

## Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (001) 終端構造の構造安定性と電子状態評価

### Evaluation for structural stability and electronic states of various Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (001)

#### terminations

九工大<sup>1</sup>, <sup>○</sup>森本将行<sup>1</sup>, 河野翔也<sup>1</sup>, 宮崎康次<sup>1</sup>, 飯久保智<sup>1</sup>

Kyushu Inst. Tech.<sup>1</sup>, <sup>○</sup>Masayuki Morimoto<sup>1</sup>, Shoya Kawano<sup>1</sup>, Koji Miyazaki<sup>1</sup>, Satoshi Iikubo<sup>1</sup>

E-mail: morimoto-m@life.kyutech.ac.jp

#### 1. 序論

熱電材料の性能指数  $ZT$  は、 $ZT = S^2\sigma T/\kappa$  の式で表され、高い  $ZT$  を得るために、高い電気伝導度と大きなゼーベック係数を有し、かつ低い熱伝導度を示す材料の研究開発が盛んに行われている。ナノ粒子化や結晶粒界の増大、異種原子ドーピングなどの手法によって  $ZT$  が向上することが知られているが、異種材料間に生じる界面熱抵抗によってフォノン散乱を増強し  $ZT$  を高める方法も活発になっている。本研究では、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (001)表面の静的および動的構造安定性と電子状態を評価することで、Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> と異種材料間で界面を構築する際の設計指針を得ることを目的とした。

#### 2. 計算手法

第一原理計算は Vienna Ab Initio Simulation Package で実行し、交換相関汎関数には Perdew-Burke-Ernzerhof を適用した。Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (001)の表面終端モデルは、5つの終端構造(Te<sup>l</sup>-1, Te<sup>l</sup>-2, Te<sup>ll</sup>, Bi-1, Bi-2)を作成し、それぞれの構造最適化における cutoff energy は 520 eV で  $k$  点は  $5\times 5\times 1$  を使用し、van der Waals'力を考慮した。また、Gaussian smearing を採用しその幅は 0.1 eV に設定した。エネルギーの計算および電子状態密度(DOS)の計算は spin orbital coupling (SOC)を考慮した。フォノン分散は Phonopy を使用し、0.01 Å の変位を導入した構造で力を求めることで計算した。

#### 3. 結果と考察

作成したそれぞれの終端構造(Fig. 1)で構造最適化を行い、形成エネルギーを比較したところ、どの構造も負のエネルギーを示した。それらの中で、Te<sup>l</sup>-1, Te<sup>ll</sup>, Bi-2 終端が Te<sup>l</sup>-2, Bi-1 終端と比べて静的に安定であったため、DOS の計算と電荷密度分布の可視化を行った。その結果、終端構造によってフェルミ準位近傍の電子状態が大きく異なり、Te<sup>ll</sup> 終端で電子ドーブ、Bi-2 終端でホールドーブとなることが分かった。さらにフェルミ準位近傍の電荷密度分布を可視化したところ、Te<sup>ll</sup> と Bi-2 終端構造で、表面に局在した準位の存在が確認された。また、フォノン分散から Te<sup>ll</sup> 終端は負の振動数がみられず、動的に安定であることも確認され、実験的に形成しやすい表面であることが明らかとなった。以上の結果から、Te<sup>ll</sup> 終端構造で界面を形成すると、電子密度の重なりによって、電子移動が阻害されない可能性が期待できる。

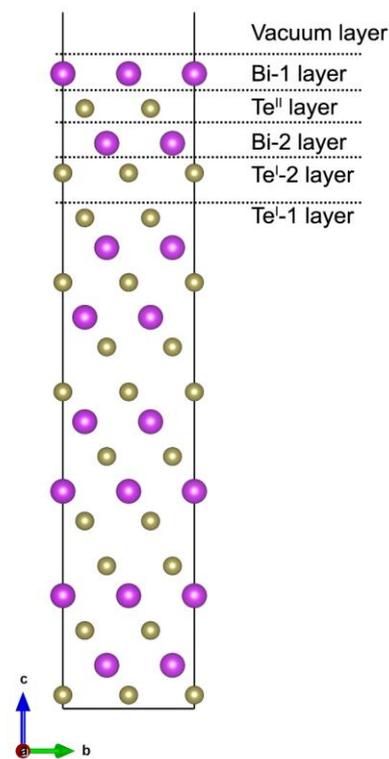


Fig. 1. Calculated Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (001) surface structures