

# Sb 置換後のハーフ・ホイスラー合金 TiNiSn の電子構造と熱電特性

## Electronic structure and thermoelectric properties of half-Heusler alloy TiNiSn after Sb substitution

横国大理工<sup>1</sup>, 防衛大材料<sup>2</sup>, ◯(M2)阿部 航佑<sup>1</sup>, 中津川 博<sup>1</sup>, 岡本 庸一<sup>2</sup>

Yokohama Natl. Univ.<sup>1</sup>, Natl. Def. Acad.<sup>2</sup>

Kosuke Abe<sup>1</sup>, Hiroshi Nakatsugawa<sup>1</sup>, Yoichi Okamoto<sup>2</sup>

E-mail: [abe-kosuke-dx@ynu.jp](mailto:abe-kosuke-dx@ynu.jp)

ハーフ・ホイスラー合金 TiNiSn は中温域で比較的高いゼーベック係数を有し、合金であるため、機械的特性に優れた熱電材料である。熱電特性を向上させる方法のひとつに元素置換があり、ハーフ・ホイスラー合金は異なる元素の置換により熱電特性が変化することが知られている<sup>1</sup>。本研究は TiNiSn の Sn サイトを Sb 置換した試料の熱電特性を測定し、第一原理計算によって求めた電子構造より、Sb が熱電特性に与える影響を明らかにすることを目的とする。

Sb 置換量は 5% まで 1% ずつ増加させて作製した。測定に用いた試料はアーク溶解法により作製したインゴットから測定可能なサイズの試料片を切り出し、熱処理を加えたものを使用した。熱処理は試料片を石英管に真空封入し、1073 K、168 時間の条件で行った。試料の結晶構造は粉末 X 線回折を行い、空間群  $F\bar{4}3m$  を用いて RIETA-FP により精密化した。電気抵抗率及びゼーベック係数は自作の装置を用いて 400~800 K の範囲で測定し、熱伝導率は熱電特性評価装置 PEM-2(アルバック理工)を用い、最終的にこれらの値を用いて  $ZT$  を算出した。Sb 置換後の電子構造は KKR グリーン関数法(MACHIKANEYAMA2002)を用いて求めた。

Fig. 1 に  $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$  ( $x=0\sim 0.03$ ) の  $ZT$  を示す。Sb 置換後の  $ZT$  が増大した理由は電気抵抗率が減少したことによる影響が大きい。これは Sn よりも価電子数の大きな Sb の置換によりキャリアが増加したことが原因と考えられる。また Sb 置換後の状態密度を求めた結果、置換後のフェルミ準位は伝導帯側への移動がみられ、高エネルギー側へ移動する理由が Sb 置換によるキャリアの増加によるものと考えられると、測定と一致する結果が得られた。

測定結果と第一原理計算により求めた状態密度から、TiNiSn に対して Sb はドナー不純物として作用することが考えられる。発表では 5% までの熱電特性と電子構造の関係を明らかにし、Sb 置換による影響をより詳細に考察する。

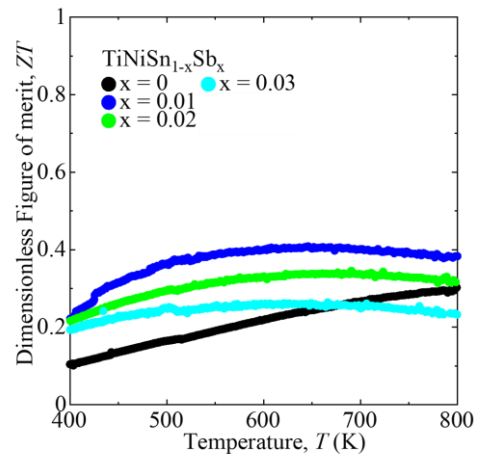


Fig. 1 Temperature dependence of Dimensionless Figure of merit for  $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$

### 参考文献

- 1) S. Bhattacharya, A. L. Pope, R. T. Littleton, Terry M. Tritt, V. Ponnambalam, Y. Xia, and S. J. Poon, Appl. Phys. Lett. **77**, 2476 (2000).