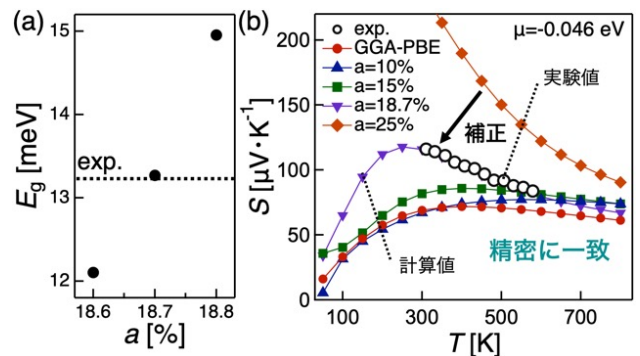


電子状態計算は実験系研究者にも利用可能な簡単で有用なツールの一つとなり久しい。特に、熱電発電材料や太陽電池材料は電子状態と材料機能とが直接的に相関しており、バンド分散や状態密度の計算値から得られる知見は大きい。今回は、電子状態計算を活用するために必要な基礎的知見について解説するとともに、狭禁制帯幅半導体である珪化ストロンチウムについて実験と計算との相補的手法を用いた精密材料解析への応用例を紹介する。

珪化ストロンチウム( $\alpha$ - $\text{SrSi}_2$ )は無毒で地殻中に豊富な元素から構成される0.1 eV未満の禁制帯幅をもつ半導体であることが実験的に報告されている。その電子状態を制御することにより、両極性型の低温熱電材料の有望候補である<sup>[1,2]</sup>他、Weyl半金属物性の発現が予想されている。

通常の密度汎関数法による計算では禁制帯が消滅するため $\alpha$ - $\text{SrSi}_2$ のバンド分散は金属として算出され、また、その物性値は禁制帯幅に対して超敏感性を有する。禁制帯幅を補正するため幾つかの第一原理的な計算手法を用いても、実材料の輸送特性を再現するために必要なmeV単位の精度を希求することは原理的に難しい。更に、実験により合成した材料では計算に用いる結晶構造モデルへと反映することが困難な結晶学的な不完全性を有しており、電子輸送特性の実験値を計算で精密解析することには限界が生じる。

本研究では混成汎関数を用いた擬ポテンシャル法を採用し、キャリア密度の実測値から推定した禁制帯幅からHartree-Fock交換積分の混合率(mixing parameter:  $a$ )を決定し、化学ポテンシャルも補正することにより、Boltzmann輸送方程式から算出した熱起電力は、Fig. 1に示すように実験値を精密に再現した。



**Fig. 1** (a) Calculated  $E_g$  as a function of the mixing parameter  $a$ , and (b) the calculated Seebeck coefficients  $S$  with respect to temperature  $T$ .

## 参考文献

- [1] **D. Shiojiri**, et al., *J. Appl. Phys.* **130**, 215103-1-11 (2021).
- [2] **D. Shiojiri**, et al., *J. Appl. Phys.* **129**, 115101-1-9 (2021).