

層状窒化物 NaMN_2 ($\text{M}=\text{Ta}, \text{Nb}$) の電子状態と熱電輸送特性の次元性

Dimensionality of electronic structures and thermoelectric transport properties in layered complex nitrides NaMN_2 ($\text{M}=\text{Ta}, \text{Nb}$)

物材機構¹, JST-さがけ², [○]大久保 勇男^{1, 2}, 森 孝雄¹

National Institute for Materials Science (NIMS)¹, JST-PRESTO², [○]Isao Ohkubo^{1, 2}, Takao Mori¹

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

【はじめに】層状物質は、優れた熱電変換特性を示す低次元電子状態の形成と熱伝導率の低減化が期待されるため、熱電変換物質として着目されてきた。我々は、新しい層状物質として窒化物に着目している。これまで、 KCoO_2 型結晶構造と $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型結晶構造の d^0 電子系 AMN_2 ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ba}$, $\text{M}=\text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$) 層状窒化物の電子状態と電子輸送特性計算を行い、その次元性について議論してきた[1-5]。 KCoO_2 型 AMN_2 では、2次元性の強い電子状態と異方性の大きな熱電輸送特性が[1,3,5]、 $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型 AMN_2 では、3次元的な電子状態と異方性の無い熱電輸送特性が計算結果として得られている[2,4,5]。本研究では、同じ $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型 d^0 電子系 AMN_2 である NaTaO_2 と NaNbO_2 (図1) [6] の電子状態計算と熱電輸送特性計算を行い、その次元性を議論した[7]。

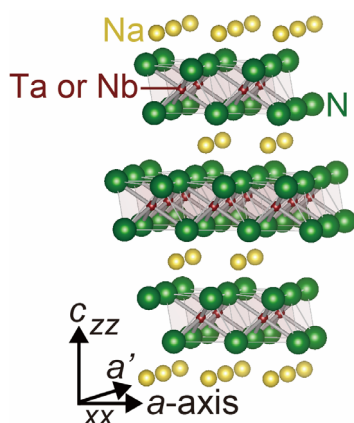


図1: $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型 NaMN_2 ($\text{M}=\text{Ta}, \text{Nb}$).

【計算方法】電子状態は WIEN2k コードを使用し、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て計算した。この電子状態の計算結果を使い、Boltzmann

方程式を用いた輸送係数計算コード BoltzTraP を使用し、緩和時間近似と Rigid band 近似の条件下で電気伝導度、Seebeck 係数、電子の熱伝導率を計算した。

【結果と考察】 $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型層状窒化物 NaTaO_2 , NaNbO_2 のバンドギャップは、それぞれ 2.19 eV, 1.53 eV 程度の半導体であった。同じ結晶構造の $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 型 SrZrO_2 , SrHfO_2 では、3次元的な電子状態を示し、輸送係数の異方性が見られなかったが[2,4]、この NaTaO_2 と NaNbO_2 では、3次元的な電子状態であるにもかかわらず、輸送係数の異方性が確認された[7]。また、酸化物熱電変換物質である d^0 電子系 3次元ペロブスカイト酸化物 KTaO_3 に比べ、大きな Seebeck 係数を示し、優れた熱電輸送特性を発現する可能性が示された。当日は、この輸送係数の異方性の起源について議論する。

References

- [1] 大久保勇男, 森 孝雄, 2014 年 第 75 回 応用物理学会秋季学術講演会, 18p-A7-11.
- [2] 大久保勇男, 森 孝雄, 2015 年 第 62 回 応用物理学会春季学術講演会, 13a-A22-7.
- [3] I. Ohkubo, T. Mori, *Chem. Mater.* **26**, 2532 (2014).
- [4] I. Ohkubo, T. Mori, *Inorg. Chem.* **53**, 8979 (2014).
- [5] I. Ohkubo, T. Mori, *Eur. J. Inorg. Chem.* 3715 (2015).
- [6] H. Jacobs et al, *J. Less-Common Met.* **146**, 147 (1989); *ibid* **191**, 51 (1993).
- [7] I. Ohkubo, T. Mori, *Chem. Mater.* **27**, 2765 (2015).