

<b>課題名</b>	セラミック材料におけるナノ組織とフォノン状態密度の関係把握 Relationship between nanostructure of ceramic and phonon's density of states	
<b>実験代表者</b> ;前川諒介(木太拓志*)	所属;トヨタ自動車(株)先端材料技術部	

\*注)実験代表者変更、(申請時の実験代表者)

**背景**; 熱⇄電気の変換が可能な熱電材料ではナノコンポジット化により、格子熱伝導率が大幅に低下し、エネルギー変換効率が向上することが知られている。格子熱伝導率低下の原因は、母相の結晶粒界とナノ分散相と母相の界面でのフォノンの散乱の増大によると考えられているが、それらの寄与度については明確になっていない。

**中性子実験の必要性**; 格子熱伝導率( $\kappa_{ph}$ )はフォノン1個の熱容量( $c$ )、固体中の音速自乗( $v^2$ )、フォノンの寿命( $\tau$ )に比例し、 $K_{ph} = (1/3)c \cdot v^2 \cdot \tau$  と表わされることが知られている。このフォノンの寿命( $\tau$ )を直接調べるには、中性子非弾性散乱によりフォノンの非弾性散乱ピーク幅から評価する以外にない。参考となりそうな試料系の文献から、フォノンが現れるエネルギーの領域は100meV以下であると予測している。その領域の測定には四季(BL01)が最適である。

**試料・実験**; 結晶粒径(約100nmと約10nm)が異なるBiSbTe母相に、数nmの $Sb_2O_3$ の分散相が有と無の合計 $2 \times 2 = 4$ 種類の試料、および単結晶BiSbTe、合計5試料を準備した。これらの試料約1mgから2mgをAl箔に包み、BL01で測定した。

**実験結果**; 入射中性子エネルギー( $E_i$ )=23meVにおける動的構造因子を図1に示す。分散相無の試料ではエネルギー遷移が正の領域において明瞭な構造が確認された。一方、分散相有の試料では明確な構造は確認できなかった。また、分散相の有/無によって動的構造因子に大きな違いが観測された。

図1に示した $E_i=23meV$ における動的構造因子を積分し得られた散乱スペクトルを図2に示す。BGおよび弾性散乱強度が試料により異なるため図2のスペクトルでは直接試料間の比較ができないため、BGおよび弾性散乱強度で規格化し、弾性散乱ピーク近傍を拡大したスペクトルを図3に示した。単結晶で明確に観測された4.5meV付近の非弾性散乱ピークは、多結晶化することにより減少し、分散相でさらに減少した。また、分散相の導入により低エネルギー遷移領域のBGが増大する傾向が観られた。

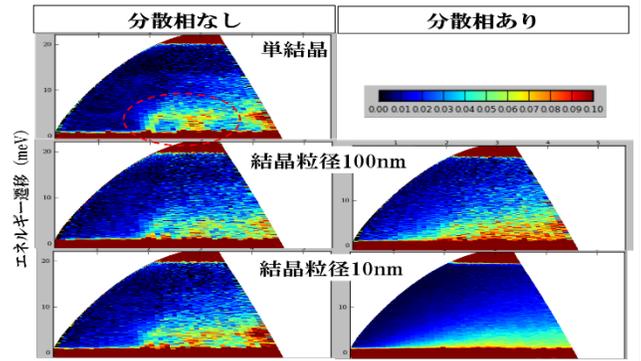


図1  $E_i=23meV$ における動的構造因子

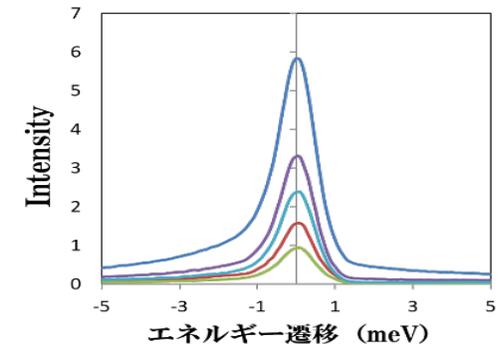


図2.  $E_i=23meV$ における散乱スペクトル

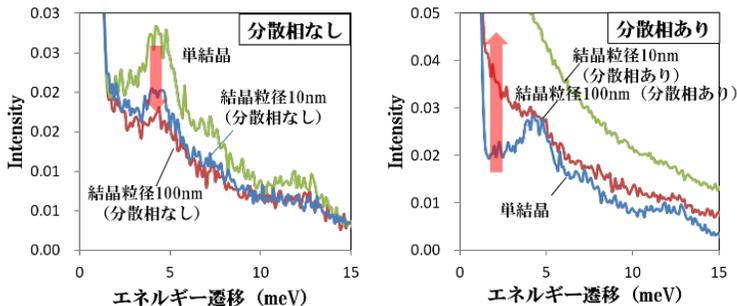


図3. 弾性散乱ピークにより規格化した散乱スペクトルの拡大図

この低エネルギー遷移領域の情報は分散相粒子の関連に関する報告がある。そこで、非弾性ピークの影響が少ない $E_i=2meV$ での散乱強度と格子熱伝導率( $K_{ph}$ )との関係を図4に示した。低エネルギー遷移領域でのBGの増加傾向は格子熱伝導率と良い相関を示していることが図4により確認された。

今回の課題において定性的には興味ある結果が得られた。試料の質量、形状、結晶粒径等の条件を揃えた詳細な実験による定量的議論が必要と思われる。

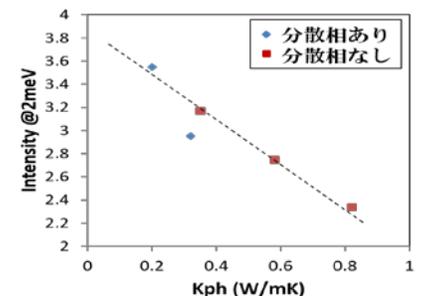


図4. 低エネルギー遷移(@2meV)領域の散乱と格子熱伝導率( $K_{ph}$ )との相関