



非化学量論組成ホイスラー型 Fe_2VAI 合金における 高分解能粉末 X 線回折測定

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_2VAI 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、高い n 型熱電性能を有する非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1+x}\text{Al}_{1-x}$ 化合物^[1]において、更にホールをキャリアーとしてドーピングした非化学量論組成と Ti 置換を組み合わせた $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08-x}\text{Ti}_x\text{Al}_{0.92}$ 化合物において、高い p 型の出力因子が得られることを明らかにした。しかしながら、この系では複数サイトに元素置換を行っているにも関わらず、熱伝導率が低減しないため、無次元性能指数 ZT が大きくなるという課題がある。そこで、この化合物系における熱電性能と結晶構造の関係を解明するために、高分解能粉末 X 線回折測定を行いこの物質における結晶構造解析を試みた。

2. 実験内容

アーク溶解法により作製し非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08-x}\text{Ti}_x\text{Al}_{0.92}$ 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 \AA) に設定した。

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 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ および特に高い熱伝導率を示す $\text{Fe}_2\text{V}_{0.98}\text{Ti}_{0.10}\text{Al}_{0.92}$ 化合物の高分解能粉末 X 線回折測定の結果を示す。Fig. 1 の結果より、この化合物系では析出物ピークは観測されず、単相の試料が得られていることが分かる。また、Fig. 1 (b) に 88.6° 近傍の回折ピークを示す。Ti 置換に伴い低角度側にピークがシフトしており、格子定数が大きくなっている。また、回折ピークの幅が減少しており、Ti 置換をしているにもかかわらず、格子内部の歪が減少していることが示唆される。この結果は、この合金系における熱伝導率の上昇は、Ti 置換に伴う歪の減少によるものであることを示しており、他の置換系では見られない特異的な結晶構造の変化をしていることが明らかになった。

4. 参考文献

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

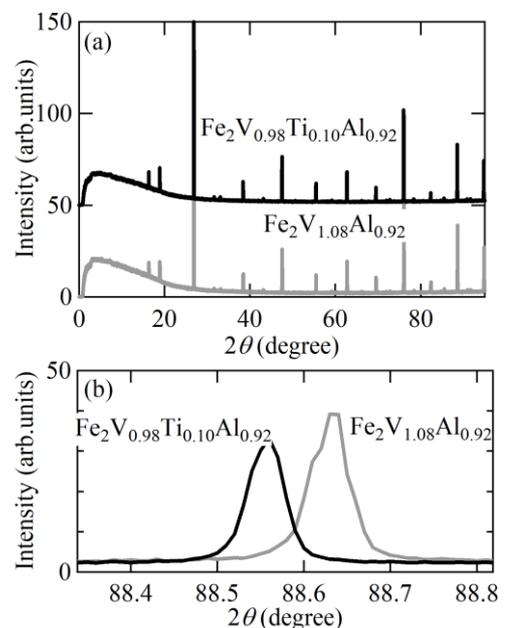


Fig. 1 非化学量論組成 $\text{Fe}_2\text{V}_{1.08}\text{Al}_{0.92}$ および $\text{Fe}_2\text{V}_{0.98}\text{Ti}_{0.10}\text{Al}_{0.92}$ 化合物の高分解能粉末 X 線回折測定結果