

高圧下における Mg_2Si 熱電材料の熱伝導測定

Thermal conductivity measurement of Mg_2Si thermoelectric materials under high pressure

岡理大理¹, 岡大惑物研² ○ 森 嘉久¹, 大上 亮¹, 秋元 優花¹, 芳野 極²

Okayama Univ. of Sci.¹, Okayama Univ.²

○Yoshihisa Mori¹, Ryo Okami¹, Yuka Akimoto¹, Takashi Yoshino²

E-mail: yoshihisa-mori@ous.ac.jp

熱電材料の性能は、ゼーベック係数 $S[V/K]$ ・電気伝導率 $\sigma[1/\Omega \cdot m]$ ・熱伝導率 $\kappa[W/m \cdot k]$ によって求められる無次元性能指数 ZT で評価される。高圧技術を活用することにより格子を直接的に制御することが可能で、その格子の変化によって熱電性能も変化する。そこで当研究室では、 Mg_2Si 熱電変換素子における高圧下での熱電性能について研究を進めており、6軸マルチプレス装置を用いて、ゼーベック係数と電気伝導率からなるパワーファクターの圧力依存性について報告してきた。今回は、高圧セルの構造を改良することで熱伝導率も同時に測定し、同じ圧力環境下での ZT を測定することを目指した。また、それと並行して熱伝導率の理論計算も実施し、実験と理論計算の結果を比較しながら高圧下における Mg_2Si 熱電材料の熱伝導率を評価した。

熱伝導率測定には周期加熱法を採用し、1 GPa の圧力下で (1) 温度：100°C ~ 600°C (2) 周期：10 sec, 60 sec (3) 温度幅：±5°C の条件で測定した。2つの加熱ヒーターは独立制御が可能となっており、一方の温度を固定した状態で、もう一方を変調させ、その時の試料両面を温度測定することで、試料内の熱流の速度が測定できる。時間に対する温度の測定結果を Fig.1 に示す。左右の拡大図は試料両面の温度測定結果で、変調周期がそれぞれ 10 sec(右)と 60 sec(左)である。変調周期が短い場合(右)は、試料両面の温度に位相差が生じ、その位相差から熱伝導を算出した。周期が長くなると(左)位相差は見えなくなるが、試料内部には温度差が生じているので、その温度差と生じている熱起電力からゼーベック係数を算出した。また、試料両面の温度を一致させることで、その温度における電気抵抗が測定可能となるので、2つのヒーターを同じ温度状態を保持しながら温度変化させることで、4端子法による電気抵抗の温度変化が測定可能になる。電気伝導率や熱伝導率を求めるには、高圧下における試料の正確なサイズパラメータが必要になるが、今回は圧力が低いので、1 GPa における格子歪の値を仮定して計算した。上記の仮定及びプロセスを経ることで、同じ高圧セルの実験で ZT を導出することに成功した。

比較のために実施した理論計算には、古典分子動力学のシミュレーションである LAMMPS を用い、熱伝導率には Green-Kubo 公式を用いた。熱伝導率の温度依存性に関する実験と理論の結果を Fig.2 に示す。双方とも、温度の上昇に伴って熱伝導率が低下する傾向を示す結果となった。

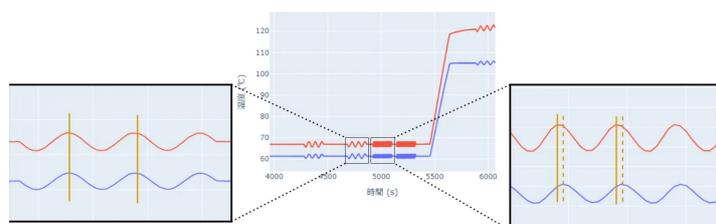


Fig 1: Measurement of temperature variation on both sides of a sample under pressure. The enlarged images on the left and right show the results for a modulation period of 60 seconds and 10 seconds.

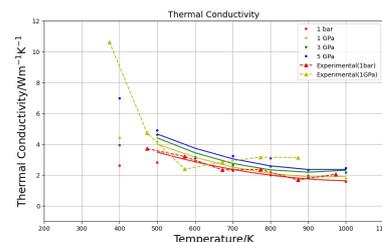


Fig 2: Thermal conductivity vs. temperature. Experimental and simulated data show the same trend.