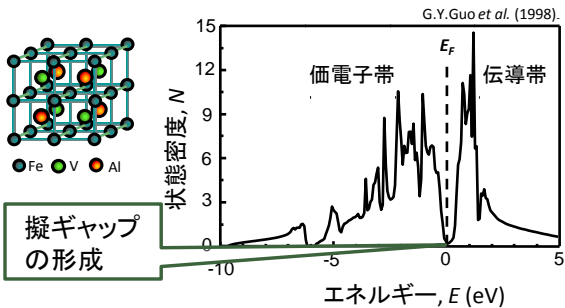


Fe₂VAIの熱電特性に及ぼす二元素同時置換の効果

名工大(院工) 近藤雄介, 西野洋一

背景

Fe₂VAIの電子構造



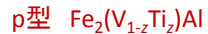
元素置換によりフェルミ準位 E_F の位置を制御

ゼーベック係数 S の増大

熱電変換材料への応用が可能

二元素同時置換(Ta+Ti)

T. Mori et al. (2008)



H. Matsuura et al. (2002)

Ta ・原子量が大い …… 熱伝導率の低減が可能

| | | | |
|---------|--------|---|--------|
| 熱伝導率 | 24W/mK | ➡ | 11W/mK |
| ゼーベック係数 | 82μV/K | ➡ | 90μV/K |

目的

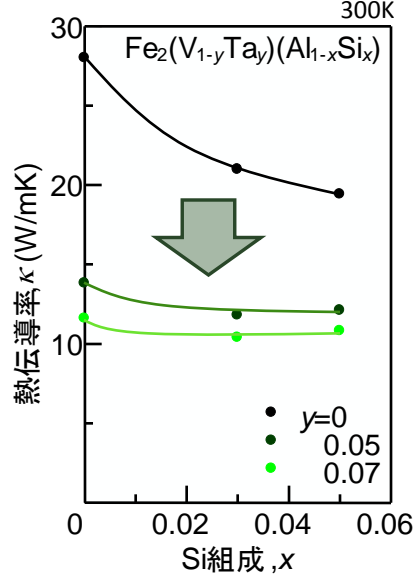
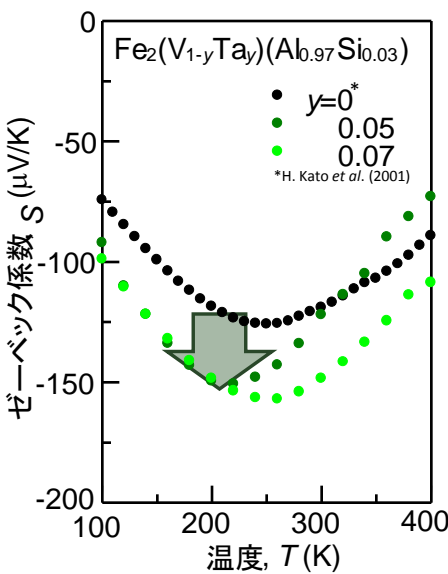
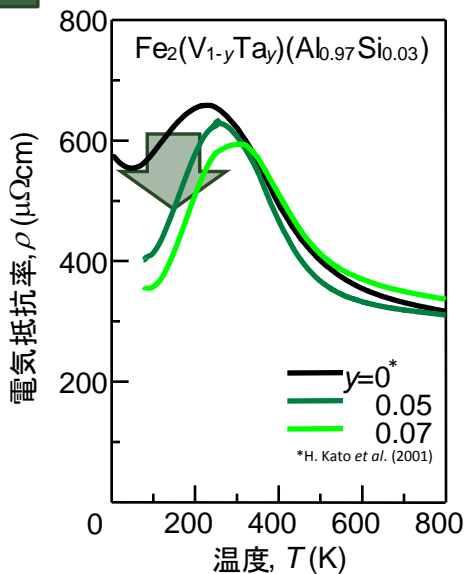


H. Kato et al. (2001) S=-132μV/K



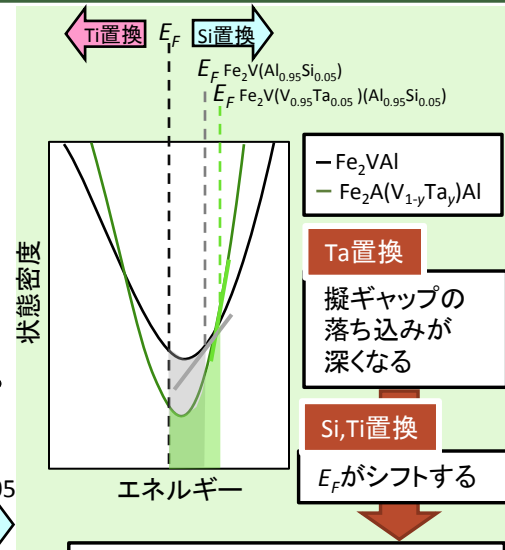
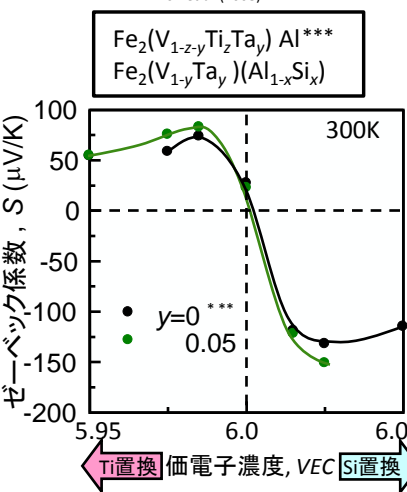
Ta,Si同時置換が熱電特性に及ぼす効果を明らかにする

結果



考察

*H. Kato et al. (2001)
**H. Matsuura et al. (2002)
***T. Mori et al. (2008)



p型, n型ともにSが増大する

EFでの状態密度の傾きが大きくなる

同様の傾向をバンド計算でも確認

結言

二元素同時置換

Ta : 擬ギャップの形状を変化させる
Si : フェルミ準位 E_F をシフトさせる

- ・ゼーベック係数 S の増大
- ・熱伝導率 κ の低下

| 性能指数 $Z (=S^2/\rho\kappa)$ | 300K $Z(10^{-4}K^{-1})$ |
|---|----------------------------|
| Fe ₂ V(Al _{0.9} Si _{0.1}) | 3.1 |
| Fe ₂ (V _{0.93} Ta _{0.07})(Al _{0.97} Si _{0.03}) | 4.0 |

1.5倍