

元素置換した $\text{AlMgB}_{14-x}\text{X}_x$ ($\text{X} = \text{C}, \text{N}$)系熱電ホウ化物の創成

Fabrication and thermoelectric properties of $\text{AlMgB}_{14-x}\text{X}_x$ ($\text{X} = \text{C}, \text{N}$) based materials

東京都市大¹, 物材機構² °野村知司¹, 平井凌¹, 西村聡之², 丸山恵史¹

Tokyo City Univ.¹, NIMS², °Satoshi Nomura¹, Ryo Hirai¹, Toshiyuki Nishimura²

and Satofumi Maruyama¹,

E-mail: smaruyam@tcu.ac.jp

【緒言】 B_{12} 正二十面体クラスター構造を結晶中に含む多ホウ化物は、B 原子の共有結合によって構成されるネットワーク構造を形成する。多ホウ化物は、慢性的な電子不足により p 型伝導体が多く、n 型伝導体に関する研究報告は僅かである。 AlMgB_{14} は B 原子ネットワーク構造に起因する化学的安定性に優れていることに加え、多ホウ化物では希少な n 型伝導体である。本研究では、n 型伝導体である AlMgB_{14} の B 原子ネットワーク中への元素置換を試みる。B 原子ネットワーク構造に対して、C や N といった B より価電子数の多い元素を置換し、構造中への電荷補償効果を調査した。具体的には、電荷補償に伴うホウ化物特有の構造歪みの緩和および機械的・熱電的物性への影響を実験的および第一原理計算を元にした計算科学の側面から検討した。

【実験方法】 各試料は粉末冶金法にて作製した。原料粉である B および C、AlN を事前にエタノール溶液中で湿式混合した後、Al、Mg と混合した。混合した粉末は、放電プラズマ焼結装置にて焼結した。焼結条件は最高保持温度 1500 度、25 分保持、加圧力 30MPa である。焼結後の試料は、粉末 X 線回折(XRD)および Rietveld 解析による生成相の同定および結晶構造解析を行った。また、SEM による組織観察およびビッカース硬さ試験による機械的特性の評価を行い、熱電特性は Seebeck 係数、電気伝導率、熱伝導率を測定した。

【実験結果】 焼結後の試料の XRD パターンより、すべての試料において AlMgB_{14} が主相であり、原料である C、AlN に起因するピークは現れなかった。作製した AlMgB_{14} の格子定数の関係を Fig. 1 に示す。全ての試料において、C および AlN 添加量の増加に伴い各軸の格子定数は減少傾向であった。C および N の原子半径は B より小さいことから、B 原子に対して C や N が置換固溶したと推察される。電気伝導率はいずれの試料も温度上昇に伴い増加傾向であったが、C 置換試料の Seebeck 係数は減少傾向であったのに対し、N 置換試料は、組成によって絶対値が $-100 \mu\text{V/K}$ から $-600 \mu\text{V/K}$ へと変化した、温度依存性は見られなかった。詳細は当日報告する。

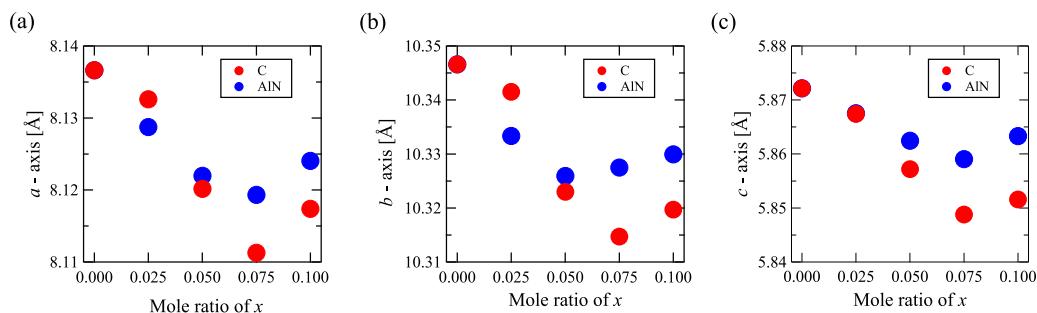


Fig. 1 C and AlN substitution effect on the lattice parameters (a) a , (b) b and (c) c