

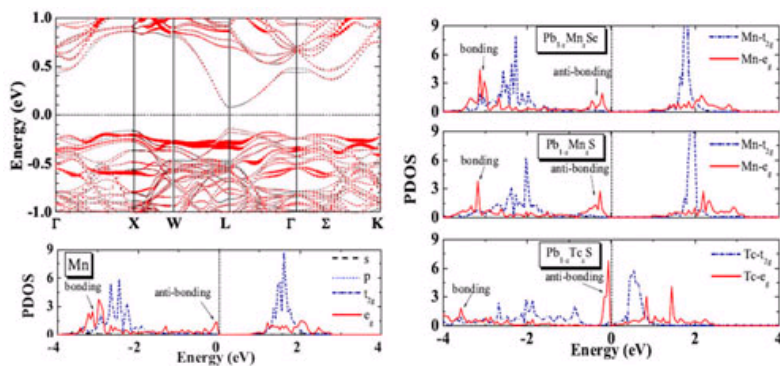
## 宁波材料所掺杂PbTe能带工程机理研究取得进展

作者：, 日期：2015-03-11

PbTe是一类发展较早的中温热电材料。其晶格结构简单，为面心立方的NaCl结构，晶格热导率较低（2.2 W/mK），禁带宽度理想（0.32 eV），熔点较高（1095 K），因具有优异的热电性能而受到广泛关注。通过不同元素掺杂来修饰能带结构的能带工程被视为提高材料电输运性能的有效手段。近年来，Heremans等人 and Pei 等人在PbTe掺杂方面分别做出了重要的研究工作，能带工程的机理也由此归分为“共振态”和“多能谷”两种作用机制。

相对于其它3d过渡族元素掺杂表现出“共振态”效应，Mn掺杂PbTe表现出“多能谷”效应。宁波材料所通过第一性原理计算分析了不同作用机理的根源以及Mn掺杂对PbTe的价带结构调节机理，最后还预测了两种作用机制相互转变的条件。研究发现，Mn掺杂PbTe的基态是磁矩为 $5 \mu_B/\text{Mn}$ 的铁磁态。Mn的5个d电子全部排列在自旋向上态，刚好形成全占据的自旋向上态和全空的自旋向下态，由于强烈的磁关联劈裂作用，使得d电子轨道远离费米面。在其它3d过渡金属不能形成全满或者全空的状态，d电子轨道将靠近费米面形成“共振态”效应。如能带结构图所示，Mn的d电子选择性作用到次级价带上并使其上升从而缩小最高价带和次级价带之间的能量差，形成“多能谷”效应。通过分波态密度的分析，可以看出这种效应来源于Mn-d电子 $e_g$ 轨道和Te-p电子轨道的反键态。如果阳离子p电子轨道下降或者d电子 $e_g$ 轨道上升，也就是两种电子轨道之间的能量差减小，如右图所示，反键态电子态密度将逐渐增大，“多能谷”效应将逐步向“共振态”效应转变。相关研究结果已发表在国期刊*J. Phys.: Condens. Matter* 27, 095501 (2015)。

本研究得到了国家自然科学基金（11404350），中国博士后基金（2014M551782），宁波市自然科学基金（2014A610003）和宁波市科技创新团队（2014B82004）的支持。



Mn掺杂PbTe的能带结构和分波态密度

(先进制造所 谈小建)