組成によりNaCl型構造(*Fm-3m*)と菱面体構造(*R3m*)の二種類の結晶構造を有する。菱面体構造の場合、原子は3*a*サイトに属する。この構造の時に、ワイコフパラメータが*z*=0, 1/2かつ基本並進ベクトルのなす角*α*が60度になるとき、空間反転および4回対称性が復活し、NaCl型構造となる(Fig.1a)。言い換えると、NaCl型構造は菱面体構造の特別な場合とみなせる。Fig.1bに示す様に、面心立方格子の場合、ブリルアンゾーン中に6つの等価なΓ-L軸(Λ軸)が存在する。一方、Fig.1cに示すように、菱面体構造において4回対称性が失われた結果、この軸はΓ-ZとΓ-Lという非等価な2種類の軸に分裂する。本研究では組成変化と結晶の対称性の変化の關係に着目し、この様に非等価となった

軸間の電子状態の差異と熱電特性の相関を議論する。今回は結晶構造解析で精密化した構造パラメータを用いて、KKR-CPA法で各組成のバンド構造を計算した。そこで本講演では実際の組成で計算した組成・構造・バンド構造の相関や実験で得た熱電特性との比較・議論を行う。

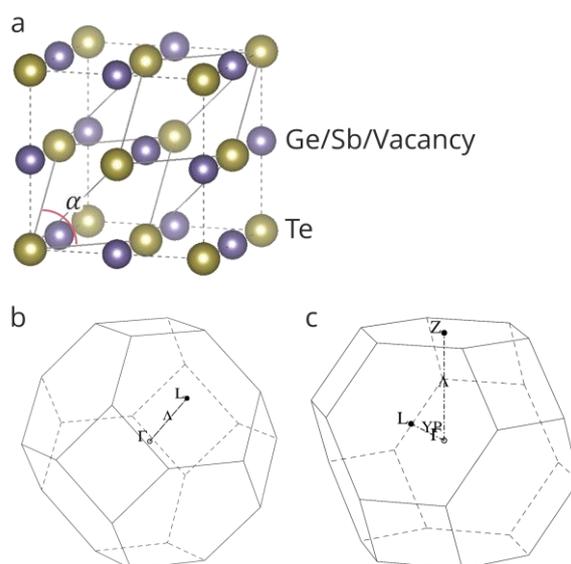


Fig.1 (a) Crystal structure of cubic GeTe-Sb₂Te₃. First Brillouin zone of (b) cubic structure (*Fm-3m*) and (c) rhombohedral structure (*R3m*).

文献

- [1] T. Matsunaga, et al., *J. Appl. Phys.*, **103**,093611 (2008)
- [2] E.-R. Sittner et al., *Phys. Solidi* **A210**, 147 (2013).
- [3] X. Xu et al., *Adv. Sci.* **5**, 1801514 (2018).