Mn 基フルホイスラー合金の熱電性能計算

Calculation of thermoelectric properties of Mn-based full-Heusler alloys

東北大院工 [1] ○林 慶 [1], 宮崎 讓 [1]

Tohoku Univ. [1], ○Kei Hayashi[1], Yuzuru Miyazaki[1]

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

金属は電気伝導率が高くて堅く、異種金属と堅牢な接合を形成できることから、熱電発電デバイス用「熱電材料」としての可能性を秘めている。最近、我々は Co 基フルホイスラー合金 Co_2YZ の中で、ハーフメタル強磁性体の Co_2MnSi が、550 K で~2.9×10^{-3} W/K^{2}m の高い出力因子(n 型)を示すことを明らかにした[1]。Co_2MnSi は電気伝導率が高いだけでなく、ゼーベック係数の絶対値も比較的高いことが特徴である。本研究では、Mn 基フルホイスラー合金 Mn_2YZ の熱電性能を調査したので報告する。

計算には電子状態計算プログラム WIEN2k [2]と熱電性能計算コード BoltzTraP [3]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。Mn_2YZ の結晶構造はすべて $L2_1$ 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。

300 K におけるゼーベック係数 S および散乱緩和時間 τ で割った電気伝導率 σ/τ を図 1 に示す。横軸は価電子数 VEC であり、赤丸が Mn_2YZ の計算結果、青丸は Co_2YZ の文献値[1]を示している。Co_2YZ のゼーベック係数は負であるのに対し、Mn_2YZ では正になるものも見られた。多くのフルホイスラー合金と同様に VEC = 24 の場合に Mn_2YZ は非磁性の擬ギャップ系金属となり、高い正のゼーベック係数を示した。VEC が 24 より小さい場合はハーフメタル強磁性となり、正の比較的高いゼーベック係数と負の大きなゼーベック係数が得られることがわかった。電気伝導率は VEC = 24 の場合と同等かそれ以上であり、強磁性ハーフメタル Mn_2YZ で高い出力因子が得られるものと期待される。

本研究は熱・電気エネルギー技術財団の助成のもと行われた。

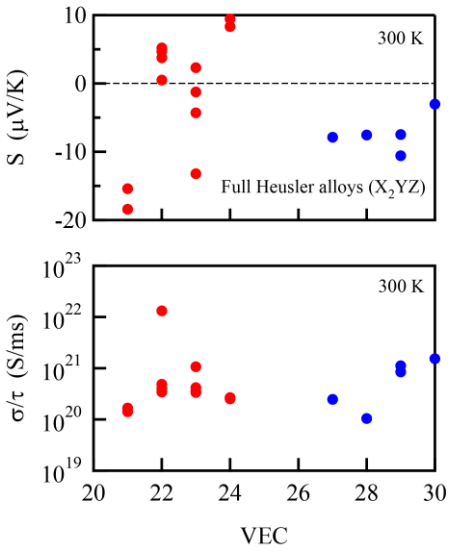

Fig. 1: Calculated S and σ/τ of Mn_2YZ (red) and Co_2YZ (blue; [1]).

[1] K. Hayashi et al., J. Electron. Mater., (first online), DOI: 10.1007/s11664-016-4944-0.

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

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

© 2017年 応用物理学会