

新規熱電材料 AgBa_2Si_3 の開発とその熱電特性

Development and Thermoelectric Properties of AgBa_2Si_3

東ソー株式会社¹ ○幸田 陽一朗¹, 秋池 良¹, 沼田 雅実¹, 倉持 豪人¹

Tosoh Corporation¹ ○Yoichiro Koda¹, Ryo Akiike¹, Masami Mesuda¹, Hideto Kuramochi¹

E-mail: tosoh@tosoh.co.jp

【研究背景・目的】熱電変換材料は、排熱回収や IoT デバイスの動作電源等の応用可能性から、注目を集めている。ある温度 T における熱電変換材料の性能は、 $ZT = S^2T/\rho\kappa$ で表され、 S , T , ρ , κ はそれぞれゼーベック係数、絶対温度、抵抗率、熱伝導率を表す。過去報告されてきた熱電変換材料には、高性能な材料も存在するが、多くが希土類や有毒元素を含んでいるという欠点があった。そこで我々は、豊富に存在し低毒性である Si に注目した。本研究では Si を含む材料の中で、比較的良好な熱電性能を示すと予測された Ag-Ba-Si 3 元系の新規組成化合物 AgBa_2Si_3 を⁽¹⁾、実際に作製し、低温で比較的高い熱電性能を得ることに成功したので、結果について報告する。

【実験方法】第一原理計算を利用した材料探索を行い、数種類の候補材を選定したのち、試作に行うことで AgBa_2Si_3 を選定した。焼結体の作製方法は、化学量論組成となるように Ag, Ba, Si を秤量、それらのインゴットをアーク溶融法により作製、さらにインゴットを粉砕した後に、放電プラズマ焼結 (SPS) 法を用いて焼結体を作製した。作製した焼結体は、電気抵抗率測定、ゼーベック係数測定、X 線回折法(XRD)による構造解析、SEM-EDS および SEM-EBSD による構造解析、レーザーフラッシュ法による熱伝導率測定を行い、電力因子および無次元性能指数 ZT を算出した。

【実験結果】作製した AgBa_2Si_3 の結晶構造と組織構造について Fig 1 (a), (b) に示した。焼結体の XRD を測定したところ、理論計算による結果と概ね一致していることがわかった(Fig 1 (c))。また各種測定を行った結果、50℃における抵抗率は $3.03 \times 10^{-3} \Omega\text{cm}$ 、ゼーベック係数は $-213 \mu\text{V/K}$ となり、n 型を示すことが明らかとなった。熱伝導率は 2.3 W/mK で最終的な電力因子は $1.50 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ 、性能指数 $ZT = 0.20$ となり新規材料では比較的高い性能を示すことがわかった。これに加えて当日は、組成を変化させることによる熱電性能向上の検討結果についても報告する。

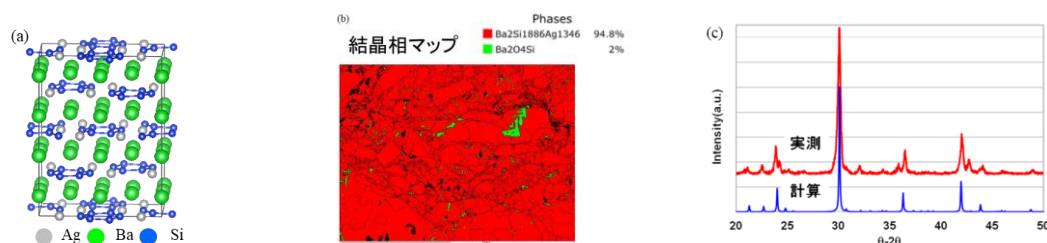


Fig 1. (a) Crystal structure. (b) SEM-EBSD phase map. (c) X-ray diffraction pattern.

謝辞：この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務の結果得られたものです。

(1) Isolde Zeiringer et. al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2011**, *50*, 05FA01.