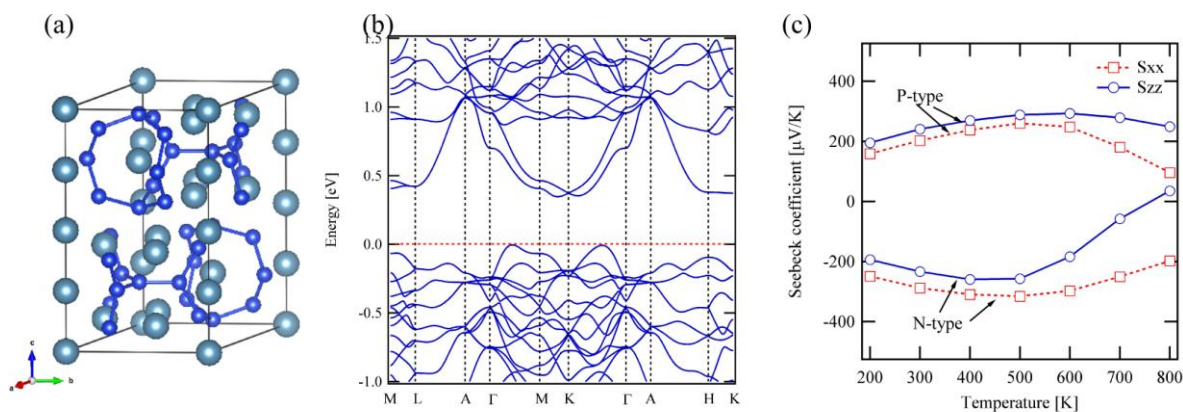


第一原理計算による半導体シリサイド Ca_3Si_4 の熱電特性First-principles calculation of thermoelectric properties of Ca_3Si_4 日立中研 [○] 簗内 真, 黒崎 洋輔, 早川 純Central Research Lab. Hitachi Ltd., [○]Shin Yabuuchi, Yosuke Kurosaki, Jun HayakawaE-mail: shin.yabuuchi.xj@hitachi.com

近年、環境・エネルギー問題や資源枯渇を背景に、未利用エネルギーの有効活用が期待されている。熱電変換素子は未利用熱エネルギーを活用できる可能性を秘めており、材料特性の向上が必要とされている。シリサイド系材料は低環境負荷・低コストの面で注目されているが、熱電変換特性が未知の材料系も多く存在する。本研究では、低環境負荷・低コストの観点よりシリサイド半導体 Ca_3Si_4 に着目した。 Ca_3Si_4 は Fig.1(a) に示すような複雑な結晶構造を有するため、低い熱伝導率を実現できる可能性がある。本研究では Ca_3Si_4 の熱起電力特性と熱伝導率評価を目的とし、第一原理計算により Ca_3Si_4 のゼーベック係数およびフォノン分散関係の評価を行った。計算では、擬ポテンシャルおよび平面波基底を用いた。交換・相関エネルギーは一般化密度勾配近似(GGA)により取り扱った。計算プログラムは VASP を用いた。

Fig.1(b) に Ca_3Si_4 のバンド構造を示す。計算によるバンドギャップの値は 0.35eV となり過去の報告と良く一致している[1]。 Ca_3Si_4 のバンド構造は伝導帯底も価電子帯頂上も Γ 点には無く、僅かなエネルギー変化で大きくフェルミ面形状が変化することが期待できる。Fig.1(c) に、キャリア密度を N 型および P 型それぞれで $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ として固定した場合のゼーベック係数の温度依存性を示す。P 型としては、 Ca_3Si_4 結晶の c 軸方向の特性が高く、最大で $300 \mu\text{V/K}$ となる。N 型としては、c 軸方向に垂直な方向の特性が高く $-300 \mu\text{V/K}$ 程度となる。発表では、詳細な熱電変換特性およびフォノン解析結果について報告する。

Fig. 1 (a) Crystal structure, (b) Band structure, and (c) Temperature dependence of Seebeck coefficients of Ca_3Si_4

【謝辞】

本研究は、経済産業省の「未来開拓研究プロジェクト」TherMAT の支援を受けて行われた。

[1] D. B. Migas, et al., J. Phys. Condens. Matter **19**, 346207 (2007)