

## Relation between Thermoelectric Properties and Structures of Skutterudite-type Crystals

### Skutterudite 형 결정의 결정구조와 열전특성의 관계

이동윤, 우병철, 이희웅

한국전기연구소 신소재응용그룹

열전재료란 열의 흐름을 전기의 흐름으로 또는 전기의 흐름을 열의 흐름으로 변환시키는 재료로써, 저온용으로써  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , 고온용으로써  $\text{PbTe}$ ,  $\text{SiGe}$  등이 개발된 후 근 20년 이상 더 우수한 재료가 개발되지 않고 있다. 그러나 최근 결정구조 및 물성과의 관계를 규명하는 다양한 연구의 진행에 따라, 여러 가지 우수한 열전재료가 개발되거나 제시되고 있다. 이중 가장 주목받고 있는 것이  $\text{RM}_4\text{X}_{12}$  ( $\text{R}=\text{La, Ce, Pr, Nd, Eu}$ ;  $\text{M}=\text{Fe, Ru, Os}$ ;  $\text{X}=\text{P, As, Sb}$ ) 공식을 갖는 Filled skutterudite 형 결정들이다.

열전특성은 열전성능지수라는 변수값을 측정함으로써 평가되어 지는데, 이 값이 높을수록 우수한 열전재료이다. 성능지수는 열전능의 자승에 비례하고, 전기저항 및 열전도도에 반비례하므로, 열전특성을 향상시키기 위해서는 이들 3가지 특성을 잘 조합해서 우수한 특성을 갖는 재료를 설계한다. 그러나 이 3가지 특성을 동시에 향상시키는 것은 불가능하다. 즉 전기저항과 열전도도는 상호 반비례하므로 전기저항을 낮추면 성능지수와 열전도도가 나빠지고, 열전도도를 낮추면 전기저항이 커지는 등 각 물성은 서로 상반된 영향을 미치고 있다. 이를 극복하고 우수한 특성을 갖는 열전재료를 만들기 위해서는 결정구조학적인 새로운 개념의 소재를 만들거나, 기존의 반도체 이론을 극복하는 새로운 현상을 이용하는 방법이 제시되어야 한다.

Skutterudite 형 열전결정은  $\text{CoSb}_3$ 로 대표되는 기존의 이원계 skutterudite 구조의 틀 속에 무겁고 작은 희토류 금속을 집어넣어, 이들 희토류 금속이 안정된 공유결합을 하지 못하고 열진동에 대해 rattling 현상을 일으키게 함으로써 전기물성의 변화는 거의 없으면서도 열전도도를 크게 낮추는 현상을 이용하여 열전특성을 향상시킨다. 여기서 희토류 금속은 높은 thermal parameter 를 지녀 phonon 을 효과적으로 산란시키는 역할을 하고, skutterudite 의 틀은 공유결합 상태를 유지하여 전기전도의 통로를 제공하고 있다. 이러한 구조는 기본격자의 공간을 희토류 금속이 채우고 있어 Filled skutterudite 라고 불리우고 있다.

본 연구는 Filled skutterudite 구조를 갖는 결정에서 결정구조와 열전특성의 관계를 이론적으로 조사해보고자 하는데 그 목적이 있다.