



# ホイスラー型 $\text{Fe}_2\text{VAI}$ 合金における高分解能粉末 X 線回折測定

宮崎 秀俊<sup>1</sup>, 曾田 一雄<sup>2</sup>  
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

$\text{Fe}_2\text{VAI}$  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、ホールのキャリアをドーブした系および電子をドーブした系において、熱電性能のピーク温度を  $400\text{ K} \sim 600\text{ K}$  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<sup>1)</sup>。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、 $p$  型材料の熱電性能が  $n$  型材料に比べて低いのが現在の課題である。最近、非化学量論組成と  $\text{Ti}$  置換を組み合わせた  $\text{Fe}_2\text{V}_{0.74}\text{Ti}_{0.34}\text{Al}_{0.92}$  化合物において、高い  $p$  型性能が得られること明らかになった。そこで、高い  $p$  型熱電性能の発現メカニズムを解明するために、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  $\text{Fe}_2\text{V}_{0.74}\text{Ti}_{0.34}\text{Al}_{0.92}$  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  $13.05\text{ keV}$  (波長： $0.95\text{ \AA}$ ) 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  $\text{Fe}_2\text{V}_{0.74}\text{Ti}_{0.34}\text{Al}_{0.92}$  化合物の高分解能粉末 X 線回折測定および XRD パターンのシミュレーション結果を示す。なお、シミュレーションにおける結晶構造モデルとしては、 $\text{V}$  と  $\text{Al}$  が適切なサイト選択性を維持しており、 $\text{Ti}$  は  $\text{V}$  サイトに置換するモデルを用いた。Fig. 1 の結果より、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。また、ピーク強度比など、シミュレーション結果は実験をよく再現しており、この合金系における高い  $p$  型熱電特性の起源は、適切なサイトへの元素置換によるものだと考えられる。今後はより詳細に局所的な結晶構造などを調べていく予定である。

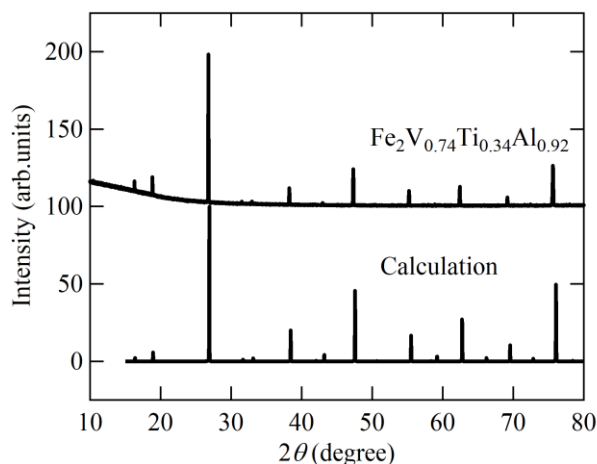


Fig. 1 非化学量論組成  $\text{Fe}_2\text{V}_{0.74}\text{Ti}_{0.34}\text{Al}_{0.92}$  化合物の高分解能粉末 X 線回折測定および XRD パターンのシミュレーション結果

## 4. 参考文献

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