

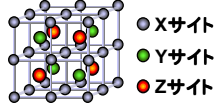
価電子濃度制御によるホイスラー型熱電材料の開発

○岩瀬啓吾 (名工大院), 西野洋一 (名工大院), 宮崎秀俊 (名大院), 曾田一雄 (名大院)

1. 背景

ホイスラー化合物

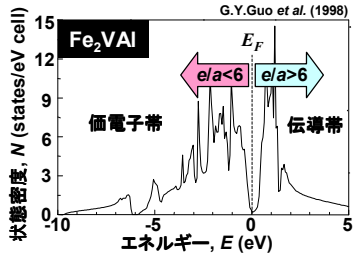
- X_2YZ の化学組成
- L2₁構造



価電子濃度(e/a)=6

- 強磁性の消失
- 擬ギャップの形成

(例) Fe_2VAl , Fe_2VGa , Fe_2TiSn



電気抵抗率

$$\rho \propto \frac{1}{N(E_F)}$$

ゼーベック係数(熱起電力)

$$S \propto -\frac{1}{N(E_F)} \left[\frac{dN(E)}{dE} \right]_{E=E_F}$$

擬ギャップ系 → EFの最適化

- 電気抵抗率の減少
- ゼーベック係数の増大

熱電材料の性能 $Z = \frac{S^2}{\rho \kappa}$

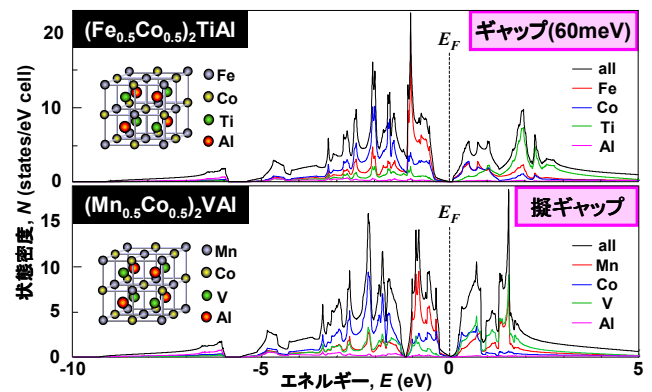
S ゼーベック係数
ρ 電気抵抗率
κ 熱伝導率

2. 目的

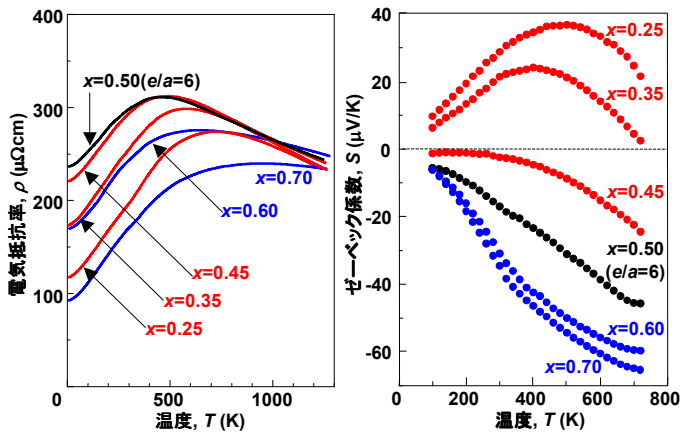
新しい擬ギャップ系ホイスラー化合物の探索

e/a=6	(Fe _{1-x} Co _x) ₂ TiAl (x=0.5)	(Mn _{1-x} Co _x) ₂ VAl (x=0.5)
Xサイト	Fe : (3d) ⁶ (4s) ² =8 Co : (3d) ⁷ (4s) ² =9	Mn : (3d) ⁵ (4s) ² =7 Co : (3d) ⁷ (4s) ² =9
Yサイト	Ti : (3d) ² (4s) ² =4	V : (3d) ³ (4s) ² =5
Zサイト	Al : (3s) ² (3p) ¹ =3	Al : (3s) ² (3p) ¹ =3

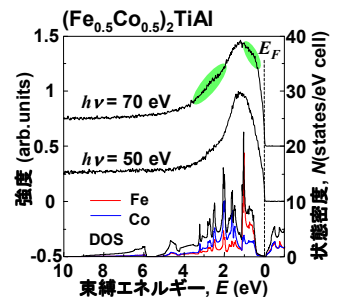
3. 状態密度 (FLAPW法)



4. (Fe_{1-x}Co_x)₂TiAlの熱電特性



5. 光電子分光測定

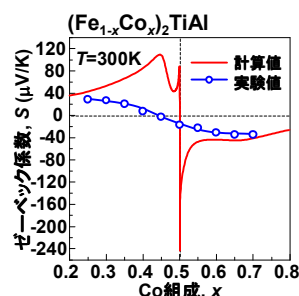


6. 計算と実験の比較

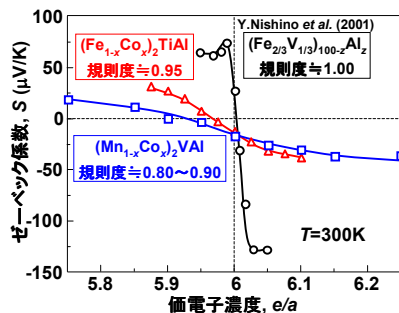
状態密度からゼーベック係数を評価

$$S(T) = -\frac{1}{eT} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} N(E)(E - \mu) (df_{FD}(E, T)/dE) dE}{\int_{-\infty}^{\infty} N(E) (df_{FD}(E, T)/dE) dE}$$

(μ 化学ポテンシャル, N(E) 状態密度, f_{FD}(E, T) フェルミ-ディラック分布関数)



7. ゼーベック係数と規則度の関係



8. 結言

e/a=6となるホイスラー化合物に着目

擬ギャップ系ホイスラー化合物
(Fe_{0.5}Co_{0.5})₂TiAl, (Mn_{0.5}Co_{0.5})₂VAl
の単相合金の作製に成功

バンド計算 ← 不一致 → 実験結果

原因...規則度の低下

★熱電特性の向上...L2₁構造の規則化

熱処理条件の改善
構成元素の選定