

博士論文公聴会の公示（物理学専攻）

学位申請者： 森 仁志

論文題目：First-principles study on the effect of electron-phonon scattering on the transport properties of thermoelectric materials

（第一原理計算に基づく熱電物質の電子輸送特性における電子-フォノン散乱効果に関する理論研究）

日時： 2021年 2月 5日（金） 15:10 - 16:40

場所： 新型コロナウイルス感染症拡大防止のためオンラインにて行う。URL等については、学内の方は下記を参照。

<https://www.phys.sci.osaka-u.ac.jp/naibu/kouchoukai.html>

学外の方は主査黒木 (kuroki[at]phys.sci.osaka-u.ac.jp [at]=@) に問い合わせること。

主査：黒木和彦

副査：小川哲生、工藤一貴、白井光雲、越智正之

論文要旨：

マルチバレー構造は、バレーの数に応じてバンド端における状態密度が高くなり、低い電気抵抗率と高いSeebeck係数を両立させることから、熱電性能を向上させることができる理想的な電子バンド構造の特徴の一つとして考えられている。しかしながら、電子が受ける散乱を考えた際、マルチバレー構造の場合にのみ生じるバレー間散乱が電気抵抗率を大きくしてしまう原因になりかねないとも考えられる。そこで、我々は電気伝導率（電気抵抗率）が受けるバレー間散乱の影響を調べるために、第一原理計算を用いてフォノンによる電子散乱の効果を露わに評価することで、いくつかの熱電物質における電気抵抗率やSeebeck係数などの輸送特性の計算を行った。この計算によって得られた輸送特性の温度依存性は、実験結果を定性的に再現するものであった。また、電子散乱に対する寄与が特に大きいフォノンモードを同定するために、輸送特性のフォノンモードによる寄与の分解を行った結果、特に室温付近においては、バレー間散乱による寄与は小さく、光学フォノンによる、バレー内散乱の寄与が支配的に大きいことを示す結果を得た。これにより、本研究で対象とした熱電物質においては、マルチバレー構造が電気抵抗率を十分に低減する役割を果たしているといえる結果となった。