

Y-B-Si 化合物の合成と熱電的性質

Synthesis and thermoelectric properties of Y-B-Si compounds

¹ 物材機構, ² 筑波大学, ³ 広島大学, ⁴ 東北大学 ○森 孝雄 ^{1,2,3}, David Berthebaud¹,野村明子⁴, 西島一志^{1,2}, 牧涼介^{1,2}, 湯蓋邦夫⁴, 宍戸統悦⁴¹NIMS, ²Univ. Tsukuba, ³Hiroshima Univ., ⁴Tohoku Univ.°T. Mori^{1,2,3}, D. Berthebaud¹, A. Nomura⁴, H. Nishijima^{1,2}, R. Maki^{1,2}, K. Yubuta⁴, T. Shishido⁴

E-mail: MORI.Takao@nims.go.jp

はじめに：本研究の大きな目的としては、炭素などに比べてまだ十分開拓されていないホウ素などのネットワーク構造物質の物性開発において、新規なネットワーク構造の発現・制御方法に注目して、新たな機能性材料を見出すことである[1]。熱電材料については今特に世界中で研究開発が急ピッチで進められている[2]。ホウ素ネットワーク構造物質はホウ素の強固な共有結合から来る高温安定性・化学安定性を有しており、原子ネットワークに由来する本質的な低熱伝導率も有していて、中高温熱電変換材料として期待される。p 型ボロンカーバイドは熱電材料としては数少なく以前実用化された実績を持つ。また、最近、同一材料で、異種ドーパント無しで優れた p、n 制御 (+400 $\mu\text{V/K}$ 超 $\sim$ -200 $\mu\text{V/K}$ 超) に成功したアルミノボライドも見出された[3]。今回は、ホウケイ化合物の熱電的性質の開発を進めたので、報告する。

実験：高温で良好な p 型熱電材料の $\text{YB}_{44}\text{Si}_2$ において、亜鉛添加によるモルフォロジー変化により大幅な熱電的性質の向上が得られているが[4]、ロジウムドーピングにより、n 型への転換も得られている。結晶構造解析により、ロジウムやニッケルドープ体において、遷移金属が一部ホウ素性二十面体のサイトに入り込んでいることが示唆され (右図上)、遷移金属の intrinsic なドーピングに成功していることが明らかになった。ネットワーク内への本質的なドーピングは材料としての制御性を格段に上げる。一方で、Y-B-Si の別の系、 $\text{YB}_{18}\text{Si}_5$ に関して (右図下)、初めて、熱電的性質の評価が可能な試料の創製に成功した。 $\text{YB}_{18}\text{Si}_5$ も新規な良好な p 型高温熱電材料として見出されたので、当日詳細を報告する。

[参考文献]

1. T. Mori, in *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare-earths*, Vol. 38, (North-Holland, Amsterdam, 2008) 105-173; in *Modules, Systems, and Applications in Thermoelectrics*, (CRC Press, London, 2012) 14.
2. *Thermoelectric Nanomaterials*, ed. K. Koumoto and T. Mori, (Springer, Heidelberg) in press (2013).
3. S. Maruyama, et al., Appl. Phys. Lett. 101 (2012) 152101.
4. T. Mori et al., Dalton Trans. 39, 1027 (2010). *Hot Article*

