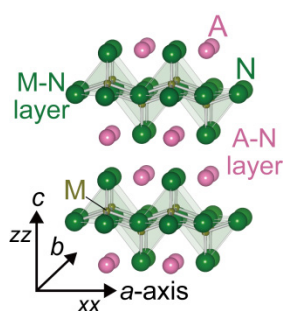


2 次元窒化物  $AMN_2$  の電子状態と熱電変換輸送特性Electronic structures and thermoelectric transport in  $AMN_2$  layered complex nitrides物材機構<sup>1</sup> ○大久保 勇男<sup>1</sup>, 森 孝雄<sup>1</sup>National Institute for Materials Science (NIMS)<sup>1</sup>, °Isao Ohkubo<sup>1</sup>, Takao Mori<sup>1</sup>

E-mail: OHKUBO.Isao@nims.go.jp

【はじめに】層状物質は、熱電変換性能向上のために有利である低次元電子状態の形成と熱伝導率の低減が期待されるため、熱電変換物質の研究対象とされてきた。これまで、層状物質の中でも、遷移金属酸化物やカルコゲナイド等が精力的に研究されてきた。我々は、新しい層状物質として層状窒化物に着目している[1]。

本研究では、 $KCoO_2$  型結晶構造の  $d^0$  電子系

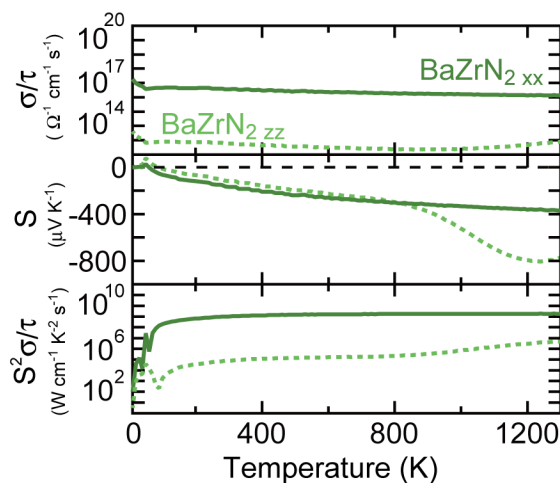
図 1:  $AMN_2$  の結晶構造。

$AMN_2$  ( $A = Sr, Ba$ ;  $M = Ti, Zr, Hf$ ) 層状窒化物(図 1)の電子状態計算と電子輸送特性計算を行い、熱電変換輸送特性の検討を行った。

【計算方法】電子状態計算コード WIEN2k を用いて、 $AMN_2$  の電子状態計算を行った。比較的バンドギャップの再現に優れた TB-mBJ 交換相関ポテンシャルを用いた。結晶構造パラメータは、報告値(実験値)を用いた。計算した電子状態を使用し、ボルツマン方程式に従って輸送係数を求める計算コード BoltzTraP を用いて、電気伝導度・Seebeck 係数・電子の熱伝導率を計算した。計算は、緩和時間近似と Rigid band 近似をもとで行った。

【結果と考察】 $AMN_2$  ( $SrTiN_2, BaZrN_2, BaHfN_2$ ) は、バンドギャップが 1.5 ~ 1.7 eV 程度の半

導体であることが示唆された。 $AMN_2$  の電子状態は、層に垂直方向( $zz$  方向)のバンド分散が、層に平行方向( $xx$  方向)のバンド分散に比べて小さく、伝導帯下端の等エネルギー面が筒状であることから、2 次元性の強い電子状態が形成される可能性が明らかになった。このため、電気伝導度や Seebeck 係数等の輸送係数においても、異方性(図 2)が確認された。同様の計算を行った 3 次元物質であるペロブスカイト型酸化物  $SrTiO_3$  と比べても、 $AMN_2$  の層に平行な面内方向( $xx$ )の熱電変換特性(Seebeck 係数等)は優れた特性を示す可能性が示唆された[2]。

図 2:  $BaZrN_2$  の熱電輸送特性の計算結果。

## References

- [1] 大久保勇男、森 孝雄、2014 年 第 61 回 応用物理学会春季学術講演会、18p-PG11-11.
- [2] I. Ohkubo, T. Mori, *Chem. Mater.* **26**, 2532 (2014).