

大気非暴露 EBSD による元素置換した AgBa_2Si_3 の構造解析

Structural analysis of elemental substituted AgBa_2Si_3 using air isolated EBSD

株式会社東ソー分析センター¹, 東ソー株式会社² ○松村 賢¹, 幸田 陽一朗²,
秋池 良², 召田 雅実²

Tosoh Analysis and Research Center Co.,Ltd.¹, Tosoh Corporation²,

°Ken Matsumura¹, Yoichiro Koda², Ryo Akiike², Masami Mesuda²

E-mail: k.matsumura@tosoh-arc.co.jp

【緒言】

Si 系の新規熱電変換材料として、低毒性かつ低温で比較的高い熱電性能($ZT=0.09$, 323K)を示す AgBa_2Si_3 を報告した[1]。さらなる性能向上のため、熱伝導率の低減を狙いとして AgBa_2Si_3 の一部を元素置換させる検討を行うことで性能が向上した[2]。そこで、性能向上要因を明らかとするため組織の構造解析を行った。本発表では、添加元素の分布状態や大気非暴露下のみで存在する新規結晶相の存在を明らかとしたため報告する。

【実験方法】

試料は放電プラズマ焼結(SPS)法により元素添加量を変えた Ag-Ba-Si 系焼結体を 2 種作製した。焼結体をイオンミリング装置により測定面を加工した後、大気下または大気非暴露下で測定装置へ導入し、SEM-EDS および EBSD による構造解析を行った。結晶相同定は、ICSD などのデータベースから検索、および、第一原理計算による構造最適化で得られた結晶構造情報を用いて解析した。

【結果および考察】

EBSD より各焼結体ともに主相として AgBa_2Si_3 相、一部 Ba_2SiO_4 相などが観察された (Fig.1)。EDS より AgBa_2Si_3 相へ添加元素が固溶していると判明した。以上より、熱伝導率の低減が起きたと考えられる。また、元素添加量を増やした焼結体のみ添加元素を含む不明結晶相が確認された。この相は大気非暴露下では安定であり、大気下で速やかに変質した。各種データベース上の結晶相と組成および結晶構造が一致する結晶相はなく新規結晶相の存在が示唆された。組成は異なるが結晶構造のみ一致する結晶相を探索した結果、 BaSi_2 (Hexagonal)相と一致した。さらに、構造最適化で得られた結晶相を用いて解析し、実測と概ね整合する構造を得た。これらの結果に加え、当日は大気非暴露 TEM による解析結果も報告予定である。

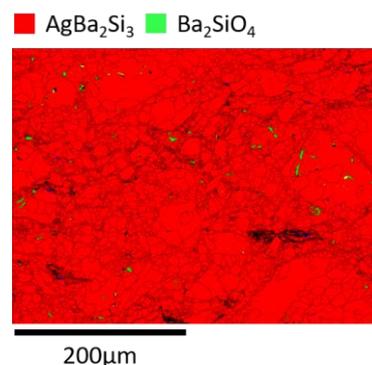


Fig.1 EBSD phase map of elemental substituted AgBa_2Si_3 .

[1] 幸田他、第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021, 23p-P03-2

[2] 幸田他、日本金属学会秋期第 171 回講演大会, 2022, P122