

トンネル構造を有する  $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  の熱電特性Thermoelectric properties of  $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  with tunnel structures○菅野 雅博<sup>1</sup>, 山田 高広<sup>1,2</sup>, 山根 久典<sup>1</sup> (1. 東北大多元研, 2. JST さきがけ)○Masahiro Kanno<sup>1</sup>, Takahiro Yamada<sup>1,2</sup>, Hisanori Yamane<sup>1</sup>

(1. IMRAM Tohoku Univ., 2. JST-PRESTO)

E-mail: yamataka@tagen.tohoku.ac.jp

【緒言】  $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  には準安定相 (*hP* 相, 空間群  $P6_122$ , 図 1) と安定相 (*tI* 相, 空間群  $\bar{I}42d$ , 図 2) の多形が存在し, 両相ともに Zn と Sn で構成される骨格構造内のトンネル空間に Na サイトが位置した結晶構造が報告されている<sup>1)</sup>. 最近, *hP* 相と同型構造でトンネル構造を有した  $\text{Na}_{2+x}\text{Tr}_{2+x}\text{Sn}_{4-x}$  ( $\text{Tr} = \text{Al}, \text{Ga}$ ) の焼結体試料が, 室温近傍で *n* 型の高い熱電特性 ( $\text{Tr} = \text{Al}$ :  $ZT = 0.15$ ,  $\text{Tr} = \text{Ga}$ :  $ZT = 0.98$ ) を示すことが明らかにされた<sup>2,3)</sup>. これらの化合物と同型または類似構造の  $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  の両相は高い熱電特性を示すことが期待されるが, これまで熱電特性の報告例はない. 本発表では,  $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  の *hP* 相および *tI* 相のインゴット試料を作製し, それらの熱電特性を調べた結果を報告する.

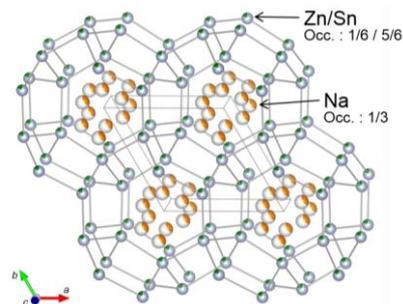
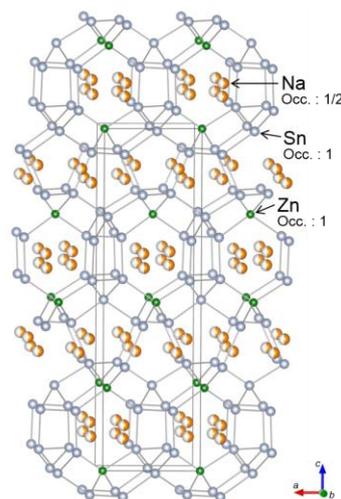
【実験】 大気中で Zn と Sn を, Ar 雰囲気グローブボックス内で Na を,  $\text{Na} : \text{Zn} : \text{Sn} = 2 : 1 : 5$  のモル比に秤量した後, Ar 雰囲気中で BN 製の坩堝の中に投入し, ステンレススチール製の容器内に封入した. これらを電気炉で 773 K で 10 h 加熱した後, 室温まで炉冷して *hP* 相のインゴット試料を作製した. *tI* 相の試料は, 703 K で 10 h 加熱し,  $-0.5 \text{ Kmin}^{-1}$  の速度で徐冷した後に 523 K で 48 h アニールすることで得られた. 粉末 XRD 法により試

料中の生成相を同定した. 試料の電気伝導率( $\sigma$ ), ゼーベック係数( $S$ ), および熱伝導率( $\kappa$ )を, それぞれ直流四端子法, 温度差起電力法, およびホットディスク法を用いて Ar 雰囲気中で測定した.

【結果】 作製された *hP* 相および *tI* 相のインゴット試料の密度は, 各相の理論密度とほぼ等しかった. *hP* 相試料の 295 K における電気伝導率( $\sigma$ ), ゼーベック係数( $S$ ), および熱伝導率( $\kappa$ )は, それぞれ  $1.07 \times 10^5 \text{ S m}^{-1}$ ,  $-111 \mu\text{V K}^{-1}$ , および  $1.87(2) \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  であった. また, *tI* 相試料の 295 K での  $\sigma$ ,  $S$ , および  $\kappa$  は,  $2.76 \times 10^2 \text{ S m}^{-1}$ ,  $-455 \mu\text{V K}^{-1}$ , および  $0.61(1) \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  であった. これらの測定値から算出される *hP* および *tI* 相試料のパワーファクター( $PF$ )と無次元性能指数( $ZT$ )は, それぞれ  $1.3 \times 10^{-3} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$  ( $PF$ ) と  $0.21$  ( $ZT$ ), および  $5.7 \times 10^{-5} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$  ( $PF$ ) と  $0.03$  ( $ZT$ ) であった.

参考文献 1) S. Stegmaier *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, **2013**, 135, 10654–10663, 2) M. Kanno *et al.*, *Chem. Mater.*, (in press), 3) T. Yamada *et al.*, *Adv. Mater.*, **2015**, 27, 4708–4713.

謝辞: 本研究は日本技術振興機構(JST)さきがけの助成を受けて行われた.

図1 *hP*- $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  の結晶構造.図2 *tI*- $\text{Na}_2\text{ZnSn}_5$  の結晶構造.