

InGaN の熱電特性

Thermoelectric properties of InGaN

都産技研 ○太田 優一

TIRI ○Yuichi Ota

E-mail: ota.yuichi@iri-tokyo.jp

環境負荷の低減を目指した新規熱電変換材料が探索されている。最近では III 族窒化物半導体もその候補として提案されており、InGaN では SiGe に匹敵する熱電性能を示すことが報告されている[1]。InGaN は組成を変えることによりキャリア濃度や熱伝導率(κ)が調整出来るため、性能指数 (ZT)を高める検討がなされている。これまで実験では低 In 組成の InGaN の熱電特性が多数報告されているが、高 In 組成の報告例はほとんどない[2]。そこで本研究では高 In 組成 InGaN の熱電特性をシミュレーションによって明らかにする事を目的とした。

シミュレーションは密度汎関数理論に基づいた第一原理計算と、Boltzmann 方程式による輸送係数計算(BoltzTrap コード使用[3])で行った。BoltzTrap では緩和時間近似および Rigid band 近似の条件下で計算を行っている。計算モデルは図 1 に示すようなスーパーセル内で III 族元素の取りうる配置を全て考慮し、エネルギー的に最も安定なものを採用している。さらに今回は実験値を基に緩和時間(τ)と熱伝導率を算出し、 ZT を見積もった。

図 2 に $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ の ZT の電子キャリア濃度依存性を示す。300 K では ZT の値が最大でも 0.07 程度であるが、温度が上昇するに伴い ZT も増加する。この傾向は既に報告のある $\text{In}_{0.17}\text{Ga}_{0.83}\text{N}$ と同様である[5]。低 In 組成の場合、キャリア濃度が $10^{19} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ 付近で ZT が最大値を示すようだが、今回の計算結果ではより低濃度の $10^{18} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ 以下で最大値を示した。このように ZT が最大化されるキャリア濃度は異なるが、高 In 組成の InGaN でも高温領域($\sim 1000 \text{ K}$)で熱電変換材料として活用出来る可能性がある事を見出した。

[1] B. N. Pantha *et al*, Appl. Phys. Lett. **92**, 042112 (2008). [2] N. Lu *et al.*, Semicond. Sci. Technol. **28**, 074023 (2013). [3] G. K. H. Madsen *et al.*, Comput. Phys. Commun. **175**, 67 (2006). [4] K. Momma *et al.*, J. Appl. Cryst. **41**, 653 (2008). [5] A. Sztein *et al.*, J. Appl. Phys. **110**, 123709 (2011).

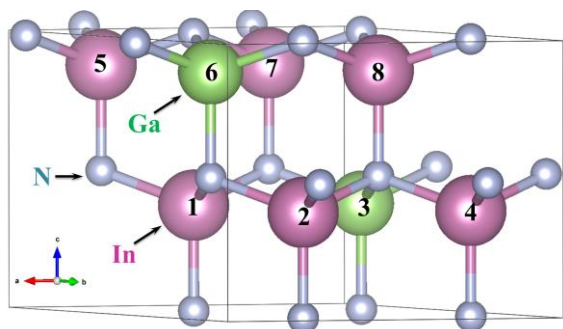


図 1. $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ の例.結晶構造は VESTA を用いて描画した[4].

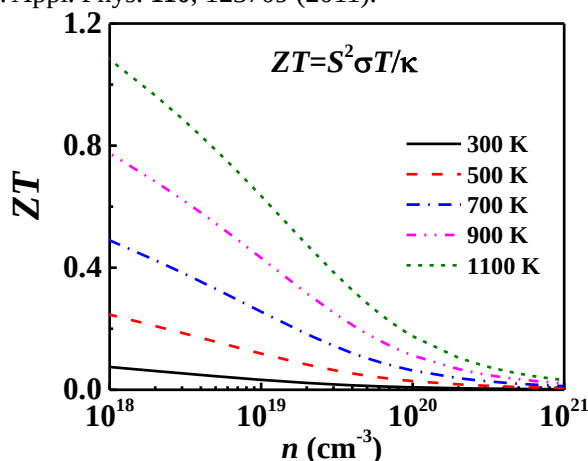


図 2. $\text{In}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ の ZT のキャリア濃度依存性.