

非平衡グリーン関数法を活用した密度汎関数理論による $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ クラスレートの輸送特性

Transport Properties of $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ Clathrates by

Density Functional Theory and Non-Equilibrium Green's Function Method

山陽小野田市立山口東理大 ○阿武宏明, (M1)古賀雄大, 岡本和也

Sanyo-Onoda City Univ. ○Hiroaki Anno, Yudai Koga, and Kazuya Okamoto

E-mail: anno@rs.socu.ac.jp

Ge クラスレート半導体は中高温領域の熱電材料の候補として注目されている。 $Ba_8Ga_xGe_{46-x}$ 系や $Ba_8Au_6Ge_{40}$ 系クラスレートにおいて組成最適化により p 型材料が得られることが知られているが、より低コストの p 型材料の開発が望まれている。そこで、本研究では Cu を含む p 型クラスレートの探索を目的とし、 $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ クラスレートの熱電特性を調査した。本研究では、非平衡グリーン関数 (NEGF) 法を活用した密度汎関数理論 (DFT) に基づく輸送特性の計算を実施した。

NEGF+DFT 法による電子輸送特性の計算は、QuantumATK パッケージを使用した。 $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ の結晶構造は Akai ら¹⁾が報告した構造を使用した。透過係数スペクトルの計算から熱電特性を計算した。

Fig. 1 はエネルギー分散 ($E-k$) 関係を示す。分散関係は Akai ら¹⁾の $Ba_8Au_6Si_{40}$ の結果と特徴が類似している。Fig. 1 より、 $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ のフェルミエネルギー E_F は価電子帯中にあり伝導タイプは p 型であると推察される。

Fig. 2 は 300 K, 600 K, および 900 K におけるゼーベック係数のスペクトルを示す。これより、 $Ba_8Cu_6Ge_{40}$ においては n 型よりも p 型の方が高いゼーベック係数が期待できる。 $Ba_8Cu_xGe_{46-x}$ のように組成制御を行いフェルミエネルギー E_F (キャリア濃度) の調整ができれば p 型特性の最適化が期待できる。

今後、実験との比較・検証を進めると共に組成の最適化について展開する予定である。

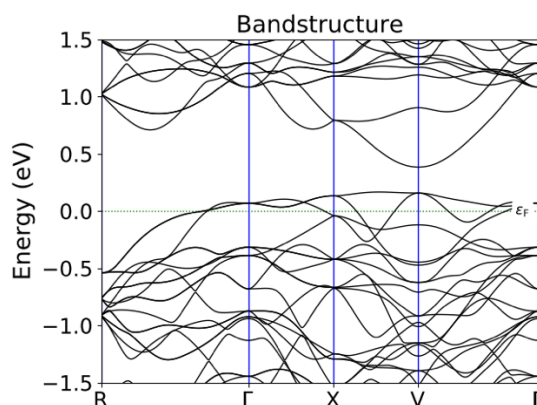


Fig. 1. Energy dispersion for $Ba_8Cu_6Ge_{40}$.

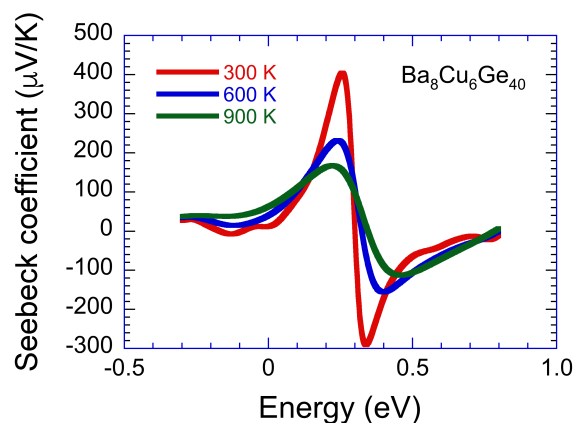


Fig. 2. Seebeck coefficient as a function of energy.

本研究は、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)の委託業務および JSPS 科研費 JP20K05136 の助成の結果得られたものである。

参考文献

- 1) K. Akai, et al., Proc. Int. Conf. on Thermoelectrics (ICT2005), (2005) p. 215.