

122 系 Zintl 相化合物における熱電性能の第一原理計算による解析

First principles study on the thermoelectric performance of

122-type Zintl phase compounds

阪大理 ^{○(PC)}白井 秀知, 黒木 和彦Osaka Univ., ^{○(PC)}Hidetomo Usui, Kazuhiko Kuroki

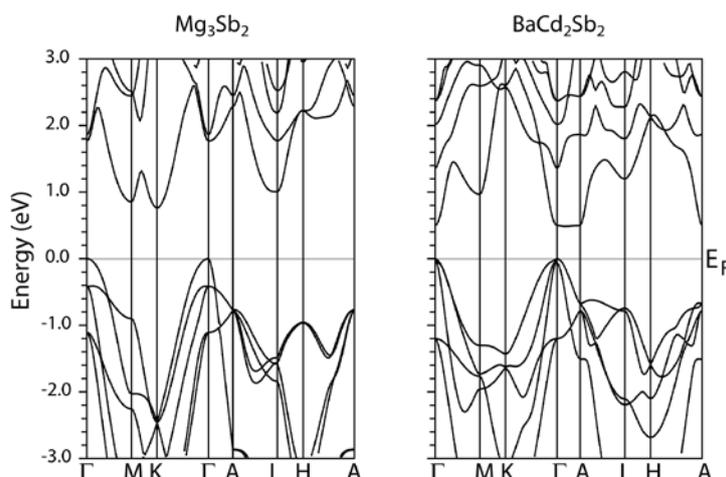
E-mail: h_usui@presto.phys.sci.osaka-u.ac.jp



エネルギー問題に対する関心が高まるなか、温度勾配による発電である熱電効果に関する研究は基礎・応用の両面からその重要度を増している。熱電性能の評価には、ゼーベック係数 S 、電気伝導度 σ 、熱伝導度 κ 、温度 T として、取り出せる電力の指針である電力因子 $PF = \sigma S^2 T$ と、総合評価である無次元性能指数 $ZT = (PF/\kappa)T$ が用いられ、 $ZT > 1$ が実用化の目安とされる。

Zintl 相は $ZT > 1$ を持つ物質群として知られており、14-1-11 系、122 系などの様々な系が存在するが[1]、特に近年は 122 系 (AB_2X_2) に注目が集まっている。CaZn₂Sb₂ のように A がアルカリ土類金属やランタノイド、X がニクトゲンなどで構成されるため、この系だけでも多くの化合物が存在する。この系では n 型、p 型ともに $ZT > 1$ が得られ[1-3]、比較的大きな電力因子と小さな熱伝導度を併せ持つ。X=Sb が実験、理論ともに数多く研究されているが[1]、他のニクトゲンに対する研究は多くない。そこで本研究では、X=P, As, Sb, Bi の 30 以上の仮想物質を含む 122 系 Zintl 相化合物を対象とし、熱電性能の計算を行った。第一原理計算とボルツマン輸送理論を用いて電力因子を計算し、122 系における高性能候補物質を探索することを目的とした。

122 系のバンド構造 (図 1) を見ると、p 型では Γ 点、n 型では Γ, M, K 点の複数のバンドが存在するため、それぞれ物質ごとに縮重度が異なる。発表では、各物質のバンド構造の特徴と、縮重度と熱電性能の関係性、大きな電力因子を持ちうる化合物について議論する予定である。

図 1. Mg₃Sb₂ と BaCd₂Sb₂ のバンド構造[1] レビューとして J. Shuai *et al.* *Materials Today Physics* **1**, 74 (2017).[2] H. Tamaki, H.K. Sato and T. Kanno, *Adv. Mater* **28** 10182 (2016).[3] X.-J. Wang *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 092106 (2009).