

中性子散乱を利用した熱電材料開発

産業技術総合研究所

李哲虎

Development of Thermoelectric Materials Using Neutron Scattering

AIST

C. H. Lee

熱を電気に変換する熱電材料は有望なグリーンエネルギー技術として期待されているが、その実用化には性能をさらに高める必要がある。熱電材料の性能は無次元性能指数 $ZT = S^2T/\rho(\kappa_e + \kappa_L)$ で表される (S :ゼーベック係数、 ρ :電気抵抗率、 κ_e :電子熱伝導率、 κ_L :格子熱伝導率)。すなわち、高い熱電性能を得るには高い電気伝導率と低い熱伝導率を併せ持つ必要がある。この相反する性質を両立させるべく、我々は非調和振動によるフォノン-フォノン散乱の増強に着目した。

大きなカゴ型構造を持つ充填スクッテルダイトやクラスレートなどで観られる原子の大振幅振動（ラットリング）は非調和性の強い振動であり、高い熱電性能を誘起することで知られている。このラットリングは従来、大きなカゴ状構造の中に充填された原子でのみ生じると考えられていた。一方、本研究ではカゴ状構造を持たない平面配位構造の材料でもラットリングが発現することを発見した。平面配位構造を持つテトラヘドライトや層状ピスマスサルファイドの結晶構造解析やフォノン解析を行い、平面配位でラットリングが発現する条件などを明らかにした[1,2]。カゴ状構造のラットリングではカゴが大きいほどゲスト原子は大きくラットリングするが、平面配位のラットリングでは逆に面内方向の化学的圧力が強いほど、面外方向へラットリングすることが明らかとなった。本成果は熱電材料探索の範囲を飛躍的に広げ、より高い熱電性能を持つ新材料の創製に資すると期待される。

我々はまた、ローンペアの存在により非調和性が強く低い格子熱伝導率を示す Mg_3Sb_2 のフォノンを調べた。その結果、ゾーンセンター付近の音響フォノンがソフトニングを起こすことを発見した。熱を多く運ぶ音響フォノンが非調和的であるために格子熱伝導率が抑制されているものと思われる。

[1] C. H. Lee et al., Appl. Phys. Lett. 112, 023903 (2018).

[2] K. Suekuni, C. H. Lee et al., Adv. Mater. 30, 1706230 (2018).