

RZnAsO の電力因子の第一原理による解析

First-principles analysis on the power factor of RZnAsO

○(M2) 徳永 雄斗¹、臼井 秀知¹、黒木 和彦¹(1. 阪大理)

○Yuto Tokunaga¹, Hidetomo Usui¹, Kazuhiko Kuroki¹ (1.Osaka Univ.)

E-mail: tokunaga@presto.phys.sci.osaka-u.ac.jp

熱電材料の性能は電気伝導度 σ 、Seebeck 係数 S 、熱伝導率 κ を用いて無次元性能指数 $ZT = (\sigma S^2 / \kappa) T$ で与えられる。近年 BiCuSeO が 923K において、性能指数 $ZT \sim 1.1$ と高い値をもつことが分かった [1]。BiCuSeO は伝導層の CuSe 層とブロック層の BiO 層から構成される層状化合物である。BiCuSeO の熱電性能は比較的低い熱伝導率 $\kappa \sim 0.5 \text{ W/m K}$ と中程度の電力因子 $\sigma S^2 \sim 6 \mu\text{W/cm K}^2$ によるものであり [1]、高温における電力因子の温度・ドーピング量依存性 [2, 3] と熱伝導率 κ [3] については、第一原理計算から実験と整合する結果が得られている。

本研究では、BiCuSeO と同じ ZrCuSiAs 構造 (空間群 P4/nmm) をもつ RZnAsO ($R=\text{La, Bi, Y}$) の熱電性能について、バンド構造の観点から理論的に評価した。熱電性能の評価には Boltzmann 輸送理論のもとで、緩和時間 τ が波数に依らないとする近似を用いた。その結果、RZnAsO は熱電材料の有力な候補物質となる可能性があり、特に Y 系は BiCuSeO よりも大きな電力因子が期待できると分かった。発表ではその理由として、Bi 系と Y 系の価電子帯の非等方性や、価電子帯に $\sigma S^2 \sim 50 \mu\text{W/cm K}^2$ (300 K) の高性能熱電材料である Na_xCoO_2 においてみられる「プリン型構造」[4] を有することなどを挙げて、熱電性能との関係について議論を行う予定である。

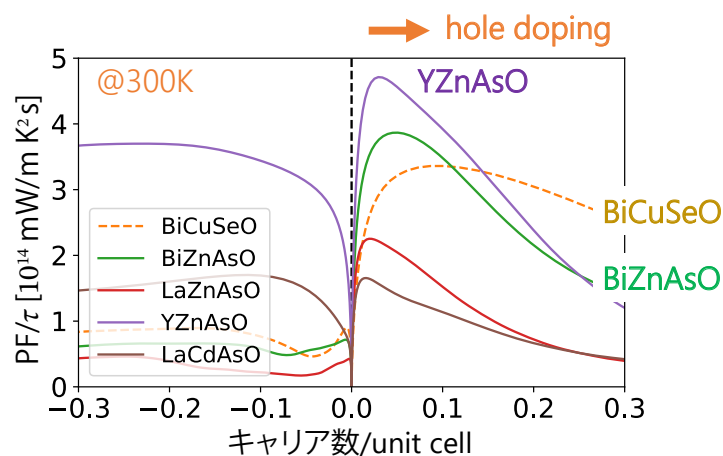


図 1: RZnAsO の電力因子/緩和時間の比較。スピン軌道相互作用は考慮していない。

- [1] J. L. Lan *et al.*, Adv. Mater. **25**, 5086 (2013).
- [2] D. Zou *et al.*, J. Mater. Chem. A **1**, 8888 (2013).
- [3] J. Ding *et al.*, New J. Phys. **17**, 0 (2015).
- [4] K. Kuroki *et al.*, J. Phys. Soc. Japan **76**, 3 (2007).