重元素置換 Fe_2VAl 系超格子薄膜でのフォノン散乱

Phonon scattering in heavy element-substituted Fe_2VAl superlattice thin films

豊工大 [1], 物材機構 [2], 名工大 [3], JST さきがけ [4]

○(PC) Seongho Choi[1], 廣井 慧 [2], 犬飼 学 [3], Dogyun Byeon[1], 松波 雅治 [1], 竹内 恒博 [1,4]

Toyota Tech. Inst.[1], NIMS[2], Nagoya Inst. Tech.[3], JST PRESTO[4]

○(PC) Seongho Choi[1], Satoshi Hiroi[2], Manabu Inukai[3], Dogyun Byeon[1], Masaharu Matsunami[1] and Tsunehiro Takeuchi[1,4]

E-mail: shchoi@toyota-ti.ac.jp

Fe_2VAl 系化合物は Bi_2Te_3 系材料を超える高い出力因子(5.5 $mWm^{-1}K^{-2}$)を有すると共に，安価で毒性もなく，機械的強度に優れることから，有望な次世代熱電材料として期待されている．しかし，熱電材料として実用化するためには，高い熱伝導率の低減が必要である．我々は，Fe_2VAl 系化合物の高い出力因子を維持つつ低い熱伝導度を達するため，(a)重元素部分置換と(b)ナノスケール超格子構造のを導入し，その効果を精密実験及び第一原理計算を用いて評価した．

薄膜サンプルは RF マグネトロンスパッタリングを用いて作製した． ターゲットとしては直径 2 インチの Mo，W，重元素置換した Fe_2VAl ディスクを使用して，両面光学研磨されている MgO 単結晶基板上に蒸着した．成膜時の Ar gas 圧力は 2.0 Pa, RF 出力は 80 W、基板温度は 600 °C とした．X 線回折から結晶構造を確認し，X 線反射から各層の厚みを調べた．加熱サーモリフレクタンス法から熱拡散率を求めて熱伝導率を算出した．第一原理計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード VASP を用いた．交換相関エネルギーの算定には PBE-GGA を用いた．有限温度での熱振動挙動に関しては，フォノン計算コード PHONOPY と PHONO3PY を用いて評価した．

図 1 は 300 K における Fe_2VAl 系化合物のフォノンのエネルギー分布を示す．導入した重元素が 25meV 以下のフォノンを変化させることがわかる。この変化が格子熱伝導度の低減に寄与することを実験でも確認した．発表では他の重元素を置換元素に選択した場合の効果についても報告する．

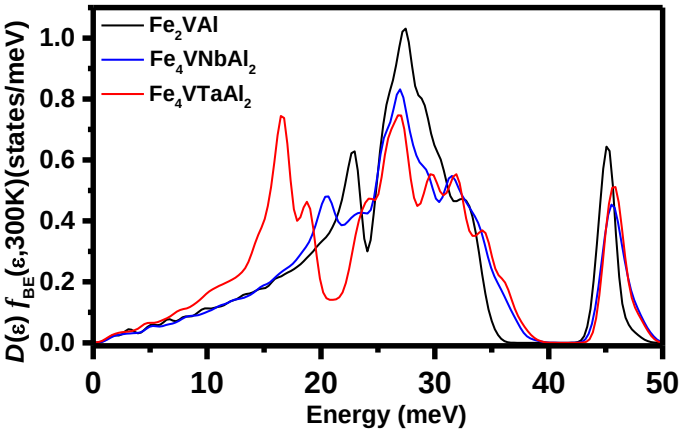

図 1．Fe_2VAl 系材料の 300K で励起されるフォノンの状態密度．