



ホイスラー型 Fe_2VAl 合金における 3d 重い電子系の起源の解明

宮崎 秀俊¹, 曾田 一雄²

1 名古屋工業大学, 2 名古屋大学

キーワード : 熱電変換材料, ホイスラー化合物, 粉末 X 線回折, 結晶構造, Rietveld 解析

1. 背景と研究目的

Fe_2VAl 化合物は低温における電気抵抗率および比熱の増大といった 3d 重い電子系の候補物質という基礎物理的な重要性の他に、高い熱電変換性能を示し応用物理的な立場からも非常に興味深い物質である。我々のグループでは、非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1+x}\text{Al}_{1-x}$ 化合物において、ホールキャリアをドーピングした系および電子をドーピングした系において、熱電性能のピーク温度を 400 K ~ 600 K 程度まで高めるとともに高い熱電性能を得られることを見出した¹⁾。この材料では、構成元素の入れ替えのみで p 型および n 型の高性能な熱電材料が作製できることから、材料コストの低減および材料作製プロセスの効率化が期待できる。しかしながら、その劇的な熱電性能の向上の起源は電子構造の変化によるものであると予想しているものの明確ではなく、その起源を理解するためには、非化学量論組成による V/Al のサイト選択性を詳細に調べる必要がある。そこで、高性能熱電変換素子のベースとなる非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ 化合物において、高分解能粉末 X 線回折測定を行い、この物質系の機能性向上のメカニズムを明らかにすることを本研究の目的として実験を行った。

2. 実験内容

アーク溶解法により作製した非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ 化合物について、あいちシンクロトロン光センター BL5S2 において高分解能粉末 X 線回折測定を室温で行った。励起光子エネルギーは 13.05 keV (波長 : 0.95 Å) に設定した。また、リートベルド解析には RIETAN-FP を用いた。

3. 結果および考察

Fig. 1 に本実験で得られた非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ 化合物の高分解能粉末 X 線回折測定の結果およびリートベルド解析の結果を示す。なおリートベルド解析の初期結晶構造モデルとしては、V と Al が適切なサイト選択性を維持していると仮定した。Fig. 1 の結果では、ホイスラー構造に起因するピークのみを観測し、単相の試料が適切に得られていることが明らかになった。しかしながら回折ピークの強度の相違は、サイト選択性のみでは説明することができず、今後は選択的配向性などの他の因子も含め詳細な解析が必要がある。

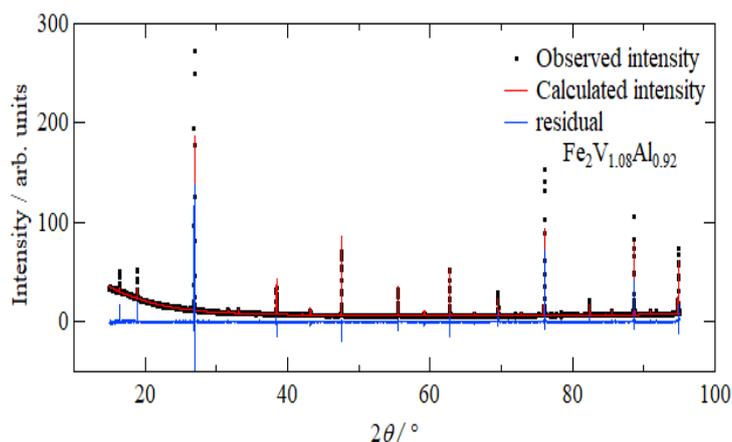


Fig. 1 非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ 化合物の高分解能粉末 X 線回折測定およびリートベルド解析の結果

4. 参考文献

1. Hidetoshi Miyazaki, Suguru Tanaka, Naoki Ide, Kazuo Soda and Yoichi Nishino, *Materials Research Express* 1, 015901 (2014).