

第一原理計算による L1₂ 型合金における電子-格子相互作用因子の評価

First-principles study on electron-phonon coupling factor of L1₂ metal alloys

日立研開, °篠内 真, 黒崎 洋輔, 早川 純

Hitachi Ltd., Research & Development Group,

°Shin Yabuuchi, Yosuke Kurosaki, and Jun Hayakawa

E-mail: shin.yabuuchi.xj@hitachi.com

環境・エネルギー問題や資源枯渇問題の解決に向け、未利用熱エネルギーを有効活用するために、熱電変換素子の高効率化が必要とされている。熱電変換材料の性能指数は ZT ($ZT = S^2\sigma T/\kappa$: S :ゼーベック係数, σ :電気伝導率, κ :熱伝導率) で表される。高効率の熱電変換材料に求められる性質は, S と σ が高く, κ が低い材料である。近年, 金属/絶縁体接合界面において, 金属材料の厚さと電子-格子相互作用に依存して, 界面熱抵抗が増大する現象が注目されている[1]。これは, 単一材料由来の物理現象ではなく, 異種材料界面によって生じる電子温度と格子温度の非平衡状態が重要となる。我々はこの現象を利用し, 異なる2つの材料を組み合わせた2層構造によって単一材料以上に熱伝導率を低減でき, 熱電変換性能を大幅に向上できることを報告した[2]。現実的なデバイスを作製する場合, 電子-格子相互作用因子が低い金属が求められる。本研究では, 第一原理計算により L1₂ 型 (Cu₃Au 構造)の合金の電子-格子相互作用因子を評価した。図1(a)に L1₂ 型 Cu₃Au と面心立方(FCC)構造 Cu と Pt の電子状態密度を示す。

Cu₃Au と Cu のフェルミエネルギー(E_F)近傍の電子状態密度は小さい。一方, Pt は E_F 付近にピークを持ち電子状態密度が大きな金属である。図1(b)に Eliashberg スペクトル関数を示す。Cu₃Au は Cu に比べ全体にスペクトル関数が低エネルギー側にシフトしており, Cu より重元素である Au よりフォノンの周波数が低下すること反映している。一方, Pt の Eliashberg スペクトル関数は Cu と比較して大きい。Pt は E_F 近傍の電子状態密度が大きいため, Eliashberg スペクトル関数の値も大きくなる。また, 電子-格子相互作用因子を評価した結果, Cu₃Au の値は Cu に比べ減少し, Pt と比較して1桁低い値である。発表では, 様々な元素種の L1₂ 型合金の電子-格子相互作用因子と格子熱伝導率の関係についても報告する予定である。本成果は, 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務の結果得られたものである。

[1] A. Majumdar et al., Appl. Phys. Lett. 84, 4768 (2004)

[2] 篠内, 他 2017 応用物理学会秋季 7a-C22-6

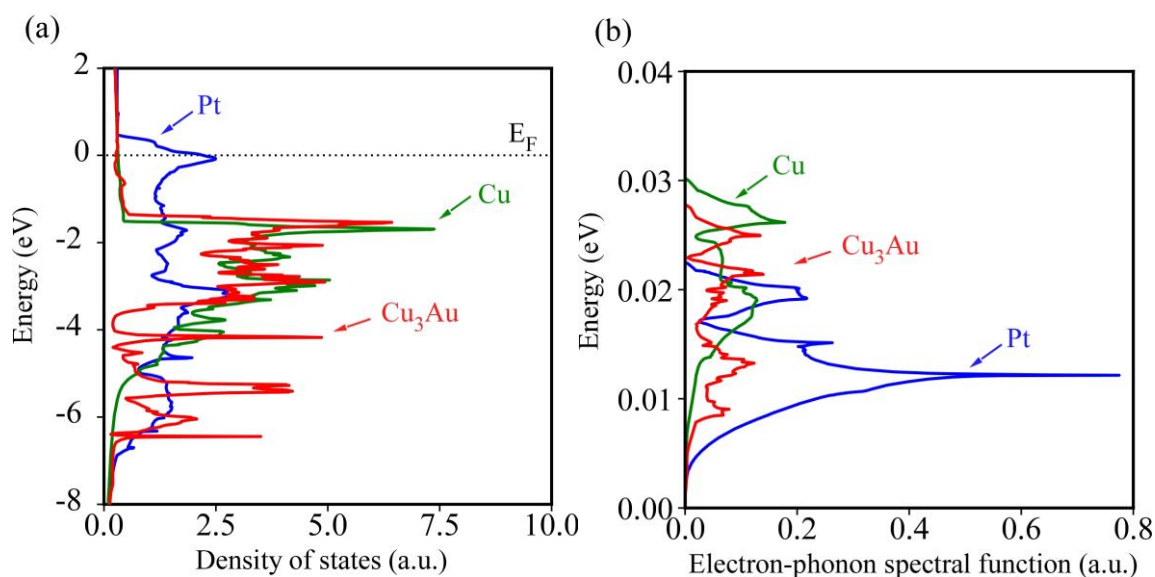


Figure 1 (a) Density of states and (b) Eliashberg spectral function of Cu₃Au, Cu and Pt