

遷移金属を含む多元素置換 Si クラスレートの熱電特性

Thermoelectric Properties of Multiple Element Substituted Silicon Clathrate

Containing a Transition Metal

山陽小野田市立山口東理大工, [○](M1)前島 理佐, (B)和田 雄大, 岡本 和也, 阿武 宏明

Tokyo Univ. Sci., Yamaguchi, [○]Risa Maejima, Takehiro Wada, Kazuya Okamoto, Hiroaki Anno

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

緒言

Si 系クラスレートは低価格・低環境負荷な元素から成る熱電材料として注目されている。現在、キャリア濃度が最適値より高いため、高い ZT が得られていない。そこで、Si 系クラスレートを多元素置換¹することで材料の高性能化を狙う。本研究では、高価数である遷移金属元素 Au, Ga, P の元素置換に関して調査した。

実験方法

アーク溶解と放電プラズマ焼結を併用して仕込組成 $\text{Ba}_8\text{Au}_x\text{Ga}_y\text{Si}_{46-x-y}\text{P}_z$ ($x = 1, 2$; $y = 16-3x$; $z = 1, 2$) の焼結体を作製した。X 線回折(XRD), ゼーベック係数 S , 電気伝導率 σ および熱伝導率 κ の測定を行った。

結果と考察

XRD の結果から、主相がクラスレート相であることを確認した。Au 置換によって(3 2 0)面の回折ピークが減少しており、Au は 6c サイトを優先占有していることが示唆された。同時に Si 不純物相の増加も観測された。

Fig. 1 より、Au 組成 x が高い程、ゼーベック係数が高い傾向があり、Au 組成 x が一定で P 組成 z が高い程、ゼーベック係数は低い傾向がある。Fig. 2 より、Au 組成 x が高い程、電気伝導率は低い傾向があり、Au 組成 x が一定で P 組成 z が高い程、電気伝導率は高い傾向がある。この結果から、元素置換による S と σ の変化はキャリア濃度の変化によると示唆された。

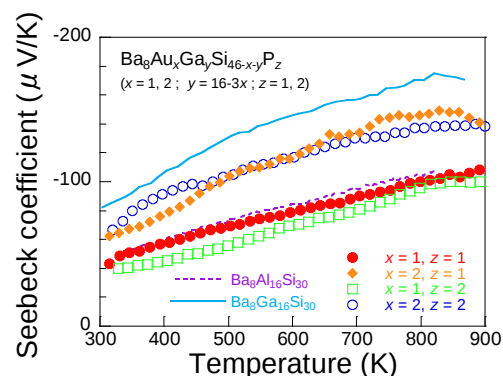


Fig. 1. Seebeck coefficient vs. temperature.

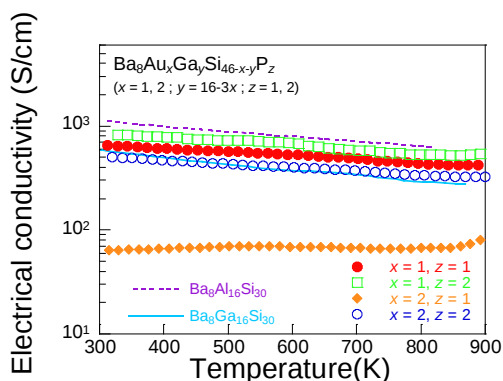


Fig. 2. Electrical conductivity vs. temperature.

結言

Si クラスレートに Au, Ga, P を置換する手法により、熱電特性の制御が可能であることが確認できた。今後、Au, Ga, P 組成の最適化による性能向上について検討する。

謝辞

この成果は NEDO の委託業務の結果得られたものである。

文献

1. Hiroaki Anno et al., Jpn. Soc. Powder. Powder. Metallurgy. **62**, 194-199 (2015).