

フルホイスラー合金 Co_2MnSi のキャリア熱伝導率と格子熱伝導率Carrier and Lattice Thermal conductivities of Co_2MnSi full-Heusler alloy東北大院工¹ °林 慶¹, 宮崎 譲¹Tohoku Univ.¹, °Kei Hayashi¹, Yuzuru Miyazaki¹

E-mail: hayashik@crystal.apph.tohoku.ac.jp

近年、ハーフホイスラー化合物とフルホイスラー化合物の熱電性能の研究が盛んに行われている。フルホイスラー化合物の中には、計算で求められた $z_e T = S^2 \sigma T / \kappa_e$ が 0.9 に達すると報告されているものもある [1]。ただし、そういった計算の多くはゼーベック係数 S 、緩和時間 τ で規格化した電気伝導率 σ / τ およびキャリア熱伝導率 κ_e / τ を使っており、格子熱伝導率 κ_l が含まれていないことに注意する必要がある。本研究では、比較的高い出力因子 (550 K で $2.9 \times 10^{-3} \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$) を示す Co_2MnSi フルホイスラー合金 [2] の熱伝導率を測定し、計算結果と比較してキャリア熱伝導率と格子熱伝導率を算出したので報告する。

既報 [2] の作製法にしたがって Co_2MnSi を作製し、レーザーフラッシュ法を用いて 298 K から 1000 K における熱伝導率を測定した。計算には電子状態計算プログラム WIEN2k [3] と熱電性能計算コード BoltzTraP [4] を用いた。電子状態計算に用いた交換相関ポテンシャルは PBE-GGA である。 Co_2MnSi の結晶構造は $L2_1$ 構造であるとした。構造最適化によって平衡状態の磁気状態と格子定数を求め、そのときの電子状態および熱電性能を計算した。

図 1 に測定した熱伝導率 κ_{total} を示す (赤丸)。 κ_{total} は $78.8 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ (298 K) から $20.8 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ (1000 K) まで温度上昇とともに減少した。電気伝導率の測定値 [2] と計算で得た σ / τ を比較して τ を算出し、 κ_e / τ の τ と同じであると仮定して κ_e を算出した (緑三角)。その結果、 κ_e は κ_{total} の約半分に過ぎないことがわかった。 κ_{total} から κ_e を差し引いた格子熱伝導率 κ_l は 298 K で $44.3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ であり、温度上昇とともに減少して、1000 K では $8.91 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ となった。 κ_e と同程度に大きい κ_l は、フルホイスラー化合物の結晶構造が持つ高い対称性に由来するものと考えられ、他のフルホイスラー化合物でも同様に κ_l が高い可能性が示唆される。

[1] S. Yousuf, D. C. Gupta, Indian J. Phys. **91**, 33 (2017).

[2] K. Hayashi, M. Eguchi, Y. Miyazaki, J. Electr. Mater. **46**, 2710 (2017).

[3] P. Blaha et al., WIEN2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Technische Universität Wien, Austria, 2001).

[4] G. H. K. Madsen and D. J. Singh, Comput. Phys. Commun., **175**, 67 (2006).

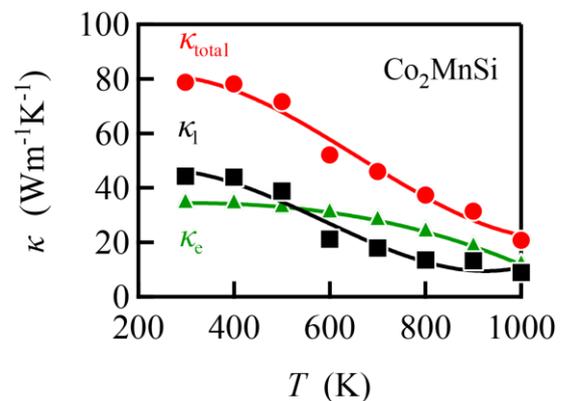


図 1 Co_2MnSi の熱伝導率 (赤丸 : κ_{total} 、緑三角 : κ_e 、黒四角 : κ_l)。