

GeTe-rich Ge-Sb-Te 系熱電材料の結晶構造とバンド構造の組成依存性

Composition Dependence of Crystal Structure and Band Structure of

GeTe-rich Ge-Sb-Te-system Thermoelectric Materials

¹ 阪府大, ² 九大, ³ JST さきがけ ○奥友洋¹, 船島洋紀², 久保田佳基¹, 小菅厚子^{1,3}

Osaka Pref. Univ.¹, Kyusyu Univ.², JST PREST²,

○Tomohiro Oku¹, Hiroki Funashima², Yoshiki Kubota¹, Atsuko Kosuga^{1,2}

E-mail: s.t.oku@p.s.osakafu-u.ac.jp

緒言

GeTe は、古くから高い熱電特性を持つ事が知られている TAGS (AgSbTe₂-GeTe) の構成化合物である。近年、バンドエンジニアリングにより PbTe の高性能化が実現された事を背景[1]に、Pb と同族元素の Ge を含む GeTe も再び注目され始めている[2]。その中でも、相変化記録材料として研究されてきた GeTe-Sb₂Te₃ 擬二元系状態図上の化合物は、組成や作製条件によって高い熱電特性を示すという報告があるが、これらと物性の相関は詳細には解明されていない[2,3]。そこで本研究では、GeTe-rich な GeTe-Sb₂Te₃ 擬二元系状態図上の様々な化合物についての結晶構造とバンド構造について詳細に調べた結果を報告する。

結果と考察

本研究で作製した (GeTe)_n(Sb₂Te₃) (n=10, 12, 16, 20, 24) は n が 12 以上では菱面体構造 (空間群: R3m) をもち、n=10 では立方晶構造 (空間群: Fm-3m) となる事が確認できた。また、構造解析の結果より、n の値が小さくなるにつれ、菱面体歪 α が低下し、n=10 では立方晶となる事が明らかになった。その他の結晶構造パラメータ、及び精密化した構造パラメータを用いて KKR-CPA 法により計算したバンド計算の結果については、当日報告する。

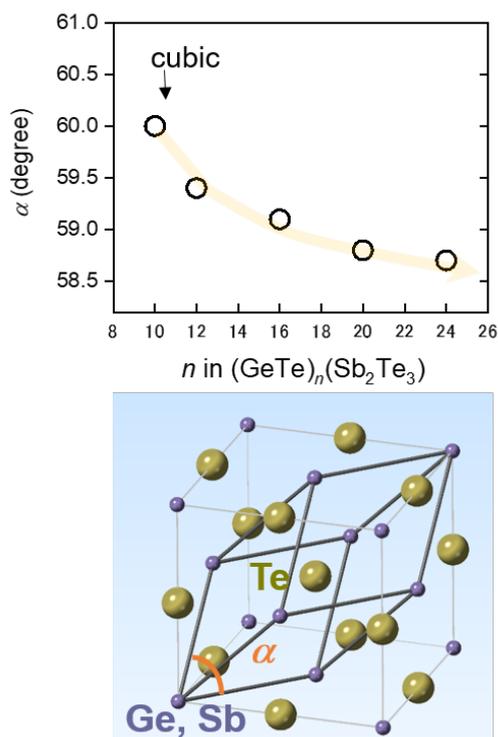


Fig. 1. Composition dependence of rhombohedral angle α of (GeTe)_n(Sb₂Te₃) samples. When the structure is cubic, α becomes 60 degrees.

参考文献

- [1] Y. Pei et al., *Nature* **5**, 473 66-69 (2011).
- [2] E.-R. Sittner et al., *Phys. Solidi A* **210**, 147-152 (2013).
- [3] X. Xu et al., *Adv. Sci.* **5**, 1801514 (2018).