

**電子状態計算による SrTiN<sub>2</sub> 層状金属窒化物の熱電変換性能の検討**  
**Evaluation of thermoelectric performances in SrTiN<sub>2</sub> layered complex metal nitrides**  
**using electronic structure calculations**

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】層状化合物は、高い熱電変換効率を実現する上で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、新しい熱電変換物質の研究対象として着目されている。これまで層状化合物の中でも、遷移金属酸化物やカルコゲナイド等の熱電変換特性が研究されてきた。本研究では、新しい層状化合物として、合成が困難であるため比較的物質開拓が遅れている層状金属窒化物に着目する。特に、AMN<sub>2</sub>(A, M=金属イオン)の化学式で記述される多成分系金属窒化物は、デラフォサイトや Na<sub>x</sub>CoO<sub>2</sub> 等を含む層状金属酸化物である AMO<sub>2</sub> 化合物群と同様に、さまざまな層状構造を示すことが知られている[1]。本研究では、AMN<sub>2</sub> 層状金属窒化物の一つである KCoO<sub>2</sub> 型結晶構造の SrTiN<sub>2</sub>(図)の電子状態計算を行い、熱電変換特性の検討を行った。

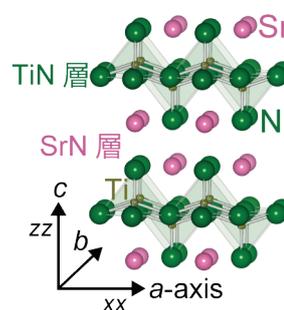


図 SrTiN<sub>2</sub> の結晶構造。

【計算方法】この研究の電子状態計算は、電子状態計算コード WIEN2k を用いて行った。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、報告されている実験値[2]を用いた。WIEN2k により計算された電子状態計算結果を使用し、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である 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】SrTiN<sub>2</sub> はバンドギャップが 1.55 eV 程度の半導体であることが示唆された。SrTiN<sub>2</sub> の電子状態は、層に垂直な方向(zz 方向)のバンド分散が層に平行な方向(xx 方向)のバンド分散に比べて小さいため、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 係数等の輸送係数も、高い異方性が確認された。同様の計算を行った 3 次元物質である SrTiO<sub>3</sub> と比べても、SrTiN<sub>2</sub> の層に平行な方向(xx 方向)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。

[1] D. H. Gregory *et al*, Inorg. Chem. **35**, 7608 (1996).

[2] G. Farault *et al*, Chem. Mater. **15**, 3922 (2003).