

Sb と B の共置換による Mg_2Sn 単結晶の熱電性能の向上

Enhancement of Thermoelectric Performance of Mg_2Sn Single Crystal via Sb and B co-substitution

東北大院工, °齋藤 亘*, 林 慶, 黄 志成, 宮崎 譲

Tohoku Univ., °Wataru Saito, Kei Hayashi, Zhicheng Huang, Yuzuru Miyazaki

*E-mail: wataru.saito.p2@dc.tohoku.ac.jp

1. 緒言

最近, 我々は, Mg 空孔欠陥 (V_{Mg}) を導入した Mg_2Sn 単結晶の Sn サイトを Sb で部分置換することで, 低い格子熱伝導率 κ_{lat} と高い電気伝導率 σ を同時に実現し, $\text{Mg}_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶で最大の無次元性能指数 $zT = 0.72$ (650 K) を得た^[1]. これは, 単相の Mg_2Sn 系熱電材料の中で最も高い値である. しかし, $\text{Mg}_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶の V_{Mg} 量は Mg_2Sn 単結晶のそれ^[2]より減少しており, V_{Mg} による κ_{lat} の低減効果は弱くなっている. Mg_2Sn 単結晶の Mg サイトを B で部分置換すると, 結晶格子にかかる化学的圧力が強くなり, V_{Mg} 量が多くなったことから^[3], 本研究では, $\text{Mg}_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶の Mg サイトを B で部分置換することで, さらに zT を向上することを目指した.

2. 実験方法

既報^[1,2]の作製法で, $(\text{Mg}_{1-x}\text{B}_x)_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ ($x = 0.00125, 0.0025$) 単結晶を作製した. 単結晶 X 線回折を用いて結晶構造を解析し, 微細組織観察と熱電性能測定を行った.

3. 結果と考察

結晶構造解析の結果, $(\text{Mg}_{1-x}\text{B}_x)_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶には V_{Mg} が存在しており, B 置換量 x の増加とともに 8.9(17)% ($x = 0$ ^[1]) から 12.3(47)% ($x = 0.0025$) まで増加することがわかった. これにより κ_{lat} が減少し, $x = 0.0025$

のときに最小値 (650 K で 1.25(1) W/mK) が得られた. x の増加とともに σ も減少したが, σ の減少率に比べ, κ_{lat} の減少率の方が大きかったため, $(\text{Mg}_{1-x}\text{B}_x)_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶の zT を, $\text{Mg}_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶より高くすることができた (Fig. 1). 最大の zT は $x = 0.00125$ のときに得られ, $zT = 0.83$ (650 K) を達成した. 講演では, $(\text{Mg}_{1-x}\text{B}_x)_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ 単結晶の微細組織, キャリア密度, キャリア移動度, およびゼーベック係数についても報告する.

参考文献

- [1] W. Saito *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **12**, 57888 (2020).
- [2] W. Saito *et al.*, *Sci. Rep.*, **10**, 2020 (2020).
- [3] W. Saito *et al.*, (unpublished).

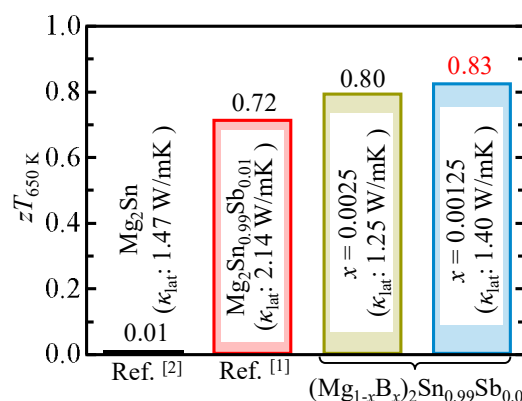


Fig. 1: zT values of the $(\text{Mg}_{1-x}\text{B}_x)_2\text{Sn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$ single-crystals and Mg_2Sn based single-crystals^[1,2].

謝辞

本研究の一部は, JSPS 特別研究員奨励費 No. 20J10512, 東北大学-清華大学の共同研究ファンド, および住友金属鉱山株式会社とのビジョン共創型パートナーシップに基づく共同研究基金の助成を受けて行われた.