

有限温度効果と不純物分布の不規則性を考慮した Mg₂Si 系材料の電気伝導率計算

Theoretical Study on Electrical Conductivity of Disordered Impurity-Doped Mg₂Si at Finite Temperatures

○島根大 NEXTA¹, ○平山 尚美

Shimane Univ. NEXTA¹, Naomi Hirayama²

E-mail: n.hirayama@riko.shimane-u.ac.jp

近年、工場や車両からの廃熱の再資源化や、IoT 社会に向けて環境熱を利用した各種センサー、無線通信機器の自立発電など、熱電変換技術の幅広い応用が期待されている。しかし主要な熱電材料は Te や Pb 等の重金属を含むものが多く、環境負荷の点で課題がある。環境低負荷かつ高出力な熱電材料開発が喫緊の課題であり、理論による材料設計指針の取得が強力な武器となり得る。

本研究では無毒、軽量、安価といった特長をもつ環境低負荷型熱電材料である Mg₂Si に着目し、不純物添加による電子状態と輸送特性の変化を理論的に解析する。擬ポテンシャル法などの第一原理計算手法は、基本的に有限温度効果を考慮できず、また、計算コストの高さから低濃度ドーピングや不純物の不規則分布を扱いにくいという問題があった。そこで、本研究では、KKR-CPA 法に基づく第一原理電子状態計算と線形応答理論による伝導率計算を実施する。これにより、有限温度効果や不純物原子のランダム配置を考慮できる上、緩和時間近似を課す必要がないため、高精度な輸送係数計算ができると期待される。

本研究では電子状態計算ソフト Akai KKR (Machikaneyama) を使用した。まず、Sb (n 型)、Ag (p 型) ドープ系に対し、有限温度における電子状態計算を行なった。結果の例として、Sb 0.5% ドープ系の状態密度を図 1 に示す。バンドギャップ内に不純物準位は形成されず、フェルミ準位が伝導帯内に位置する n 型の状態が得られた。この電子状態を基に電気伝導率を計算した結果を表 1 に示す。Pure Mg₂Si と比較して、Sb 系では伝導率が高く、また、温度上昇に伴う伝導率の増加も再現できた。本発表では、伝導率に対する不純物濃度依存性についても紹介し、この解析手法の材料開発への応用について議論する。

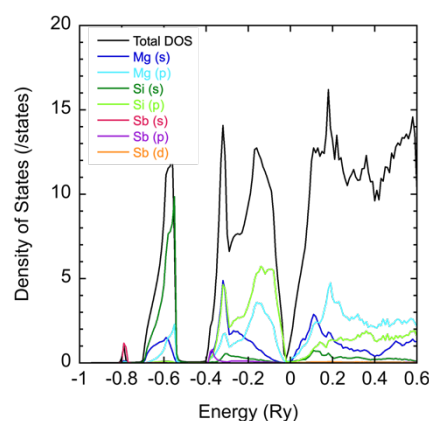


Figure 1 : Densities of States of Sb-doped Mg₂Si.

Table I : Electrical conductivities (S/cm) of pure and 0.5 % Sb-doped Mg₂Si at different temperatures.

温度	0 K	300 K	600 K
Pure Mg ₂ Si	0	1.84	7.36
0.5% Sb-doped Mg ₂ Si	14400	28800	29000