

InN の熱電特性

Thermoelectric properties of InN

都産技研 [○]太田 優一TIRI ⁱ Yuichi Ota

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

最近 III 族窒化物半導体でもゼーベック係数などの熱電特性に関する報告が増えてきている。特に熱電変換材料への応用としては InN 系の混晶が有望視されており、室温において InGaN で 10 (mW/m・K)を超える出力因子(Power Factor;PF)を持つことが報告されている[1]。したがって、キャリア濃度やバンドギャップをチューニングすることによって更なる熱電性能の向上が期待されている。そこで本研究では、まず基本となる InN の熱電特性をシミュレーションによって明らかにすることを目的とした。

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[2])で行った。なお、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。

図 1 に各温度における PF を示す。なお、横軸の μ ($=E-E_f$)はケミカルポテンシャルを示しており、縦軸は緩和時間 τ を残した状態で表記してある。InN の緩和時間が概ね 10^{-14} (sec)のオーダーであると仮定すると、300 K においても 1 (mW/m・K)程度の PF を持つことが予測される。図 2 に C.Stiewe らが定義した性能指数 $Z_e T$ を示す[3]。この $Z_e T$ は緩和時間に依存しない形で計算することが可能であり、 ZT の上限値としての意味を有している。ここでは $Z_e T$ をゼーベック係数 S とローレンツ数 $L = 2.45 \times 10^{-8}$ (W Ω K⁻²)を使って算出した。図 2 より実用上の性能指数($ZT > 1$)を超えるにはキャリア濃度が少なくとも 10^{19} (cm⁻³)以下である必要があることが明らかとなった。また 10^{17} (cm⁻³)台のキャリア濃度であれば温度に依らず、 ZT が 1 を超える可能性が高いことを見出した。

[1] N. Lu *et al.*, Semicond. Sci. Technol. 28, 074023 (2013). [2] G.K.H. Madsen *et al.*, Comput. Phys. Commun.175, 67 (2006). [3] C. Stiewe *et al.*, J. Appl. Phys. 97, 044317 (2005).

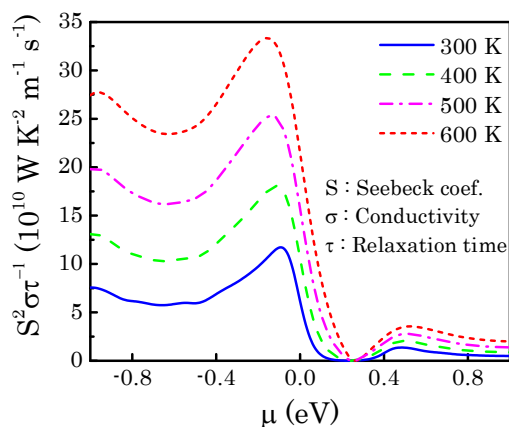
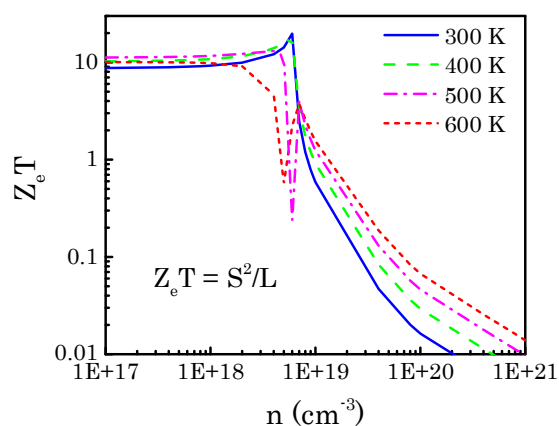


図 1. InN の PF の温度依存性.

図 2. InN の性能指数($Z_e T$)のキャリア濃度依存性.