



Al 系カルコパイライト材料の相転移解析

竹内恒博，崔城豪，邊韜均，Swapnil Chetan Ghodke，平田 圭介，Robert Sobota
豊田工業大学

キーワード：カルコパイライト，熱電変換材料， CuAlTe_2 ， AgAlTe_2

1. 背景と研究目的

正方晶カルコパイライト構造をもつ CuAlTe_2 と AgAlTe_2 化合物は熱電変換材料として有望なことが理論的に指摘されている[1~3]。我々のグループでは、これらの化合物の多結晶のバルク試料を作製することに成功し、熱電特性を調べてきた。その過程に於て、これまでに報告されていない結晶構造の変化と、それに伴う物性変化を観測した。物性変化の起源を解明する為には、放射光を用いた精密構造解析が必要であると判断した。本研究では、粉末放射光回折実験により CuAlTe_2 および AgAlTe_2 正方晶カルコパイライト型化合物の相変態過程と熱電特性に及ぼすその影響を明らかにすることを目的とした。

2. 実験内容

Cu, Ag, Al, Te を出発原料として、固相反応方法により CuAlTe_2 と AgAlTe_2 化合物を作製した。得られた試料を粉碎後、ホットプレスにてバルク化した。作製したバルク試料を再粉碎し、直径 $\phi 0.2 \text{ mm}$ の石英ガラス製キャピラリーに充填し、あいしンクロトロン BL5S2 にて放射光回折実験を行った。用いた放射光の波長は $0.6 \text{ \AA}$ であり、室温～ 637K の温度範囲にて回折実験を行った。回折 X 線は 4 連装 PILATUS100K（カメラ長 340 mm ）により記録した。

3. 結果および考察

Fig.1 に室温、 540K 、 637K で測定した CuAlTe_2 の XRD パターンを示す。室温と 637K では、全ての回折ピークが正方晶系カルコパイライト型構造（空間群 $I-42d$ (No.122)）で指数付け可能であり、単相が得られていることが分かった。一方、 540K のプロファイルでは主相のみならず、不純物結晶による反射ピークが観測された。

本実験を受けて、 540K から急冷した試料を作製し、SEM-EDX 測定を行った。その結果、不純物相は Te と Cu_2Te であることが分かった。これらが 637K では溶融状態にあり、 637K から急冷した場合にはアモルファス相として試料の存在している可能性が高いことがわかった。この実験結果から、 CuAlTe_2 において観測された異常な熱電物性は、正方晶系カルコパイライト相とアモルファス相が混在することにより生み出される可能性が高いと結論した。

上記の考え方が正しい事を検証する為に、現在、アモルファス相を含まない正方晶系カルコパイライト相の単相試料を作製し、その熱電特性を解明する研究を行っている。

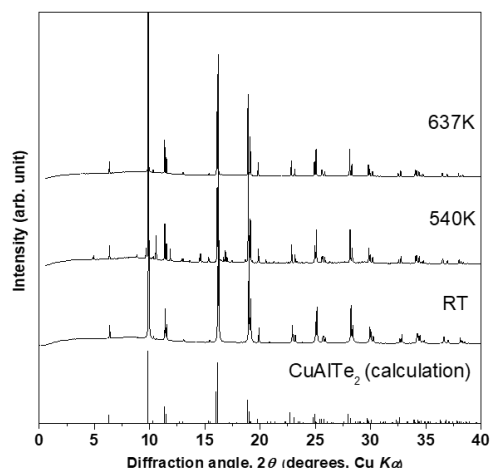


Fig.1 CuAlTe_2 の XRD パターン

4. 参考文献

1. B. V. Korzun et al., *Phys. Stat. sol. (b)*, 243, R57-R59 (2006)
2. B. V. Korzun et al., *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, 19, 255-260 (2008)
3. V. K. Gudelli et al., *J. Alloy. Comp.*, 648, 958-965 (2015)