

圧力により導入された欠陥が熱電材料 CuGaTe₂ に与える影響

Effects of defects induced by pressure on thermoelectric material CuGaTe₂

阪府大¹, 神戸大², 東京大³, JST さきがけ⁴,

○藤井洋輔¹, 船島洋紀², 吉田博³, 山田幾也¹, 小菅厚子^{1,4}

¹ Osaka Pref. Univ., ² Kobe Univ., ³ The Univ of Tokyo, ⁴ JST, PRESTO

Yosuke Fujii¹, Hiroki Funashima², Hiroshi Katayama-Yoshida³, Ikuya Yamada¹, and Atsuko Kosuga^{1,4,*}

*E-mail: a-kosuga@p.s.osakafu-u.ac.jp

1. 概要

カルコパイライト構造化合物は、その高い熱電特性故に近年熱電材料として注目されている^[1,2]。この化合物の特徴として、良好な電気的特性を示す一方、熱伝導率に更なる低減の余地がある。我々の研究室では、材料内に複数スケールの欠陥を導入可能である室温高压処理が、カルコパイライト構造化合物の構造と熱伝導率に与える影響を解析してきた^[3,4]。本研究では、カルコパイライト構造熱電材料 CuGaTe₂ に着目した。処理により得られた構造の安定性を形成エネルギー計算により議論し、また導入された欠陥含有構造が電気的特性に与える影響の解析結果について報告する。

2. 実験

熔融と水冷により作製した CuGaTe₂ を粉碎して粉末試料を得た。更に圧力構造相転移前後の 6, 12GPa で室温高压処理を施し、得たバルク状試料の熱電特性を測定した。結晶構造解析により、カチオンサイトのアンチサイト欠陥の

導入を明らかにした。その後、欠陥を含有した結晶構造モデルにて、KKR-CPA 法^[5]を用いてブロッホスペクトルと状態密度を計算した。

3. 結果と考察

室温高压処理により、熱を加えることなくバルク状 CuGaTe₂ を得た。結晶構造解析と PAW 法を用いた形成エネルギー計算により、カチオンサイトのアンチサイト欠陥を含有する構造が準安定相として生成される事が予想された。Fig.1 に形成エネルギー計算結果(カルコパイライト構造の値との差を記述)と結晶構造例を示した。導入されたアンチサイト欠陥が電気的特性に与える影響について当日詳細に報告する。

[1] T. Plirdpring, *et al*, *Adv. Mater.* **24**, (2012) 3622.

[2] A. Kosuga, *et al*, *Appl. Phys. Lett.* **100**, (2012) 042108.

[3] A. Kosuga, *et al*, *Inorg. Chem.* **53**, (2014) 6844.

[4] Y. Fujii, *et al.*, in preparation.

[5] H. Akai, *J. Phys. Condens. Matter.* **1**, (1989) 8045.

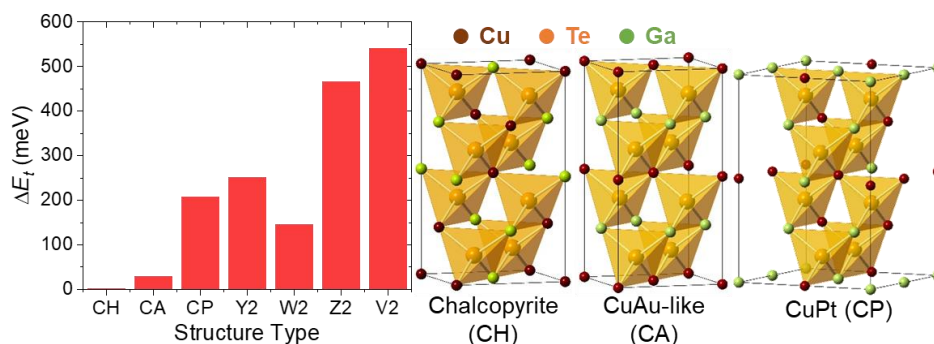


Fig. 1 The result of formation energy and examples of disordered structure