

(GeTe)₁₀Sb₂Te₃ におけるバンド有効質量の異方性Anisotropy of band effective mass in (GeTe)₁₀Sb₂Te₃阪府大理¹, JST さきがけ² ○(D3)奥 友洋¹, 小菅 厚子^{1,2}OPU¹, JST PREST², [○]Tomohiro Oku¹, Atsuko Kosuga^{1,2,*}

*E-mail: a-kousga@p.s.osakafu-u.ac.jp

諸言

熱電材料の性能を物質固有の微視的パラメータで議論する物理量として B 因子がある¹。音響フォノン散乱 ($\mu \propto 1/m_b^{*5/2}$) が支配的な多くの熱電材料に於いては $B \propto N_v/m_b^* \kappa_{ph}$ である²。ここでキャリア易動度 μ 、谷間縮重度 N_v 、バンド有効質量 m_b^* 、格子熱伝導率 κ_{ph} を用いた。バンド構造が異方的な物質においてはさらに m_b^* の異方性を考慮する必要がある³。我々の研究室では GeTe-rich GeTe-Sb₂Te₃ 系熱電材料に於いて GeTe 濃度を制御し、谷間縮重度に由来する出力因子 PF の向上を達成した⁴。先行研究では系のバンド有効質量に関する議論は行わなかった。そこで本研究では (GeTe)₁₀Sb₂Te₃ のバンド有効質量を求め、その異方性が熱電特性に与える影響を議論する。

方法

fcc (GeTe)₁₀Sb₂Te₃⁴ のバンド構造 (ブロッホスペクトル) を AkaiKKR⁵ を用いた第一原理計算で求めた。また、バンド構造から各価電子帯の有効質量を放物線近似によって求めた。

結果と考察

(GeTe)₁₀Sb₂Te₃ のバンド構造を Fig. 1a に示す。(GeTe)₁₀Sb₂Te₃ は fcc GeTe と類似のバンド構造を示したが、価電子帯について Σ バンドと L バンドのエネルギー差が非常に小さく縮重していた。次に Σ バンドの横有効質量 $m_{\perp}$ を Fig. 1b に示す。Fig. 1b より Σ バンドの有効質量は異方性が高いとわかる。その他の結果および詳細な議論は当日の発表で行う。

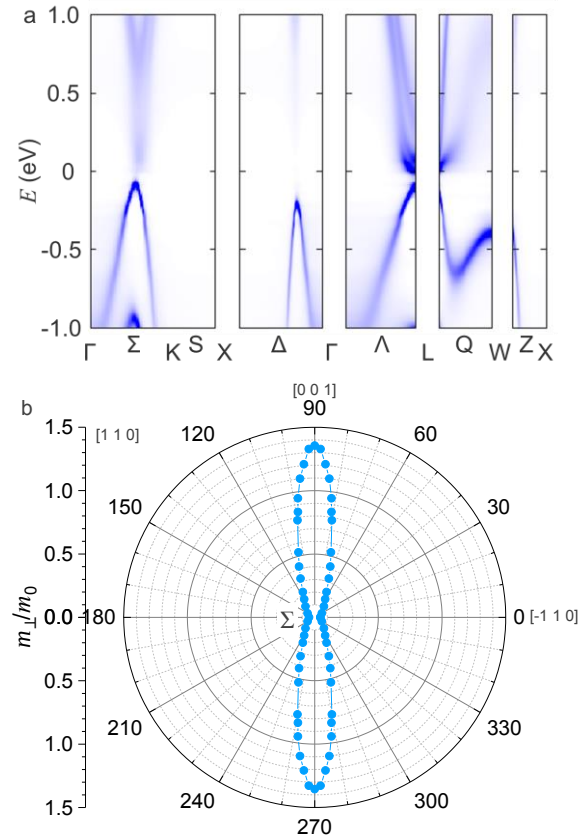


Fig. 1 a) Bloch spectral function of (GeTe)₁₀Sb₂Te₃ and b) transverse effective mass $m_{\perp}$ for Σ axis.

文献

1. E. S. Toberer, P. Gorai and V. Stevanović, in *Materials Aspect of Thermoelectricity*, ed. C. Uher, CRC Press, Boca Raton, 2016, pp. 1-38.
2. H. J. Goldsmid, *Thermoelectric Refrigeration*, Plenum, New York, 1964.
3. B. L. Anderson and R. L. Anderson, *Fundamentals of Semiconductor Devices*, Maruzen Publishing, Tokyo, 2012.
4. T. Oku, H. Funashima, S. Kawaguchi, Y. Kubota and A. Kosuga, submitted.
5. H. Akai, *J. Phys. Condens. Matter*, 1989, **1**, 8045-8064.

謝辞

バンド構造の計算については、船島洋紀先生 (近代高専総シス工) にご助言頂きました。