

高出力因子を目指した Yb 系新規金属間化合物/合金の探索研究

High power factor thermoelectric materials : An exploration of Yb compounds / alloys

産総研¹ ○山本 淳¹, 木方 邦宏¹, 李 哲虎¹, 村田 正行¹, 西当弘隆¹, 今井庸二¹

AIST¹ Atsushi Yamamoto¹, Kunihiro Kihou¹, Chul-Ho Lee¹,

Masayuki Murata¹, Hirotaka Nishiate¹, Yoji Imai¹

E-mail: a.yamamoto@aist.go.jp

【緒言】

熱電発電の高効率化のためには高い性能指数 ZT を有する熱電材料が必要であり、電子構造の最適化による出力因子 σS^2 の最大化と、フォノン制御による熱伝導率 κ の抑制が必要である。一般に高性能とされている熱電材料の出力因子 σS^2 は 10^{-3} W/mK² のオーダーであり、実用材料である (Bi,Sb)₂(Te,Se)₃ 系では $3 \sim 5 \times 10^{-3}$ W/mK² 程度であるが、近年様々な原理に基づき、これらの値を遥かに凌ぐ高い出力因子が報告されている^{1),2),3)}。出力因子に理論上の上限はないと考えられるため、より優れた電子構造をもつ材料を実現できる可能性があり、熱電能の異常に大きな金属なども開発のターゲットとなる。本研究では 4f 電子を含む金属および半導体において高い出力因子の可能性を探るため Yb を基本組成とする金属間化合物および合金の合成をおこない、熱電特性を評価したので報告する。

【実験方法】

直径 20mmΦ のグラファイトるつぼに所定のモル比に秤量した Yb および金属元素を充填し、SPS 装置 (富士電波工機製) を利用して真空下でジュール加熱によりグラファイトるつぼを加熱して、融点直下で固相反応を行った。固相反応が十分に進行していない場合は粉碎して再度加熱を行い、固相反応を繰り返して目的相の合成を行った。焼結体を矩形に切り出した後、ZEM-3 (アドバンス理工製) により室温以上の出力因子を評価した。Yb を含む化合物の構成元素としては Si, Al, Ni, Mn, Fe, Cu, Zn 等の典型元素を選択し、2 元系および 3 元系の合金組成の合成を行った。バルク材料中の添加元素の固相拡散を活用したバルクコンビナトリアルの手法を活用し、熱電能の感度分析/スクリーニング等を実施した。

【結果】

既に多くの研究がなされている Yb-Al の 2 元系では室温において $\sim 7 \times 10^{-3}$ W/mK² 程度の高い出力因子が安定して再現された。Yb-Al 系において元素添加により 3 元系に拡張することによる出力因子の効果的な増大は認められなかった。複数の金属間化合物および合金において 10^{-3} W/mK² の出力因子が観測された。化合物/合金系の室温以上の特性の詳細は当日に発表をする。

【参考文献】

- 1 A. Bentien, et al., *Europhysics Letters*, Vol. 80 No.1 (2007).
- 2 T. Inohara et al., *Appl. Phys. Lett.* 110, 183901 (2017)
- 3 H. Ohta, et al., *Adv. Sci.* 5, 1700696 (2018)

【謝辞】

本研究の一部は、NEDO および TherMAT の支援を受けて実施された。