

アージロド鉱 Ag_8SnSe_6 の熱電特性に対する電子ドーピング効果

Effects of electron doping on thermoelectric properties of ternary argyrodite Ag_8SnSe_6

東京理科大¹, (地独)都産技研² ○(B)屋久大輔¹, 小林真大², 庄野厚¹, 林英男², 並木宏允²

¹Tokyo University of Science, ²TIRI, °D. Yahisa,¹ M. Kobayashi,² A. Shono,¹ H. Hayashi,² H. Namiki²

E-mail: 4217141@ed.tus.ac.jp

熱電変換材料は、熱エネルギーによって材料間に生じた温度差を、ゼーベック効果を用いて電気エネルギーに変換する材料である。ある温度 T における熱電変換材料の性能は無次元性能指数 $ZT = S^2 T / \rho \kappa$ で表され、単位温度差あたりの熱起電力 S が大きく、熱伝導率 κ と電気抵抗率 ρ が小さいことが求められる。

$A^{m+}_{(12-n)/m} B^{n+} C^2_6$ で表される化合物群のアージロド鉱は、一般的な熱電変換材料と比較しても非常に低い熱伝導率 ($\kappa < 0.5$) を有している。それにより高い ZT が達成されており、 n 型の Ag_8SnSe_6 はアージロド鉱の中でも特に高い ZT が報告されている。しかしながら Ag_8SnSe_6 は、不純物ドーピングによるキャリア密度制御の取り組みや系統的な評価は十分に行われておらず、更なる性能向上の可能性を有している化合物である。そこで本研究では、電子ドーピングによるキャリア密度制御および点欠陥導入による熱伝導率の更なる低減によって、熱電特性の向上を目指した。

今回、 Sn^{4+} に対して 5 価または 6 価を取りうる Nb、Ta、Mo、W を電子ドーパントとして選定した。 $\text{Ag}_8\text{Sn}_{1-x}\text{M}_x\text{Se}_6$ ($M = \text{Nb, Ta, Mo, W}$) を化学量論比で秤量した後、石英管に真空封入し、熔融法によって多結晶体を合成した。Fig.1 に示すように、ノンドープと Nb 及び Ta ドープ試料では単相の合成に成功したが、Mo 及び W ドープ試料ではそれぞれ MoSe_2 と WSe_2 が不純物相として含まれていることが確認された。単相の合成に成功したノンドープと Nb 及び Ta ドープ試料では、XRD ピークがシフトしている事を確認しており、電気抵抗率の温度依存性がノンドープの半導体的振る舞いから金属的な振る舞いに変化していることも確認できている。

現在ドーピング量を変化させた試料の合成にも成功しており、熱電特性の評価を進めている。加えて、当日の発表ではナノインデンターによる機械特性についても議論を行う予定である。

謝辞：本研究は、文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム事業の支援を受けて実施されました。(JPMXP09A20UT0128)

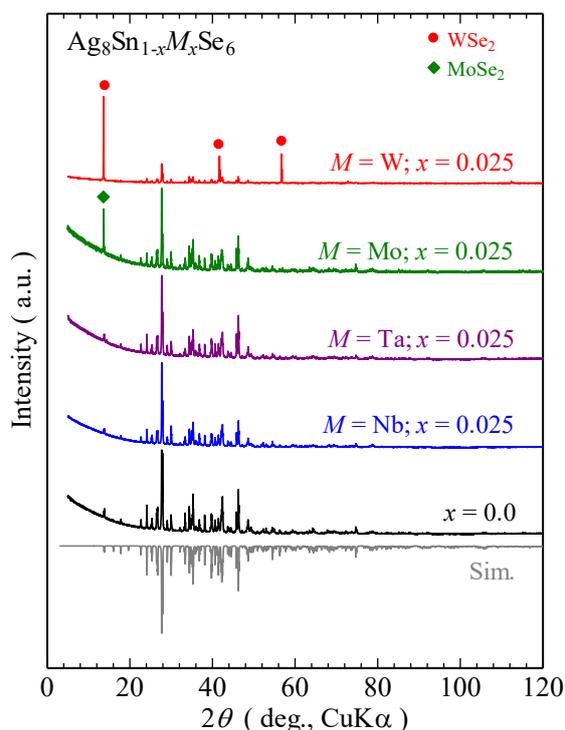


Fig.1 Powder XRD patterns of $\text{Ag}_8\text{Sn}_{1-x}\text{M}_x\text{Se}_6$ ($M = \text{Nb, Ta, Mo, W; } x=0.025$)